

修士論文

固有直交分解を用いた local/global 反復法
に基づく 2 次元非均質炉心解析手法の開発

名古屋大学大学院

工学研究科博士前期課程

総合エネルギー工学専攻

山本章夫研究室

伊藤雅人

令和 6 年 2 月

固有直交分解を用いた local/global 反復法に基づく 2次元非均質炉心解析手法の開発

原子核エネルギー制御工学グループ 山本研究室 伊藤 雅人

1. 緒言 炉心解析コスト低減手法として、固有直交分解(POD)が注目されている。POD では、全中性子束分布を少数の POD 基底により展開することで計算コストを低減できる。具体的には、POD 基底に基づき行列形式の連立方程式を圧縮することで、解くべき未知数の総数を削減できる。しかし、従来の POD 手法には、(1)POD 基底数を統計的に決定する際、計算条件が正規分布に従うことを仮定する必要がある、(2)大規模な非均質炉心体系では求める未知数の総数が大きすぎるため POD の効果的な適用が困難である、(3)典型的な輸送計算手法(例:MOC)では行列演算を用いずに中性子束を評価するため POD の適用が困難である、といった課題があった。修士研究では、各課題を解決するために、①Wilks の手法を用いた POD 展開次数探索手法の開発[1],[2]、②local/global 反復法を用いた POD 計算手法の開発[3]、③SP3 法に基づく POD 輸送計算手法の開発[4]、に取り組んだ。本発表では、大規模な非均質炉心体系の輸送計算に対して適用可能な POD 計算手法として新たに開発した「POD を用いた local/global 反復法に基づく SP3 計算手法」について述べる。

2. 提案手法 原子炉の炉心は多数の同一形状の燃料集合体で構成されており、単一集合体の大きさは比較的小さい。したがって、詳細メッシュ単一集合体計算に POD を適用することで、その有効性を十分発揮できる。さらに SP3 輸送計算の場合、解くべき方程式を行列形式の連立方程式で記述できるため、POD を適用できる。提案手法では、①詳細メッシュ単一集合体体系における POD を用いた SP3 計算(local 計算)と②p-CMFD 法による粗メッシュ全炉心計算(global 計算)を、収束条件を満足するまで反復する。本反復では、各 local 計算の境界条件として入射部分中性子流を与え、global 計算結果を用いて更新することで、隣接した集合体からの中性子漏れ量を反映した全炉心の詳細メッシュ全中性子束分布を計算できる。

3. 検証結果 2次元 UO_2 -MOX 炉心体系を対象として提案手法の有効性を検証した。各集合体は C5G7 ベンチマーク体系を燃料棒単位で均質化した体系とした。集合体および反射体領域は $17 \times 17 = 289$ の空間メッシュに分割し、エネルギー群数は 2 群に縮約した。燃料集合体の POD 基底数は Wilks の手法により、反射体領域の POD 基底数は低ランク近似により、それぞれ評価した。その結果、得られた UO_2 燃料集合体、MOX 燃料集合体、反射体領域の POD 基底数はそれぞれ 48, 44, 59 本となり、本検証計算では、各 local 計算で求める未知数を約 1/5 まで低減できた。得られた各 POD 基底を用いて、提案手法により、全中性子束分布と実効増倍率 k_{eff} を計算した。本検証では、詳細メッシュ全炉心 SP3 計算結果を参照解として、提案手法の計算誤差を評価した。計算結果の一例として、熱群全中性子束の相対誤差(絶対値)の空間分布を図 1 に示す。提案手法による全中性子束の相対二乗平均平方根誤差および k_{eff} 誤差はそれぞれ 0.06% および 0.0002% と極めて小さいことを確認した。さらに Intel® core™ i9 (2.99 GHz) で提案手法による SP3 計算を実施した場合、その計算時間は 1.4 秒であり、p-CMFD 加速法を用いた詳細炉心 SP3 計算と比較して、34 倍の高速化を達成することもできた。以上より、本研究の成果として、計算コストを大幅に低減しつつ高精度な非均質炉心解析が可能な計算手法を世界に先駆けて開発できた。

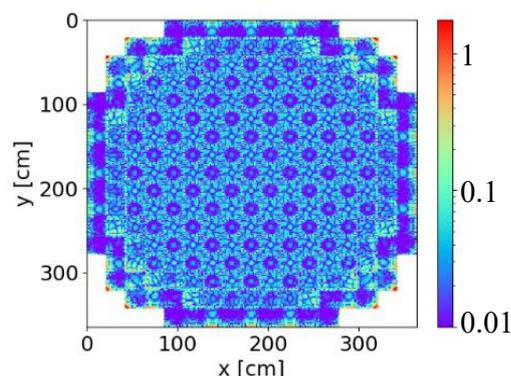


図 1 熱群全中性子束の相対誤差分布[%]

口頭発表 [1] 伊藤雅人 他, 日本原子力学会 2023 年春の年会, 1K03, 3月 13 日-15 日 (2023); [2] M. Ito et al., *M&C 2023*, Tu3T1-5, Niagara Falls, August 13-17 (2023); [3] M. Ito et al., *Proc. RPHA 2023*, C18, Gyeongju, October 24-25 (2023); [4] 伊藤雅人 他, 日本原子力学会 2024 年春の年会, 1L10, 3月 26 日 (2024) (発表予定).

目次

第 1 章	序論.....	4
1.1	背景.....	4
1.2	本研究の目的.....	6
1.3	本論文の構成.....	7
1.4	参考文献.....	8
第 2 章	炉心解析手法と固有直交分解.....	10
2.1	本章の概要.....	10
2.2	炉心解析手法.....	10
2.2.1	拡散方程式および SP3 方程式の導出.....	11
2.2.2	多群近似.....	17
2.2.3	空間離散化.....	18
2.2.4	境界条件.....	21
2.2.5	離散化された 2 次元拡散方程式および SP3 方程式の行列表記.....	28
2.2.6	計算手順.....	33
2.3	固有直交分解.....	35
2.3.1	POD 基底計算法.....	35
2.3.2	固有直交分解を用いた次元削減手法.....	36
2.4	本章のまとめ.....	39
2.5	参考文献.....	40
第 3 章	データ拡張と Wilks の手法に基づく POD 基底評価.....	42
3.1	本章の概要.....	42
3.2	snapshot 作成に対するデータ拡張の応用.....	43
3.3	Wilks の手法に基づく POD 展開次数の探索.....	45
3.3.1	Wilks の手法の理論.....	45
3.3.2	Wilks の手法を用いた POD 展開誤差の UTL 推定手順.....	48
3.3.3	POD 展開次数探索手順.....	48
3.4	Wilks の手法の POD 展開誤差評価に対する適用可能性調査.....	50
3.4.1	計算条件.....	50
3.4.2	信頼度計算手順.....	52
3.4.3	検証結果.....	53
3.5	Wilks の手法に基づく POD 展開次数探索手法に関する検討.....	56
3.5.1	計算条件.....	56
3.5.2	検証結果.....	57
3.6	本章のまとめ.....	62

3.7	参考文献.....	63
第4章	NUMA法を用いたPOD local/global反復法に基づく拡散計算手法.....	65
4.1	本章の概要.....	65
4.2	計算理論.....	66
4.2.1	PODを用いた固有値 local 計算.....	69
4.2.2	空間均質化および不連続因子評価.....	70
4.2.3	不連続因子を用いた global 計算.....	76
4.2.4	rebalance factorによるPOD展開係数の規格化.....	80
4.2.5	NUMA法による local 体系の境界条件更新.....	80
4.2.6	各集合体内の中性子束分布再構成.....	83
4.3	2次元多集合体体系における検証.....	84
4.3.1	計算条件.....	84
4.3.2	POD基底評価手順および結果.....	87
4.3.3	検証結果.....	90
4.4	本章のまとめ.....	104
4.5	参考文献.....	105
第5章	Fixed POD local/global反復法に基づく拡散計算手法.....	107
5.1	本章の概要.....	107
5.2	計算理論.....	107
5.2.1	PODを用いた固定源 local 計算.....	108
5.2.2	部分中性子流の補正係数評価.....	114
5.2.3	p-CMFD法に基づく global 計算.....	117
5.2.4	local 体系の境界条件および核分裂源更新.....	118
5.2.5	各集合体内の中性子束分布再構成.....	120
5.3	2次元炉心体系における検証.....	120
5.3.1	計算条件.....	120
5.3.2	POD基底評価手順および結果.....	123
5.3.3	検証結果.....	127
5.4	本章のまとめ.....	132
5.5	参考文献.....	133
第6章	Fixed POD local/global法に基づくSP3計算手法.....	135
6.1	本章の概要.....	135
6.2	計算理論.....	135
6.2.1	local 体系におけるPODを用いた固定源SP3計算.....	135
6.2.2	空間均質化および部分中性子流の補正係数評価.....	146
6.2.3	p-CMFD法に基づく global 計算.....	148

6.2.4	local 体系の境界条件および核分裂源更新.....	148
6.2.5	各集合体内の中性子束分布再構成.....	150
6.3	2次元炉心体系における検証.....	150
6.3.1	計算条件.....	150
6.3.2	POD 基底評価手順および結果.....	152
6.3.3	検証結果.....	161
6.4	本章のまとめ.....	169
6.5	参考文献.....	169
第7章	結論.....	171
7.1	まとめ.....	171
7.2	今後の課題.....	174
7.3	参考文献.....	175
	口頭発表.....	176

第1章 序論

1.1 背景

原子炉では、核分裂反応により膨大なエネルギーを生み出すことができる一方、有害な放射性物質が生成されてしまう。2011年3月11日の東京電力福島第一原子力発電所事故で顕在化したように、原子炉で重大な事故事象が生じ、放射性物質が施設外に放出されると、環境・公衆に対して深刻な影響を及ぼす。したがって、原子力発電施設を運用するうえで、原子炉の安全性を向上し続ける努力が要求される。

また、(1)ウラン燃料の有効活用、(2)環境への負荷低減のために、少ない燃料消費量でより多くのエネルギーを生み出す、すなわち原子炉の経済性を向上することも重要である。例えば、より少ない新燃料で原子炉を運用できれば、放射性廃棄物を低減できる。

原子炉の安全性・経済性を評価するためには、数値計算により、炉内の全中性子束分布や実効増倍率などの、炉心特性量を求める必要がある。この計算は炉心解析と呼ばれる。炉心解析では、炉内の中性子の集団的挙動を記述する中性子輸送方程式を数値的に解くことで炉心特性量を評価する。しかし、定常状態の中性子輸送方程式は空間変数3つ、エネルギー変数1つ、飛行方向変数2つの合計6つの変数からなる微積分型方程式であり、輸送方程式を数値的に解くために、膨大な計算コストを要する。したがって、実際に輸送方程式を解く際には、様々な近似を適用することで計算コスト低減を図る。通常、炉心解析では、飛行方向について関数展開した後、エネルギー・空間を離散化する。各変数の近似について簡単に説明する。

● 飛行方向関数展開

中性子飛行方向依存性については、複数のルジャンドル多項式で展開することで近似的に表現する。本近似に基づいて、拡散理論[1],[2]、 P_n 理論[1],[2]、Simplified P_n (SP_n)理論[3]などが展開される。現在、炉心解析では主に、拡散理論が広く用いられている。拡散理論は、上述した3つの理論の中では最も飛行方向を単純化した理論であり、最も低コストで炉心解析を実施できる。近年の計算機性能の向上により、中性子飛行方向による効果をより正確に扱うことができる SP_3 理論が有効活用されている[4],[5]。

● エネルギー離散化

エネルギー離散化では、エネルギーを複数の領域に区切り、各領域内で断面積が一定と近似する。例えば、効率よく炉心解析を実施する場合、中性子のエネルギーを高速群と熱群の2つのグループに分けることが多い。

● 空間離散化

空間離散化では、炉心体系を複数の領域（空間メッシュ）に分割し、各領域内で断面積や中性子束を一定と近似する。

以下で、空間離散化について詳しく述べる。

空間離散化において、空間メッシュを細かく分割するほど、計算精度は向上するが、求める未知数が増加するため計算コストが増大してしまう。軽水炉において高精度な数値計算を実施するためには、1メッシュ長さを1~2cm程度に細かく分割する必要がある[6]。この場合、例えば、Fig. 1.1に示したWestinghouse社製の4ループPWR炉心[7]は、約一千万メッシュに分割される。以上より、炉心体系を詳細に分割した場合、メッシュ数が膨大で、計算コストが大きくなる。

そこで、計算コストを低減するための手法として、近代ノード法が広く用いられている[6],[8]。近代ノード法では、燃料集合体を空間的に均質化した粗いメッシュ体系において、粗メッシュ内の全中性子束分布を解析的な関数による展開形で表現することで、詳細メッシュ計算結果をできる限り再現するよう工夫している。これにより空間メッシュを粗くとり、求める未知数を削減することで、計算コストを低減できる。

しかし、近代ノード法のように空間メッシュを粗くとる手法では、燃料棒単位の詳細な出力分布の計算精度向上には限界がある。そのため、計算精度向上を実現するためには、実用的な時間で実施可能な、燃料棒単位の非均質炉心解析の実現が必要不可欠である。

そこで本研究では、高精度かつ高速な炉心解析を実現するために、固有直交分解(Proper Orthogonal Decomposition, POD) [9]-[11]に注目する。PODでは、詳細計算により評価した中性子束分布からなるsnapshotデータに基づいて、中性子束分布の主成分としてPOD基底を評価できる。得られた少数のPOD基底を用いて中性子束分布を展開することで、求める未知数を削減でき、計算コストの低減につながる事が期待される。先行研究では、集合体単位の均質体系[9],[10]や小規模な非均質体系[11]において、PODを用いた次元削減の有効性が検討されている。

しかし、実機炉心解析において、PODの有効性を最大限発揮するためには、解決すべき主要な課題が3つある。以下で各課題について説明する。

● 中性子束展開に用いるPOD展開次数決定

PODを用いた炉心解析コストはPOD基底数(POD展開次数)に依存し、解析精度はPOD展開次数および計算条件(例:燃料装荷配置やアルベド境界条件等)に依存する。PODを用いた炉心解析では、多数の計算条件の中性子束分布を高精度に展開可能なPOD基底を使用することが望ましい。また、POD展開次数が小さくなるほど、解析コストは小さくなる一方、解析精度は低くなってしまふ。以上より、PODの有効性を十分発揮するためには、多数の計算条件における中性子束分布を高精度に展開可能なPOD展開次数を評価する必要がある。先行研究では、計算条件(例:アルベド値)が正規分布に従うことを仮定してPOD基底による中性子束展開誤差を推定することで、POD展開次数を評価する手法[12]が考案さ

れている。しかし、炉心解析では、正規分布を用いずに、多数の計算条件における POD 基底による中性子束展開精度を評価することが望ましい。

- 非均質かつ大規模な炉心体系への POD 適用

Fig. 1.1 で示した実機炉心のように、非均質かつ大規模な炉心体系に対して POD を直接適用した場合、中性子束を精度よく展開するために多数の POD 基底を要することとなり、POD の有効性を十分発揮できない可能性がある。したがって、POD を詳細な炉心解析に適用するうえで、非均質炉心体系に対して適用可能な POD 計算手法を確立することが重要な課題である。

- 中性子輸送計算に対する POD 適用

POD では、行列形式の連立方程式を圧縮することで、計算モデルの次元削減を可能とする。そのため、拡散計算のように、行列形式の方程式を解くことで中性子束分布を求める方法論に対しては、POD を用いた次元削減を適用できる。一方、典型的な輸送計算手法である MOC[2],[13]や Sn 法[2]では、特定の直線上を飛行する中性子の増減を追跡する transport sweep に基づいて、中性子束分布を評価する。すなわち、行列形式の方程式を解くような方法論ではないため、POD の直接的な適用が困難である。

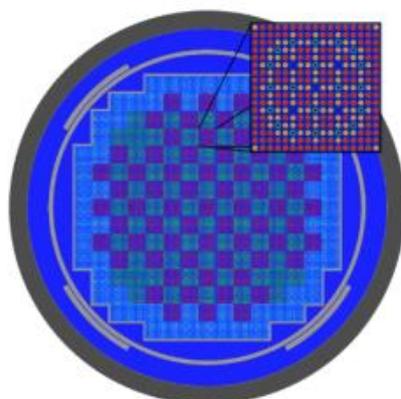


Fig. 1.1 Watts Bar Unit 1 炉心 [7]

1.2 本研究の目的

1.1 節で説明したように、高精度かつ高速な炉心解析を実現するための方法論として、POD を用いた次元削減の適用が挙げられる。先行研究では、集合体単位の均質体系や小規模な非均質体系に対する POD の適用が検討された。POD の有効性を最大限発揮する上で、多数の計算条件における中性子束分布を高精度に展開できる POD 展開次数評価手法を見出すことが重要である。さらに、より高精度な炉心解析を実施するためには、非均質かつ大規模な炉心体系に対して適用可能な POD 計算手法を確立する必要がある。そこで本研究では、①高

精度かつ展開次数が少ない POD 基底を評価する方法論を考案すること、および②非均質かつ大規模な 2 次元炉心体系における拡散計算に適用可能な POD を用いた次元削減手法を考案することを目的とする。さらに、中性子の飛行方向依存性を考慮した更なる計算精度向上のため、③2 次元炉心 SP3 計算への POD 適用法を考案することも、本研究の目的とする。

目的①を達成するためには、POD 基底による多数の中性子束分布展開精度 (POD 展開精度) を統計的に評価する必要がある。本研究では、統計的評価手法として、Wilks の手法 [14],[15] に注目する。Wilks の手法を用いることで、統計的分布を仮定せずに、多数の計算条件における POD 展開精度を統計的に評価できる。以上より、Wilks の手法を用いて、多数の計算条件における中性子束分布を高精度に展開可能な POD 展開次数評価の実現を目指す。

目的②を達成するために、本研究では、local/global 反復法 (LG 反復法) [16]–[20] に注目する。ここで LG 反復法とは、詳細メッシュ単一集合体計算と粗メッシュ全炉心計算を繰り返す手法である。単一集合体は炉心体系と比べて体系の大きさが小さいため、詳細メッシュ単一集合体計算に POD を適用することで、POD の有効性を十分発揮できる可能性がある。そこで、本研究では、2 次元炉心体系を対象として、POD と LG 反復法を組み合わせた POD LG 反復法に基づく拡散計算の実現を目指す。

目的③を達成するために、輸送計算手法の一種である SP3 法 [4],[5] に注目する。SP3 法では、中性子飛行方向依存性を 0–3 次のルジャンドル多項式の展開形で近似的に表現することで、中性子飛行方向効果を拡散計算より正確に扱える。本手法の特筆すべき点は、行列形式の連立方程式 (SP3 方程式) を解くことで、中性子束分布を評価する点である。このため、行列形式の SP3 方程式を圧縮する形で、POD を用いた次元削減を適用できる。そこで、本研究では、SP3 法を用いることで、2 次元炉心体系に適用可能な POD 輸送計算の実現を目指す。

1.3 本論文の構成

本論文は全 7 章構成である。

第 1 章では、本研究の背景および目的を述べた。

第 2 章では、本研究で用いる基礎理論として、拡散計算および SP3 計算手法と POD に関する理論を説明する。

第 3 章では、POD 展開次数を決定する方法論として、データ拡張と Wilks の手法を用いた POD 展開次数探索手法を考案する。2 次元単一集合体体系を対象として、提案手法により評価した POD 基底を用いて集合体内全中性子束分布を高精度に再現可能か調査する。

第 4 章では、反射体を含まない 2 次元多集合体体系を対象とした POD LG 反復法に基づ

く拡散計算手法を考案する。提案手法により、燃料棒単位の 2 次元多集合体体系内の全中性子束分布を精度よく再現可能か検証する。

第 5 章では、反射体を含む 2 次元炉心体系に適用可能な POD LG 反復法として、Fixed POD LG 反復法に基づく拡散計算手法を考案する。第 4 章の手法では、(1)LG 反復計算が数値的に不安定であり、かつ(2)反射体領域を含んだ炉心体系への適用が困難である、という課題があり、これを解決するための取り組みとなる。燃料棒単位の 2 次元炉心体系を用いて、提案手法により、拡散計算に対して POD の有効性を十分発揮できるか検証する。

第 6 章では、Fixed POD LG 反復法に基づく SP3 計算手法を考案する。燃料棒単位の 2 次元炉心体系を用いて、提案手法により、SP3 計算に対して POD の有効性を十分発揮できるか検証する。

第 7 章では、本論文の結論および今後の課題について述べる。

1.4 参考文献

- [1] 小林啓祐, “原子炉物理”, コロナ社, (1996).
- [2] D. G. Cacuci, “Handbook of nuclear engineering volume II,” Springer, (2010).
- [3] E. W. Larsen, J. E. Morel , and J. M. McGhee, “Asymptotic derivation of the multigroup P1 and simplified Pn equations with anisotropic scattering,” *Nucl. Sci. Eng.*, **123**(3), pp. 328–342 (1996); <https://doi.org/10.13182/NSE123-328>.
- [4] M. Tatsumi and A. Yamamoto, “Advanced PWR core calculation based on multi-group nodal-transport method in three-dimensional pin-by-pin geometry,” *J. Nucl. Sci. Technol.*, **40**(6), pp.376–387 (2003); <https://doi.org/10.1080/18811248.2003.9715369>.
- [5] S. Jeon, H. Hong, N. Choi, et al., “Methods and performance of a GPU-based pinwise two-step nodal code VANGARD,” *Prog. Nucl. Energy*, **156**, 104528 (2023); <https://doi.org/10.1016/j.pnucene.2022.104528>.
- [6] 奥村啓介, “近代ノード法と不連続因子の基礎”, 第 36 回炉物理夏季セミナーテキスト, 日本原子力学会 (2004).
- [7] E. Davidson, M. Asgari, M. Baird, et. al., “VERA-Grizzly ex-core calculations: Watts bar unit 1 cycles 1-2,” ORNL/TM-2021/2245, Oak Ridge National Laboratory Tech. Report (2021); <https://doi.org/10.2172/1838974>.
- [8] R. D. Lawrence, “Progress in nodal methods for the solution of the neutron diffusion and transport equations,” *Prog. Nucl. Energy*, **17**(2), pp.271–301 (1986); [https://doi.org/10.1016/0149-1970\(86\)90034-X](https://doi.org/10.1016/0149-1970(86)90034-X).
- [9] R. Elzohery and J. Roberts, “Modeling neutronic transients with Galerkin projection onto a greedy-sampled, POD subspace,” *Ann. Nucl. Energy*, **162**, 108487 (2021); <https://doi.org/10.1016/j.anucene.2021.108487>.
- [10] K. Tsujita, T. Endo, and A. Yamamoto, “Fast reproduction of time-dependent diffusion

- calculations using the reduced order model based on the proper orthogonal and singular value decompositions,” *J. Nucl. Sci. Technol.*, **58**(2), pp.173–183 (2021); <https://doi.org/10.1080/00223131.2020.1814891>.
- [11] K. Tsujita, T. Endo, and A. Yamamoto, “Efficient reduced order model based on the proper orthogonal decomposition for time-dependent MOC calculations,” *J. Nucl. Sci. Technol.*, **60**(3), pp. 343–357 (2023); <https://doi.org/10.1080/00223131.2022.2097963>.
- [12] C. Wang, H. S. A. Khalik, “Exact-to-precision generalized perturbation theory for eigenvalue problems,” *Nucl. Eng. Des.*, **256**, pp. 130–140 (2013); <http://dx.doi.org/10.1016/j.nucengdes.2012.11.006>.
- [13] 牛尾直史, “Characteristics 法の基礎”, 第 36 回炉物理夏季セミナーテキスト, 日本原子力学会 (2004).
- [14] S. S. Wilks, “Determination of sample sizes for setting tolerance limits,” *Ann. Math. Stat.*, **12**(1), pp. 91–96 (1941).
- [15] N. W. Porter, “Wilks’ formula applied to computational tools: A practical discussion and verification,” *Ann. Nucl. Energy*, **133**, pp.129–137 (2019); <https://doi.org/10.1016/j.anucene.2019.05.012>.
- [16] N. Z. Cho, S. Yuk, and J. Lee, “Overlap local/global iteration framework for monte carlo/diffusion nodal calculations,” *Trans. Am. Nucl. Soc.*, **102**(1), pp. 528–532 (2010).
- [17] N. Z. Cho, S. Yuk, H. J. Yoo et al., “Overlapping local/global iteration framework for whole-core transport solution,” *Nucl. Sci. Eng.*, **175**(3), pp. 227–238 (2013); <https://doi.org/10.13182/NSE12-68>.
- [18] S. Yuk and N. Z. Cho, “Whole-core transport solutions with 2-D/1-D fusion kernel via p-CMFD acceleration and p-CMFD embedding of nonoverlapping local/global iterations,” *Nucl. Sci. Eng.*, **181**(1), pp.1–16 (2015); <https://doi.org/10.13182/NSE14-88>.
- [19] B. Cho and N. Z. Cho, “A nonoverlapping local/global iterative method with 2-D/1-D fusion transport kernel and p-CMFD wrapper for transient reactor analysis,” *Ann. Nucl. Energy*, **85**, pp.937–957 (2016); <https://doi.org/10.1016/j.anucene.2015.07.012>.
- [20] B. Cho and N. Z. Cho, “Nonoverlapping local/global iterations with 2-D/1-D fusion transport kernel and p-CMFD wrapper for transient reactor analysis—II: parallelization and predictor–corrector quasi-static method application,” *Ann. Nucl. Energy*, **90**, pp.284–302 (2016); <https://doi.org/10.1016/j.anucene.2015.12.018>.

第2章 炉心解析手法と固有直交分解

2.1 本章の概要

本章では、本研究で用いる炉心解析手法に関する理論と固有直交分解の概要を説明する。炉心解析では、拡散理論または Simplified P3 (SP3) 理論に基づいて炉内の中性子束が評価される。炉心解析を高精度化するためには、炉心体系を詳細にモデル化する必要がある。ただし、実機炉心は構造が複雑かつ大規模である。したがって計算コストの観点から、詳細にモデル化された炉心体系における高精度な炉心解析は実用的でない。そこで本研究では、固有直交分解(Proper orthogonal decomposition, POD)[1]–[3]に注目する。POD は、データ駆動型の次元削減手法である。POD を活用することで、中性子束が少数の基底 (POD 基底) で効率よく展開できる。このため、中性子束の自由度を削減でき、数値計算コストを低減できる。

2.2 節では、炉心解析手法について説明する。まず、炉心内の集団的挙動を支配する方程式である拡散方程式および SP3 方程式を導出する。次に、拡散方程式および SP3 方程式に対するエネルギー・空間の離散化について説明する。その後、外部境界面の数値計算上の取り扱いを説明する。その後、離散化された拡散方程式および SP3 方程式を行列とベクトルを用いて表記する。最後に、べき乗法を用いた中性子支配方程式の数値計算手順を説明する。

2.3 節では、固有直交分解に関する理論の概要を説明する。まず、POD 基底の計算方法を説明する。次に、POD 基底を用いた行列形式の拡散方程式および SP3 方程式の次元削減手法について説明する。

最後に 2.4 節で本章のまとめを述べる。

2.2 炉心解析手法

原子炉内における中性子の集団的挙動は次式の中性子輸送方程式によって記述される [4]–[6]。

$$\vec{\Omega} \cdot \nabla \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) + \Sigma_t(\vec{r}, E) \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = Q(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \quad (2.1)$$

上式中の変数の意味は以下のとおりである。

\vec{r} : 位置

E : エネルギー

$\vec{\Omega}$: 中性子の飛行方向ベクトル

ψ : 角度中性子束

Σ_t : 全断面積

Q : 中性子生成源

(2.1)式の左辺第1項は中性子漏洩項、左辺第2項は中性子吸収項である。また、右辺は中性子生成項である。したがって、上式は中性子の漏洩・吸収による減少量と中性子の生成量のつり合い式である。臨界状態の固有値方程式を考え、中性子が核分裂反応及び散乱反応によ

って生成される場合には、生成項 Q は次式で記述される[4]–[6]。

$$Q(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \frac{\chi(\vec{r}, E)}{4\pi} \frac{1}{k_{\text{eff}}} \int_{4\pi} \int_0^\infty v \Sigma_f(\vec{r}, E') \psi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') dE' d\Omega' \\ + \int_{4\pi} \int_0^\infty \Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \psi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') dE' d\Omega' \quad (2.2)$$

上式中の変数の意味は以下のとおりである。

- k_{eff} : 実効増倍率
- χ : 核分裂スペクトル
- v : 1核分裂あたりに放出される平均中性子数
- Σ_f : 核分裂断面積
- Σ_s : 散乱断面積

(2.2)式を角度中性子束 ψ について解くことで、与えられた断面積を用いた場合における炉内
の中性子の集団的な挙動を正確に予測できる。ただし、角度中性子束 ψ は位置 \vec{r} 、エネルギー
 E 、中性子の飛行方向ベクトル $\vec{\Omega}$ の合計 6 つの未知数を含む微積分型の方程式であり、解
析的に解くことが困難である。このため炉心解析では、輸送方程式に対して、関数展開や離
散化を適用し、数値計算を駆使して輸送方程式の近似解を求める。

中性子の飛行方向を球面調和関数で関数展開することで、拡散方程式および SP3 方程式
が得られる。本節では、炉心解析で用いられる拡散計算および SP3 計算に関する理論を説
明する。

2.2.1 項では、中性子輸送方程式から拡散方程式および SP3 方程式を導出する。2.2.2 項で
は、エネルギーの離散化手法である多群近似について説明し、2.2.3 項で、空間離散化につ
いて説明する。2.2.4 項では、数値計算における計算体系の外部境界面の取扱いを説明する。
2.2.5 項では、エネルギー・空間的に離散化された方程式を行列形式で表現する。最後に、
2.2.6 項で、べき乗法を用いた k_{eff} 固有値問題の計算手順を説明する。

2.2.1 拡散方程式および SP3 方程式の導出

● PL 近似

本項では、拡散方程式および Simplified P3 方程式 (SP3 方程式) の導出にあたり、重要な
役割を果たす PL 近似[6]について説明する。ただし、以下では空間の次元を 1 次元平板と
し、空間の 1 次元変数は x とする。また、 x 軸と $\vec{\Omega}$ とのなす角を θ とし、方向余弦 $\mu = \cos\theta$ と
する。

1次元問題では、他2方向の漏れ量 $\partial\psi/\partial y = \partial\psi/\partial z = 0$ であるため、1次元輸送方程式は
次式のように記述できる。

$$\mu \frac{\partial\psi(x, E, \mu)}{\partial x} + \Sigma_t(x, E)\psi(x, E, \mu) = Q(x, E, \mu) \quad (2.3)$$

まず、角度中性子束 ψ と中性子源 Q を(2.4)式および(2.5)式のようにルジャンドル多項式 $P_l(\mu)$ により展開する。

$$\psi(x, E, \mu) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2} \psi_l(x, E) P_l(\mu) \quad (2.4)$$

$$Q(x, E, \mu) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2} Q_l(x, E) P_l(\mu) \quad (2.5)$$

上式中の各変数の意味は以下のとおりである。

$P_l(\mu)$: l 次のルジャンドル多項式

$\psi_l(x, E)$: l 次のルジャンドル多項式に対応する角度中性子束の展開係数

$Q_l(x, E)$: l 次のルジャンドル多項式に対応する中性子源の展開係数

ルジャンドル多項式 $P_l(\mu)$ は(2.6)式で定義される多項式であり、(2.7)式の正規直交関係を満たす。

$$P_l(\mu) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{d\mu^l} (\mu^2 - 1)^l \quad (2.6)$$

$$\int_{-1}^1 P_l(\mu) P_{l'}(\mu) d\mu = \begin{cases} 0 & (l \neq l') \\ \frac{2}{2l+1} & (l = l') \end{cases} \quad (2.7)$$

例えば、0次–3次のルジャンドル多項式は次式で記述される。

$$P_0(\mu) = 1, P_1(\mu) = \mu, P_2(\mu) = \frac{3\mu^2 - 1}{2}, P_3(\mu) = \frac{5\mu^3 - 3\mu}{2} \quad (2.8)$$

(2.4)–(2.6), (2.8)式から分かるように、0次のルジャンドル多項式は飛行方向に関する等方的な成分、高次のルジャンドル多項式は非等方的な成分を表現している。仮に、角度中性子束や中性子源の飛行方向依存性が低次のルジャンドル多項式の和で十分表現できる場合には、次数が大きいルジャンドル多項式の成分を無視しても、角度中性子束の飛行方向分布を精度よく再現できることが期待される。そこで、実際の炉心解析では、次式のように0次– L 次のルジャンドル多項式を用いて角度依存性を近似的に取り扱う。

$$\psi(x, E, \mu) \approx \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} \psi_l(x, E) P_l(\mu) \quad (2.9)$$

$$Q(x, E, \mu) \approx \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} Q_l(x, E) P_l(\mu) \quad (2.10)$$

このように $L+1$ 次以降のルジャンドル多項式を無視した関数展開を PL 近似という[6]。なお、3次元問題では、ルジャンドル多項式ではなく球面調和関数により角度中性子束が展開されるが、3次元拡散方程式導出の詳細は本論文では省略する。

ここで(2.7)式の正規直交関係より、 $\psi_l(x, E)$ および $Q_l(x, E)$ は(2.11)式および(2.12)式のように記述できる。

$$\psi_l(x, E) = \int_{-1}^1 P_l(\mu) \psi(x, E, \mu) d\mu \quad (2.11)$$

$$Q_l(x, E) = \int_{-1}^1 P_l(\mu) Q(x, E, \mu) d\mu \quad (2.12)$$

(2.8)式で示したように $P_0(\mu) = 1$ であるため、(2.11)式に基づくと、0次の中性子束の展開係数 ψ_0 は次式のように角度中性子束の全角度での積分値、すなわち全中性子束 ϕ と一致する。

$$\psi_0(x, E) = \int_{-1}^1 P_0(\mu) \psi(x, E, \mu) d\mu = \int_{-1}^1 \psi(x, E, \mu) d\mu = \phi(x, E) \quad (2.13)$$

同様に、1次の中性子束の展開係数 ψ_1 は次式のように正味の中性子流 J と一致する。

$$\psi_1(x, E) = \int_{-1}^1 P_1(\mu) \psi(x, E, \mu) d\mu = \int_{-1}^1 \mu \psi(x, E, \mu) d\mu = J(x, E) \quad (2.14)$$

以降では、偶数次の中性子束の展開係数を ϕ_l と表記し、 l 次の中性子束とよぶ。また、奇数次の中性子束の展開係数を J_l と表記し、 l 次の正味の中性子流とよぶ。ただし、本論文の拡散理論では、次項の拡散方程式導出時を除き、中性子飛行方向に対応する下添え字を省略する。すなわち、0次の中性子束および1次の正味の中性子流をそれぞれ単に、 ϕ および J と表記する。

● 拡散方程式

本項で拡散方程式を導出する。まず中性子輸送方程式(2.3)式にP1近似を適用する。すなわち、角度中性子束および中性子源を(2.15)式および(2.16)式のように0次と1次のルジャンドル多項式で展開する。

$$\psi(x, E, \mu) \approx \frac{1}{2} \{ \phi_0(x, E) P_0(\mu) + 3J_1(x, E) P_1(\mu) \} \quad (2.15)$$

$$Q(x, E, \mu) \approx \frac{1}{2} \{ Q_0(x, E) P_0(\mu) + 3Q_1(x, E) P_1(\mu) \} \quad (2.16)$$

次に、輸送方程式(2.3)式に(2.15)式および(2.16)式を代入し、 $P_0(\mu)$ および $P_1(\mu)$ をかけた後、角度 μ に関して積分することで(2.17)式および(2.18)式が得られる。

$$\begin{aligned} & \int_{-1}^1 P_0(\mu) \mu \frac{\partial \psi(x, E, \mu)}{\partial x} d\mu + \Sigma_t(x, E) \int_{-1}^1 P_0(\mu) \psi(x, E, \mu) d\mu \\ &= \int_{-1}^1 P_0(\mu) Q(x, E, \mu) d\mu \end{aligned} \quad (2.17)$$

$$\begin{aligned} & \int_{-1}^1 P_1(\mu) \mu \frac{\partial \psi(x, E, \mu)}{\partial x} d\mu + \Sigma_t(x, E) \int_{-1}^1 P_1(\mu) \psi(x, E, \mu) d\mu \\ &= \int_{-1}^1 P_1(\mu) Q(x, E, \mu) d\mu \end{aligned} \quad (2.18)$$

(2.17)式および(2.18)式の左辺第2項と右辺第1項の積分は(2.11)式および(2.12)式の右辺に一

致する。また、(2.17)式および(2.18)式の左辺第1項の角度中性子束 ψ を(2.15)式のように0,1次のルジャンドル多項式の展開形で表現した後、ルジャンドル多項式(2.8)式を代入し、角度変数に関する積分計算を実施することで、(2.19)式および(2.20)式が得られる。

$$\int_{-1}^1 P_0(\mu) \mu \frac{\partial \psi(x, E, \mu)}{\partial x} d\mu = \frac{\partial J_1(x, E)}{\partial x} \quad (2.19)$$

$$\int_{-1}^1 P_1(\mu) \mu \frac{\partial \psi(x, E, \mu)}{\partial x} d\mu = \frac{1}{3} \frac{\partial \phi_0(x, E)}{\partial x} \quad (2.20)$$

以上より、(2.17)式および(2.18)式は(2.21)式および(2.22)式のように記述できる。

$$\frac{\partial J_1(x, E)}{\partial x} + \Sigma_t(x, E) \phi_0(x, E) = Q_0(x, E) \quad (2.21)$$

$$\frac{1}{3} \frac{\partial \phi_0(x, E)}{\partial x} + \Sigma_t(x, E) J_1(x, E) = Q_1(x, E) \quad (2.22)$$

ここで、非等方散乱 Q_1 について、次式のように「非等方散乱によって生じる中性子数と非等方散乱によって失われる中性子数が等しい」と近似する。

$$\begin{aligned} Q_1(x, E) &= \int_0^\infty \Sigma_{s1}(x, E' \rightarrow E) J_1(x, E') dE' \approx \int_0^\infty \Sigma_{s1}(x, E \rightarrow E') J_1(x, E) dE' \\ &= \Sigma_{s1}(x, E) J_1(x, E) \end{aligned} \quad (2.23)$$

上式中の $\Sigma_{s1}(x, E)$ は、1次の非等方散乱断面積であり、次式で定義される。

$$\Sigma_{s1}(x, E) = \int_0^\infty \Sigma_{s1}(x, E \rightarrow E') dE' \quad (2.24)$$

(2.22)式に(2.23)式を代入することで、次式が得られる。

$$\begin{aligned} \frac{1}{3} \frac{\partial \phi_0(x, E)}{\partial x} + \Sigma_t(x, E) J_1(x, E) &= \Sigma_{s1}(E) J_1(x, E) \\ \Leftrightarrow \frac{1}{3} \frac{\partial \phi_0(x, E)}{\partial x} + \Sigma_{tr}(x, E) J_1(x, E) &= 0 \end{aligned} \quad (2.25)$$

ただし、 Σ_{tr} は輸送断面積とよばれる量であり、(2.26)式で定義される。

$$\Sigma_{tr}(x, E) = \Sigma_t(x, E) - \Sigma_{s1}(x, E) \quad (2.26)$$

(2.25)式より、正味の中性子流 $J_1(x, E)$ は次式で記述できる。

$$J_1(x, E) = -\frac{1}{3\Sigma_{tr}(x, E)} \frac{\partial \phi_0(x, E)}{\partial x} = -D(x, E) \frac{\partial \phi_0(x, E)}{\partial x} \quad (2.27)$$

ただし、 $D(x, E)$ は拡散係数であり、次式のように輸送断面積によって定義される。

$$D(x, E) = \frac{1}{3\Sigma_{tr}(x, E)} \quad (2.28)$$

(2.27)式を(2.21)式に代入し、角度変数に関する下添え字を省略することで、1次元拡散方程式が以下のように得られる。

$$-\frac{\partial}{\partial x} \left[D(x, E) \frac{\partial \phi_0(x, E)}{\partial x} \right] + \Sigma_t(x, E) \phi_0(x, E) = Q_0(x, E) \quad (2.29)$$

角度変数に関する下添え字を省略した場合、多次元拡散方程式は次式で記述される。

$$-\nabla[D(\vec{r}, E)\nabla\phi(\vec{r}, E)] + \Sigma_t(\vec{r}, E)\phi(\vec{r}, E) = Q(\vec{r}, E) \quad (2.30)$$

上式は1次元拡散方程式に対して空間変数 $x \rightarrow \vec{r}$ 、空間偏微分項 $\partial/\partial x \rightarrow \nabla$ と変換した方程式に対応する。臨界状態の固有値方程式を考え、中性子が核分裂反応及び散乱反応によって生成される場合には、 $Q(\vec{x}, E)$ は次式で記述できる。

$$Q(\vec{r}, E) = \frac{\chi(\vec{r}, E)}{k_{\text{eff}}} \int_0^\infty \nu \Sigma_f(\vec{r}, E') \phi(\vec{r}, E') dE' + \int_0^\infty \Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E) \phi(\vec{r}, E') dE' \quad (2.31)$$

● SP3 方程式

本項では、SP3 方程式を導出する。そのためにまず、1次元 P3 方程式を導出する。はじめに1次元中性子輸送方程式(2.3)式に P3 近似を適用する。すなわち、角度中性子束および中性子源を(2.32)式および(2.33)式のように0次～3次のルジャンドル多項式で展開する。

$$\psi(x, E, \mu) \approx \frac{1}{2} \left\{ \phi_0(x, E) P_0(\mu) + 3J_1(x, E) P_1(\mu) \right. \\ \left. + 5\phi_2(x, E) P_2(\mu) + 7J_3(x, E) P_3(\mu) \right\} \quad (2.32)$$

$$Q(x, E, \mu) \approx \frac{1}{2} \left\{ Q_0(x, E) P_0(\mu) + 3Q_1(x, E) P_1(\mu) \right. \\ \left. + 5Q_2(x, E) P_2(\mu) + 7Q_3(x, E) P_3(\mu) \right\} \quad (2.33)$$

次に、拡散方程式導出時と同様に、輸送方程式(2.3)式に(2.32)式および(2.33)式を代入し、 $P_0(\mu)$ – $P_3(\mu)$ をかけた後、角度 μ に関して積分することで(2.34)式–(2.37)式が得られる。

$$\frac{\partial J_1(x, E)}{\partial x} + \Sigma_t(x, E) \phi_0(x, E) = Q_0(x, E) \quad (2.34)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left\{ \frac{1}{3} \phi_0(x, E) + \frac{2}{3} \phi_2(x, E) \right\} + \Sigma_t(x, E) J_1(x, E) = Q_1(x, E) \quad (2.35)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left\{ \frac{2}{5} J_1(x, E) + \frac{3}{5} J_3(x, E) \right\} + \Sigma_t(x, E) \phi_2(x, E) = Q_2(x, E) \quad (2.36)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left\{ \frac{3}{7} \phi_2(x, E) \right\} + \Sigma_t(x, E) J_3(x, E) = Q_3(x, E) \quad (2.37)$$

$l \geq 1$ 次の非等方散乱源 Q_l について、「非等方散乱によって生じる中性子数と非等方散乱によって失われる中性子数が等しい」と近似することで、(2.35)式–(2.37)式はそれぞれ(2.38)式–(2.40)式のように記述できる。

$$\frac{\partial}{\partial x} \left\{ \frac{1}{3} \phi_0(x, E) + \frac{2}{3} \phi_2(x, E) \right\} + \Sigma_{tr}(x, E) J_1(x, E) = 0 \quad (2.38)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left\{ \frac{2}{5} J_1(x, E) + \frac{3}{5} J_3(x, E) \right\} + \Sigma_{t2}(x, E) \phi_2(x, E) = 0 \quad (2.39)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left\{ \frac{3}{7} \phi_2(x, E) \right\} + \Sigma_{t3}(x, E) J_3(x, E) = 0 \quad (2.40)$$

ここで、 Σ_{t2} および Σ_{t3} は(2.41)式で定義される。

$$\Sigma_{tn}(x, E) = \Sigma_t(x, E) - \Sigma_{sn}(x, E) \quad \text{for } n = 2, 3 \quad (2.41)$$

本論文での SP3 計算では、(2.42)式のように「2 次以上の非等方散乱断面積は 1 次の非等方散乱断面積 Σ_{s1} に等しい」とする輸送近似を適用する。

$$\Sigma_{tn} = \Sigma_t - \Sigma_{sn} \approx \Sigma_t - \Sigma_{s1} = \Sigma_{tr} \quad (2.42)$$

(2.38)式および(2.40)式、(2.42)式より、 ϕ_0 と ϕ_2 を用いて J_1 および J_3 は(2.43)式および(2.44)式のように記述できる。

$$\begin{aligned} J_1(x, E) &= -\frac{1}{3\Sigma_{tr}(z, E)} \frac{\partial}{\partial x} \{ \phi_0(x, E) + 2\phi_2(x, E) \} \\ &= -D(x, E) \frac{\partial}{\partial x} \{ \phi_0(x, E) + 2\phi_2(x, E) \} \end{aligned} \quad (2.43)$$

$$J_3(x, E) = -\frac{3}{7\Sigma_{tr}(x, E)} \frac{\partial \phi_2(x, E)}{\partial x} = -D_3(x, E) \frac{\partial \phi_2(x, E)}{\partial x} \quad (2.44)$$

ただし、 $D_3(x, E)$ は次式で定義される。

$$D_3(x, E) = \frac{3}{7\Sigma_{tr}(x, E)} = \frac{9}{7} D(x, E) \quad (2.45)$$

(2.34)式および(2.39)式に(2.43)式および(2.44)式を代入することで、1 次元 P3 方程式として(2.46)式および(2.47)式が得られる。

$$-\frac{\partial}{\partial x} \left[D(x, E) \frac{\partial}{\partial x} \{ \phi_0(x, E) + 2\phi_2(x, E) \} \right] + \Sigma_t(x, E) \phi_0(x, E) = Q_0(x, E) \quad (2.46)$$

$$\begin{aligned} &-\frac{\partial}{\partial x} \left\{ \frac{3}{5} D_3(x, E) \frac{\partial \phi_2(x, E)}{\partial x} \right\} + \Sigma_{tr}(x, E) \phi_2(x, E) \\ &= \frac{2}{5} \{ \Sigma_t(x, E) \phi_0(x, E) - Q_0(x, E) \} \end{aligned} \quad (2.47)$$

最後に、1 次元 P3 方程式の空間変数 $x \rightarrow \vec{r}$ 、空間偏微分項 $\partial/\partial x \rightarrow \nabla$ に変換する。これにより多次元 SP3 方程式として(2.48)式および(2.49)式が得られる。

$$-\nabla [D(\vec{r}, E) \nabla \{ \phi_0(\vec{r}, E) + 2\phi_2(\vec{r}, E) \}] + \Sigma_t(\vec{r}, E) \phi_0(\vec{r}, E) = Q_0(\vec{r}, E) \quad (2.48)$$

$$-\nabla \left\{ \frac{3}{5} D_3(\vec{r}, E) \nabla \phi_2(\vec{r}, E) \right\} + \Sigma_{tr}(\vec{r}, E) \phi_2(\vec{r}, E) = \frac{2}{5} \{ \Sigma_t(\vec{r}, E) \phi_0(\vec{r}, E) - Q_0(\vec{r}, E) \} \quad (2.49)$$

多次元の P3 方程式中には、 $\partial^2/\partial x \partial y$ のような偏微分項が含まれる。一方、多次元問題の SP3 方程式には、 $\partial^2/\partial x \partial y$ のような項は含まれず拡散方程式と同様の形式で記述されるため、数値計算上の取り扱いが比較的容易である。

なお、臨界状態の固有値方程式を考え、中性子が核分裂反応及び散乱反応によって生成される場合には、 $Q_0(\vec{r}, E)$ は拡散理論と同様に次式で記述できる。

$$Q_0(\vec{r}, E) = \frac{\chi(\vec{r}, E)}{k_{\text{eff}}} \int_0^\infty \nu \Sigma_f(\vec{r}, E') \phi_0(\vec{r}, E') dE' + \int_0^\infty \Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E) \phi_0(\vec{r}, E') dE' \quad (2.50)$$

2.2.2 多群近似

本項では、エネルギー離散化である多群近似について説明する。

前項で説明したように、拡散および SP3 方程式は核反応断面積に依存する。一般に核反応断面積をエネルギーの関数とみたとき、その関数形は極めて複雑である。そのため、拡散および SP3 方程式を解析的に解くことは困難である。そこで炉心解析では、**Fig. 2.1**のように連続量であるエネルギーをNG通りのグループ(群)に分ける。

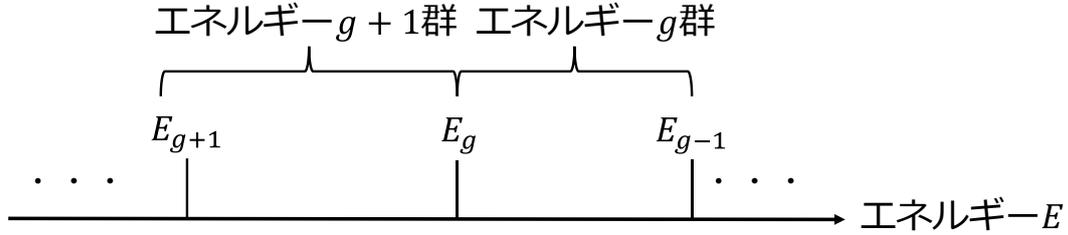


Fig. 2.1 エネルギーの離散化

この時、離散化前後で各エネルギー群の反応率が保存するように、全中性子束および2次中性子束、各断面積をそれぞれ(2.51)式-(2.55)式のように平均化する。

$$\phi_{l,g}(\vec{r}) = \int_{E_g}^{E_{g-1}} \phi_l(\vec{r}, E) dE \quad (2.51)$$

$$\Sigma_{t,g}(\vec{r}) = \frac{\int_{E_g}^{E_{g-1}} \Sigma_t(\vec{r}, E) \phi_0(\vec{r}, E) dE}{\phi_{0,g}(\vec{r})} \quad (2.52)$$

$$\chi_g(\vec{r}) = \frac{\int_{E_g}^{E_{g-1}} \chi(\vec{r}, E) \nu \Sigma_f(\vec{r}, E) \phi_0(\vec{r}, E) dE}{\int_{E_g}^{E_{g-1}} \nu \Sigma_f(\vec{r}, E) \phi_0(\vec{r}, E) dE} \quad (2.53)$$

$$\nu \Sigma_{f,g}(\vec{r}) = \frac{\int_{E_g}^{E_{g-1}} \nu \Sigma_f(\vec{r}, E) \phi_0(\vec{r}, E) dE}{\phi_{0,g}(\vec{r})} \quad (2.54)$$

$$\Sigma_{s,g' \rightarrow g}(\vec{r}) = \frac{\int_{E_g}^{E_{g-1}} dE \int_{E_{g'}^{g'-1}} dE' \Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E) \phi_0(\vec{r}, E')}{\phi_{0,g'}(\vec{r})} \quad (2.55)$$

例えば、多群近似された拡散方程式は(2.56)式のように記述できる。

$$\begin{aligned}
& -\nabla\{D_g(\vec{r})\nabla\phi_g(\vec{r})\} + \Sigma_{t,g}(\vec{r})\phi_g(\vec{r}) \\
& = \frac{\chi_g(\vec{r})}{k_{\text{eff}}} \sum_{g'} v\Sigma_{f,g'}(\vec{r})\phi_{g'}(\vec{r}) + \sum_{g'} v\Sigma_{s,g'\rightarrow g}(\vec{r})\phi_{g'}(\vec{r})
\end{aligned} \tag{2.56}$$

ただし、エネルギー g 群の拡散係数 $D_g(\vec{r})$ は次式から計算される。

$$D_g(\vec{r}) = \frac{\int_{E_g}^{E_{g-1}} D(\vec{r}, E)\phi(\vec{r}, E) dE}{\phi_g(\vec{r})} \tag{2.57}$$

拡散理論の(2.56)式および(2.57)式において、飛行方向の下添え字を省略していることに留意されたい。

2.2.3 空間離散化

前項でエネルギー離散化について説明した。本項では、空間離散化について説明する。空間離散化では、3次元空間を有限の体積をもつ NR 個の領域（空間メッシュ）に分割する。この時、多群近似と同様に離散化前後で各エネルギー群の反応率が保存するように、全中性子束および2次中性子束、各断面積をそれぞれ(2.58)式–(2.62)式のように平均化する。

$$\phi_{l,g,r} = \frac{\int_{V_r} \phi_{l,g}(\vec{r}) dV}{\int_{V_r} dV} \tag{2.58}$$

$$\Sigma_{t,g,r} = \frac{\int_{V_r} \Sigma_{t,g}(\vec{r})\phi_{0,g}(\vec{r}) dV}{\int_{V_r} \phi_{0,g}(\vec{r}) dV} \tag{2.59}$$

$$\chi_{g,r} = \frac{\int_{V_r} \chi_g(\vec{r})v\Sigma_{f,g}(\vec{r})\phi_{0,g}(\vec{r}) dV}{\int_{V_r} v\Sigma_{f,g}(\vec{r})\phi_{0,g}(\vec{r}) dV} \tag{2.60}$$

$$v\Sigma_{f,g,r} = \frac{\int_{V_r} v\Sigma_{f,g}(\vec{r})\phi_{0,g}(\vec{r}) dV}{\int_{V_r} \phi_{0,g}(\vec{r}) dV} \tag{2.61}$$

$$\Sigma_{s,g'\rightarrow g,r} = \frac{\int_{V_r} \Sigma_{s,g'\rightarrow g}(\vec{r})\phi_{0,g'}(\vec{r}) dV}{\int_{V_r} \phi_{0,g'}(\vec{r}) dV} \tag{2.62}$$

ここまでは、空間を3次元として説明した。ただし拡散計算およびSP3計算の概要は1次元問題の計算理論で十分理解できる。そこで、以降では、空間を1次元として説明する。本研究では、2次元炉心体系を対象として研究を実施したため、2次元問題における各計算理論が必要となる。2次元問題における各計算理論は1次元の各計算理論を拡張する形で2.2.5項にて説明する。なお、空間を1次元とした場合、SP3計算はP3計算と等価であるが、2次元問題と用語を統一するために、以降ではSP3計算と記載する。また、空間メッシュの総数

を $NR = NX$ とする。

● 拡散計算

飛行方向の下添え字を省略すると、多群近似・空間離散化された1次元拡散方程式は次式のように記述できる。

$$\frac{J_{g,i+1/2} - J_{g,i-1/2}}{\Delta x_i} + \Sigma_{r,g,i} \phi_{g,i} = \frac{\chi_{g,i}}{k_{\text{eff}}} \sum_{g'} \nu \Sigma_{f,g',i} \phi_{g',i} + \sum_{g' \neq g} \Sigma_{s,g' \rightarrow g,i} \phi_{g',i} \quad (2.63)$$

ここで、上式中の各変数の意味は以下のとおりである。

$J_{g,i+1/2}$: i 番目と $i+1$ 番目空間メッシュの境界面におけるエネルギー g 群の正味の中性子流

Δx_i : i 番目空間メッシュの x 方向メッシュ幅

$\Sigma_{r,g,i}$ は次式のように全断面積から自群散乱断面積を引いた量であり、除去断面積と呼ばれる。

$$\Sigma_{r,g,i} = \Sigma_{t,g,i} - \Sigma_{s,g \rightarrow g,i} \quad (2.64)$$

有限体積法に基づくと、 $J_{g,i+1/2}$ は $\phi_{g,i}$ を用いて次式のように表現できる[5]。

$$J_{g,i+1/2} = -\frac{2D_{g,i}D_{g,i+1}}{D_{g,i+1}\Delta x_i + D_{g,i}\Delta x_{i+1}}(\phi_{g,i+1} - \phi_{g,i}) \quad (2.65)$$

ただし本研究では、拡散係数 $D_{g,i}$ はエネルギー・空間的に離散化された輸送断面積 $\Sigma_{tr,g,i}$ を用いて次式から求めた。

$$D_{g,i} = \frac{1}{3\Sigma_{tr,g,i}} \quad (2.66)$$

(2.65)式より、1次元拡散方程式(2.63)式は $\phi_{g,i}$ を用いて次式で記述できる。

$$A_{g,i}^{x-} \phi_{g,i-1} + A_{g,i}^{x+} \phi_{g,i+1} + A_{g,i}^0 \phi_{g,i} = \frac{\chi_{g,i}}{k_{\text{eff}}} \sum_{g'} \nu \Sigma_{f,g',i} \phi_{g',i} + \sum_{g' \neq g} \Sigma_{s,g' \rightarrow g,i} \phi_{g',i} \quad (2.67)$$

ただし、左辺の係数 $A_{g,i}^{x-}$ 、 $A_{g,i}^{x+}$ 、 $A_{g,i}^0$ はそれぞれ(2.68)式-(2.70)式で定義される。

$$A_{g,i}^{x-} = -\frac{2D_{g,i-1}D_{g,i}}{(D_{g,i}\Delta x_{i-1} + D_{g,i-1}\Delta x_i)\Delta x_i} \quad (2.68)$$

$$A_{g,i}^{x+} = -\frac{2D_{g,i}D_{g,i+1}}{(D_{g,i+1}\Delta x_i + D_{g,i}\Delta x_{i+1})\Delta x_i} \quad (2.69)$$

$$A_{g,i}^0 = \Sigma_{r,g,i} - A_{g,i}^{x-} - A_{g,i}^{x+} \quad (2.70)$$

本論文では、係数 $A_{g,i}^{x-}$ 、 $A_{g,i}^{x+}$ 、 $A_{g,i}^0$ のように漏洩および吸収による中性子の消滅量に対応する係数を消滅係数と呼ぶ。

● SP3 計算

多群近似・空間離散化された 1 次元 SP3 方程式は次式のように記述できる。

$$\frac{J_{1,g,i+1/2} - J_{1,g,i-1/2}}{\Delta x_i} + \Sigma_{r,g,i} \phi_{0,g,i} = \frac{\chi_{g,i}}{k_{\text{eff}}} \sum_{g'} \nu \Sigma_{f,g',i} \phi_{0,g',i} + \sum_{g' \neq g} \Sigma_{s,g' \rightarrow g,i} \phi_{0,g',i} \quad (2.71)$$

$$\begin{aligned} & \frac{3J_{3,g,i+1/2} - J_{3,g,i-1/2}}{5} - \frac{2}{5} \Sigma_{r,g,i} \phi_{0,g,i} + \Sigma_{tr,g,i} \phi_{2,g,i} \\ & = -\frac{2}{5} \left(\frac{\chi_{g,i}}{k_{\text{eff}}} \sum_{g'} \nu \Sigma_{f,g',i} \phi_{0,g',i} + \sum_{g' \neq g} \Sigma_{s,g' \rightarrow g,i} \phi_{0,g',i} \right) \end{aligned} \quad (2.72)$$

拡散計算と同様に有限体積法に基づくと、 $J_{1,g,i+1/2}$ および $J_{3,g,i+1/2}$ は $\phi_{0,g,i}$ 、 $\phi_{2,g,i}$ を用いてそれぞれ(2.73)式および(2.74)式で記述できる。

$$J_{1,g,i+1/2} = -\frac{2D_{g,i}D_{g,i+1}}{D_{g,i+1}\Delta x_i + D_{g,i}\Delta x_{i+1}} (\phi_{0,g,i+1} + 2\phi_{2,g,i+1} - \phi_{0,g,i} - 2\phi_{2,g,i}) \quad (2.73)$$

$$J_{3,g,i+1/2} = -\frac{2D_{3,g,i}D_{3,g,i+1}}{D_{3,g,i+1}\Delta x_i + D_{3,g,i}\Delta x_{i+1}} (\phi_{2,g,i+1} - \phi_{2,g,i}) \quad (2.74)$$

上式より、1 次元 SP3 方程式は $\phi_{0,g,i}$ および $\phi_{2,g,i}$ を用いて次式のように記述できる。

$$\begin{aligned} & A_{(00),g,i}^{x-} \phi_{0,g,i-1} + A_{(00),g,i}^{x+} \phi_{0,g,i+1} + A_{(00),g,i}^0 \phi_{0,g,i} \\ & + A_{(02),g,i}^{x-} \phi_{2,g,i-1} + A_{(02),g,i}^{x+} \phi_{2,g,i+1} + A_{(02),g,i}^0 \phi_{2,g,i} \\ & = \frac{\chi_{g,i}}{k_{\text{eff}}} \sum_{g'} \nu \Sigma_{f,g',i} \phi_{0,g',i} + \sum_{g' \neq g} \Sigma_{s,g' \rightarrow g,i} \phi_{0,g',i} \end{aligned} \quad (2.75)$$

$$\begin{aligned} & A_{(20),g,i}^{x-} \phi_{0,g,i-1} + A_{(20),g,i}^{x+} \phi_{0,g,i+1} + A_{(20),g,i}^0 \phi_{0,g,i} \\ & + A_{(22),g,i}^{x-} \phi_{2,g,i-1} + A_{(22),g,i}^{x+} \phi_{2,g,i+1} + A_{(22),g,i}^0 \phi_{2,g,i} \\ & = -\frac{2}{5} \left(\frac{\chi_{g,i}}{k_{\text{eff}}} \sum_{g'} \nu \Sigma_{f,g',i} \phi_{0,g',i} + \sum_{g' \neq g} \Sigma_{s,g' \rightarrow g,i} \phi_{0,g',i} \right) \end{aligned} \quad (2.76)$$

ただし、係数 $A_{(mn),g,i}^{x-}$ 、 $A_{(mn),g,i}^{x+}$ 、 $A_{(mn),g,i}^0$ ($m, n = 0, 2$) はそれぞれ(2.77)式–(2.88)式で定義される。

$$A_{(00),g,i}^{x-} = \frac{-2D_{g,i-1}D_{g,i}}{(D_{g,i-1}\Delta x_i + D_{g,i}\Delta x_{i-1})\Delta x_i} \quad (2.77)$$

$$A_{(00),g,i}^{x+} = \frac{-2D_{g,i}D_{g,i+1}}{(D_{g,i}\Delta x_{i+1} + D_{g,i+1}\Delta x_i)\Delta x_i} \quad (2.78)$$

$$A_{(00),g,i}^0 = \Sigma_{r,g,i} - A_{(00),g,i}^{x-} - A_{(00),g,i}^{x+} \quad (2.79)$$

$$A_{(02),g,i}^{x-} = \frac{-4D_{g,i-1}D_{g,i}}{(D_{g,i-1}\Delta x_i + D_{g,i}\Delta x_{i-1})\Delta x_i} \quad (2.80)$$

$$A_{(02),g,i}^{x+} = \frac{-4D_{g,i}D_{g,i+1}}{(D_{g,i}\Delta x_{i+1} + D_{g,i+1}\Delta x_i)\Delta x_i} \quad (2.81)$$

$$A_{(02),g,i}^0 = -A_{(02),g,i}^{x-} - A_{(02),g,i}^{x+} \quad (2.82)$$

$$A_{(20),g,i}^{x-} = 0 \quad (2.83)$$

$$A_{(20),g,i}^{x+} = 0 \quad (2.84)$$

$$A_{(20),g,i}^0 = -\frac{2}{5}\Sigma_{r,g,i} - A_{(20),g,i}^{x-} - A_{(20),g,i}^{x+} \quad (2.85)$$

$$A_{(22),g,i}^{x-} = \frac{-6D_{3,g,i-1}D_{3,g,i}}{5(D_{3,g,i-1}\Delta x_i + D_{3,g,i}\Delta x_{i-1})\Delta x_i} \quad (2.86)$$

$$A_{(22),g,i}^{x+} = \frac{-6D_{3,g,i}D_{3,g,i+1}}{5(D_{3,g,i}\Delta x_{i+1} + D_{3,g,i+1}\Delta x_i)\Delta x_i} \quad (2.87)$$

$$A_{(22),g,i}^0 = \Sigma_{tr,g,i} - A_{(22),g,i}^{x-} - A_{(22),g,i}^{x+} \quad (2.88)$$

2.2.4 境界条件

前項で正味の中性子流 $J_{l+1,g,i}$ と中性子束 $\phi_{l,g,i}$ ($l = 0, 2$)の関係式を導出する際には、 i 番目メッシュの隣に空間メッシュが存在することを仮定している。しかし、実機炉心のような有限の大きさの体系では、外部境界面において本仮定は成り立たない。このため、数値計算上、外部境界面では特別な取り扱いが必要となる。そこで本項で、外部境界面において正味の中性子流 J_{l+1} が中性子束 ϕ_l を用いてどのように表現できるか説明する。以下で、まず拡散計算における境界条件について説明する。その後、SP3 計算における境界条件について説明する。

● 拡散計算

各境界条件を説明する上で重要な概念である $x \pm$ 方向の部分中性子流 $J_{x\pm}$ について説明する。正味の中性子流 J が全方向に飛行する中性子を考慮した量であるのに対し、 $J_{x\pm}$ は $x \pm$ 方向に飛行する中性子のみを数え上げた量であり、(2.89)式および(2.90)式で定義される。

$$J_{x+}(x, E) = \int_0^1 P_1(\mu)\psi(x, E, \mu) d\mu \quad (2.89)$$

$$J_{x-}(x, E) = -\int_{-1}^0 P_1(\mu)\psi(x, E, \mu) d\mu \quad (2.90)$$

以下で、 J_{x+} を全中性子束 ϕ および正味の中性子流 J を用いて表す。拡散理論では、P1 近似に

基づくことで、角度中性子束 ψ が $P_0(\mu)$ および $P_1(\mu)$ で(2.15)式のように展開される。(2.15)式を代入すると J_{x+} は次式のように記述できる。

$$\begin{aligned} J_{x+}(x, E) &= \int_0^1 P_1(\mu) \frac{1}{2} \{ \phi(x, E) P_0(\mu) + 3J(x, E) P_1(\mu) \} d\mu \\ &= \frac{1}{2} \phi(x, E) \int_0^1 P_1(\mu) P_0(\mu) d\mu + \frac{3}{2} J(x, E) \int_0^1 P_1^2(\mu) d\mu \end{aligned} \quad (2.91)$$

各項の μ に関する積分値は(2.92)式および(2.93)式のように計算できる。

$$\int_0^1 P_1(\mu) P_0(\mu) d\mu = \int_0^1 \mu d\mu = \frac{1}{2} \quad (2.92)$$

$$\int_0^1 P_1^2(\mu) d\mu = \int_0^1 \mu^2 d\mu = \frac{1}{3} \quad (2.93)$$

以上より、 J_{x+} は次式のように記述できる。

$$J_{x+}(x, E) = \frac{1}{4} \phi(x, E) + \frac{1}{2} J(x, E) \quad (2.94)$$

同様に、 J_{x-} は次式のように記述できる。

$$J_{x-}(x, E) = \frac{1}{4} \phi(x, E) - \frac{1}{2} J(x, E) \quad (2.95)$$

次に、 $x \pm$ 方向の部分中性子流 $J_{x\pm}$ と似た概念として、流入（流出）部分中性子流 $J^{in(out)}$ について説明する。 $J^{in(out)}$ は中性子が流入（流出）する方向に飛行する中性子量であり、 $J_{x\pm}$ と密接な関係がある。例えば体系左端境界面では、体系に流入する中性子は $x +$ 方向に飛行する中性子であり、流出する中性子は $x -$ 方向に飛行する中性子である。すなわち、次式が成り立つ。

$$J^{in} = J_{x+}, \quad J^{out} = J_{x-} \quad \text{on left boundary} \quad (2.96)$$

同様に体系右端境界面では、次式が成り立つ。

$$J^{in} = J_{x-}, \quad J^{out} = J_{x+} \quad \text{on right boundary} \quad (2.97)$$

このように、境界面によって、着目する中性子の飛行方向が異なる点が流入（流出）部分中性子流の特徴である。拡散理論では、流入（流出）部分中性子流 $J^{in(out)}$ を用いて境界条件が与えられる。以降では、完全反射境界条件、真空境界条件、アルベド境界条件の3つの境界条件を説明する。具体的には、3つの境界条件を与えた場合において、外部境界面の正味の中性子流がどのように記述されるか示した後、消滅係数 $A_{g,i}^{x-}$ 、 $A_{g,i}^{x+}$ を示す。

A) 完全反射境界条件

完全反射境界条件とは体系から流出する中性子がすべて反射されて、体系内に流入することを仮定する条件である。本条件は外部境界面において体系と外界全体が面対称であることに対応する。ここで、定義より正味の中性子流 J と $x \pm$ 方向の部分中性子流 $J_{x\pm}$ との間に

は、次式の関係が成り立つ。

$$J = J_{x+} - J_{x-} \quad (2.98)$$

完全反射境界条件では、 $J_{x+} = J_{x-}$ なので $J = 0$ である。したがって、体系の両端の境界条件として完全反射境界条件を与えた場合には、消滅係数は次式のように表現できる。

$$A_{g,1}^{x-} = A_{g,Nx}^{x+} = 0 \quad (2.99)$$

B) 真空境界条件

真空境界条件とは、体系外を真空とみなし体系外に流出した中性子が体系内に戻ってこないと仮定する条件である。拡散計算では、外部境界面からある距離 d_g だけ直線外挿した位置における中性子数を0とする。1次元平板体系における輸送理論に基づくと、各エネルギー一群の拡散係数 D_g と外挿距離 d_g には次式に示した関係がある[5],[6]。

$$d_g = 2.1312D_g \quad (2.100)$$

体系左端に真空境界条件を与えた場合を考える。この時、左境界面における全中性子束（表面中性子束） $\phi_{s,g,1/2}$ および1番目メッシュの全中性子束 $\phi_{g,1}$ において次式が成り立つと仮定する。

$$\frac{\phi_{s,g,1/2}}{d_g} \approx \frac{\phi_{g,1} - \phi_{s,g,1/2}}{\Delta x_1/2} \quad (2.101)$$

(2.101)式を表面中性子束 $\phi_{s,g,1/2}$ について解くことで次式が得られる。

$$\phi_{s,g,1/2} \approx \frac{2}{\frac{\Delta x_1}{d_g} + 2} \phi_{g,1} \quad (2.102)$$

さらに、正味の中性子流 $J_{g,1/2}$ は表面中性子束 $\phi_{s,g,1/2}$ および全中性子束 $\phi_{g,1}$ を用いて次式で記述できる。

$$J_{g,1/2} = -\frac{2D_{g,1}}{\Delta x_1} (\phi_{g,1} - \phi_{s,g,1/2}) \quad (2.103)$$

(2.103)式に(2.102)式を代入して整理することで、次式が得られる。

$$J_{g,1/2} = -\frac{2D_{g,1}}{4.2624D_{g,1} + \Delta x_1} \phi_{g,1} \quad (2.104)$$

ただし、拡散係数 D_g と外挿距離 d_g の関係式(2.100)式を用いた。以上より体系左端に真空境界条件を与えた場合、消滅係数 $A_{g,1}^{x-}$ は次式で記述できる。

$$A_{g,1}^{x-} = -\frac{2D_{g,1}}{(4.2624D_{g,1} + \Delta x_1)\Delta x_1} \quad (2.105)$$

体系右端に真空境界条件を与えた場合についても同様の手順で計算することで、正味の中性子流 $J_{g,Nx-1/2}$ は次式のように記述できることが示される。

$$J_{g,NX-1/2} = \frac{2D_{g,NX}}{4.2624D_{g,NX} + \Delta x_{NX}} \phi_{g,NX} \quad (2.106)$$

したがって、体系右端に真空境界条件を与えた場合、消滅係数 $A_{g,NX}^{x+}$ は次式で記述できる。

$$A_{g,NX}^{x+} = -\frac{2D_{g,NX}}{(4.2624D_{g,NX} + \Delta x_{NX})\Delta x_{NX}} \quad (2.107)$$

C) アルベド境界条件

アルベド境界条件とは、境界面における各エネルギー群の部分中性子流の反射率を与える条件であり、アルベド値 α_g を用いて次式で定義される。

$$J_g^{in} = \alpha_g J_g^{out} \quad (2.108)$$

まず、体系左端にアルベド境界条件を与えた場合を考える。体系左端では、(2.96)式が成り立つため、流入および流出部分中性子流 $J_{g,1/2}^{in}, J_{g,1/2}^{out}$ はそれぞれ(2.109)式および(2.110)式で記述できる。

$$J_{g,1/2}^{in} = \frac{1}{4} \phi_{s,g,1/2} + \frac{1}{2} J_{g,1/2} \quad (2.109)$$

$$J_{g,1/2}^{out} = \frac{1}{4} \phi_{s,g,1/2} - \frac{1}{2} J_{g,1/2} \quad (2.110)$$

ここで、正味の中性子流 $J_{g,1/2}$ 表面中性子束 $\phi_{g,1/2}$ には(2.103)式の関係がある。(2.109)式および(2.110)式に(2.103)式を代入した後、得られた2つの式を(2.108)式に代入することで次式が得られる。

$$\frac{1}{4} \phi_{s,g,1/2} - \frac{D_{g,1}}{\Delta x_1} (\phi_{g,1} - \phi_{s,g,1/2}) = \alpha_g^{x-} \left\{ \frac{1}{4} \phi_{s,g,1/2} + \frac{D_{g,1}}{\Delta x_1} (\phi_{g,1} - \phi_{s,g,1/2}) \right\} \quad (2.111)$$

ただし、 α_g^{x-} は体系左端におけるエネルギー g 群のアルベド値である。上式を $\phi_{s,g,1/2}$ について解くことで、次式が得られる。

$$\phi_{s,g,1/2} = \frac{4(1 + \alpha_g^{x-})D_{g,1}}{4(1 + \alpha_g^{x-})D_{g,1} + (1 - \alpha_g^{x-})\Delta x_1} \phi_{g,1} \quad (2.112)$$

(2.112)式を(2.103)式に代入し整理することで、 $J_{g,1/2}$ が $\phi_{g,1}$ を用いて次式のように記述できる。

$$J_{g,1/2} = -\frac{2(1 - \alpha_g^{x-})D_{g,1}}{4(1 + \alpha_g^{x-})D_{g,1} + (1 - \alpha_g^{x-})\Delta x_1} \phi_{g,1} \quad (2.113)$$

以上より、体系左端にアルベド境界条件を与えた場合、消滅係数 $A_{g,1}^{x-}$ は次式で記述できる。

$$A_{g,1}^{x-} = -\frac{2(1 - \alpha_g^{x-})D_{g,1}}{\{4(1 + \alpha_g^{x-})D_{g,1} + (1 - \alpha_g^{x-})\Delta x_1\}\Delta x_1} \quad (2.114)$$

以上で導出した(2.114)式の消滅係数 $A_{g,1}^{x-}$ を、A), B)の境界条件を与えた時の消滅係数(2.99)式および(2.105)式と比較すると、A)で述べた完全反射境界条件は全エネルギー群において $\alpha_{g,1} = 1.0$ の場合に対応し、B)で述べた真空境界条件は全エネルギー群において $\alpha_{g,1} =$

0.03176の場合に対応する。真空境界条件（体系外に流出した中性子が体系内に戻ってこないと仮定する条件）を拡散理論の枠組みで考えると、流入部分中性子流 $J^{in} = 0$ であり、 $\alpha_{g,1} = 0$ と定義することもできる。しかし、B)で説明したように、本研究における拡散計算の真空境界条件では、輸送理論に基づいて評価した外挿位置 d_g で中性子束を0とする。拡散理論の枠組みで本条件が成り立つとき、外部境界面を通過して、体系内に中性子がわずかに入射する。そのため、B)で述べた真空境界条件に対応するアルベド値は非ゼロの値となる。

体系右端にアルベド境界条件を与えた場合、同様の手順で計算を実施することで正味の中性子流 $J_{g,NX-1/2}$ は次式で与えられることが示される。

$$J_{g,NX-1/2} = \frac{2(1 - \alpha_g^{x+})D_{g,NX}}{4(1 + \alpha_g^{x+})D_{g,NX} + (1 - \alpha_g^{x+})\Delta x_{NX}} \phi_{g,NX} \quad (2.115)$$

上式より、体系右端にアルベド境界条件を与えた場合、消滅係数 $A_{g,NX}^{x+}$ は次式で記述できる。

$$A_{g,NX}^{x+} = -\frac{2(1 - \alpha_g^{x+})D_{g,NX}}{\{4(1 + \alpha_g^{x+})D_{g,NX} + (1 - \alpha_g^{x+})\Delta x_{NX}\}\Delta x_{NX}} \quad (2.116)$$

● SP3 計算

拡散計算で説明したように完全反射条件および真空境界条件は、それぞれ特殊なアルベド値を与えたアルベド境界条件とみなすことができる。そこで、SP3 計算では、アルベド境界条件のみに絞って説明する。SP3 計算におけるアルベド境界条件を説明するにあたり、部分中性子流の概念が必要となる。そこでまず、SP3 計算における部分中性子流の定義を以下で説明する。SP3 計算では、 $x \pm$ 方向の l 次の部分中性子流 $J_{x\pm,l}$ ($l = 1,3$)はそれぞれ(2.117)式および(2.118)式で定義される。

$$J_{x+,l}(x, E) = \int_0^1 P_l(\mu)\psi(x, E, \mu) d\mu \quad (2.117)$$

$$J_{x-,l}(x, E) = -\int_{-1}^0 P_l(\mu)\psi(x, E, \mu) d\mu \quad (2.118)$$

角度中性子束 ψ を0-3次のルジャンドル多項式で(2.32)式のように展開して、 μ に関する積分計算を実施することで $J_{x\pm,1}J_{x\pm,3}$ はそれぞれ(2.119)式および(2.120)式で記述できる。

$$J_{x\pm,1}(x, E) = \frac{1}{4}\Phi(x, E) \pm \frac{1}{2}J_1(x, E) - \frac{3}{16}\phi_2(x, E) \quad (2.119)$$

$$J_{x\pm,3}(x, E) = -\frac{1}{16}\Phi(x, E) \pm \frac{1}{2}J_3(x, E) + \frac{7}{16}\phi_2(x, E) \quad (2.120)$$

ただし、 Φ は ϕ_0 、 ϕ_2 を用いて次式で定義される量である。

$$\Phi(x, E) = \phi_0(x, E) + 2\phi_2(x, E) \quad (2.121)$$

$\Phi_{g,i}$ を用いることで、1次の正味の中性子流 $J_{1,g,i+1/2}$ を次式のように(2.73)式よりも簡単に記述できる。

$$J_{1,g,i+1/2} = -\frac{2D_{g,i}D_{g,i+1}}{D_{g,i+1}\Delta x_i + D_{g,i}\Delta x_{i+1}}(\Phi_{g,i+1} - \Phi_{g,i}) \quad (2.122)$$

SP3 理論でも流入（流出）部分中性子流 $J_l^{in(out)}$ ($l = 1, 3$)が拡散計算と全く同様に定義される。すなわち、体系左端および右端で $J_l^{in(out)}$ はそれぞれ(2.123)式および(2.124)式のように定義される。

$$J_l^{in} = J_{x+,l}, \quad J_l^{out} = J_{x-,l} \quad \text{on left boundary} \quad (2.123)$$

$$J_l^{in} = J_{x-,l}, \quad J_l^{out} = J_{x+,l} \quad \text{on right boundary} \quad (2.124)$$

次に、アルベド境界条件について説明する。SP3 計算では、境界面における各エネルギー群、 l 次の部分中性子流の反射率を与える条件であり、アルベド値 $\alpha_{l,g}$ を用いて次式で定義される。

$$J_{l,g}^{in} = \alpha_{l,g}J_{l,g}^{out} \quad (l = 1, 3) \quad (2.125)$$

完全反射境界条件は全エネルギー群、全次数において $\alpha_{l,g} = 1$ に対応し、真空境界条件は全エネルギー群、全次数において $\alpha_{l,g} = 0$ に対応する。SP3 計算では、真空境界条件として Marshak の真空境界条件[7],[8]を用いた。そのため真空境界条件に対応するアルベド値が拡散計算におけるアルベド値 (0.03176) とわずかに異なっている。

以下で、体系左端にアルベド境界条件を与えた場合を考える。体系左端では(2.123)式が成り立つため、各次数の流入および流出部分中性子流 $J_{1,g,1/2}^{in}, J_{1,g,1/2}^{out}$ 、はそれぞれ(2.126)式–(2.129)式で記述できる。

$$J_{1,g,1/2}^{in} = \frac{1}{4}\Phi_{s,g,1/2} + \frac{1}{2}J_{1,g,1/2} - \frac{3}{16}\phi_{s,2,g,1/2} \quad (2.126)$$

$$J_{1,g,1/2}^{out} = \frac{1}{4}\Phi_{s,g,1/2} - \frac{1}{2}J_{1,g,1/2} - \frac{3}{16}\phi_{s,2,g,1/2} \quad (2.127)$$

$$J_{3,g,1/2}^{in} = -\frac{1}{16}\Phi_{s,g,1/2} + \frac{1}{2}J_{3,g,1/2} + \frac{7}{16}\phi_{s,2,g,1/2} \quad (2.128)$$

$$J_{3,g,1/2}^{out} = -\frac{1}{16}\Phi_{s,g,1/2} - \frac{1}{2}J_{3,g,1/2} + \frac{7}{16}\phi_{s,2,g,1/2} \quad (2.129)$$

ここで、 $J_{1,g,1/2}$ および $J_{3,g,1/2}$ はそれぞれ(2.130)式および(2.131)式で記述できる。

$$J_{1,g,1/2} = -\frac{2D_{g,1}}{\Delta x_1}(\Phi_{g,1} - \Phi_{s,g,1/2}) \quad (2.130)$$

$$J_{3,g,1/2} = -\frac{2D_{3,g,1}}{\Delta x_1}(\phi_{2,g,1} - \phi_{s,2,g,1/2}) \quad (2.131)$$

上式を与えた上で、(2.126)式–(2.129)式を(2.125)式に代入することで、(2.132)式および(2.133)式が得られる。

$$\frac{1}{4}\Phi_{s,g,1/2} - \frac{D_{g,1}}{\Delta x_1}(\Phi_{g,1} - \Phi_{s,g,1/2}) - \frac{3}{16}\phi_{s,2,g,1/2} \quad (2.132)$$

$$= \alpha_{1,g}^{x^-} \left\{ \frac{1}{4}\Phi_{s,g,1/2} + \frac{D_{g,1}}{\Delta x_1}(\Phi_{g,1} - \Phi_{s,g,1/2}) - \frac{3}{16}\phi_{s,2,g,1/2} \right\} \\ - \frac{1}{16}\Phi_{s,g,1/2} - \frac{D_{3,g,1}}{\Delta x_1}(\phi_{2,g,1} - \phi_{s,2,g,1/2}) + \frac{7}{16}\phi_{s,2,g,1/2} \quad (2.133)$$

$$= \alpha_{3,g}^{x^-} \left\{ -\frac{1}{16}\Phi_{s,g,1/2} + \frac{D_{3,g,1}}{\Delta x_1}(\phi_{2,g,1} - \phi_{s,2,g,1/2}) + \frac{7}{16}\phi_{s,2,g,1/2} \right\}$$

ただし、 $\alpha_{l,g}^{x^-}$ は体系左端のエネルギー- g 群、 l 次のアルベド値である。上式を $\Phi_{s,g,1/2}$ 、 $\phi_{s,2,g,1/2}$ について解くことで、(2.134)式および(2.135)式が得られる。

$$\Phi_{s,g,1/2} = \frac{b_{(1,1),g} D_{g,1}}{b_g \Delta x_1} (1 + \alpha_{1,g}^{x^-}) \Phi_{g,1} + \frac{b_{(0,1),g} D_{3,g,1}}{b_g \Delta x_1} (1 + \alpha_{3,g}^{x^-}) \phi_{2,g,1} \quad (2.134)$$

$$\phi_{s,g,1/2,2} = \frac{b_{(1,0),g} D_{g,1}}{b_g \Delta x_1} (1 + \alpha_{1,g}^{x^-}) \Phi_{g,1} + \frac{b_{(0,0),g} D_{3,g,1}}{b_g \Delta x_1} (1 + \alpha_{3,g}^{x^-}) \phi_{2,g,1} \quad (2.135)$$

ただし、係数 $b_{(m,n),g}$ ($m, n = 0, 1$)および b_g はそれぞれ(2.136)式-(2.140)式で定義される。

$$b_{(0,0),g} = \frac{D_{g,1}}{\Delta x_1} + \frac{1}{4} + \alpha_{1,g}^{x^-} \left\{ \frac{D_{g,1}}{\Delta x_1} - \frac{1}{4} \right\} \quad (2.136)$$

$$b_{(0,1),g} = \frac{3}{16} (1 - \alpha_{1,g}^{x^-}) \quad (2.137)$$

$$b_{(1,0),g} = \frac{1}{16} (1 - \alpha_{3,g}^{x^-}) \quad (2.138)$$

$$b_{(1,1),g} = \frac{D_{g,3}}{\Delta x_1} + \frac{7}{16} + \alpha_{3,g}^{x^-} \left\{ \frac{D_{3,g}}{\Delta x_1} - \frac{7}{16} \right\} \quad (2.139)$$

$$b_g = b_{(0,0),g} b_{(1,1),g} - b_{(0,1),g} b_{(1,0),g} \quad (2.140)$$

(2.134)式および(2.135)式を(2.130)式および(2.131)式に代入することで、(2.141)式および(2.142)式が得られる。

$$J_{1,g,1/2} = -\frac{2D_{g,1}}{\Delta x_1} \left[\left\{ 1 - \frac{b_{(1,1),g} D_{g,1}}{b_g \Delta x_1} (1 + \alpha_{1,g}^{x^-}) \right\} \phi_{0,g,1} \right. \\ \left. + \left\{ 2 \left(1 - \frac{b_{(1,1),g} D_{g,1}}{b_g \Delta x_1} (1 + \alpha_{1,g}^{x^-}) \right) \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{b_{(0,1),g} D_{3,g,1}}{b_g \Delta x_1} (1 + \alpha_{3,g}^{x^-}) \right\} \phi_{2,g,1} \right] \quad (2.141)$$

$$J_{3,g,1/2} = -\frac{2D_{3,g,1}}{\Delta x_1} \left[\begin{array}{c} -\frac{b_{(1,0),g} D_{g,1}}{b_g \Delta x_1} (1 + \alpha_{1,g}^{x-}) \phi_{0,g,1} \\ \left(1 - \frac{2b_{(1,0),g} D_{g,1}}{b_g \Delta x_1} (1 + \alpha_{1,g}^{x-}) \right) \\ -\frac{b_{(0,0),g} D_{3,g,1}}{b_g \Delta x_1} (1 + \alpha_{3,g}^{x-}) \end{array} \right] \phi_{2,g,1} \quad (2.142)$$

ただし、(2.121)式を代入して $\Phi_{g,1}$ を消去した。以上より、最終的に消滅係数 $A_{(m,n),g,1}^{x-}$ ($m, n = 0, 2$)は(2.143)式–(2.146)式で記述できる。

$$A_{(0,0),g,1}^{x-} = -\frac{2D_{g,1}}{\Delta x_1^2} \left\{ 1 - \frac{b_{(1,1),g} D_{g,1}}{b_g \Delta x_1} (1 + \alpha_{1,g}^{x-}) \right\} \quad (2.143)$$

$$A_{(0,2),g,1}^{x-} = -\frac{2D_{g,1}}{\Delta x_1^2} \left\{ 2 \left(1 - \frac{b_{(1,1),g} D_{g,1}}{b_g \Delta x_1} (1 + \alpha_{1,g}^{x-}) \right) - \frac{b_{(0,1),g} D_{3,g,1}}{b_g \Delta x_1} (1 + \alpha_{3,g}^{x-}) \right\} \quad (2.144)$$

$$A_{(2,0),g,1}^{x-} = \frac{6D_{g,1} D_{3,g,1} b_{(1,0),g}}{5\Delta x_1^3 b_g} (1 + \alpha_{1,g}^{x-}) \quad (2.145)$$

$$A_{(2,2),g,1}^{x-} = -\frac{6D_{3,g,1}}{5\Delta x_1^2} \left\{ 1 - \frac{2b_{(1,0),g} D_{g,1}}{b_g \Delta x_1} (1 + \alpha_{1,g}^{x-}) - \frac{b_{(0,0),g} D_{3,g,1}}{b_g \Delta x_1} (1 + \alpha_{3,g}^{x-}) \right\} \quad (2.146)$$

体系右側にアルベド境界条件を与えた場合も同様にして、消滅係数 $A_{(m,n),g,NX}^{x+}$ ($m, n = 0, 2$)は(2.147)式–(2.150)式で記述できる。

$$A_{(0,0),g,NX}^{x+} = -\frac{2D_{g,NX}}{\Delta x_{NX}^2} \left\{ 1 - \frac{b_{(1,1),g} D_{g,NX}}{b_g \Delta x_{NX}} (1 + \alpha_{1,g}^{x+}) \right\} \quad (2.147)$$

$$A_{(0,2),g,NX}^{x+} = -\frac{2D_{g,NX}}{\Delta x_{NX}^2} \left\{ 2 \left(1 - \frac{b_{(1,1),g} D_{g,NX}}{b_g \Delta x_{NX}} (1 + \alpha_{1,g}^{x+}) \right) - \frac{b_{(0,1),g} D_{3,g,NX}}{b_g \Delta x_{NX}} (1 + \alpha_{3,g}^{x+}) \right\} \quad (2.148)$$

$$A_{(2,0),g,NX}^{x+} = \frac{6D_{g,NX} D_{3,g,NX} b_{(1,0),g}}{5\Delta x_{NX}^3 b_g} (1 + \alpha_{1,g}^{x+}) \quad (2.149)$$

$$A_{(2,2),g,NX}^{x+} = -\frac{6D_{g,NX,3}}{5\Delta x_{NX}^2} \left\{ 1 - \frac{2b_{(1,0),g} D_{g,NX}}{b_g \Delta x_{NX}} (1 + \alpha_{1,g}^{x+}) - \frac{b_{(0,0),g} D_{3,g,NX}}{b_g \Delta x_{NX}} (1 + \alpha_{3,g}^{x-}) \right\} \quad (2.150)$$

上式における係数 $b_{(m,n),g}$ および b_g は、(2.136)式–(2.140)式にて定義された各係数に対して、 $D_{g,1} \rightarrow D_{g,NX}$, $D_{3,g,1} \rightarrow D_{3,g,NX}$, $\Delta x_1 \rightarrow \Delta x_{NX}$, $\alpha_{l,g}^{x-} \rightarrow \alpha_{l,g}^{x+}$ ($l = 1, 3$)と変換した係数である。

2.2.5 離散化された2次元拡散方程式およびSP3方程式の行列表記

前項までで空間・エネルギー的に離散化された1次元拡散方程式およびSP3方程式を導出した。本項では、まず1次元拡散およびSP3方程式を2次元体系に拡張する。次に行列とベクトルを用いて各方程式を表記する。

● 拡散計算

エネルギー・空間的に離散化された2次元拡散方程式は次式のように記述できる。

$$\begin{aligned} & \frac{J_{g,i+1/2,j} - J_{g,i-1/2,j}}{\Delta x_i} + \frac{J_{g,i,j+1/2} - J_{g,i,j-1/2}}{\Delta y_j} + \Sigma_{r,g,i,j} \phi_{g,i,j} \\ & = \frac{\chi_{g,i,j}}{k_{\text{eff}}} \sum_{g'} \nu \Sigma_{f,g',i,j} \phi_{g',i,j} + \sum_{g' \neq g} \Sigma_{s,g' \rightarrow g,i,j} \phi_{g',i,j} \end{aligned} \quad (2.151)$$

ただし、下添え字*i*が*x*方向のメッシュ番号を表し、*j*が*y*方向のメッシュ番号を表す。以降では、*x*方向メッシュ数を*NX*とし、*y*方向メッシュ数を*NY*とする。したがって、総メッシュ数 $NR = NX \times NY$ である。

1次元拡散方程式との大きな違いは*y*方向の中性子の漏洩項である。2.2.3項および2.2.4項で説明した手順と同様にして*y*方向の正味の中性子流 $J_{g,i,j+1/2}$ は $\phi_{g,i,j}$ を用いて次式のように表記できる。

$$J_{g,i,j+1/2} = - \frac{2D_{g,i,j}D_{g,i,j+1}}{D_{g,i,j+1}\Delta y_j + D_{g,i,j}\Delta y_{j+1}} (\phi_{g,i,j+1} - \phi_{g,i,j}) \quad (2.152)$$

ただし、 Δy_j は *j* 番目メッシュにおける *y* 方向メッシュ長さである。上式は *x* 方向の正味の中性子流 $J_{g,i+1/2,j}$ に関する(2.65)式の変数 *x* を変数 *y* に変換した式に対応する。外部境界面においても *x* 方向の正味の中性子流 $J_{g,i+1/2,j}$ の変数 $x \rightarrow y$ へと変換したものが *y* 方向の正味の中性子流 $J_{g,i,j+1/2}$ に対応する。したがって、(*i, j*)メッシュにおけるエネルギー *g* 群の全中性子束 $\phi_{g,i,j}$ の収支式は次式のように記述できる。

$$\begin{aligned} & A_{g,i,j}^{x-} \phi_{g,i-1,j} + A_{g,i,j}^{x+} \phi_{g,i+1,j} + A_{g,i,j}^{y-} \phi_{g,i,j-1} + A_{g,i,j}^{y+} \phi_{g,i,j+1} + A_{g,i,j}^0 \phi_{g,i,j} \\ & = \frac{\chi_{g,i,j}}{k_{\text{eff}}} \sum_{g'} \nu \Sigma_{f,g',i,j} \phi_{g',i,j} + \sum_{g' \neq g} \Sigma_{s,g' \rightarrow g,i,j} \phi_{g',i,j} \end{aligned} \quad (2.153)$$

左辺の各消滅係数はそれぞれ(2.154)式-(2.158)式で定義される。

$$A_{g,i,j}^{x-} = \begin{cases} - \frac{2(1 - \alpha_{g,i,j}^{x-})D_{g,i,j}}{\{4(1 + \alpha_{g,i,j}^{x-})D_{g,i,j} + (1 - \alpha_{g,i,j}^{x-})\Delta x_i\}\Delta x_i} & (i = 1) \\ - \frac{2D_{g,i-1,j}D_{g,i,j}}{(D_{g,i,j}\Delta x_{i-1} + D_{g,i-1,j}\Delta x_i)\Delta x_i} & (i \neq 1) \end{cases} \quad (2.154)$$

$$A_{g,i,j}^{x+} = \begin{cases} - \frac{2(1 - \alpha_{g,i,j}^{x+})D_{g,i,j}}{\{4(1 + \alpha_{g,i,j}^{x+})D_{g,i,j} + (1 - \alpha_{g,i,j}^{x+})\Delta x_i\}\Delta x_i} & (i = NX) \\ - \frac{2D_{g,i,j}D_{g,i+1,j}}{(D_{g,i+1,j}\Delta x_i + D_{g,i,j}\Delta x_{i+1})\Delta x_i} & (i \neq NX) \end{cases} \quad (2.155)$$

$$\mathbf{F}_{g' \rightarrow g} = \begin{pmatrix} \chi_{g,1,1} \nu \Sigma_{f,g',1,1} & & & & \\ & \chi_{g,1,2} \nu \Sigma_{f,g',1,2} & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & \chi_{g,NX,NY} \nu \Sigma_{f,g',NX,NY} \end{pmatrix} \quad (2.161)$$

$$\mathbf{S}_{g' \rightarrow g} = \begin{pmatrix} \Sigma_{s,g' \rightarrow g,1,1} & & & & \\ & \Sigma_{s,g' \rightarrow g,2,1} & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & \Sigma_{s,g' \rightarrow g,NX,NY} \end{pmatrix} \quad (2.162)$$

$$\vec{\phi}_g = \begin{pmatrix} \phi_{g,1,1} \\ \phi_{g,2,1} \\ \vdots \\ \phi_{g,NX,1} \\ \phi_{g,1,2} \\ \vdots \\ \phi_{g,NX,NY} \end{pmatrix} \quad (2.163)$$

核分裂断面積行列 $\mathbf{F}_{g' \rightarrow g}$ および散乱断面積行列 $\mathbf{S}_{g' \rightarrow g}$ は対角行列であり、消滅行列 \mathbf{A}_g は 5 重対角行列である。

● SP3 計算

エネルギー・空間的に離散化された 2 次元 SP3 方程式は(2.164)式および(2.165)式のように記述できる。

$$\frac{J_{1,g,i+1/2,j} - J_{1,g,i-1/2,j}}{\Delta x_i} + \frac{J_{1,g,i,j+1/2} - J_{1,g,i,j-1/2}}{\Delta y_j} + \Sigma_{r,g,i,j} \phi_{0,g,i,j} \quad (2.164)$$

$$= \frac{\chi_{g,i,j}}{k_{\text{eff}}} \sum_{g'} \nu \Sigma_{f,g',i,j} \phi_{0,g',i,j} + \sum_{g' \neq g} \Sigma_{s,g' \rightarrow g,i,j} \phi_{0,g',i,j}$$

$$\frac{3J_{3,g,i+1/2,j} - J_{3,g,i-1/2,j}}{5} + \frac{3J_{3,g,i,j+1/2} - J_{3,g,i,j-1/2}}{5} - \frac{2}{5} \Sigma_{r,g,i,j} \phi_{0,g,i,j} + \Sigma_{tr,g,i,j} \phi_{2,g,i,j} \quad (2.165)$$

$$= -\frac{2}{5} \left(\frac{\chi_{g,i,j}}{k_{\text{eff}}} \sum_{g'} \nu \Sigma_{f,g',i,j} \phi_{0,g',i,j} + \sum_{g' \neq g} \Sigma_{s,g' \rightarrow g,i,j} \phi_{0,g',i,j} \right)$$

1 次元 SP3 方程式と 2 次元 SP3 方程式との大きな違いは、 y 方向の中性子の漏洩項である。拡散計算と同様に、 y 方向の正味の中性子流 $J_{l,g,i,j+1/2}$ は x 方向の正味の中性子流 $J_{l,g,i+1/2,j}$ に関する(2.73)式および(2.74)式の変数 x を変数 y に変換した量に対応する。したがって、 (i,j) メッシュにおけるエネルギー g 群の全中性子束および 2 次中性子束の収支式は(2.166)式および(2.167)式のように記述できる。

$$\begin{aligned}
& A_{(0,0),g,i,j}^{x-} \phi_{0,g,i-1,j} + A_{(0,0),g,i,j}^{x+} \phi_{0,g,i+1,j} + A_{(0,0),g,i,j}^{y-} \phi_{0,g,i,j-1} + A_{(0,0),g,i,j}^{y+} \phi_{0,g,i,j+1} \\
& \quad + A_{(0,0),g,i,j}^0 \phi_{0,g,i,j} \\
& + A_{(0,2),g,i,j}^{x-} \phi_{2,g,i-1,j} + A_{(0,2),g,i,j}^{x+} \phi_{2,g,i+1,j} + A_{(0,2),g,i,j}^{y-} \phi_{2,g,i,j-1} + A_{(0,2),g,i,j}^{y+} \phi_{2,g,i,j+1} \\
& \quad + A_{(0,2),g,i,j}^0 \phi_{2,g,i,j}
\end{aligned} \tag{2.166}$$

$$= \frac{\chi_{g,i,j}}{k_{\text{eff}}} \sum_{g'} \nu_{\Sigma_{f,g',i,j}} \phi_{0,g',i,j} + \sum_{g' \neq g} \Sigma_{s,g' \rightarrow g,i,j} \phi_{0,g',i,j}$$

$$\begin{aligned}
& A_{(2,0),g,i,j}^{x-} \phi_{0,g,i-1,j} + A_{(2,0),g,i,j}^{x+} \phi_{0,g,i+1,j} + A_{(2,0),g,i,j}^{y-} \phi_{0,g,i,j-1} + A_{(2,0),g,i,j}^{y+} \phi_{0,g,i,j+1} \\
& \quad + A_{(2,0),g,i,j}^0 \phi_{0,g,i,j} \\
& + A_{(2,2),g,i,j}^{x-} \phi_{2,g,i-1,j} + A_{(2,2),g,i,j}^{x+} \phi_{2,g,i+1,j} + A_{(2,2),g,i,j}^{y-} \phi_{2,g,i,j-1} + A_{(2,2),g,i,j}^{y+} \phi_{2,g,i,j+1} \\
& \quad + A_{(2,2),g,i,j}^0 \phi_{2,g,i,j}
\end{aligned} \tag{2.167}$$

$$= -\frac{2}{5} \left(\frac{\chi_{g,i,j}}{k_{\text{eff}}} \sum_{g'} \nu_{\Sigma_{f,g',i,j}} \phi_{0,g',i,j} + \sum_{g' \neq g} \Sigma_{s,g' \rightarrow g,i,j} \phi_{0,g',i,j} \right)$$

左辺の消滅係数について、 $A_{(m,n),g,i,j}^{x\pm}$ ($m, n = 0, 2$) は 2.2.3 項および 2.2.4 項で示した係数と同様である。 $A_{(m,n),g,i,j}^{y\pm}$ は拡散計算と同様に $A_{(m,n),g,i,j}^{x\pm}$ の係数を $x \rightarrow y$ へと変換した係数に対応する。 $A_{(m,n),g,i,j}^0$ はそれぞれ(2.168)式-(2.171)式で定義される。

$$A_{(0,0),g,i,j}^0 = \Sigma_{r,g,i,j} - A_{(0,0),g,i,j}^{x-} - A_{(0,0),g,i,j}^{x+} - A_{(0,0),g,i,j}^{y-} - A_{(0,0),g,i,j}^{y+} \tag{2.168}$$

$$A_{(0,2),g,i,j}^0 = -A_{(0,2),g,i,j}^{x-} - A_{(0,2),g,i,j}^{x+} - A_{(0,2),g,i,j}^{y-} - A_{(0,2),g,i,j}^{y+} \tag{2.169}$$

$$A_{(2,0),g,i,j}^0 = -\frac{2}{5} \Sigma_{r,g,i,j} - A_{(2,0),g,i,j}^{x-} - A_{(2,0),g,i,j}^{x+} - A_{(2,0),g,i,j}^{y-} - A_{(2,0),g,i,j}^{y+} \tag{2.170}$$

$$A_{(2,2),g,i,j}^0 = \Sigma_{tr,g,i,j} - A_{(2,2),g,i,j}^{x-} - A_{(2,2),g,i,j}^{x+} - A_{(2,2),g,i,j}^{y-} - A_{(2,2),g,i,j}^{y+} \tag{2.171}$$

体系全体のエネルギー- g 群全中性子束 $\phi_{0,g,i,j}$ および $\phi_{2,g,i,j}$ の収支式(2.166)式および(2.167)式全体はそれぞれ 1 組の連立方程式をなす。したがって、この連立方程式は行列とベクトルを用いて次式のように表記できる。

$$\mathbf{A}_{(0,0),g} \vec{\phi}_{0,g} + \mathbf{A}_{(0,2),g} \vec{\phi}_{2,g} = \frac{1}{k_{\text{eff}}} \sum_{g'} \mathbf{F}_{g' \rightarrow g} \vec{\phi}_{0,g'} + \sum_{g' \neq g} \mathbf{S}_{g' \rightarrow g} \vec{\phi}_{0,g'} \tag{2.172}$$

$$\mathbf{A}_{(2,0),g} \vec{\phi}_{0,g} + \mathbf{A}_{(2,2),g} \vec{\phi}_{2,g} = -\frac{2}{5} \left\{ \frac{1}{k_{\text{eff}}} \sum_{g'} \mathbf{F}_{g' \rightarrow g} \vec{\phi}_{0,g'} + \sum_{g' \neq g} \mathbf{S}_{g' \rightarrow g} \vec{\phi}_{0,g'} \right\} \tag{2.173}$$

上式中の変数の意味は以下のとおりである。

$\vec{\phi}_{n,g} \in \mathbb{R}^{NR \times 1}$: エネルギー- g 群、 n 次中性子束の空間分布

$\mathbf{A}_{(m,n),g} \in \mathbb{R}^{NR \times NR}$: エネルギー g 群、 (m,n) 次の消滅係数行列

核分裂断面積行列 $\mathbf{F}_{g' \rightarrow g}$ および散乱断面積行列 $\mathbf{S}_{g' \rightarrow g}$ は(2.161)式および(2.162)式の定義と同じである。消滅行列 $\mathbf{A}_{(m,n),g}$ は、拡散計算で定義した \mathbf{A}_g (2.160)式の各要素について、 $A_{g,i,j}^{x\pm} \rightarrow A_{(m,n),g,i,j}^{x\pm}$ 、 $A_{g,i,j}^{y\pm} \rightarrow A_{(m,n),g,i,j}^{y\pm}$ 、 $A_{g,i,j}^0 \rightarrow A_{(m,n),g,i,j}^0$ とした NR 行 NR 列の行列である。したがって $\mathbf{A}_{(m,n),g}$ は5重対角行列である。 l 次中性子束の空間分布 $\vec{\phi}_{n,g}$ の定義を次式に示す。

$$\vec{\phi}_{n,g} = \begin{pmatrix} \phi_{n,g,1,1} \\ \phi_{n,g,2,1} \\ \vdots \\ \phi_{n,g,NX,1} \\ \phi_{n,g,1,2} \\ \vdots \\ \phi_{n,g,NX,NY} \end{pmatrix} \quad (2.174)$$

2.2.6 計算手順

前項までで離散化された拡散方程式および SP3 方程式を導出した。離散化された各方程式は固有値 k_{eff} 、固有ベクトル $\vec{\phi}_{l,g}$ の固有値問題である。本研究では、固有値問題を解くために、反復解法である「べき乗法」[9]を用いた。拡散計算と SP3 計算において、基本的な計算の流れは同一であるため、以下では例としてべき乗法を用いた拡散計算手順の概要を Fig. 2.2 とともに説明する。

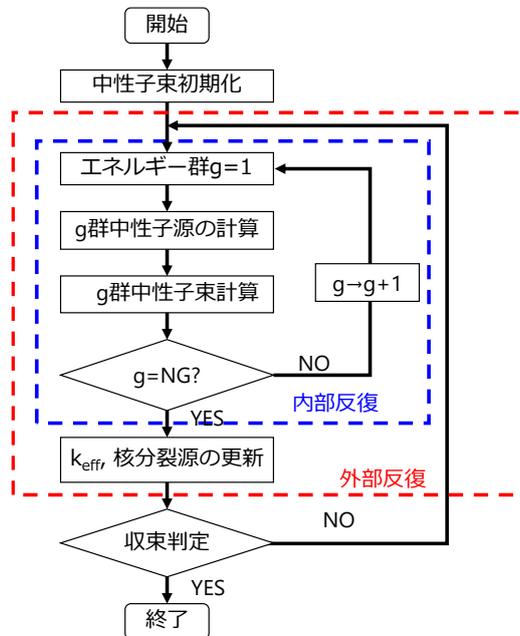


Fig. 2.2 拡散計算フロー

拡散計算で解くべき方程式は次式のように記述できる。

$$\mathbf{A}_g \vec{\phi}_g = \vec{Q}_g \quad (2.175)$$

上式を $\vec{\phi}_g$ について解けばよいが、右辺の \vec{Q}_g は次式のように核分裂源や散乱源からなり、 $\vec{\phi}_{g,0}$ に依存する。

$$\vec{Q}_g = \frac{1}{k_{\text{eff}}} \sum_{g'} \mathbf{F}_{g' \rightarrow g} \vec{\phi}_{g'} + \sum_{g' \neq g} \mathbf{S}_{g' \rightarrow g} \vec{\phi}_{g'} \quad (2.176)$$

$\vec{\phi}_g$ に依存する。したがって \vec{Q}_g もまた未知の量である。そこで、計算開始時に、 $\vec{\phi}_g$ の初期値を用いて、中性子源 \vec{Q}_g の初期値を決定する。具体的には、まず、 $\vec{\phi}_g^{(0)}$ の各要素 $\phi_{g',i,j}^{(0)}$ を用いて、実効増倍率初期値 $k_{\text{eff}}^{(0)}$ を次式より計算する。

$$k_{\text{eff}}^{(0)} = \sum_{g'} \sum_i \sum_j v \Sigma_{f,g',i,j} \phi_{g',i,j}^{(0)} \Delta x_i \Delta y_j \quad (2.177)$$

次に、 $\vec{\phi}_g^{(0)}$ および $k_{\text{eff}}^{(0)}$ を用いて、(2.175)式より \vec{Q}_g の初期値 $\vec{Q}_g^{(0)}$ を計算する。

得られた $\vec{Q}_g^{(0)}$ に基づき、(2.175)式を解くことで、中性子束分布 $\vec{\phi}_g^{(1)}$ を更新する。その後、得られた $\vec{\phi}_g^{(1)}$ を用いて、再度中性子源分布 \vec{Q}_g を更新する、といった反復計算を、収束条件を満足するまで繰り返す。本反復計算では、まず核分裂源を固定して内部反復で散乱源を更新した後、外部反復で核分裂源を更新する。 n 回目の外部反復における核分裂源更新時に、実効増倍率 $k_{\text{eff}}^{(n)}$ を次式で計算する。

$$k_{\text{eff}}^{(n)} = \sum_{g'} \sum_i \sum_j v \Sigma_{f,g',i,j} \phi_{g',i,j}^{(n)} \Delta x_i \Delta y_j \quad (2.178)$$

本反復計算により、拡散方程式(2.159)式右辺の生成源 \vec{Q}_g が修正され、最終的に中性子束分布 $\vec{\phi}_g$ の数値解を得ることができる。

SP3 計算を実施するためには、内部反復として全中性子束 ϕ_0 と2次中性子束 ϕ_2 に関する反復を追加すればよい。具体的には、まずエネルギー g 群の(2.172)式および(2.173)式を式変形して得られる(2.179)式および(2.180)式において、(2.179)式を $\vec{\phi}_{0,g}$ について解いた後、(2.180)式を $\vec{\phi}_{2,g}$ について解く。

$$\mathbf{A}_{(0,0),g} \vec{\phi}_{0,g} = \frac{1}{k_{\text{eff}}} \sum_{g'} \mathbf{F}_{g' \rightarrow g} \vec{\phi}_{0,g'} + \sum_{g' \neq g} \mathbf{S}_{g' \rightarrow g} \vec{\phi}_{0,g'} - \mathbf{A}_{(0,2),g} \vec{\phi}_{2,g} \quad (2.179)$$

$$\mathbf{A}_{(2,2),g} \vec{\phi}_{2,g} = -\frac{2}{5} \left\{ \frac{1}{k_{\text{eff}}} \sum_{g'} \mathbf{F}_{g' \rightarrow g} \vec{\phi}_{0,g'} + \sum_{g' \neq g} \mathbf{S}_{g' \rightarrow g} \vec{\phi}_{0,g'} \right\} - \mathbf{A}_{(2,0),g} \vec{\phi}_{0,g} \quad (2.180)$$

その後、エネルギー $g+1$ 群において同様にして $\vec{\phi}_{0,g+1}$ および $\vec{\phi}_{2,g+1}$ を計算する、といった計

算処理を全エネルギー群に対して実施する。ただし、内部反復では、拡散計算と同様に核分裂源を固定し、散乱源および漏れ量に関する項 ((2.179)式および(2.180)式の第3項) のみを更新する。

2.3 固有直交分解

固有直交分解(Proper Orthogonal Decomposition, POD)[1]–[3]とは、データ駆動型の次元削減手法である。POD では、多数の中性子束からなる snapshot に特異値分解を用いることで、中性子束の主成分である POD 基底が評価でき、中性子束分布を効率よく展開できる。これにより、求める未知数が削減され、計算コストを低減できる。

2.3.1 項で、POD 基底の計算法について説明する。2.3.2 項で、POD を用いた拡散計算および SP3 計算の次元削減手法について説明する。

2.3.1 POD 基底計算法

本項では、POD 基底の計算手順を説明する。

まず、多数の計算条件 (例：アルベド境界条件) で拡散計算あるいは SP3 計算を実施し、得られたエネルギー g 群の l 次中性子束分布 $\vec{\phi}_{l,g}$ を次式のように並べることで、snapshot 行列 $\mathbf{M}_{l,g}$ を作成する。

$$\mathbf{M}_{l,g} = [\vec{\phi}_{l,g,1} \quad \cdots \quad \vec{\phi}_{l,g,c} \quad \cdots \quad \vec{\phi}_{l,g,NC}] \quad (2.181)$$

上式中の変数の意味は以下のとおりである。

$\vec{\phi}_{l,g,c}$: c 番目の条件におけるエネルギー g 群、 l 次中性子束空間分布
 NC : 計算条件数

以降の説明では、snapshot 行列 $\mathbf{M}_{l,g}$ のランクを z とする。

次に、snapshot 行列 $\mathbf{M}_{l,g}$ は、特異値分解[10]–[12]を用いることで、次式のように3つの行列の積の形で表現できる。

$$\mathbf{M}_{l,g} = \mathbf{U}_{l,g} \mathbf{\Sigma}_{l,g} \mathbf{V}_{l,g}^T \quad (2.182)$$

上式中の各変数の意味は以下のとおりである。

$\mathbf{U}_{l,g} \in \mathbb{R}^{NR \times z}$: 左特異ベクトル行列
 $\mathbf{\Sigma}_{l,g} \in \mathbb{R}^{z \times z}$: 特異値行列
 $\mathbf{V}_{l,g} \in \mathbb{R}^{NC \times z}$: 右特異ベクトル行列

上添え字 \mathbf{T} は行列の転置を意味する。 $\mathbf{U}_{l,g}$, $\mathbf{\Sigma}_{l,g}$, $\mathbf{V}_{l,g}$ はそれぞれ(2.183)式–(2.185)式で定義される。

$$\mathbf{U}_{l,g} = (\vec{u}_{1,l,g} \quad \cdots \quad \vec{u}_{z,l,g}) \quad (2.183)$$

$$\Sigma_{l,g} = \begin{pmatrix} \sigma_{1,l,g} & 0 & \cdots & \cdots \\ 0 & \sigma_{2,l,g} & 0 & \ddots \\ \vdots & 0 & \ddots & \cdots \\ 0 & \cdots & 0 & \sigma_{z,l,g} \end{pmatrix} \quad (2.184)$$

$$\mathbf{V}_{l,g} = (\vec{v}_{1,l,g} \quad \cdots \quad \vec{v}_{z,l,g}) \quad (2.185)$$

$\vec{u}_{s,l,g}$ および $\vec{v}_{s,l,g}$ はそれぞれ snapshot 行列 $\mathbf{M}_{g,l}$ の s 次の左特異ベクトルおよび右特異ベクトルという。 $\sigma_{s,l,g}$ は s 次の特異値であり、各特異値には $\sigma_{1,l,g} > \sigma_{2,l,g} \geq \cdots \sigma_{z,l,g}$ の関係を満たす。

左特異ベクトル $\vec{u}_{s,l,g}$ がエネルギー g 群の l 次中性子束の s 次の POD 基底である。 s 次の特異値 $\sigma_{s,l,g}$ は s 次の POD 基底の寄与割合を意味する。すなわち、1 次の POD 基底 $\vec{u}_{1,l,g}$ が中性子束分布の主要なモードであり、高次の POD 基底は中性子束分布を微調整する役割をもつ。

上記より、次数の大きい POD 基底は中性子束分布に対する寄与が極めて小さい場合がある。その場合、大きな次数の POD 基底を無視できる。例えば、 z 個の POD 基底のうち、 $r+1$ 次以上の POD 基底を無視し、 r 本の POD 基底 $\vec{u}_{1,l,g} \quad \cdots \quad \vec{u}_{r,l,g}$ のみを用いて中性子束分布を再構成できる。このような考え方を低ランク近似という。

2.3.2 固有直交分解を用いた次元削減手法

2.2.5 項で説明したように、拡散方程式および SP3 方程式を対象とした数値計算を実施するためには、エネルギー・空間を離散化する必要がある。このとき、エネルギー g 群の中性子束分布は $NR = NX \times NY$ 次元のベクトルである。以降の説明では、POD 次元削減に基づき、次元削減される変数を見やすくするため、下添え字 l, g を省略する。中性子束分布ベクトル $\vec{\phi}$ は NR 個の互いに線形独立なベクトル \vec{u}_s を用いて次式のように展開できる。

$$\vec{\phi} = a_1 \vec{u}_1 + a_2 \vec{u}_2 + \cdots + a_{NR} \vec{u}_{NR} = \sum_s^{NR} a_s \vec{u}_s \quad (2.186)$$

この場合、中性子束分布ベクトル $\vec{\phi}$ を得るためには、各係数 $a_s (1 \leq s \leq NR)$ を求める必要がある。ここで、互いに線形独立なベクトルを上手く選ぶことで、エネルギー g 群の中性子束を少ない r 本 ($r < NR$) の基底で次式のように効率良く展開できたとする。

$$\vec{\phi} = h_1 \vec{u}_1 + h_2 \vec{u}_2 + \cdots + h_r \vec{u}_r = \sum_s^r h_s \vec{u}_s \quad (2.187)$$

この場合は、中性子束分布ベクトル $\vec{\phi}$ を得るためには、各係数 $h_s (1 \leq s \leq r)$ を求めればよい。通常の拡散あるいは SP3 計算であれば、中性子束分布を計算するには、 NR 個の未知数 ϕ_1, \dots, ϕ_{NR} を求める必要があるのに対し、(2.187) 式のように展開できれば、 r 個の未知数 h_1, \dots, h_r のみを求めればよい。つまり、中性子束を効率よく展開できる基底を求めることができれば、求める未知数を減らすことができる。

前項で説明したように POD を活用することで、エネルギー g 群、 l 次の中性子束分布を効率よく展開できる POD 基底が得られ、中性子束分布 $\vec{\phi}_{l,g}$ は次式のように r 個の POD 基底 $\vec{u}_{s,l,g}$ で展開できる。

$$\vec{\phi}_{l,g} \approx \sum_{s=1}^r \vec{u}_{s,l,g} h_{s,l,g} = \mathbf{U}_{l,g} \vec{h}_{l,g} \quad (2.188)$$

ただし、 $h_{s,l,g}$ は次数 s の POD 展開係数であり、 $\vec{h}_{l,g}$ は次式で定義される POD 展開係数ベクトルである。

$$\vec{h}_{l,g} = (h_{1,l,g} \quad \cdots \quad h_{r,l,g}) \quad (2.189)$$

この時、任意の条件（ex.外部境界条件、燃料の燃焼度等）における POD 展開係数ベクトル $\vec{h}_{l,g}$ が得られれば、(2.188)式に基づいて、中性子束分布 $\vec{\phi}_{l,g}$ を再構成できる。2.2.5 項で説明したように、離散化された拡散方程式および SP3 方程式は行列形式でまとめることができ、それらを解くことで、中性子束分布 $\vec{\phi}_{l,g}$ の数値解を求めることができる。同様に、POD に基づく拡散計算や SP3 計算の場合も、解くべき支配方程式（拡散方程式や SP3 方程式）の代わりに「POD 展開係数に関する方程式」を解くことで、任意の条件に対して POD 展開係数を求めることができる。以下では、行列形式の拡散方程式および SP3 方程式に基づいて、POD 展開係数に関する方程式を導出する。

POD 展開係数に関する方程式導出にあたり、重要となる POD 基底行列 $\mathbf{U}_{l,g}$ の役割を説明する。(2.188)式で示したように、基底行列 $\mathbf{U}_{l,g}$ を展開係数ベクトル $\vec{h}_{l,g}$ の左からかけることで、中性子束分布ベクトル $\vec{\phi}_{l,g}$ が得られる。すなわち、基底行列 $\mathbf{U}_{l,g}$ を左からかけることは、展開係数のベクトル空間を拡大して、詳細な中性子束分布のベクトル空間に射影することに対応する。一方、(2.188)式の両辺に $\mathbf{U}_{l,g}^T$ をかけて、POD 基底の正規直交性を表現した(2.190)式を用いることで、(2.191)式が得られる。

$$\mathbf{U}_{l,g}^T \mathbf{U}_{l,g} = \mathbf{I}^{r \times r} \quad (2.190)$$

$$\vec{h}_{l,g} \approx \mathbf{U}_{l,g}^T \vec{\phi}_{l,g} \quad (2.191)$$

上式における $\mathbf{I}^{r \times r}$ は r 行 r 列の単位行列である。(2.191)式より、基底行列の転置 $\mathbf{U}_{l,g}^T$ を左からかけることは、詳細な中性子束分布のベクトル空間を圧縮して、展開係数のベクトル空間に射影することに対応する。

したがって、行列形式の支配方程式の左から $\mathbf{U}_{l,g}^T$ をかけることで、方程式を圧縮し、展開係数のベクトル空間に射影できる。本性質に基づくことで、POD 展開係数に関する方程式を導出できる。

● 拡散計算

拡散計算における POD 展開係数に関する方程式を導出する。2.2.5 項で説明したように、拡散方程式は行列とベクトルを用いて(2.159)式のように記述できる。

$$\mathbf{A}_g \vec{\phi}_g = \frac{1}{k_{\text{eff}}} \sum_{g'} \mathbf{F}_{g' \rightarrow g} \vec{\phi}_{g'} + \sum_{g' \neq g} \mathbf{S}_{g' \rightarrow g} \vec{\phi}_{g'} \quad (2.159)$$

再掲

上式の $\vec{\phi}_g$ に(2.188)式を代入して、左から \mathbf{U}_g^T をかけることで、次式が得られる。

$$\widehat{\mathbf{A}}_g \vec{h}_g = \frac{1}{k_{\text{eff}}} \sum_{g'} \widehat{\mathbf{F}}_{g' \rightarrow g} h_{g'} + \sum_{g' \neq g} \widehat{\mathbf{S}}_{g' \rightarrow g} \vec{h}_{g'} \quad (2.192)$$

上式中の行列 $\widehat{\mathbf{A}}_g$ 、 $\widehat{\mathbf{F}}_{g' \rightarrow g}$ 、 $\widehat{\mathbf{S}}_{g' \rightarrow g}$ はそれぞれ(2.193)式–(2.195)式のように係数行列の左から \mathbf{U}_g^T 、右から \mathbf{U}_g をかけたものであり、それぞれ r 行 r 列の正方行列である。

$$\widehat{\mathbf{A}}_g = \mathbf{U}_g^T \mathbf{A}_g \mathbf{U}_g \quad (2.193)$$

$$\widehat{\mathbf{F}}_{g' \rightarrow g} = \mathbf{U}_g^T \mathbf{F}_{g' \rightarrow g} \mathbf{U}_{g'} \quad (2.194)$$

$$\widehat{\mathbf{S}}_{g' \rightarrow g} = \mathbf{U}_g^T \mathbf{S}_{g' \rightarrow g} \mathbf{U}_{g'} \quad (2.195)$$

(2.192)式の未知数は \vec{h}_g であり、本式を POD 展開係数に関する方程式とみなせる[1]–[3]。

● SP3 計算

SP3 計算における POD 展開係数に関する方程式を導出する。2.2.5 項で説明したように、SP3 方程式は行列とベクトルを用いて(2.172)式および(2.173)式のように記述できる。

$$\mathbf{A}_{(0,0),g} \vec{\phi}_{0,g} + \mathbf{A}_{(0,2),g} \vec{\phi}_{2,g} = \frac{1}{k_{\text{eff}}} \sum_{g'} \mathbf{F}_{g' \rightarrow g} \vec{\phi}_{0,g'} + \sum_{g' \neq g} \mathbf{S}_{g' \rightarrow g} \vec{\phi}_{0,g'} \quad (2.172)$$

再掲

$$\mathbf{A}_{(2,0),g} \vec{\phi}_{0,g} + \mathbf{A}_{(2,2),g} \vec{\phi}_{2,g} = -\frac{2}{5} \left\{ \frac{1}{k_{\text{eff}}} \sum_{g'} \mathbf{F}_{g' \rightarrow g} \vec{\phi}_{0,g'} + \sum_{g' \neq g} \mathbf{S}_{g' \rightarrow g} \vec{\phi}_{0,g'} \right\} \quad (2.173)$$

再掲

上式の $\vec{\phi}_{l,g}$ ($l = 0, 2$)に(2.188)式を代入して、(2.172)式および(2.173)式の左からそれぞれ $\mathbf{U}_{g,0}^T$ および $\mathbf{U}_{g,2}^T$ をかけることで、次式が得られる。

$$\widehat{\mathbf{A}}_{(0,0),g} \vec{h}_{0,g} + \widehat{\mathbf{A}}_{(0,2),g} \vec{h}_{2,g} = \frac{1}{k_{\text{eff}}} \sum_{g'} \widehat{\mathbf{F}}_{(0,0),g' \rightarrow g} \vec{h}_{0,g'} + \sum_{g' \neq g} \widehat{\mathbf{S}}_{(0,0),g' \rightarrow g} \vec{h}_{0,g'} \quad (2.196)$$

$$\widehat{\mathbf{A}}_{(2,0),g} \vec{h}_{0,g} + \widehat{\mathbf{A}}_{(2,2),g} \vec{h}_{2,g} = -\frac{2}{5} \left\{ \frac{1}{k_{\text{eff}}} \sum_{g'} \widehat{\mathbf{F}}_{(2,0),g' \rightarrow g} \vec{h}_{0,g'} + \sum_{g' \neq g} \widehat{\mathbf{S}}_{(2,0),g' \rightarrow g} \vec{h}_{0,g'} \right\} \quad (2.197)$$

上式中の行列 $\widehat{\mathbf{A}}_{(m,n),g}$ 、 $\widehat{\mathbf{F}}_{(m,0),g' \rightarrow g}$ 、 $\widehat{\mathbf{S}}_{(m,0),g' \rightarrow g}$ ($m, n = 0, 2$)はそれぞれ(2.198)式–(2.200)式で定義される r 行 r 列の正方行列である。

$$\widehat{\mathbf{A}}_{(m,n),g} = \mathbf{U}_{m,g}^T \mathbf{A}_{(m,n),g} \mathbf{U}_{n,g} \quad (2.198)$$

$$\widehat{\mathbf{F}}_{(m,0),g' \rightarrow g} = \mathbf{U}_{m,g}^T \mathbf{F}_{(m,0),g' \rightarrow g} \mathbf{U}_{0,g'} \quad (2.199)$$

$$\hat{\mathbf{S}}_{(m,0),g' \rightarrow g} = \mathbf{U}_{m,g}^T \mathbf{S}_{(m,0),g' \rightarrow g} \mathbf{U}_{0,g'} \quad (2.200)$$

(2.196)式および(2.197)式をさらにまとめることで、全中性子束の展開係数 h_0 と2次中性子束の展開係数 h_2 に関する反復計算が必要なくなり、べき乗法の総外部反復回数が減少することで計算コストを低減できる。一方で、行列サイズは大きくなることで、1回あたりの計算コストが増加する。しかし、圧縮行列サイズは元の行列サイズと比べて小さいため、計算コスト増加効果よりも、低減効果の方が大きいと考えられる。

以上を踏まえて、本研究では、(2.196)式および(2.197)式を次式のようにさらにまとめる。

$$\hat{\mathbf{A}}_g \vec{h}_g = \frac{1}{k_{\text{eff}}} \sum_{g'} \hat{\mathbf{F}}_{g' \rightarrow g} \vec{h}_{g'} + \sum_{g' \neq g} \hat{\mathbf{S}}_{g' \rightarrow g} \vec{h}_{g'} \quad (2.201)$$

上式中の $\hat{\mathbf{A}}_g$ 、 $\hat{\mathbf{F}}_{g' \rightarrow g}$ 、 $\hat{\mathbf{S}}_{g' \rightarrow g}$ は、 $2 \times r$ 行 $2 \times r$ 列の行列であり、それぞれ(2.202)式–(2.204)式で定義される。

$$\hat{\mathbf{A}}_g = \begin{pmatrix} \hat{\mathbf{A}}_{(0,0),g} & \hat{\mathbf{A}}_{(0,2),g} \\ \hat{\mathbf{A}}_{(2,0),g} & \hat{\mathbf{A}}_{(2,2),g} \end{pmatrix} \quad (2.202)$$

$$\hat{\mathbf{F}}_{g' \rightarrow g} = \begin{pmatrix} \hat{\mathbf{F}}_{(0,0),g' \rightarrow g} & \mathbf{0} \\ -\frac{2}{5} \hat{\mathbf{F}}_{(2,0),g' \rightarrow g} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \quad (2.203)$$

$$\hat{\mathbf{S}}_{g' \rightarrow g} = \begin{pmatrix} \hat{\mathbf{S}}_{(0,0),g' \rightarrow g} & \mathbf{0} \\ -\frac{2}{5} \hat{\mathbf{S}}_{(2,0),g' \rightarrow g} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \quad (2.204)$$

また、 \vec{h}_g は $2 \times r$ 次元のベクトルであり、(2.205)式で定義される。

$$\vec{h}_g = \begin{pmatrix} \vec{h}_{0,g} \\ \vec{h}_{2,g} \end{pmatrix} \quad (2.205)$$

(2.201)式の未知数は \vec{h}_g であるため、本式を POD 展開係数に関する方程式とみなせる。

以上の手順で中性子支配方程式から POD 展開係数に関する方程式を導出できる。本手法により求める未知数を空間メッシュ数から POD 基底数まで削減できる。POD 展開係数に関する方程式の数値計算の基本的な流れは 2.2.6 項と同様である。得られた POD 展開係数を用いて(2.188)式より中性子束分布を再構成できる。

2.4 本章のまとめ

本章では、本研究で用いる炉心解析手法および固有直交分解(Proper Orthogonal Decomposition, POD)に関する理論について説明した。

2.2 節で、炉心解析手法として通常用いられる拡散理論および SP3 理論を説明した。

中性子の飛行方向を近似することで、原子炉内の中性子の集団的挙動を正確に記述する中性子輸送方程式から、拡散方程式および SP3 方程式が導出できる。さらに、エネルギー・空間で離散化することにより、各方程式を連立方程式（行列形式の方程式）で記述できる。

行列形式の拡散方程式および SP3 方程式は「中性子束分布ベクトルを固有ベクトル」とし、「実効増倍率 k_{eff} を固有値」とする固有値方程式として記述される。 k_{eff} 固有値計算はべき乗法により実施できる。

2.3 節では、POD に関する理論を説明した。

POD では、少数の POD 基底を用いて中性子束分布を展開できる。このとき、各 POD 基底の係数（POD 展開係数）を求めることができれば、中性子束分布を計算できる。POD 手法では、計算に用いる各係数行列の左右から POD 基底行列 \mathbf{U}^T, \mathbf{U} を掛けることにより、連立方程式を圧縮し、POD 展開係数に関する方程式を導出できる。これにより解くべき中性子支配方程式の未知数を空間メッシュ数から POD 基底数まで削減できる。

本章の記述内容により、本研究で用いる基礎理論を説明できた。残りの章で、第 1 章で挙げた POD の課題を解決し、大規模な非均質体系の輸送計算に適用可能な POD 計算の実現を目指す。

2.5 参考文献

- [1] R. Elzohery and J. Roberts, “Modeling neutronic transients with Galerkin projection onto a greedy-sampled, POD subspace,” *Ann. Nucl. Energy*, **162**, 108487, (2021); <https://doi.org/10.1016/j.anucene.2021.108487>.
- [2] K. Tsujita, T. Endo, and A. Yamamoto, “Fast reproduction of time-dependent diffusion calculations using the reduced order model based on the proper orthogonal and singular value decompositions,” *J. Nucl. Sci. Technol.*, **58**(2), pp.173–183, (2021); <https://doi.org/10.1080/00223131.2020.1814891>.
- [3] K. Tsujita, T. Endo, and A. Yamamoto, “Efficient reduced order model based on the proper orthogonal decomposition for time-dependent MOC calculations,” *J. Nucl. Sci. Technol.*, **60**(3), pp. 343–357, (2023); <https://doi.org/10.1080/00223131.2022.2097963>.
- [4] 山本章夫, “Boltzmann 方程式の解法 ~決定論的手法~”, 第 34 回炉物理夏期セミナーテキスト, 日本原子力学会, (2002).
- [5] 山本章夫, “拡散方程式の数値解法の基礎”, 第 36 回炉物理夏期セミナーテキスト, 日本原子力学会 (2004).
- [6] 小林啓祐, “原子炉物理”, コロナ社, (1996).
- [7] R. E. Marshak, “Note on the spherical harmonic method as applied to the Milne problem for a sphere,” *Phys. Rev.* **71**(7), pp.443–446, (1947).

- [8] K. Tada, A. Yamamoto, Y. Yamane et. al., “Validation of neutron current formulations for the response matrix method based on the SP3 theory,” *Ann. Nucl. Energy*, **37**(1), pp.22–27, (2010); <https://doi.org/10.1016/j.anucene.2009.10.009>.
- [9] 遠藤知弘, “Python を利用した核計算 (1)決定論的手法”, 第 50 回炉物理夏期セミナーテキスト, 日本原子力学会 (2018).
- [10] 長谷川秀彦, 山田進 他, “計算力学レクチャーコース 固有値計算と特異値計算”, (2019).
- [11] 松下柁輝, “特異値分解法を用いた安全解析コードの低次元化モデルの開発”, 修士論文, 名古屋大学 (2020).
- [12] M. Yamamoto, T. Endo, and A. Yamamoto, “Compression of cross-section data size for high-resolution core analysis using dimensionality reduction technique,” *Nucl. Sci. Eng.*, **195**(1), pp.33–49, (2021); <https://doi.org/10.1080/00295639.2020.1781482>.

第3章 データ拡張と Wilks の手法に基づく POD 基底評価

3.1 本章の概要

本章では、データ拡張と Wilks の手法に基づく POD 基底評価について説明する。

POD では、中性子束空間分布を少数の POD 基底で展開する。ここで、展開に使用する POD 基底は、中性子束分布の空間的な特徴をとらえた量となっている。例えば、典型的な PWR 単一集合体を考えた場合、その幾何形状は回転対称性を有するといった特徴がある。このような体系では、理想的な POD 基底もまた同じ対称性を有すると考えられる。しかし、単純なランダムサンプリング法により snapshot データを準備する場合、体系と同じ対称性をもつ POD 基底を得るためには、snapshot データとして多数の中性子束分布が必要となる。すなわち、POD を得るために、高コストな従来法に基づく数値計算を事前に多数回実施する必要がある。

さらに、こうして得られた POD 基底を活用した POD 炉心解析コストは、計算に用いる POD 基底数 (POD 展開次数) に依存している。単純に計算コストを低減したければ、中性子束分布を展開する POD 基底数 (POD 展開次数) を少なくすればよい。ただし、POD 展開誤差は POD 展開次数および計算条件に依存しており、同一の計算条件において、POD 展開次数を単純に減少させた場合には、POD 展開誤差は増加せざるを得ない。POD を炉心解析に適用するにあたっては、多数の計算条件における中性子束分布を高精度で再構成可能な POD 基底を使用することが望ましい。しかし、一般的に、炉心解析で設定する計算条件 (例: アルベド境界条件、燃料集合体配置パターン等) は、無数に存在する。このような場合、全条件における POD 展開誤差を評価することは困難である。したがって、限られた検証回数で得られた POD 展開誤差から、全計算条件の POD 展開誤差を統計的に推定する必要がある。

以上で述べたように、ある POD 基底の POD 展開誤差を統計的に評価することができれば、その POD 基底を活用した炉心解析精度を議論できる。しかし、POD 展開次数が増加するにつれて、POD 炉心解析コストも増加する。したがって、多くの POD 基底を用いた場合、POD の有効性を十分発揮できない。以上より、POD の有効性を十分発揮するためには、POD 炉心解析精度が高く、かつ POD 展開次数が小さいような POD 基底を評価する必要がある。

これらの課題を解決するために、本章では、データ拡張と Wilks の手法を用いた POD 基底評価手法を提案する。

データ拡張とは、画像認識を目的とした機械学習等に対する前処理の一つであり、画像の一部拡大や回転、反転等により新たなデータを生成することで、学習用データを増大させる [1]処理を指す。本手法を POD 基底計算に用いる snapshot の作成に適用することで、少ない snapshot データを増大し、POD 基底数を増大させることができる。さらに単一集合体のように回転対称性をもつ体系の場合、従来法に基づき得られた中性子束分布を回転させることで、少ない snapshot データから、集合体と同じ回転対称性をもつ POD 基底を計算できる。すなわち、従来法による高コストな計算回数を増やすことなく、効率よく snapshot データを

収集できることが期待される。

Wilks の手法[2]-[5]は、任意の対象に適用可能な統計的評価手法の一つである。Wilks の手法に基づくことで、POD 展開誤差の統計的評価に必要なサンプル数を決定できる。本章では拡散計算に基づき、①Wilks の手法の POD 展開誤差評価に対する適用可能性調査および②提案したアルゴリズムの有効性を検証する。

3.2 節では、POD 基底計算に対するデータ拡張の応用法について説明する。

3.3 節では、Wilks の手法に基づく POD 展開次数探索法について説明する。まず、Wilks の手法の理論を説明する。次に、Wilks の手法を用いた POD 展開誤差の upper tolerance limit (UTL) 推定手順について説明する。最後に、Wilks の手法に基づく POD 展開次数探索手順を説明する。

3.4 節では、2次元単一集合体体系を対象として、Wilks の手法に基づき、POD 展開誤差を統計的に評価可能か検証する。

3.5 節では、2次元単一集合体体系を対象として、Wilks の手法に基づく POD 展開次数探索アルゴリズムの有効性を検証する。具体的には、提案手法により POD 基底を計算した後、対象とする計算条件において POD 展開誤差が目標誤差を満足するか調査する。

最後に、3.6 節で本章のまとめを述べる。

3.2 snapshot 作成に対するデータ拡張の応用

本節では、POD 基底計算に対するデータ拡張の応用法について説明する。

データ拡張とは、画像認識の機械学習の前処理として用いられる手法であり、学習用データである画像データを拡大、回転、反転あるいは画像の色彩変化等により、学習用データを増大させる[1]。

本研究では、回転によるデータ拡張を単一集合体の POD 基底計算に応用する。以下で、拡散計算に対する POD 基底計算を例として説明する。SP3 計算における POD 基底計算に対しても同様の手順で回転のデータ拡張を適用できる。

典型的な PWR 集合体体系を考えた場合、集合体中心まわりの 90° 回転操作に対して対称 (1/4 対称) である。従って、十分な snapshot データが与えられた場合、得られる POD 基底は 1/4 対称であると考えられる。しかし、snapshot データ数が少数の場合、snapshot を構成する全中性子束分布に偏りが生じる。従って、このような場合には、特定の方向 (例えば、 x 負方向) における全中性子束が大きい分布が snapshot データを構成する全中性子束分布を占める割合が大きくなる、といったことが起こりうる。このように snapshot データを構成する中性子束の分布に偏りがある場合、得られる POD 基底もそうした偏りの情報を持つため、POD 基底の 1/4 対称性が失われる。これにより、POD 基底の展開効率が悪化することが懸念される。こうした対称性を保持するための手法の一つとして、snapshot データ数を増やすことがあげられる。ただし、snapshot データ数を増やすと、従来法による高コストな計算回数が増加し、POD 基底計算コストが増加する。

拡散計算回数を増加させることなく、1/4 対称性をもつ POD 基底を得るために、回転によるデータ拡張を活用する。具体的には、**Fig. 3.1** のように、拡散計算より得られた中性子束分布を 90° 回転および 180° 回転、 270° 回転させることで得られる 3 つの中性子束分布を snapshot データに追加する。このように、回転によるデータ拡張を用いることで、 N 回の拡散計算結果から、 $4N$ 通りの snapshot データを取得できる。拡散計算より得られた中性子束分布が特定の方向 x 負側に偏っていたとき、 90° 回転および 180° 回転、 270° 回転した中性子束分布はそれぞれ y 負側、 x 正側、 y 正側に同程度偏った分布となり、snapshot を構成する中性子束分布の偏りが軽減される。したがって、少数の snapshot データから 1/4 対称性をもつ POD 基底を評価できることが期待される。

典型的な PWR 集合体は、回転対称性以外に、**Fig. 3.2** に示した対角線を軸とした反転対称性も有する。したがって、例えば、**Fig. 3.3** のように、反転軸を対角線 1, 対角線 2, 対角線 1 として順に中性子束分布を反転することで、snapshot を構成する中性子束分布の偏りを軽減できる。

ただし、反転によるデータ拡張を実施するためには、反転軸 (**Fig. 3.2** の対角線 1,2) に応じて、異なる反転処理を実施する必要がある。一方、回転によるデータ拡張では、集合体周りで 90° 回転させる、といった同一の処理を繰り返せばよい。このように、実装が比較的容易なため、本研究では回転によるデータ拡張を用いることとする。

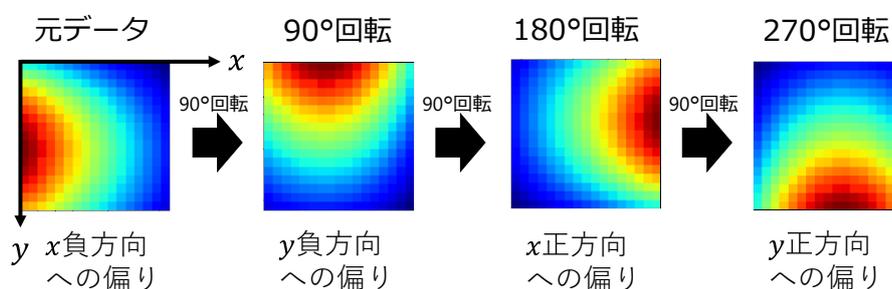


Fig. 3.1 中性子束分布の回転

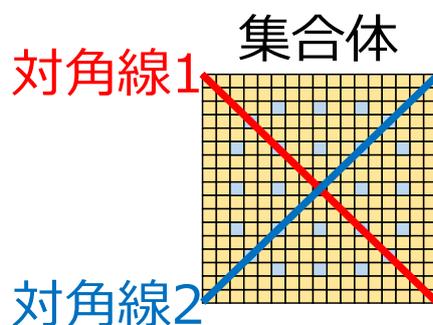


Fig. 3.2 集合体の対角線

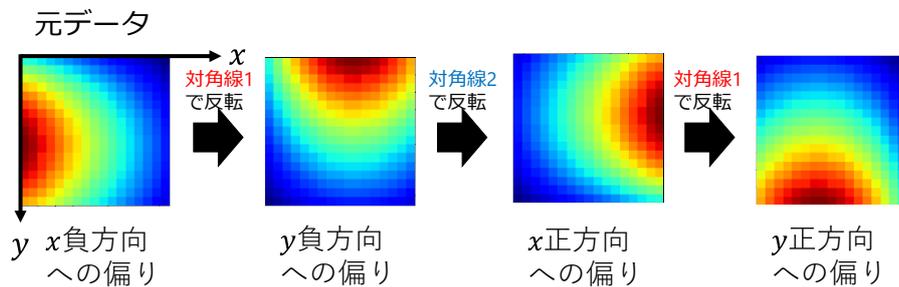


Fig. 3.3 中性子束分布の反転（反転軸：対角線）

3.3 Wilks の手法に基づく POD 展開次数の探索

本節では、Wilks の手法を用いた POD 展開誤差の評価手順について説明する。

3.3.1 項で統計的手法の Wilks の手法の理論を説明する。3.3.2 項で Wilks の手法を用いた POD 展開誤差の UTL 推定手順を説明する。3.3.3 項で Wilks の手法に基づく POD 展開次数探索手順について説明する。

3.3.1 Wilks の手法の理論

Wilks の手法はノンパラメトリックな統計的評価手法の一つである。Wilks の手法では、対象とする物理量の統計的分布 $f(x)$ を仮定せずに物理量の上側許容限界（Upper Tolerance Limit, UTL）を推定できる[2]–[5]。原子力分野では事故解析における不確かさ評価に活用されている[4],[5]。本項では、Wilks の手法の理論について、日本人の身長を例にして説明する。

はじめに、下側累積確率および上側累積確率について説明した後、Wilks の手法で重要な UTL について説明する。次に、Wilks の手法を用いた UTL 推定に必要なサンプル数 N_{Wilks} に関する公式を導出する。最後に、Wilks の手法に基づく POD 展開次数探索手順を説明する。Wilks の手法に関する詳細な説明は文献[2],[3]を参照されたい。

まず、UTL を説明する上で重要な概念である下側累積確率、上側累積確率について Fig. 3.4 とともに説明する。日本人の身長分布を表す統計的分布を $f(x)$ とする。日本人身長の実際の最大値と最小値は未知である。以下では、身長の最大値・最小値がどんな値であっても本議論を適用可能とするため、身長 x は $(0, \infty)$ の任意の実数を取りうると仮定する。この時、ある身長 L に対する下側累積確率 a および上側累積確率 b は、それぞれ(3.1)式および(3.2)式によって定義される。

$$a(L) = \int_0^L f(x) dx \quad (3.1)$$

$$b(L) = \int_L^\infty f(x) dx \quad (3.2)$$

上式の定義より、 a, b に対して次式が成り立つ。

$$a + b = 1 \quad (3.3)$$

したがって、「下側累積確率 a が 0.95 以上 ($a \geq 0.95$)」と「上側累積確率 b が 0.05 以下 ($b \leq (1 - 0.95) = 0.05$)」は同値である。

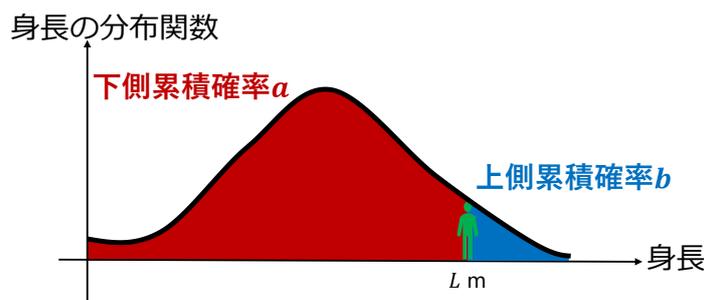


Fig. 3.4 上側累積確率および下側累積確率の概念図

次に、UTL について説明する。UTL を評価する目的は、物理量がとりうる範囲のうち値が大きいもの、より正確に言えば上側累積確率がある値以下となる物理量値を推定することである。例えば「日本人のうち上位 5%以内の身長 L (すなわち、上側累積確率 $b = \int_L^{\infty} f(x)dx$ が 5%以下となる身長 L)」の推定などである。 p 次の Wilks の手法では、 N_{wilks} 通りの身長データの p 番目に大きな値を UTL 推定値 L_{est} とみなす。以下では、UTL 推定に必要なサンプル数 N_{wilks} を既知として、本研究で用いた 1 次の Wilks の手法について説明することとする。1 次の Wilks の手法では、 N_{wilks} 通りの身長データの最大値が UTL 推定値 L_{est} である。この時、 N_{wilks} 通りの身長データは日本人全体からランダムに選択されるため、推定ごとに UTL 推定値 L_{est} は異なる。すなわち、UTL 推定値は統計的なばらつきをもつ。したがって、身長データサンプルをランダムに取得し続けて、複数回 UTL を推定した場合、ある推定では UTL 推定値 L_{est} が上位 5%以内となるが、別の推定では上位 5%以内とはならない、といったことが起こる。そこで、UTL 推定値 L_{est} が「上位 5%以内の身長となる」確率、すなわち UTL 推定が成功する確率 q を与える。確率 q は UTL 推定値 L_{est} がどの程度信頼できるかを表す指標であり、信頼度と呼ばれる。これにより、少数の身長データから「上位 5%以内の身長」として UTL 推定値 L_{est} を信頼度 q で推定できる。後の説明のために、条件「上位 5%以内の身長」を下側累積確率により表現する。この場合、本条件は、「下側累積確率 $a = \int_0^L f(x)dx$ が $p = 95\%$ 以上となる身長」と記述できる。ただし、下側累積確率 a の下限値を p とした。以降では本条件を UTL 推定条件とよび、 p を単に確率とよぶ。

上記説明において Wilks の手法による UTL 推定では、サンプル数 N_{wilks} 、確率 p および信頼度 q という 3 つの指標が登場した。以降では、これら 3 つのパラメータの関係性について考察し、Wilks の手法による UTL 推定に必要なサンプル数 N_{wilks} に関する公式を導出する。

まず、 N_{wilks} 通りのサンプルに基づく Wilks の手法による UTL 推定を考える。UTL 推定値を L_{est} とする。また、下側累積確率がちょうど p に一致する身長が 1.8m であったとする。このとき、UTL 推定値 L_{est} が UTL 推定条件を満足するためには、次式が成り立てばよい。

$$L_{\text{est}} \geq 1.8 \quad (3.4)$$

(3.4)式は「身長を測定した N_{wilks} 人のうち身長が 1.8 m である人が少なくとも 1 人存在する」と言い換えられる。その確率は次式のように記述される。

$$1 - p^{N_{\text{wilks}}} \quad (3.5)$$

UTL 推定条件を満たす確率は信頼度 q に対応するため、サンプル数 N_{wilks} 、確率 p および信頼度 q は次式で関係づけられる。

$$1 - p^{N_{\text{wilks}}} = q \quad (3.6)$$

ただし、(3.6)式が(0,1)の実数 p, q に対して成り立つためには、サンプル数 N_{wilks} が任意の実数をとると仮定しなければならない。例えば、 $p = q = 0.95$ としたとき、(3.6)式を満たすサンプル数 $N_{\text{wilks}} = 58.4 \dots$ である。そこで、サンプル数 N_{wilks} が整数値のみをとるために(3.6)式を次式のように修正する。

$$1 - p^{N_{\text{wilks}}} \geq q \quad (3.7)$$

このように等号を不等号に修正することで、(0,1)の実数 p, q に対して上式を満たす最小の整数値として、サンプル数 N_{wilks} を決定できる。(3.7)式をサンプル数 N_{wilks} について解くことで次式が得られる。

$$N_{\text{wilks}} \geq \frac{\ln(1 - q)}{\ln p} \quad (3.8)$$

上式がサンプル数 N_{wilks} 、確率 p および信頼度 q の関係式であり、Wilks の公式と呼ばれる [2],[3]。例として、 $p, q = 0.95, 0.99$ のとき、1 次の Wilks の手法の UTL 推定に必要なサンプル数 N_{wilks} を **Table 3.1** にまとめる。**Table 3.1** より確率 p あるいは信頼度 q が増加すると、必要なサンプル数 N_{wilks} も増加することが分かる。

Table 3.1 1 次の Wilks の手法による UTL 推定に必要なサンプル数 N_{wilks}

		信頼度 q	
		0.95	0.99
確率 p	0.95	59	90
	0.99	299	459

3.3.2 Wilks の手法を用いた POD 展開誤差の UTL 推定手順

前項で説明したように、1 次の Wilks の手法では、UTL を推定するために必要なサンプル数 N_{wilks} は、(3.8)式に示した Wilks の公式により計算できる。例えば $p = q = 0.95$ の場合、必要なサンプル数 $N_{\text{wilks}} = 59$ である。ただし、本条件における厳密な信頼度（信頼度参照値） q_{ref} は次式を満たす信頼度として計算できる。

$$N_{\text{wilks}} = \ln(1 - q_{\text{ref}}) / \ln p \quad (3.9)$$

$N_{\text{wilks}} = 59$ 、 $p = 0.95$ の場合、 $q_{\text{ref}} = 0.9515$ である。 $q_{\text{ref}} \neq q$ となるのは、サンプル数 N_{wilks} は整数値であり、小数値が切り上げられるためである。

$(p, q) = (0.95, 0.95)$ とした場合、1 次の Wilks の手法に基づく POD 展開誤差の UTL 推定手順は以下のとおりである。

- (1) $N_{\text{wilks}} = 59$ 通りの計算条件で POD 展開誤差を評価する。
- (2) 59 通りの POD 展開誤差の最大値を評価する。この最大値が 1 次の Wilks の手法に基づく UTL 推定値 ε_{est} である。

3.3.3 POD 展開次数探索手順

本項では、Wilks の手法に基づく POD 展開次数探索手法による拡散計算用の POD 基底評価手順を説明する。提案手法を用いることで、ユーザーが設定した誤差の目標値を満足するように、POD 展開次数を決定できる。提案手法の基本的な方針は、「ユーザーが指定した POD 展開誤差の目標値 ε_{lim} を満足するまで snapshot データ数を増やし、POD 展開次数を 1 次ずつ増加させることで、目標値 ε_{lim} を満足する POD 展開次数を自動的に評価する」といったものである。ある展開次数における POD 展開誤差の UTL は 1 次の Wilks の手法を用いて推定される。このように POD 展開次数を 1 ずつ増加させ、POD 展開誤差を逐次推定することにより、POD 炉心解析精度が高く、展開次数が少ないような POD 基底を評価できることが期待される。

以下で、目標誤差の対象が 1 つ（例：中性子束分布の相対誤差平均値）の場合における POD 展開次数探索手順を Fig. 3.5 とともに説明する。ただし、以降では、説明を簡易にするため、データ拡張を利用しない探索手順を扱う。

- A) POD 展開誤差の目標値 ε_{lim} および Wilks の手法に関するパラメータである確率 p 、信頼度 q を設定する。
- B) Wilks の手法に基づき、UTL 推定に用いるサンプル数 N_{wilks} を決定する。
- C) N_{wilks} 通りのランダムなアルベド境界条件のもと、拡散計算を実施する。
- D) ステップ C) と異なる条件のもと、拡散計算を $N_{\text{order}} = 1$ 回実施し、中性子束 $\vec{\phi}_{g,c=1}^{\text{snap}}$ を得る。ただし、上添え字 *snap* は snapshot に用いることを意味する。 $\vec{\phi}_{g,c}$ は、 c 番目の計算条件におけるエネルギー g 群の全中性子束空間分布を意味する。
- E) 得られた中性子束から snapshot 行列 $\mathbf{M}_{g,N_{\text{order}}} = [\vec{\phi}_{g,1}^{\text{snap}} \quad \cdots \quad \vec{\phi}_{g,N_{\text{order}}}^{\text{snap}}]$ を作成する。

- F) $\mathbf{M}_{g,N_{order}}$ に対して特異値分解を実施し、各エネルギー群の POD 基底 $\mathbf{U}_g = [\vec{u}_{1,g} \cdots \vec{u}_{s,g} \cdots \vec{u}_{N_{order},g}]$ を計算する。ただし、下添え字 s は POD 基底の次数を意味する。
- G) ステップ C) と同一の N_{wilks} 通りの計算条件の下、2.3.2 項で説明した POD 展開係数に関する方程式を解いた後、中性子束を再構成する。
- H) ステップ C) とステップ G) の計算結果に基づいて、 N_{wilks} 通りの POD 展開誤差 ε_t ($t = 1, \dots, N_{wilks}$) を評価する。
- I) POD 展開誤差 UTL を $\varepsilon_{est} = \max_{t=1 \cdots N_{wilks}} (\varepsilon_t)$ より推定する。
- J) $\varepsilon_{est} \leq \varepsilon_{lim}$ ならば、終了する。
- K) 新たにランダムなアルベド境界条件で拡散計算を 1 回追加で実施する。
- L) $N_{order} = N_{order} + 1$ とし、E) に戻る。

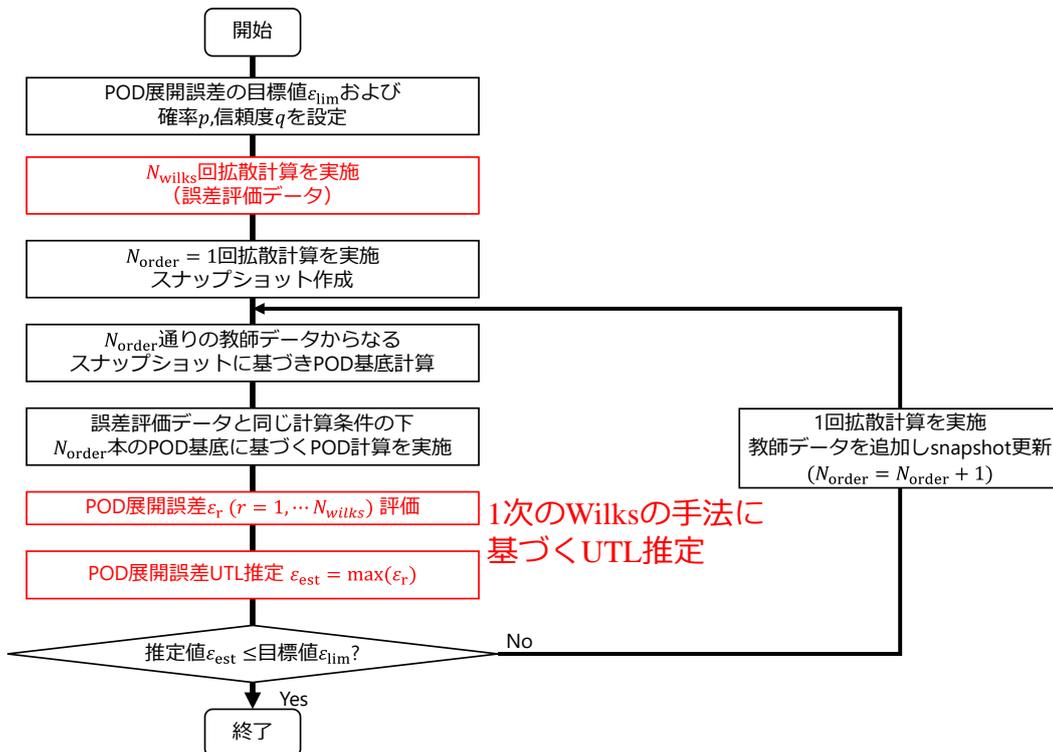


Fig. 3.5 Wilks の手法に基づく POD 展開次数探索アルゴリズムのフロー

POD 展開誤差として、例えば中性子束相対誤差平均値 $rRMSE$ や実効増倍率誤差 Δk_{eff} などが挙げられる。 $rRMSE$ および Δk_{eff} はそれぞれ(3.10)式および(3.11)式で定義される。

$$rRMSE = \sqrt{\sum_{g=1}^{NG} \sum_{i=1}^{NX} \sum_{j=1}^{NY} \left(\frac{\phi_{g,i,j}^{POD}}{\phi_{g,i,j}^{ref}} - 1 \right)^2} \quad (3.10)$$

$$\Delta k_{\text{eff}} = |k_{\text{eff}}^{\text{POD}} - k_{\text{eff}}^{\text{ref}}| \quad (3.11)$$

上式中の変数の意味は以下のとおりである。

上添え字 *POD* : POD 計算で得られた結果

上添え字 *ref* : 参照解 (通常の拡散計算で得られた結果)

$|A|$: A の絶対値

Fig. 3.5 では、目標誤差の対象を 1 つとしたが、容易に目標誤差の対象を 2 つ以上に拡張できる。例えば、(3.10) 式の $r\text{RMSE}$ および (3.11) 式の Δk_{eff} の 2 つを目標誤差の指標とする場合、POD 展開次数探索の収束条件を「 $r\text{RMSE}$ の UTL 推定値が 0.1% 以下」かつ「 Δk_{eff} の UTL 推定値が 0.01% 以下」などとすればよい。

提案手法においてデータ拡張を用いる際には、ステップ E) の snapshot 作成時にデータ拡張を適用すればよい。具体的には、 N_{order} を 4 データ分増加させるごとに、snapshot データ追加用の集合体詳細メッシュ拡散計算を 1 回のみ実施する。例えば、 n 回目の反復では、 $N_{\text{order}} = 4n$ 通りの snapshot データから POD 基底を評価する。その後、得られた $4n$ 本の POD 基底のうち、 $4(n-1) + m$ 本 ($m = 1, 2, 3, 4$) の POD 基底による中性子束展開誤差が目標誤差を満足するか判定する。 $4n$ 本の POD 基底を用いても目標誤差を満足できない場合には、再度、集合体詳細メッシュ拡散計算を 1 回のみ実施した後、データ拡張を用いて、snapshot データを 4 データ分増加させる、といった処理を POD 展開誤差が目標誤差を満足するまで繰り返す。

本項では、提案手法による拡散計算用の POD 基底評価手順を説明したが、SP3 計算用の POD 基底も同様の手順で評価できる。すなわち、snapshot データの準備および POD 展開誤差評価のための計算として、拡散計算の代わりに SP3 計算を実施すればよい。

3.4 Wilks の手法の POD 展開誤差評価に対する適用可能性調査

本節では、2 次元単一集合体において、1 次の Wilks の手法を用いて、POD 展開誤差の UTL を推定可能か検証する。具体的には、信頼度 q の計算値が統計的な不確かさの範囲で信頼度の参照値 0.9515 を含むかどうか、bootstrap 法 [6] を用いて検証する。3.4.1 項では、本検証の計算条件について説明する。3.4.2 項では、信頼度計算手順を説明する。3.4.3 項では、本検証で用いた POD 基底空間分布を示した後、Wilks の手法に基づく POD 展開誤差の UTL に関する検証結果を示す。

3.4.1 計算条件

本項では、計算条件について説明する。計算体系は **Fig. 2.2** に示した C5G7 ベンチマーク体系 [7] の 2 次元単一 UO_2 集合体体系とした。集合体内の空間メッシュは 17×17 に分割した。本体系の 1 メッシュサイズは 1.26 cm であり、1 メッシュが 1 ピンセルに対応する。エ

エネルギー群数は2群とした。本研究では、自作した2次元拡散コードを用いて検証を実施した。ピンセル単位の均質化およびエネルギー群縮約は、輸送計算コード GENESIS[8],[9]を用いて実施した。すべての境界面にアルベド境界条件を適用し、各境界面のアルベド値は空間的に一様とした。4つの境界面におけるアルベド値は一様乱数によって独立に決定した。高速群と熱群のアルベド値の一様乱数範囲はそれぞれ[0.4, 1.3]および[0.5, 1.6]とした。本乱数範囲は、空間均質化・エネルギー群縮約した C5G7 ベンチマーク体系における、各集合体境界面上のアルベド値を含むように決定した。各物質の断面積・拡散係数を Table 3.2–Table 3.4 に示す。

本章では、POD 展開係数に関する方程式を解き、中性子束を再構成する一連の計算を POD 計算と呼ぶ。拡散計算および POD 計算において、内部反復は ADI 法[10]、外部反復はべき乗法を用いた。全中性子束 ϕ および実効増倍率 k_{eff} の収束条件式を(3.12)式および(3.13)式に示す。

$$\max \left(\left| \frac{\phi_{g,i,j}^{(n-1)}}{\phi_{g,i,j}^{(n)}} - 1 \right| \right) < \varepsilon_{\phi} \quad (3.12)$$

$$\left| \frac{k_{\text{eff}}^{(n-1)}}{k_{\text{eff}}^{(n)}} - 1 \right| < \varepsilon_{k_{\text{eff}}} \quad (3.13)$$

ただし、上添え字 n は反復回数を意味する。POD 展開係数 h に関する収束条件式は(3.12)式と同様であり、収束条件は ε_h によって与えられる。拡散計算では、外部反復計算における中性子束 ϕ と k_{eff} の収束条件は $\varepsilon_{\phi}^{\text{outer}} = \varepsilon_{k_{\text{eff}}}^{\text{outer}} = 1 \times 10^{-8}$ とし、ADI 法の収束条件は $\varepsilon_{\phi}^{\text{inner}} = 1 \times 10^{-9}$ とした。POD 計算では、外部反復計算における展開係数 h と k_{eff} の収束条件は $\varepsilon_h^{\text{outer}} = \varepsilon_{k_{\text{eff}}}^{\text{outer}} = 1 \times 10^{-8}$ とし、ADI 法の収束条件は $\varepsilon_h^{\text{inner}} = 1 \times 10^{-9}$ とした。

Wilks の手法のパラメータである確率 p /信頼度 q はともに 0.95 とした。したがって、Wilks の手法に基づく UTL 推定に必要なサンプル数 $N_{\text{wilks}} = 59$ であった。

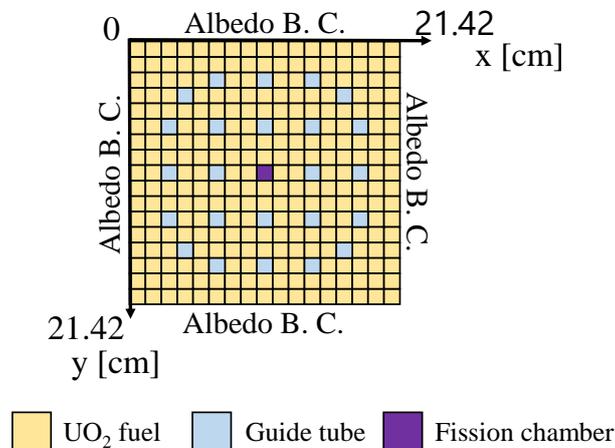


Fig. 3.6 2次元 UO₂ 集合体体系

Table 3.2 UO₂燃料領域の巨視的断面積

g	$\Sigma_{a,g}$ [cm ⁻¹]	$\nu\Sigma_{f,g}$ [cm ⁻¹]	χ_g [-]	D_g [cm]	$\Sigma_{s,1\rightarrow g}$ [cm ⁻¹]	$\Sigma_{s,2\rightarrow g}$ [cm ⁻¹]
1	1.004868E-2	7.285493E-3	1.0	8.938528E-1	3.432982E-1	2.699352E-5
2	9.826820E-2	1.615601E-1	0.0	3.299141E-1	1.957058E-2	9.120693E-1

Table 3.3 Guide Tube 領域の巨視的断面積

g	$\Sigma_{a,g}$ [cm ⁻¹]	$\nu\Sigma_{f,g}$ [cm ⁻¹]	χ_g [-]	D_g [cm]	$\Sigma_{s,1\rightarrow g}$ [cm ⁻¹]	$\Sigma_{s,2\rightarrow g}$ [cm ⁻¹]
1	3.484490E-4	0.0	0.0	1.037233E+0	2.893333E-1	1.219670E-5
2	1.806611E-2	0.0	0.0	2.761785E-1	3.168611E-2	1.188871E+0

Table 3.4 Fission Chamber 領域の巨視的断面積

g	$\Sigma_{a,g}$ [cm ⁻¹]	$\nu\Sigma_{f,g}$ [cm ⁻¹]	χ_g [-]	D_g [cm]	$\Sigma_{s,1\rightarrow g}$ [cm ⁻¹]	$\Sigma_{s,2\rightarrow g}$ [cm ⁻¹]
1	3.488735E-4	8.044248E-7	1.0	1.037457E+0	2.893229E-1	1.223093E-5
2	1.804620E-2	1.718044E-6	0.0	2.764201E-1	3.162672E-2	1.187836E+0

3.4.2 信頼度計算手順

本項では、Wilks の手法に基づいて推定した POD 展開誤差の統計的妥当性を検証する方法として、その信頼度計算手順について説明する。

本検証では、信頼度 q の計算値が統計的な不確かさの範囲で参照値 0.9515 を含むかどうかを検証した。まず、確率 p 、信頼度 q のもと、Wilks の手法に基づいて、 $N_q = 1000$ 回 POD 展開誤差の UTL を推定した後、「POD 展開誤差が UTL 推定値以下である確率 p_c 」($1 \leq c \leq N_q = 1000$)を求めた。その後、 $N_q = 1000$ 通りの p_c を用いることで、信頼度 q を計算した。具体的な信頼度 q の計算手順は以下のとおりである。

- A) 異なるアルベド境界条件下で、30 回拡散計算を実施した。
- B) 30 通りの中性子束分布に基づき、回転によるデータ拡張を用いて、エネルギー g 群の snapshot 行列 \mathbf{M}_g を作成した。 \mathbf{M}_g は合計 120 通りの中性子束分布からなる。本検証では、得られた 120 本の POD 基底のうち、30 本の POD 基底を用いて中性子束分布を展開した。
- C) ランダムなアルベド境界条件下で、ステップ A)と同様に拡散計算を $N_{\text{wilks}} = 59$ 回実施した。
- D) ステップ C)で評価した $N_{\text{wilks}} = 59$ 通りの中性子束を POD 基底で展開した。このと

き、POD 展開係数は $h_{s,g} = \vec{u}_{s,g} \cdot \vec{\phi}_g$ より求めた。

- E) ステップ D) で評価した 30 本の POD 基底で展開した中性子束と中性子束参照値（拡散計算の元の結果）から、POD 展開誤差として 59 通りの中性子束 rRMSE を評価した。
- F) 得られた 59 通りの rRMSE から最大値を求め、POD 展開誤差の UTL を推定した。
- G) 確率 p_c を計算するために、異なるランダムなアルベド境界条件下で $N_p = 1000$ 回の拡散計算を実施した。その結果を用いて、1000 通りの rRMSE を評価した。確率 p_c は「総試行回数 $N_p = 1000$ 回」に対する「(2) で推定した推定した UTL 以下の rRMSE 値の数」の割合で推定した。
- H) ステップ C) ~ G) を $N_q = 1000$ 回繰り返し、1000 通りの確率 p^c ($1 \leq c \leq N_q = 1000$) を得た。「総試行回数 $N_q = 1000$ 回」に対する「 p^c の値が 0.95 以上の数」の割合を計算することで、最終的に信頼度 q_{calc} を推定した。推定された信頼度 q_{calc} の統計的不確かさは bootstrap 法[6]を用いて評価した。

3.4.3 検証結果

本項では、POD 展開誤差の UTL 推定に対する Wilks の手法の適用可能性調査結果を説明する。まず、POD 基底の空間分布を示す。次に、3.4.2 項で説明した反復計算で求めた信頼度の計算値を示す。

本計算で得られた POD 基底の一例として、1-8 次の高速群および熱群の POD 基底空間分布をそれぞれ Fig. 3.7 および Fig. 3.8 に示す。また、1-30 次の各エネルギー群の次数に対する特異値の変化を Fig. 3.9 に示す。青丸が高速群の特異値であり、赤×が熱群の特異値である。3.4.2 項で説明したように、本検証では、回転によるデータ拡張を用いて snapshot を作成した。そのため、中性子束分布の主要な成分である 1 次の POD 基底として、典型的な PWR 集合体体系と同じ 1/4 対称性をもつ空間分布が得られたことが Fig. 3.7 および Fig. 3.8 からわかる。

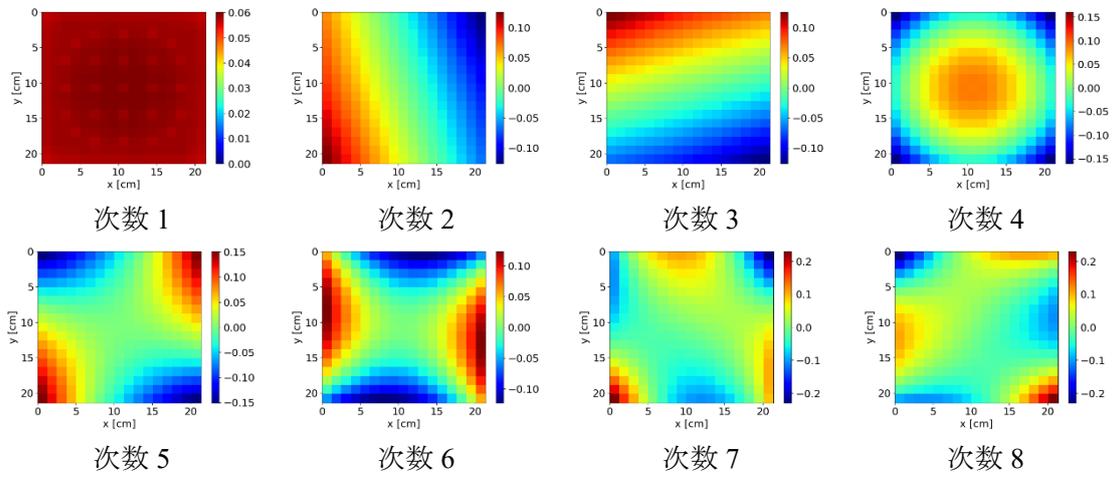


Fig. 3.7 高速群 POD 基底空間分布

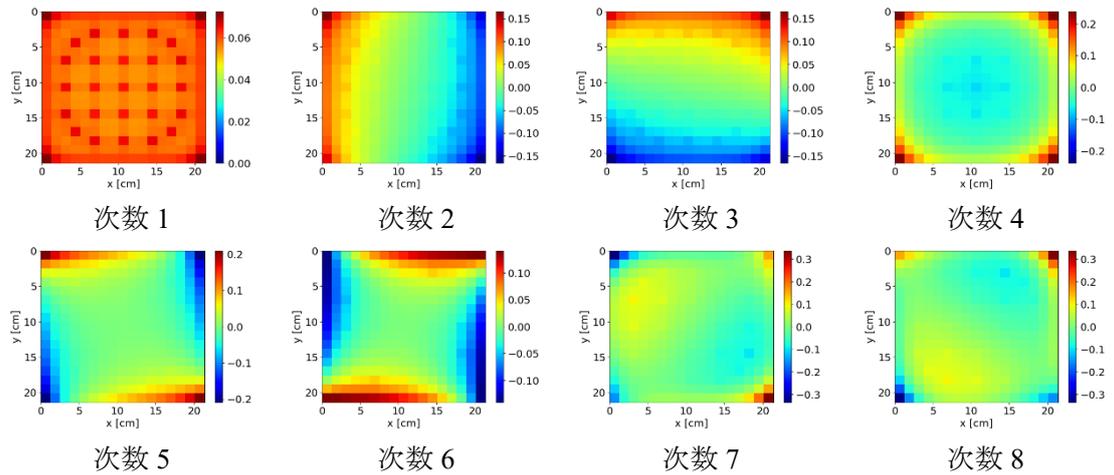


Fig. 3.8 熱群 POD 基底空間分布

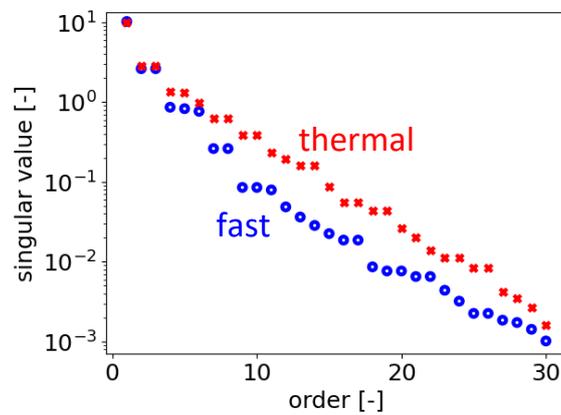


Fig. 3.9 次数に対する特異値変化 (1次-30次)

一例として、3.4.2 項で説明した信頼度反復計算の $c = 8$ 回目の反復において、ステップ F) で 59 通りのサンプルより推定した UTL (0.2%) およびステップ G) で得られた 1000 通りの rRMSE を Fig. 3.10 に示す。青丸と赤×のデータはそれぞれ UTL 推定値以下の rRMSE と UTL 推定値より大きい rRMSE を意味する。この場合、確率 p_c は $962/(N_p = 1000) = 0.962$ であり、0.95 より大きい。したがって、 $c = 8$ で Wilks の手法による UTL 推定が成功しているといえる。

ステップ H) で推定した $N_q = 1000$ 通りの UTL の頻度分布を Fig. 3.11 に示す。1 次の Wilks の手法では、POD 展開誤差の UTL は $N_{\text{wilks}} = 59$ 通りの rRMSE の最大値として推定される。そのため、推定された UTL は、59 通りのランダムなアルベド境界条件に依存する。したがって、 $N_q = 1000$ 通りの UTL 推定値は統計的にばらつく。本検証では、 $N_q = 1000$ 通りの UTL 推定値の平均値は、0.38%、標準偏差は 0.23% であった。また、歪度 (分布形状の左右対称度合い) は +2.14 であり、左側に偏った分布である。 $N_q = 1000$ 通りの UTL 推定のうち、950 通りで、「POD 展開誤差が UTL 推定値以下である確率 p_c 」が $p = 0.95$ 以上であった、すなわち、Wilks の手法による UTL 推定が成功した。

最後に、信頼度計算値 q_{calc} は 0.950 ± 0.07 であった。信頼度の不確かさは bootstrap 法を用いて評価した。 q_{calc} は不確かさの範囲で信頼度参照値 q_{ref} を含む。したがって、本結果より、Wilks の手法により、確率 p と信頼度 q で POD 展開誤差の UTL を適切に推定できるといえる。

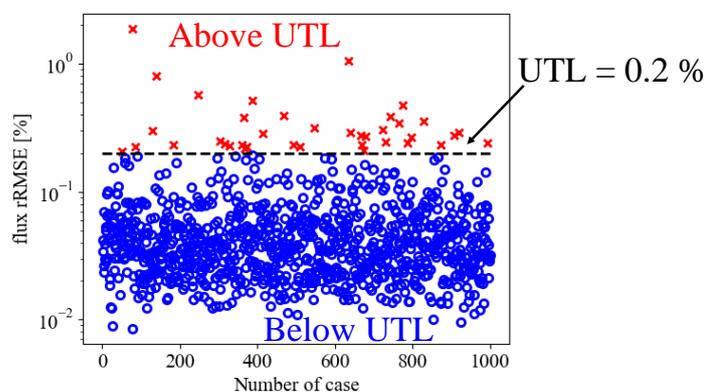


Fig. 3.10 $N_p = 1000$ 通りの rRMSE および UTL 推定値 ($c = 8$)

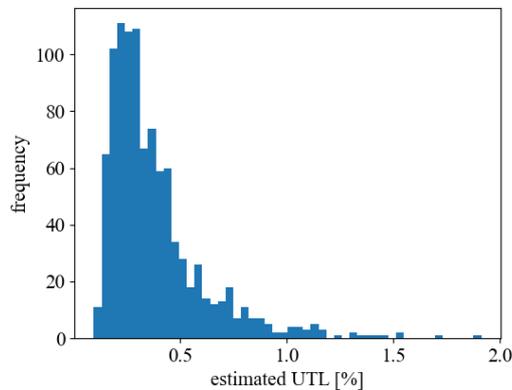


Fig. 3.11 $N_q = 1000$ 通りの UTL 推定値

3.5 Wilks の手法に基づく POD 展開次数探索手法に関する検討

本節では、2次元単一集合体において、Wilks の手法に基づく POD 展開次数探索手法の有効性を検討する。本検証では、まず、提案手法を用いて POD 基底を評価する。次に、10万通りのランダムなアルベド境界条件に対して、提案手法を用いて得られた POD 基底を用いて POD 計算を実施する。この時、展開係数に関する方程式を解くことで、全中性子束分布と実効増倍率 k_{eff} を計算する。得られた 10 万通りの計算条件のうち、POD 計算誤差が目標誤差を満足する割合を評価する。3.5.1 項では、本検証計算で用いた計算条件を示す。3.5.2 項では、本検証で用いた POD 基底空間分布を示した後、Wilks の手法に基づく POD 展開次数探索手法の有効性検証結果を示す。

3.5.1 計算条件

本項では、検証計算の計算条件を説明する。計算体系は、3.4.1 項と同じ Fig. 3.6 に示した C5G7 ベンチマーク体系[7]の 2次元単一 UO_2 集合体体系とした。集合体内の空間メッシュは 17×17 に分割した。本体系の 1 メッシュサイズは 1.26 cm であり、1 メッシュが 1 ピンセルに対応する。エネルギー群数は 2 群とした。本研究では、自作した 2次元拡散コードを用いて検証を実施した。ピンセル単位の均質化およびエネルギー群縮約は、輸送計算コード GENESIS[8],[9]を用いて実施した。すべての境界面にアルベド境界条件を適用し、各境界面のアルベド値は空間的に一様とした。4つの境界面におけるアルベド値は一様乱数によって独立に決定した。高速群と熱群のアルベド値の一様乱数範囲はそれぞれ[0.4, 1.3]および[0.5, 1.6]とした。本乱数範囲は、空間均質化・エネルギー群縮約した C5G7 ベンチマーク体系における、各集合体境界面上のアルベド値を含むように決定した。各物質の断面積・拡散係数は 3.4.1 項に示した Table 3.2–Table 3.4 と同一である。

拡散計算および POD 計算において、内部反復は ADI 法[10]、外部反復はべき乗法を用いた。拡散計算では、外部反復計算における中性子束 ϕ と k_{eff} の収束条件は $\varepsilon_{\phi}^{\text{outer}} = \varepsilon_{k_{\text{eff}}}^{\text{outer}} =$

1×10^{-8} とし、ADI法の収束条件は $\varepsilon_{\phi}^{inner} = 1 \times 10^{-9}$ とした。POD計算では、外部反復計算における展開係数 h と k_{eff} の収束条件は $\varepsilon_h^{outer} = \varepsilon_{k_{eff}}^{outer} = 1 \times 10^{-8}$ とし、ADI法の収束条件は $\varepsilon_h^{inner} = 1 \times 10^{-9}$ とした。

本検証では、提案手法によるPOD基底評価時の目標誤差を「全中性子束 rRMSE の UTL 推定値が 0.1%以下」かつ「 Δk_{eff} の UTL 推定値が 0.01%以下」とした。本節では、全中性子束 rRMSE および Δk_{eff} の目標誤差の値をそれぞれ $\varepsilon_{\phi,lim}$ および $\varepsilon_{k_{eff},lim}$ で表現する。本検証の場合、「 $\varepsilon_{\phi,lim} = 0.1\%$ 」および「 $\varepsilon_{k_{eff},lim} = 0.01\%$ 」である。

また、Wilksの手法のパラメータである確率 p /信頼度 q はともに 0.95 とした。したがって、Wilksの手法に基づく UTL 推定に必要なサンプル数は、3.3.1 項で説明したように $N_{wilks} = 59$ となる。

3.5.2 検証結果

本項では、提案手法の有効性検証結果について説明する。まず、提案手法を用いたPOD基底評価結果について説明する。次に、提案手法により得られたPOD基底を用いたPOD計算による全中性子束分布 ϕ と実効増倍率 k_{eff} の計算誤差を示す。

● POD基底評価結果

提案手法により得られたPOD基底の展開次数は41次であった。得られたPOD基底の一例として、1-8次の高速群および熱群のPOD基底空間分布をそれぞれFig. 3.12およびFig. 3.13に示す。また、各エネルギー群の次数に対する特異値の変化をFig. 3.14に示す。青丸が高速群の特異値であり、赤×が熱群の特異値である。Fig. 3.12およびFig. 3.13より、snapshot作成時に回転によるデータ拡張を用いることで、POD展開次数探索手法において、中性子束分布の主要な成分である1次のPOD基底として、典型的なPWR集合体体系と同じ1/4対称性をもつことがわかる。2次のPOD基底はy方向の中性子束の傾きを、3次のPOD基底はx方向の中性子束の傾きを補正する。さらに高次のPOD基底はより複雑な全中性子束の形を補正する。

Fig. 3.14について、2,3次の特異値を比較すると、2つの特異値が一致している。特異値は中性子束を展開する際における、対応するPOD基底の重要度である。すなわち、2,3次のPOD基底の重要度は同程度となる。ここで、熱群の2,3次のPOD基底の空間分布に注目すると、2次のPOD基底はy方向の中性子束の傾きを、3次のPOD基底はx方向の中性子束の傾きを補正する空間分布となっている。このように2次元xy体系では、空間方向の自由度が2であるため、中性子束の傾きを再現する際に、各方向の傾きを補正するPOD基底の重要度が同程度、すなわち同一の特異値を持った2つのPOD基底が縮退している状況となる。

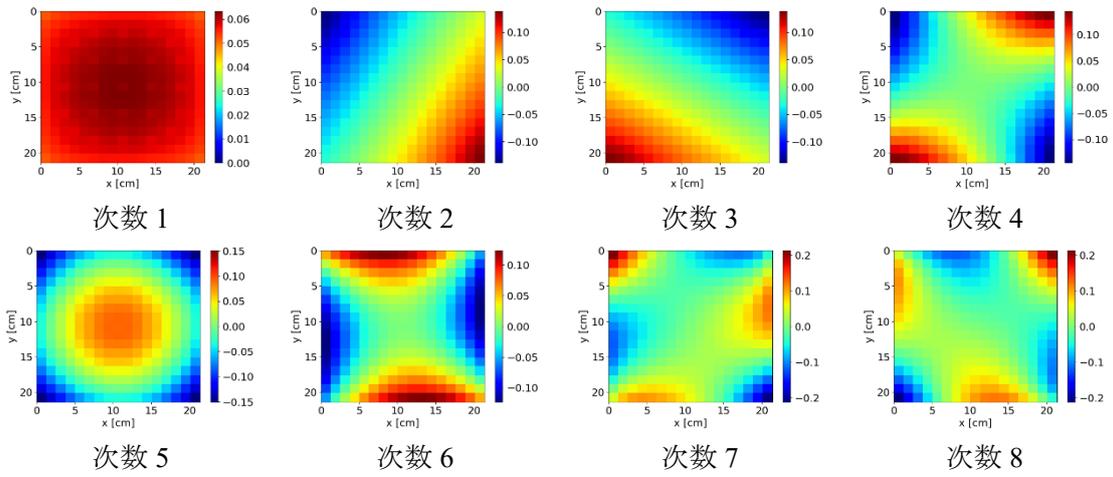


Fig. 3.12 提案手法を用いて評価した高速群 POD 基底空間分布

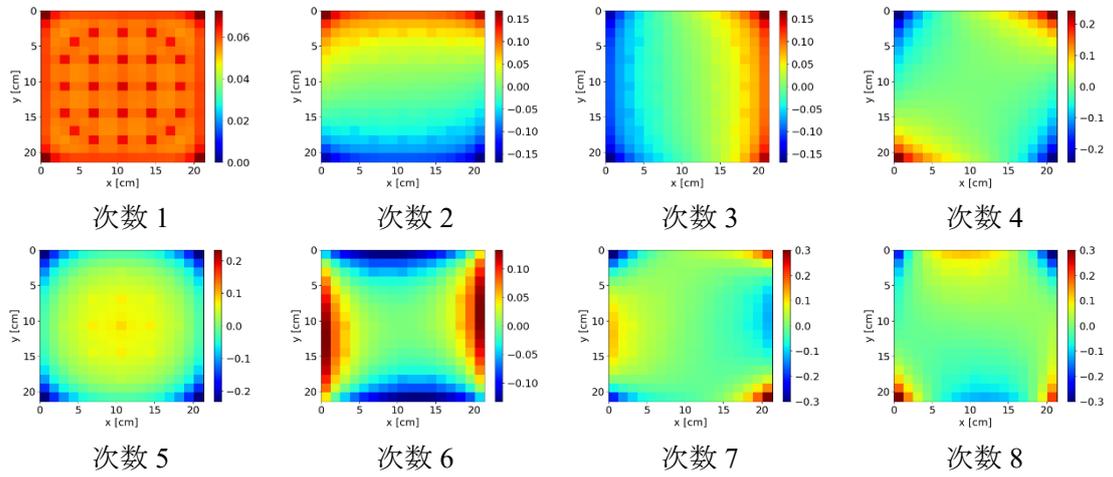


Fig. 3.13 提案手法を用いて評価した熱群 POD 基底空間分布

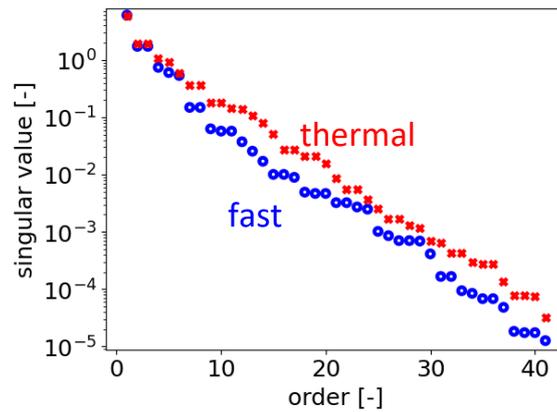


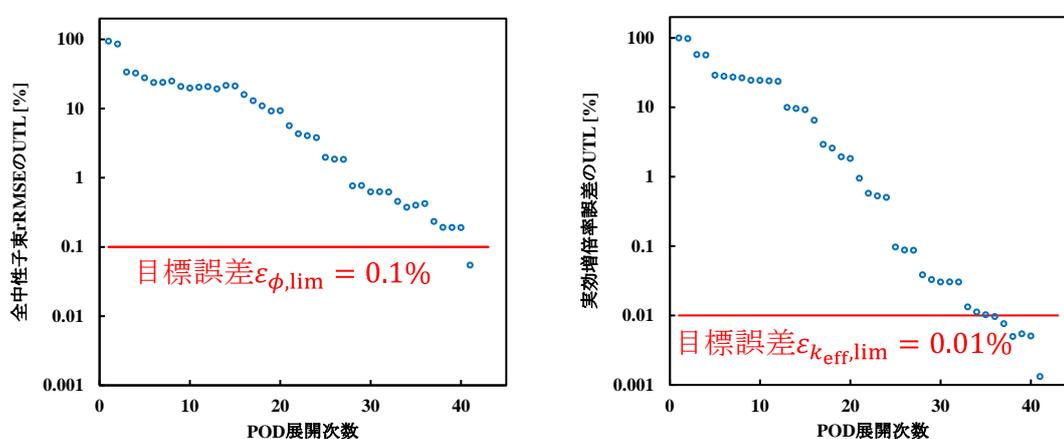
Fig. 3.14 次数に対する特異値変化

POD 展開次数に対する UTL の変化および目標誤差を Fig. 3.15 に示す。Fig. 3.15 より、全

中性子束の rRMSE および実効増倍率誤差 Δk_{eff} の UTL が目標誤差を満足する展開次数はそれぞれ 41 次および 36 次であった。2.2.6 項で説明したように、実効増倍率 k_{eff} は次式のように核分裂反応率の体積積分値として計算される。

$$k_{\text{eff}} = \sum_{g'} \sum_i \sum_j v \Sigma_{f,g',i,j} \phi_{g',i,j} \Delta x_i \Delta y_j \quad (3.14)$$

したがって、全中性子束の POD 展開誤差が互いに打ち消しあって、全中性子束誤差と比べて、実効増倍率 k_{eff} の誤差は小さくなると考えられる。以上の理由により、今回の計算条件では、POD 展開次数は実効増倍率誤差 Δk_{eff} よりも、むしろ中性子束 rRMSE の UTL によって律速されることになると考えられる。

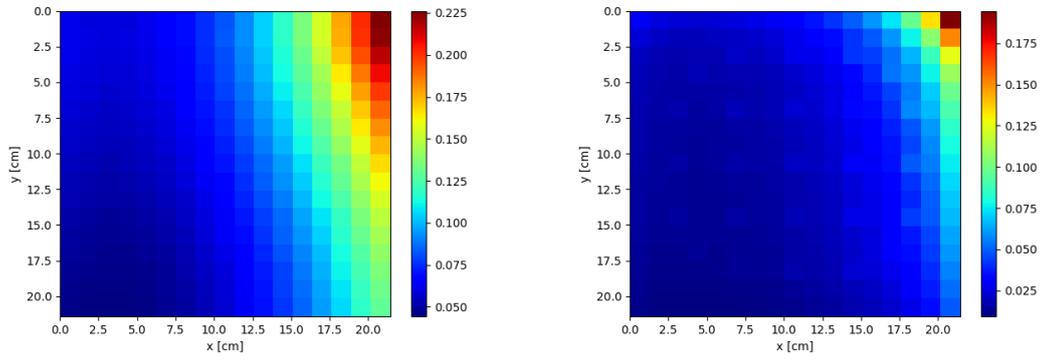


(1) 全中性子束 rRMSE の UTL

(2) 実効増倍率誤差 Δk_{eff} の UTL

Fig. 3.15 POD 展開次数に対する UTL の変化および目標誤差

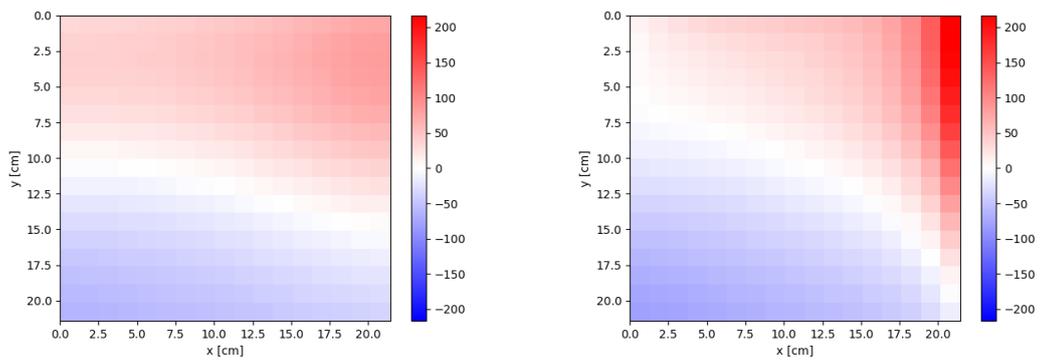
Fig. 3.15 に注目すると、POD 展開次数に対する UTL 変化が不連続に変化している結果が観察された。この理由について議論するために、以降では、特に 2 次と 3 次の POD 展開次数に対する UTL の不連続変化について考察する。Wilks の手法では、ランダムサンプリング法によりアルベド境界条件を変化させた 59 通りの POD 展開誤差の最大値として UTL を推定する。POD 展開次数が 2 の時に、全中性子束 rRMSE が最大となった計算条件における全中性子束空間分布を Fig. 3.16 に示す。同条件において、POD 展開次数を 2 および 3 としたときの相対誤差分布を、それぞれ Fig. 3.17 および Fig. 3.18 に示す。



高速群

熱群

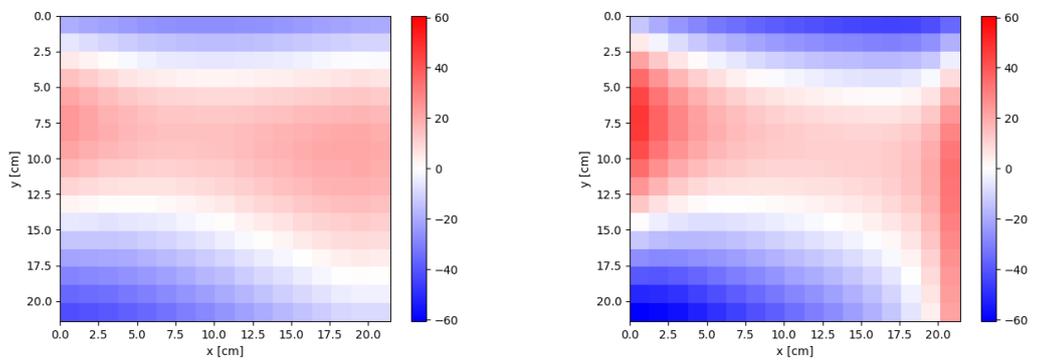
Fig. 3.16 rRMSE が最大となる計算条件の全中性子束空間分布



高速群

熱群

Fig. 3.17 中性子束相対誤差空間分布 (POD 展開次数 2)



高速群

熱群

Fig. 3.18 中性子束相対誤差空間分布 (POD 展開次数 3)

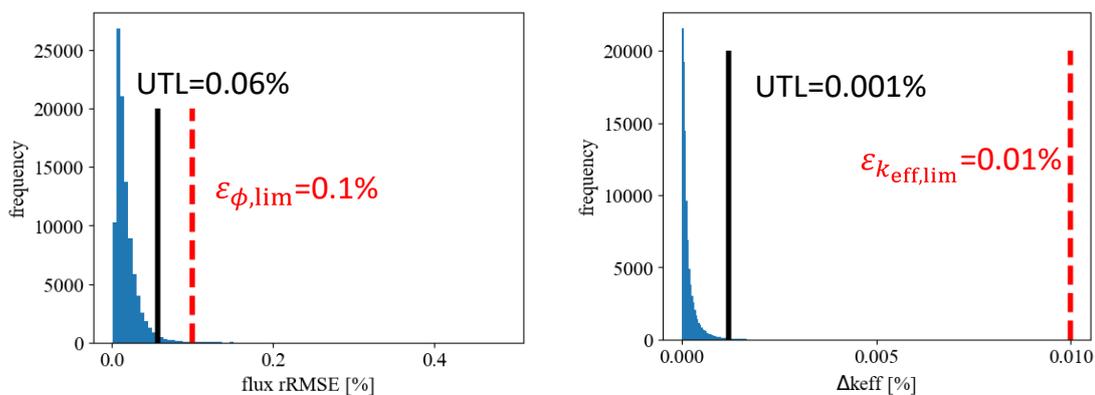
Fig. 3.17 および Fig. 3.18 より、POD 展開次数を 2 から 3 に増加させることで、中性子束相対誤差の最大値が 1/3 程度低減していることがわかる。Fig. 3.16 より、rRMSE が最大となった計算条件において、全中性子束分布は右上 (x 正、 y 負) 方向に偏っている。POD 展開次数が 2 の場合、Fig. 3.17 より、熱群の中性子束相対誤差が同じく右上方向で最大となる。一方、POD 展開次数が 3 の場合、Fig. 3.18 より、右上領域で相対誤差が低減している。前述したように、2 次と 3 次の熱群 POD 基底はそれぞれ y, x 方向の全中性子束の傾きを補正する。1 次と 2 次の POD 基底を用いた場合、 y 方向の全中性子束の傾きが補正できるが、 x 方向の傾きを補正できない。そのため、Fig. 3.16 のような右上でピークをもつ全中性子束分布の再現が困難である。一方、1 次–3 次の POD 基底を用いた場合、 y 方向と x 方向の傾きを補正できるため、右上にピークがある分布の POD 展開誤差を低減できると考えられる。これは、右上にピークがある分布において、2 次と 3 次の POD 基底が同程度に重要である、すなわち、右上にピークがある分布に対する 2 次と 3 次の POD 展開係数が近い値をもつことを意味する。これは、Fig. 3.14 で示したように 2 次と 3 次の特異値が一致している結果からも、納得することができる。このように、中性子束空間分布の形状によっては、 s 次の POD 基底が、より低次の s' 次の POD 基底 ($s' < s$) と同程度に重要となる場合がある。そのような場合、 s' 次の POD 基底までを含めても、 s 次の POD 基底を含めない場合、計算精度は大きく向上しない。逆に、中性子束分布を展開する際に、 s 次の POD 基底を含むか否かで POD 展開誤差が大きく (不連続的に) 減少する、と考えられる。

● 提案手法の有効性検証結果

10 万通りの POD 計算誤差の頻度分布を Fig. 3.19 に図示する。黒実線が最終的な UTL 値を示し、赤点線が目標誤差を示す。最終的な各誤差の UTL 推定値はそれぞれ、0.057% および 0.001% であった。総数 10 万通りの誤差のうち、UTL 推定値および目標誤差以下の誤差値の割合を Table 3.5 に示す。Table 3.5 より、全中性子束 rRMSE および Δk_{eff} の UTL 値以下の割合がともに 0.95 以上であり、Wilks の手法による UTL 推定が成功している。また、99% 以上の計算条件で目標誤差を満足している。本検証結果より、提案手法を用いることで目標誤差を満足し、かつ POD 展開次数が小さいような POD 基底を評価可能であるといえる。

以下で、本検証条件において POD 展開次数を律速する中性子束 rRMSE の UTL 推定値について議論する。Table 3.5 に示した「全中性子束 rRMSE の UTL 推定値以下となる計算条件の割合 0.9755」が、Wilks の手法で UTL 推定条件 (UTL 推定値以下となる計算条件の割合が p 以上) として設定したパラメータ $p = 0.95$ より大きく、本検証で実施した UTL 推定は保守的であるといえる。UTL 推定に用いた Wilks の手法は、次数が低いほど統計的評価が保守的となる確率が高い [3]。本検証では、1 次の Wilks の手法を用いたため、UTL 推定が保守的となったと考えられる。ゆえに、高次の Wilks の手法を用いることで、UTL 推定条件として設定したパラメータ値 p に近い値をとるよう、展開誤差の UTL を推定できることが期

待される。



(1) 全中性子束 rRMSE の頻度分布 (2) 実効増倍率誤差 Δk_{eff} の頻度分布

Fig. 3.19 POD 計算誤差の頻度分布

Table 3.5 UTL 値あるいは目標誤差の値以下の計算条件の割合

	全中性子束 rRMSE	実効増倍率誤差 Δk_{eff}
UTL 推定値以下の割合	0.9755	0.9942
目標誤差以下の割合	0.9945	1.0000

3.6 本章のまとめ

本章では、POD 基底評価手法として、データ拡張と Wilks の手法に基づく POD 展開次数探索手法を提案し、燃料棒単位の単一 UO_2 集合体体系で、提案手法の有効性を検証した。本検証結果により、①データ拡張を用いることで、少数の snapshot データから典型的な PWR 集合体と同じ回転対称性を有する POD 基底を計算できること、②提案手法を用いることで、中性子束分布を高精度に再現可能かつ POD 展開次数が小さいような POD 基底を評価できることが確認できた。

3.2 節では、POD 基底計算に対するデータ拡張の応用法について説明した。データ拡張は、画像認識を目的とした機械学習等に対する前処理の一つであり、画像の一部拡大や回転、反転等により新たなデータを生成することで、学習用データを増大できる。特に本章では、回転によるデータ拡張を用いた、単一集合体体系の POD 基底の snapshot 作成法を説明した。具体的には、従来法によって得られた中性子束分布を集合体周りに 90° 回転および 180° 回転、 270° 回転した 3 つの中性子束分布を snapshot に加える。これにより、snapshot を構成する中性子束分布の偏りが軽減され、少数の snapshot データから、典型的な PWR 集合体と同じ 1/4 対称性をもつ POD 基底を評価できる。

3.3 節では、Wilks の手法に基づく POD 展開次数探索法について説明した。Wilks の手法では、統計評価のパラメータとして「確率 p 」および「信頼度 q 」を設定することで、対象とする物理量の統計的分布 $f(x)$ を仮定せずに物理量の上側許容限界 (Upper Tolerance Limit, UTL) を推定できる。

「Wilks の手法に基づく POD 展開次数探索法」では、Wilks の手法により推定した POD 展開誤差の UTL 値が目標誤差以下となるまで、POD 基底数 (POD 展開次数) を 1 ずつ増やす。これにより、目標誤差を満足し、かつ展開次数が少ないような POD 基底を評価できる。

3.4 節では、2 次元単一 UO_2 集合体体系を対象として、Wilks の手法に基づき、POD 展開誤差を統計的に評価可能か検証した。本検証では、反復計算により信頼度を計算し、得られた信頼度計算値が不確かさの範囲で信頼度参照値を含むか bootstrap 法を用いて検証した。その結果、信頼度計算値が不確かさの範囲で信頼度参照値を含んだ。本検証結果より、Wilks の手法に基づき、POD 展開誤差を統計的に評価可能であることを明らかとした。

3.4 節で得られた検証結果を踏まえ、3.5 節では 2 次元単一 UO_2 集合体体系を対象として、提案手法の有効性を検証した。本検証では、提案手法により POD 基底を評価した後、ランダムサンプリング法によりアルベド境界条件を変化させた 10 万通りの POD 展開誤差が目標誤差「中性子束相対誤差の平均値 rRMSE が 0.1% 以下」かつ「実効増倍率誤差 Δk_{eff} が 0.01% 以下」を満足するか調査した。

snapshot データ準備時に、回転によるデータ拡張を適用し、提案手法により POD 基底を評価した。得られた POD 基底の展開次数は 41 次であった。また、1 次の POD 基底の空間分布が典型的な PWR 集合体と同じ 1/4 対称性をもつことを確認した。

得られた POD 基底を用いて、10 万通りのランダムなアルベド境界条件における中性子束 rRMSE および Δk_{eff} を評価した。その結果、10 万通りの計算条件のうち、99% 以上の計算条件において、中性子束 rRMSE および Δk_{eff} が、ともに目標誤差を満足した。

本章の検証結果より、データ拡張と Wilks の手法を用いて、中性子束分布を高精度に再現可能、かつ POD 展開次数が小さいような POD 基底を評価する方法論を編み出すことができた。

本章の結果を踏まえ、次章では、提案手法により得られた POD 基底を用いた大規模な非均質体系に適用可能な POD 計算の実現を目指す。

3.7 参考文献

- [1] C. Shorten and T. M. Khoshgoftaar, “A survey on image data augmentation for deep learning,” *J. Big Data*, 6(1), 60 (2019); <https://doi.org/10.1186/s40537-019-0197-0>.
- [2] S. S. Wilks, “Determination of sample sizes for setting tolerance limits,” *Ann. Math. Stat.*,

- 12(1), pp. 91–96 (1941).
- [3] N. W. Porter, “Wilks’ formula applied to computational tools: A practical discussion and verification,” *Ann. Nucl. Energy*, **133**, pp.129–137 (2019); <https://doi.org/10.1016/j.anucene.2019.05.012>.
- [4] S. KANG J. Heo, C. Choi, et al., “Assessment study about the risk of Wilks’ formula for uncertainty quantification of design extension condition scenarios in prototype Gen-IV sodium fast reactor,” *J. Nucl. Sci. Technol.*, **55**(7), pp. 746–755 (2018); <https://doi.org/10.1080/00223131.2018.1435317>.
- [5] S. W. Lee, B. D. Chung, Y. S. Bang, et al., “Analysis of uncertainty quantification method by comparing Monte-Carlo method and Wilks’ formula,” *Nucl. Eng. Technol.*, **46**(4), pp. 481–488 (2014); <https://doi.org/10.5516/NET.02.2013.047>.
- [6] B. Efron and R. Tibshirani, “Bootstrap methods for standard errors, confidence intervals and other measures of statistical accuracy,” *Stat. Sci.*, **1**(1), pp. 54–77 (1986).
- [7] OECD/NEA, *Benchmark on deterministic transport calculations without spatial homogenization*, Nuclear Energy Agency, (2005).
- [8] A. Yamamoto, A. Giho, Y. Kato, et al., “GENESIS A three-dimensional heterogeneous transport solver based on the legendre polynomial expansion of angular flux method,” *Nucl. Sci. Technol.*, **186**(1), pp. 1–22 (2017); <https://doi.org/10.1080/00295639.2016.1273002>.
- [9] A. Yamamoto, A. Giho, T. Endo, “Recent developments in the genesis code based on the Legendre polynomial expansion of angular flux method,” *Nucl. Eng. Technol.*, **49**(6), pp. 1143–1156 (2017); <https://doi.org/10.1016/j.net.2017.06.016>.
- [10] 辻田浩介, “Characteristics 法を用いた動特性計算に関する研究”, 修士論文, 名古屋大学 (2013).

第4章 NUMA 法を用いた POD local/global 反復法に基づく拡散計算手法

4.1 本章の概要

本章では、POD による次元削減を用いた local/global 反復法に関する計算理論を説明した後、local 計算のアルベド値空間分布を更新することで local/global 反復計算を実施する方法として NUMA 法を提案する。提案手法の有効性を調査するため、2次元多集合体計算を実施する。

近年、POD を用いた拡散方程式や輸送方程式の効率的な次元削減が提案されている[1]–[3]。ピンセル単位の非均質炉心計算を実施するためには膨大な空間メッシュを要する。また、そのような非均質体系内の全中性子束分布は極めて複雑となる。このため、POD による次元削減を体系全体の詳細計算に直接適用すると、高精度に全中性子束を再構成するために必要な POD 基底数が多くなり、その有効性を十分発揮できない可能性がある。一方、単一集合体の詳細計算であれば、体系全体と比べて、空間メッシュ数が少なく、全中性子束分布の凹凸も少ないため、POD の有効性を発揮できることが期待される。そこで本章では、POD による次元削減を local/global 反復法[4]–[8]に適用した POD local/global 反復法 (POD LG 反復法) に基づく拡散計算手法を考案する。

POD LG 反復法では、各集合体の詳細メッシュ拡散計算 (local 計算) に POD を適用し、体系全体の粗メッシュ拡散計算 (global 計算) と交互に反復する。LG 反復法における local 計算として、固有値計算を実施する方法論[4],[5]と固定源計算を実施する方法論[6]–[8]が考案されている。前章で提案した POD 展開次数探索手法を用いた POD 基底評価では、POD を用いた固有値計算の計算誤差が目標誤差を満足することを Wilks の手法[10]により統計的に評価し、POD 展開次数を決定する。そこで本章では、POD を用いた local 計算として POD 基底評価時と同一の固有値計算を用いることとする。

local 計算を固有値計算とした場合、集合体間境界面の境界条件はアルベド値で与えられる。この時、POD LG 反復法により、精度よく集合体内の詳細な中性子束分布を評価するためには、集合体間境界面に適切なアルベド値を与えなければならない。しかし、LG 反復法では、集合体間境界面のアルベド値の空間分布を評価できないため計算誤差が大きくなる、といった課題がある。そこで、集合体間境界面におけるアルベド値空間分布評価手法として、Non-linear iterative Updating fine Mesh Albedo (NUMA) 法を新たに考案する。NUMA 法を用いた POD local/global 反復法により、多集合体体系の詳細メッシュ拡散計算を精度よく再現可能か調査する。

4.2 節では、提案手法の計算理論について説明する。まず、LG 反復計算の概要と提案手法の全体像を説明する。その後、各計算部分について、より詳細に説明する。まず local 計算について説明し、均質化および不連続因子の計算、global 計算、NUMA 法を用いたアルベド値の計算、rebalance factor による POD 展開係数の規格化、各集合体内の全中性子束分布再構成の順に説明を続ける。

4.3 節では、2次元多集合体体系への提案手法の適用結果を説明する。まず、提案手法を

適用する計算体系および計算条件を説明する。次に、2次元単一集合体の POD 基底評価手順を説明し、得られた POD 基底を示す。最後に、多集合体体系に対して提案手法を適用した結果を説明する。

最後に 4.4 節で、本章のまとめを述べる。

4.2 計算理論

本節では、NUMA 法を用いた POD local/global 反復法 (POD LG) に基づく拡散計算理論を説明する。

まず、local/global 反復計算の概要を説明する。

炉心を構成する各集合体について、単一集合体計算を実施するためには、集合体境界面の境界条件を与える必要がある。境界条件を与えるためには、隣接する集合体からの中性子移流効果を評価する必要がある。例えば、 x 方向の中性子移流効果は、適切なアルベド値のもとで次式のアルベド境界条件を与えることで考慮できる[4],[5],[9]。

$$J_{g,i,j}^{in,x^\mp} = \alpha_{g,i,j}^{x^\mp} J_{g,i,j}^{out,x^\mp} \quad (4.1)$$

上式中における各変数の意味は以下のとおりである。

- $J_{g,i,j}^{in,x^\mp}$: (i,j) 番目メッシュの x 負/正方向境界面における流入部分中性子流
- $J_{g,i,j}^{out,x^\mp}$: (i,j) 番目メッシュの x 負/正方向境界面における流出部分中性子流
- $\alpha_{g,i,j}^{x^\mp}$: (i,j) 番目メッシュの x 負/正方向境界面におけるアルベド値

y 方向についても同様である。上式から適切なアルベド値を与えるためには、対応する境界面における流入/流出部分中性子流 $J^{in/out}$ を評価する必要がある。しかし、 $J^{in/out}$ を得るためには、体系全体の詳細メッシュ計算結果が必要となり、事前に $J^{in/out}$ を決定できない。そこで、**Fig. 4.1**のように、始めに単一集合体に適当な境界条件を与えて、各単一集合体計算を実施した後、その結果を用いて体系を均質化、均質化された全炉心体系の粗メッシュ計算結果を用いて各集合体の境界条件を更新する、といった一連の計算を繰り返し実施することで、集合体間の適切な境界条件を与えることができる。このような反復計算を local/global 反復計算という[4],[5]。

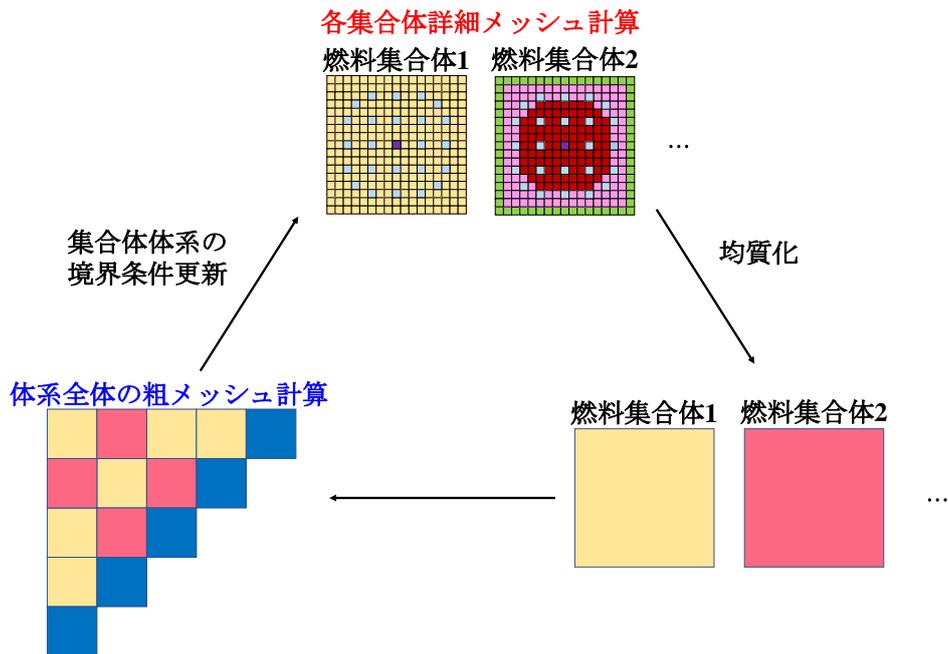


Fig. 4.1 local/global 計算の概念図

以下で、local/global 反復計算に POD を適用した POD local/global 反復計算 (POD LG 反復計算) の理論を説明する。

NUMA 法を用いた POD LG 反復法に基づく拡散計算フローを Fig. 4.2 に示す。

まず、POD LG 反復計算を実施する前に、2.3.1 項で説明した手順で、各集合体の POD 基底を事前に計算する。具体的には、計算条件の異なる多数の集合体内の中性子束分布を snapshot データとして、特異値分解を用いることで POD 基底を計算する。本検証では、各境界面で空間的に一様なアルベド境界条件を与えた単一集合体の固有値計算を多数回実施し、得られた中性子束分布により、snapshot データを準備する。すなわち、snapshot データ準備時には、集合体境界面のアルベド値空間分布を与えない。詳細な POD 基底評価手順は 4.3.2 項で説明する。

POD LG 反復計算では、初めに、すべての単一集合体間に完全反射境界条件を与え、炉心を構成するそれぞれの単一集合体を対象とした詳細メッシュ拡散計算 (local 計算) を実施する。この時、POD を活用して次元削減した POD 展開係数に関する方程式を解くことで、各集合体内の POD 展開係数を得る。次に、local 計算より得られた POD 展開係数と POD 基底を駆使することで、単一集合体の均質化し、正味の中性子流を補正する不連続因子を計算する。集合体内均質化断面積および不連続因子を用いて、体系全体の粗メッシュ拡散計算 (global 計算) を実施する。

その後、local 計算および global 計算で得られた各集合体の全中性子束体積平均値 $\bar{\phi}^L, \bar{\phi}^G$ の比として定義される rebalance factor ($= \bar{\phi}^G / \bar{\phi}^L$) により、各集合体の全中性子束分布を規格化する。local 計算では固有値方程式を解くため、local/global 反復により得られた各単一

集合体内の全中性子束、すなわち POD 展開係数の大きさは一意に決まらない。そこで、local/global 反復により得られた各単一集合体内の全中性子束分布を global 計算により得られた平均中性子束のレベルに一致させるよう、rebalance factor により POD 展開係数を規格化する。

続いて、NUMA 法に基づき、global 計算結果および rebalance factor により規格化した local 計算結果を用いて単一集合体間のアルベド値を更新する。ここで NUMA 法を用いて評価したアルベド値は集合体の各辺で均一の値ではなく、空間依存性を持つ。更新されたアルベド境界条件の下、再度 local 計算を実施する。このように local 計算と global 計算を交互に反復してアルベド値を更新することで、最終的に集合体間の適切なアルベド値を与えることができる。

local/global 反復計算が収束した後、規格化された POD 展開係数と POD 基底を用いて、各集合体内の詳細メッシュ全中性子束分布を再構成する。

本節の各項で、各計算部分についてより詳細に説明する。4.2.1 項で、POD を用いた固有値 local 計算について説明する。4.2.2 項で、空間均質化および不連続因子評価手順を説明する。4.2.3 項で、global 計算について説明する。4.2.4 項で、rebalance factor を用いた POD 展開係数の規格化を説明する。4.2.5 項で NUMA 法を用いたアルベド値空間分布評価手順を説明する。4.2.6 項で、POD 展開係数と POD 基底を用いた各集合体内の全中性子束分布の再構成再構成について説明する。

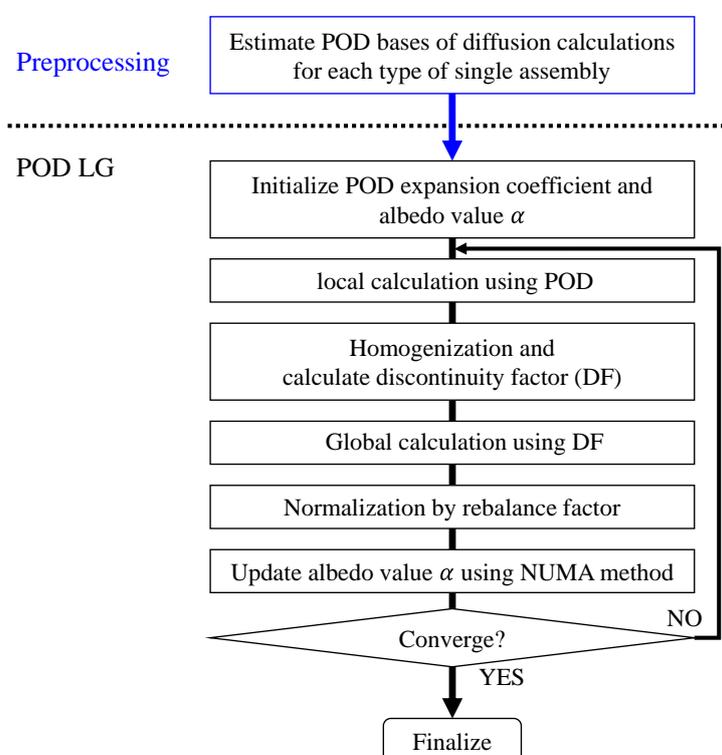


Fig. 4.2 NUMA 法を用いた POD LG 反復法に基づく拡散計算フロー

4.2.1 POD を用いた固有値 local 計算

本項では、POD を用いた固有値 local 計算について説明する。

local 計算では、各単一集合体詳細メッシュ拡散計算に対して、POD を適用する。はじめに 2.2 節で説明した手順で、断面積および境界面のアルベド値に基づいて係数行列 \mathbf{A}_g , $\mathbf{F}_{g' \rightarrow g}$, $\mathbf{S}_{g' \rightarrow g}$ を求める。各集合体の local 計算開始時に、4.2.5 項で述べる手順で更新されたアルベド値に応じて、係数行列 \mathbf{A}_g のみ更新される。次に(4.2)式-(4.4)式のように基底行列 \mathbf{U}_g で \mathbf{A}_g , $\mathbf{F}_{g' \rightarrow g}$, $\mathbf{S}_{g' \rightarrow g}$ を挟む (行列の左・右からかける) ことで、POD 展開係数の計算で用いる係数行列 $\hat{\mathbf{A}}_g$, $\hat{\mathbf{F}}_{g' \rightarrow g}$, $\hat{\mathbf{S}}_{g' \rightarrow g}$ が得られる。

$$\hat{\mathbf{A}}_g = \mathbf{U}_g^T \mathbf{A}_g \mathbf{U}_g \quad (4.2)$$

$$\hat{\mathbf{F}}_{g' \rightarrow g} = \mathbf{U}_g^T \mathbf{F}_{g' \rightarrow g} \mathbf{U}_{g'} \quad (4.3)$$

$$\hat{\mathbf{S}}_{g' \rightarrow g} = \mathbf{U}_g^T \mathbf{S}_{g' \rightarrow g} \mathbf{U}_{g'} \quad (4.4)$$

得られた係数行列 $\hat{\mathbf{A}}_g$, $\hat{\mathbf{F}}_{g' \rightarrow g}$, $\hat{\mathbf{S}}_{g' \rightarrow g}$ に基づいて、local 計算の内部反復は LU 分解、外部反復はべき乗法を用いて次式の POD 展開係数 \vec{h}_g に関する方程式を解く。

$$\hat{\mathbf{A}}_g \vec{h}_g = \frac{1}{k_{\text{eff}}} \sum_{g'=1}^{NG} \hat{\mathbf{F}}_{g' \rightarrow g} \vec{h}_{g'} + \sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq g}}^{NG} \hat{\mathbf{S}}_{g' \rightarrow g} \vec{h}_{g'} \quad (4.5)$$

上式において、 k_{eff} は実効増倍率である。べき乗法の反復過程で、 k_{eff} は次式より更新する。

$$k_{\text{eff}} = \sum_{g=1}^{NG} \sum_{g'=1}^{NG} \text{sum}(\hat{\mathbf{F}}_{g' \rightarrow g} \vec{h}_{g'}) \quad (4.6)$$

上式中の $\text{sum}(\vec{a})$ は、ベクトル \vec{a} の全要素の総和を意味する。以下で(4.6)式を変形し、右辺の意味を説明する。まず、(4.6)式の $\hat{\mathbf{F}}_{g' \rightarrow g}$ に(4.3)式を代入することで、次式が得られる。

$$\begin{aligned} k_{\text{eff}} &= \sum_{g=1}^{NG} \sum_{g'=1}^{NG} \text{sum}(\mathbf{U}_g^T \mathbf{F}_{g' \rightarrow g} \mathbf{U}_{g'} \vec{h}_{g'}) \\ &= \sum_{g=1}^{NG} \sum_{g'=1}^{NG} \text{sum}(\mathbf{U}_g^T \mathbf{F}_{g' \rightarrow g} \mathbf{U}_{g'} \vec{h}_{g'}) \\ &= \sum_{g=1}^{NG} \sum_{g'=1}^{NG} \text{sum}(\mathbf{U}_g^T \mathbf{F}_{g' \rightarrow g} \vec{\phi}_{g'}) \end{aligned} \quad (4.7)$$

(4.7)式の最後の式変形では、全中性子束分布 $\vec{\phi}_g$ と POD 展開係数 \vec{h}_g の関係式(4.8)式を用いた。

$$\vec{\phi}_g = \mathbf{U}_g \vec{h}_g \quad (4.8)$$

また、 $\sum_{g'=1}^{NG} \mathbf{F}_{g' \rightarrow g} \vec{\phi}_{g'}$ は、核分裂源ベクトル \vec{P}_g であるため、(4.6)式は次式のように記述できる。

$$k_{\text{eff}} = \sum_{g=1}^{NG} \text{sum}(\mathbf{U}_g^T \vec{P}_g) \quad (4.9)$$

以上より、本研究では、実効増倍率 k_{eff} は、核分裂源ベクトルを全中性子束の POD 基底で展開して得られる展開係数の総和として計算することになっている。

4.2.2 空間均質化および不連続因子評価

本項では、local 計算結果に基づく空間均質化および不連続因子評価について説明する。

● 空間均質化

local 体系の詳細メッシュを 1 集合体 1 メッシュとして均質化する。各メッシュの均質化された全断面積、核分裂スペクトル、核分裂断面積、散乱断面積、拡散係数は全中性子束を用いてそれぞれ(4.10)式–(4.14)式のように記述される。

$$\Sigma_{t,g,I,J}^G = \frac{\sum_{(i,j) \in L_{I,J}} \Sigma_{t,g,i,j}^L \phi_{g,i,j}^L \Delta x_i^L \Delta y_j^L}{\sum_{(i,j) \in L_{I,J}} \phi_{g,i,j}^L \Delta x_i^L \Delta y_j^L} \quad (4.10)$$

$$\chi_{g,I,J}^G = \frac{\sum_{(i,j) \in L_{I,J}} \chi_{g,i,j}^L \sum_{g'} \nu \Sigma_{f,g',i,j}^L \phi_{g',i,j}^L \Delta x_i^L \Delta y_j^L}{\sum_{(i,j) \in L_{I,J}} \sum_{g'} \nu \Sigma_{f,g',i,j}^L \phi_{g',i,j}^L \Delta x_i^L \Delta y_j^L} \quad (4.11)$$

$$\nu \Sigma_{f,g,I,J}^G = \frac{\sum_{(i,j) \in L_{I,J}} \nu \Sigma_{f,g,i,j}^L \phi_{g,i,j}^L \Delta x_i^L \Delta y_j^L}{\sum_{(i,j) \in L_{I,J}} \phi_{g,i,j}^L \Delta x_i^L \Delta y_j^L} \quad (4.12)$$

$$\Sigma_{s,g' \rightarrow g,I,J}^G = \frac{\sum_{(i,j) \in L_{I,J}} \Sigma_{s,g' \rightarrow g,i,j}^L \phi_{g',i,j}^L \Delta x_i^L \Delta y_j^L}{\sum_{(i,j) \in L_{I,J}} \phi_{g',i,j}^L \Delta x_i^L \Delta y_j^L} \quad (4.13)$$

$$D_{g,I,J}^G = \frac{\sum_{(i,j) \in L_{I,J}} D_{g,i,j}^L \phi_{g,i,j}^L \Delta x_i^L \Delta y_j^L}{\sum_{(i,j) \in L_{I,J}} \phi_{g,i,j}^L \Delta x_i^L \Delta y_j^L} \quad (4.14)$$

上式中の各変数の意味は以下のとおりである。

上添え字 L : local 体系の量

上添え字 G : global 体系の量

$\sum_{(i,j) \in L_{I,J}}$: (I,J) 番目の local 体系内の空間メッシュの総和

$\phi_{g,i,j}$: (i,j) 番目のメッシュ、エネルギー g 群の全中性子束

Δx_i : x 方向の i 番目メッシュにおける x 方向メッシュ長さ

Δy_j : y 方向の j 番目メッシュにおける y 方向メッシュ長さ
 $\Sigma_{t,g,i,j}$: (i,j) 番目のメッシュ、エネルギー g 群の全断面積
 $\chi_{g,i,j}$: (i,j) 番目のメッシュ、エネルギー g 群の核分裂スペクトル
 $\nu\Sigma_{f,g,i,j}$: (i,j) 番目のメッシュ、エネルギー g 群の核分裂断面積
 $\Sigma_{s,g'\rightarrow g,i,j}$: (i,j) 番目のメッシュ、エネルギー $g' \rightarrow g$ への散乱断面積
 $D_{g,i,j}$: (i,j) 番目のメッシュ、エネルギー g の拡散係数

本手法では、local 計算において、中性子束空間分布は r 本の POD 基底により展開される。
 例えば、均質化全断面積(4.10)式は、POD 基底および POD 展開係数を用いて(4.15)式のよう
 に記述できる。

$$\Sigma_{t,g,I,J}^G = \frac{\sum_{(i,j) \in L_{I,J}} \Sigma_{t,g,i,j}^L (\sum_{b=1}^r u_{b,g,i,j}^L h_{b,g,I,J}^L) \Delta x_i^L \Delta y_j^L}{\sum_{(i,j) \in L_{I,J}} (\sum_{b=1}^r u_{b,g,i,j}^L h_{b,g,I,J}^L) \Delta x_i^L \Delta y_j^L} \quad (4.15)$$

上式中の変数の意味は以下のとおりである。

$u_{b,g,i,j}$: (i,j) 番目メッシュのエネルギー g 群、 b 次の POD 基底
 $h_{b,g,I,J}$: (I,J) 番目 local 体系におけるエネルギー g 群、 b 次の POD 展開係数

上式を整理することで、次式のように変形できる。

$$\begin{aligned} \Sigma_{t,g,I,J}^G &= \frac{\sum_{b=1}^r \left(\sum_{(i,j) \in L_{I,J}} \Sigma_{t,g,i,j}^L u_{b,g,i,j}^L \Delta x_i^L \Delta y_j^L \right) h_{b,g,I,J}^L}{\sum_{b=1}^r \left(\sum_{(i,j) \in L_{I,J}} u_{b,g,i,j}^L \Delta x_i^L \Delta y_j^L \right) h_{b,g,I,J}^L} \\ &= \frac{\sum_{b=1}^r \tilde{\Sigma}_{t,b,g,I,J} h_{b,g,I,J}^L}{\sum_{b=1}^r \tilde{u}_{b,g,I,J} h_{b,g,I,J}^L} \end{aligned} \quad (4.16)$$

ただし、 $\tilde{\Sigma}_{t,b,g,I,J}$ および $\tilde{u}_{b,g,I,J}$ はそれぞれ(4.17)式および(4.18)式で定義される。

$$\tilde{\Sigma}_{t,b,g,I,J} = \sum_{(i,j) \in L_{I,J}} \Sigma_{t,g,i,j}^L u_{b,g,i,j}^L \Delta x_i^L \Delta y_j^L \quad (4.17)$$

$$\tilde{u}_{b,g,I,J} = \sum_{(i,j) \in L_{I,J}} u_{b,g,i,j}^L \Delta x_i^L \Delta y_j^L \quad (4.18)$$

上式の右辺は、全断面積、POD 基底、メッシュ幅のみといった、local/global 反復過程で変
 化しない量から構成される。したがって、次数 b の POD 基底を重みとした重み付き体積平
 均全断面積 $\tilde{\Sigma}_{t,b,g,I,J}$ および $\tilde{u}_{b,g,I,J}$ を事前に評価しておくことで、各 local 計算で得られた POD
 展開係数 $h_{b,g,I,J}^L$ を用いて、(4.16)式に基づき、陽に全中性子束を再構成することなく、均質化
 全断面積を評価できる。

核分裂スペクトル、核分裂断面積散乱断面積、拡散係数についても同様の式変形を実施し、

得られた(4.19)式–(4.22)式より、各均質化量を計算する。

$$\chi_{g,I,J}^G = \frac{\sum_{b=1}^r \tilde{\chi}_{b,g,I,J} h_{b,g,I,J}^L}{\sum_{b=1}^r \sum_{g'} \tilde{v}_{\Sigma_{f,b,g',I,J}} h_{b,g',I,J}^L} \quad (4.19)$$

$$v_{\Sigma_{f,g,I,J}}^G = \frac{\sum_{b=1}^r \tilde{v}_{\Sigma_{f,b,g,I,J}} h_{b,g,I,J}^L}{\sum_{b=1}^r \tilde{u}_{b,g,I,J} h_{b,g,I,J}^L} \quad (4.20)$$

$$\Sigma_{s,g' \rightarrow g,I,J}^G = \frac{\sum_{b=1}^r \tilde{\Sigma}_{s,b,g' \rightarrow g,I,J} h_{b,g',I,J}^L}{\sum_{b=1}^r \tilde{u}_{b,g',I,J} h_{b,g',I,J}^L} \quad (4.21)$$

$$D_{g,I,J}^G = \frac{\sum_{b=1}^r \tilde{D}_{b,g,I,J} h_{b,g,I,J}^L}{\sum_{b=1}^r \tilde{u}_{b,g,I,J} h_{b,g,I,J}^L} \quad (4.22)$$

ただし、 $\tilde{\chi}_{b,g,I,J}$ および $\tilde{v}_{\Sigma_{f,b,g,I,J}}$ 、 $\tilde{\Sigma}_{s,b,g' \rightarrow g,I,J}$ 、 $\tilde{D}_{b,g,I,J}$ はそれぞれ(4.23)式–(4.26)式で定義される。

$$\tilde{\chi}_{b,g,I,J} = \sum_{(i,j) \in L_{I,J}} \chi_{g,i,j}^L \sum_{g'} v_{\Sigma_{f,g',i,j}}^L u_{b,g',i,j}^L \Delta x_i^L \Delta y_j^L \quad (4.23)$$

$$\tilde{v}_{\Sigma_{f,b,g,I,J}} = \sum_{(i,j) \in L_{I,J}} v_{\Sigma_{f,g,i,j}}^L u_{b,g,i,j}^L \Delta x_i^L \Delta y_j^L \quad (4.24)$$

$$\tilde{\Sigma}_{s,b,g' \rightarrow g,I,J} = \sum_{(i,j) \in L_{I,J}} \Sigma_{s,g' \rightarrow g,i,j}^L u_{b,g',i,j}^L \Delta x_i^L \Delta y_j^L \quad (4.25)$$

$$\tilde{D}_{b,g,I,J} = \sum_{(i,j) \in L_{I,J}} D_{g,i,j}^L u_{b,g,i,j}^L \Delta x_i^L \Delta y_j^L \quad (4.26)$$

(4.10)式–(4.13)式に示した均質化断面積は空間均質化の前後で各反応率が保存されるよう、求めている。しかし、(4.14)式に示した均質化拡散係数を用いた場合、有限差分近似に起因する誤差と相まって、均質化前後で正味の中性子流が保存されないため、均質化誤差が生じる。したがって、均質化誤差を低減するために、体系均質化の前後で正味の中性子流が保存できるような補正量が必要となる。本手法では、各方向の正味の中性子流を補正するために、不連続因子[11],[12]を用いる。例えば、 x 方向の中性子流を補正する不連続因子は次式で定義される。

$$f_{g,I,J}^{x-/x+} = \frac{\bar{\Phi}_{s,g,I,J}^{L,x-/x+}}{\bar{\Phi}_{s,g,I,J}^{G,x-/x+}} \quad (4.27)$$

上式中の変数の意味は以下のとおりである。

$f_{g,I,J}^{x-/x+}$: (I,J) 番目集合体体系の x 負/正方向境界面における不連続因子

$\bar{\Phi}_{s,g,I,J}^{G,x-/x+}$: global 体系の (I,J) 番目メッシュの x 負/正方向境界面におけるエネルギー g 群の表面中性子束

$\bar{\phi}_{s,g,I,J}^{L,x-/x+}$ は、local 計算より得られた x 負/正方向境界面における表面中性子束の面平均値であり、次式で定義される。

$$\bar{\phi}_{s,g,I,J}^{L,x-/x+} = \frac{\sum_{j \in LS_{I,J}^{x-/x+}} \phi_{s,g,i,j}^{L,x-/x+} \Delta y_j^L}{\sum_{j \in LS_{I,J}^{x-/x+}} \Delta y_j^L} \quad (4.28)$$

ただし、 $\sum_{j \in LS_{I,J}^{x-/x+}}$ は (I,J) 番目の local 体系の x 正/負方向境界面に接するメッシュの総和を意味する。 y 方向の中性子流を補正する不連続因子 $f_{g,I,J}^{y-/y+}$ も同様に次式で定義される。

$$f_{g,I,J}^{y-/y+} = \frac{\bar{\phi}_{s,g,I,J}^{L,y-/y+}}{\bar{\phi}_{s,g,I,J}^{G,y-/y+}} \quad (4.29)$$

ただし、 $\bar{\phi}_{s,g,I,J}^{L,y-/y+}$ は次式で定義される。

$$\bar{\phi}_{s,g,I,J}^{L,y-/y+} = \frac{\sum_{i \in LS_{I,J}^{y-/y+}} \phi_{s,g,i,j}^{L,y-/y+} \Delta x_i^L}{\sum_{i \in LS_{I,J}^{y-/y+}} \Delta x_i^L} \quad (4.30)$$

不連続因子、すなわち $\bar{\phi}_s^L$ および $\bar{\phi}_s^G$ 計算手順は、次項で説明する。不連続因子を用いることで流れを保存するように 5 つの消滅係数 $A_{g,I,J}^0$ 、 $A_{g,I,J}^{x-/x+}$ 、 $A_{g,I,J}^{y-/y+}$ を求めることができる。不連続因子を適用した場合の消滅係数の具体的な計算手順は 4.2.3 項で説明する。

● 不連続因子

(4.27)式および(4.29)式で定義したように、不連続因子は local 計算と global 計算で得られる 2 つの表面中性子束の比から求めることができる量である。しかし、local/global 反復計算では、local 計算で得られる量のみを用いて不連続因子を計算しなければならない。すなわち、不連続因子を求めるためには、local 計算における単一集合体境界面での表面中性子束と正味の中性子流を、まず求める必要がある。以下では、LG 反復過程における不連続因子の計算手順の一例として、 (I,J) 番目の local 体系の x 負/正方向境界面を考える。Fig. 4.3 のように、 (I,J) 番目の local 体系の x 負/正方向境界面に接するメッシュの x 方向メッシュ番号を i_-/i_+ とし、 $(i_-/i_+,j)$ 番目メッシュにおける local 計算の表面中性子束と正味の中性子流をそれぞれ $\phi_{s,g,i_-/i_+,j}^L$ および $J_{g,i_-/i_+,j}^L$ と表記する。本手法では、local 計算は単一燃料集合体の計算であるため、単一燃料集合体体系の境界条件を考えることにより $\phi_{s,g,i_-/i_+,j}^L$ および $J_{g,i_-/i_+,j}^L$ を計算することができる。local 計算では、各集合体体系の境界条件がアルベド境界条件で与えられる。この場合、 x 負/正方向境界面における表面中性子束 $\phi_{s,g,i_-/i_+,j}^L$ と正味の中性子流 $J_{g,i_-/i_+,j}^L$ はアルベド値を用いて、それぞれ(4.31)式および(4.32)式から計算できる。

$$\phi_{s,g,i_-/i_+,j}^L = \frac{4(1 + \alpha_{g,i_-/i_+,j}^L) D_{g,i_-/i_+,j}^L}{4(1 + \alpha_{g,i_-/i_+,j}^L) D_{g,i_-/i_+,j}^L + (1 - \alpha_{g,i_-/i_+,j}^L) \Delta x_{i_-/i_+}^L} \phi_{g,i_-/i_+,j}^L \quad (4.31)$$

$$J_{g,i_-/i_+,j}^L = \pm \frac{2(1 - \alpha_{g,i_-/i_+,j}^L) D_{g,i_-/i_+,j}^L}{4(1 + \alpha_{g,i_-/i_+,j}^L) D_{g,i_-/i_+,j}^L + (1 - \alpha_{g,i_-/i_+,j}^L) \Delta x_{i_-/i_+}^L} \phi_{g,i_-/i_+,j}^L \quad (4.32)$$

$\alpha_{g,i_-/i_+,j}^L$ は $(i_-/i_+,j)$ メッシュにおけるエネルギー g 群アルベド値を意味する。

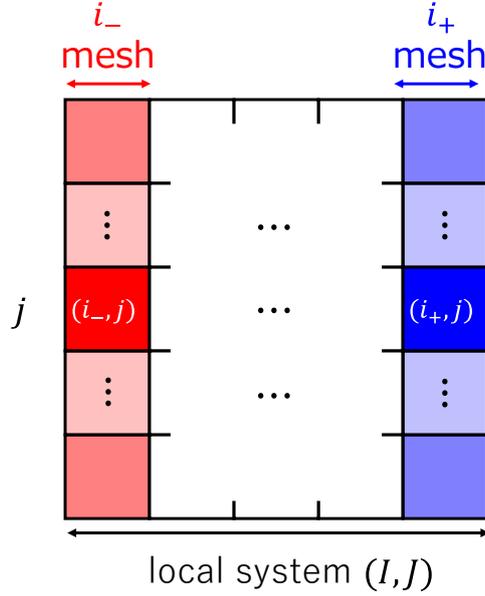


Fig. 4.3 $(i_-/i_+,j)$ 番目のメッシュ位置

(4.31)式および(4.32)式は POD 基底と POD 展開係数を用いて、それぞれ(4.33)式および(4.34)式のように記述できる。

$$\phi_{s,g,i_-/i_+,j}^L = \frac{4(1 + \alpha_{g,i_-/i_+,j}^L) D_{g,i_-/i_+,j}^L}{4(1 + \alpha_{g,i_-/i_+,j}^L) D_{g,i_-/i_+,j}^L + (1 - \alpha_{g,i_-/i_+,j}^L) \Delta x_{i_-/i_+}^L} \sum_{b=1}^r u_{b,g,i_-/i_+,j}^L h_{b,g,I,J}^L \quad (4.33)$$

$$J_{g,i_-/i_+,j}^L = \mp \frac{2(1 - \alpha_{g,i_-/i_+,j}^L) D_{g,i_-/i_+,j}^L}{4(1 + \alpha_{g,i_-/i_+,j}^L) D_{g,i_-/i_+,j}^L + (1 - \alpha_{g,i_-/i_+,j}^L) \Delta x_{i_-/i_+}^L} \sum_{b=1}^r u_{b,g,i_-/i_+,j}^L h_{b,g,I,J}^L \quad (4.34)$$

不連続因子を求めるためには、 $\phi_{s,g,i_-/i_+,j}^L$ および $J_{g,i_-/i_+,j}^L$ の面平均値が必要となる。面平均表面中性子束 $\bar{\phi}_{s,g,I,J}^{L,x-/x+}$ は、(4.28)式から計算できる。同様に、面平均の正味の中性子流 $\bar{J}_{g,I,J}^{L,x-/x+}$ は、次式から計算できる。

$$\bar{J}_{g,I,J}^{L,x-/x+} = \frac{\sum_{j \in LS_{I,J}^{x-/x+}} J_{g,i_-/i_+,j}^L \Delta y_j^L}{\sum_{j \in LS_{I,J}^{x-/x+}} \Delta y_j^L} \quad (4.35)$$

次に、不連続因子を求めるために、global 計算における (I, J) 番目の単一集合体の x 負/正方向の境界面での表面中性子束に相当する量 $\bar{\phi}_{s,g,I,J}^{G,x-/x+}$ を、local 計算より得られる数値解に基づいて求める。そのために、次式に示したような集合体境界面における「global 計算の正味の

中性子流 $\bar{J}_{g,I,J}^{G,x-/x+}$ と「local 計算の正味の中性子流の面平均値 $\bar{J}_{g,I,J}^{L,x-/x+}$ 」が等しいという条件を与える。

$$\bar{J}_{g,I,J}^{G,x-/x+} = \bar{J}_{g,I,J}^{L,x-/x+} \quad (4.36)$$

本条件は、均質化前後で正味の中性子流を保存するために与えられる。不連続因子を用いた拡散計算については、次項で詳しく説明する。ここで、 $\bar{J}_{g,I,J}^{G,x-/x+}$ は $\bar{\phi}_{s,g,I,J}^{G,x-/x+}$ を用いて、次式のように表現できる。

$$\bar{J}_{g,I,J}^{G,x-/x+} = \pm D_{g,I,J}^G \frac{\bar{\phi}_{s,g,I,J}^{G,x-/x+} - \bar{\phi}_{g,I,J}^G}{\Delta x_I^G / 2} \quad (4.37)$$

(4.36)式を考慮して、上式を変形することで、次式が得られる。

$$\bar{\phi}_{s,g,I,J}^{G,x-/x+} = \bar{\phi}_{g,I,J}^G \pm \frac{\Delta x_I^G}{2D_{g,I,J}^G} \bar{J}_{g,I,J}^{L,x-/x+} \quad (4.38)$$

x_I^G は (I,J) 番目 local 体系の x 方向メッシュ長さである。また、 $D_{g,I,J}^G$ は(4.26)式から計算できる。したがって、 $\bar{\phi}_{s,g,I,J}^{G,x-/x+}$ を local 計算結果から求めるためには、 $\bar{\phi}_{g,I,J}^G$ を local 計算の全中性子束に基づいて評価する必要がある。global 計算では、1 メッシュは単一集合体に対応する。そこで、 $\bar{\phi}_{g,I,J}^G$ として local 計算より得られる集合体内の代表値を与えることとする。すなわち、次式のような単一集合体の体積平均をとった量 $\bar{\phi}_{g,I,J}^L$ を与える[12]。

$$\bar{\phi}_{g,I,J}^L = \frac{\sum_{(i,j) \in L_{I,J}} \phi_{g,i,j}^L \Delta x_i^L \Delta y_j^L}{S_{I,J}} \quad (4.39)$$

ただし、 $S_{I,J}$ は (I,J) 番目のメッシュの面積である。上式は、(4.18)式で定義した $\tilde{u}_{b,g,I,J}$ を用いて、次式のように記述できる。

$$\bar{\phi}_{g,I,J}^L = \frac{\sum_{b=1}^r \tilde{u}_{b,g,I,J} h_{b,g,I,J}}{S_{I,J}} \quad (4.40)$$

(4.38)式の $\bar{\phi}_{g,I,J}^G$ を上式より求めた $\bar{\phi}_{g,I,J}^L$ に置き換えると、 $\bar{\phi}_{s,g,I,J}^{G,x-/x+}$ は local 計算結果のみを用いて、次式により求めることができる。

$$\bar{\phi}_{s,g,I,J}^{G,x-/x+} = \bar{\phi}_{g,I,J}^L \mp \frac{\Delta x_I^G}{2D_{g,I,J}^G} \bar{J}_{g,I,J}^{L,x-/x+} \quad (4.41)$$

上式では、 $\bar{\phi}_{s,g,I,J}^{G,x-/x+}$ は local 計算で得られる数値解のみを用いて評価するため、次項で説明する global 計算より求められる値とは、その値が異なっている点に留意されたい。最終的に、global 計算で用いる不連続因子は、以上で求めた $\phi_{s,g,i,j}^{L,x-/x+}$ と $\phi_{s,g,i,j}^{G,x-/x+}$ の比として、次式から計算できる。

$$f_{g,I,J}^{x-/x+} = \frac{\bar{\phi}_{s,g,I,J}^{L,x-/x+}}{\bar{\phi}_{g,I,J}^L \mp \frac{\Delta x_I^G}{2D_{g,I,J}^G} \bar{J}_{g,I,J}^{L,x-/x+}} \quad (4.42)$$

同様に考えて、 y 方向の不連続因子 $f_{g,I,J}^{y-/y+}$ は次式から計算できる。

$$f_{g,I,J}^{y-/y+} = \frac{\bar{\phi}_{s,g,I,J}^{L,y-/y+}}{\bar{\phi}_{g,I,J}^L \mp \frac{\Delta y_J^G}{2D_{g,I,J}^G} \bar{J}_{g,I,J}^{L,y-/y+}} \quad (4.43)$$

4.2.3 不連続因子を用いた global 計算

本項では、不連続因子を用いた粗メッシュ拡散計算について説明する。

まず、 (I,J) 番目と $(I+1,J)$ 番目の集合体間の境界面を考える。前項で説明したように、local 計算で求めた POD 展開係数に基づいて、各 local 体系で均質化した断面積を求めることができる。しかし、均質化された断面積のみを用いた粗メッシュ計算では、正味の中性子流が保存されないため、詳細メッシュ計算の結果を精度よく再現できない。そこで、粗メッシュ計算において正味の中性子流を保存するために、各境界面で「local 計算より得られる正味の中性子流の面平均値」と「global 計算より得られる正味の中性子流」が保存される、すなわち境界面で次式が成り立つとする。

$$\bar{J}_{g,I,J}^{G,x+} = \bar{J}_{g,I,J}^{L,x+}, \quad \bar{J}_{g,I+1,J}^{G,x-} = \bar{J}_{g,I+1,J}^{L,x-} \quad (4.44)$$

通常の拡散計算では、(4.45)式と(4.46)式のように、領域表面で表面中性子束と正味の中性子流が連続であることを仮定し、消滅係数 $A_{g,I,J}^{x-/x+}$ を求める。

$$\phi_{s,g,i,j}^{x+} = \phi_{s,g,i+1,j}^{x-} \quad (4.45)$$

$$J_{g,i,j}^{x+} = J_{g,i+1,j}^{x-} \quad (4.46)$$

上式のように、メッシュ間の境界面において表面中性子束および正味の中性子流に何らかの関係が与えられなければ、消滅係数を求めることはできない。

local 計算では、(4.45)式と(4.46)式に基づいて、消滅係数を計算した。local 計算において、(4.45)式と(4.46)式が成り立つとき、 $\phi_{s,g,i,j}^{x+/x-}$ および $J_{g,i,j}^{net,x+/x-}$ の面平均値もまた、境界面で連続となる、すなわち(4.47)式および(4.48)式が成り立つ。

$$\bar{\phi}_{s,g,I,J}^{L,x+} = \bar{\phi}_{s,g,I+1,J}^{L,x-} \quad (4.47)$$

$$\bar{J}_{g,I,J}^{L,x+} = \bar{J}_{g,I+1,J}^{L,x-} \quad (4.48)$$

(4.48)式と global 計算および local 計算より得られる正味の中性子流の関係式(4.44)式を合わせて考えると、global 計算においても正味の中性子流の連続条件が成り立つ。この時、さらに global 計算において表面中性子束の連続条件を与えると、global 計算が「均質化された断面積のみを用いた粗メッシュ拡散計算」と等価となり、正味の中性子流を保存できない。そこで、local 計算における表面中性子束の面平均値に関する連続条件(4.47)式を global 計算の量を用いて表すことで、表面中性子束に関する条件を与えることとする。すなわち、(4.49)式および(4.50)式が成り立つとする。

$$f_{g,I,J}^{x+} \bar{\Phi}_{s,g,I,J}^{G,x+} = f_{g,I+1,J}^{x-} \bar{\Phi}_{s,g,I+1,J}^{G,x-} \quad (4.49)$$

$$\bar{J}_{g,I,J}^{G,x+} = \bar{J}_{g,I+1,J}^{G,x-} \quad (4.50)$$

(4.49)式は不連続因子の定義(4.27)式を代入すると、(4.47)式と一致する。(4.49)式において、一般に $f_{g,I,J}^{x+} \neq f_{g,I+1,J}^{x-}$ である。したがって、(4.49)式は global 計算において境界面で表面中性子束の不連続性を仮定する条件である。以上より、均質化前後で正味の中性子流が保存されるよう、メッシュ境界面での表面中性子束および正味の中性子流が満たすべき条件を与えることができた。

以下で、条件(4.49)式および(4.50)式を与えた場合の消滅係数 $A_{g,I,J}^{x-/x+}$ を求める。そのために、正味の中性子流 $\bar{J}_{g,I,J}^{G,x+} = \bar{J}_{g,I+1,J}^{G,x-}$ を全中性子束 $\bar{\Phi}_{g,I,J}^G$ で表現する。全中性子束の空間に関する微分項の差分化と(4.50)式を考えると、正味の中性子流は次式のように記述できる。

$$\bar{J}_{g,I,J}^{G,x+} = -D_{g,I,J}^G \frac{\bar{\Phi}_{s,g,I,J}^{G,x+} - \bar{\Phi}_{g,I,J}^G}{\Delta x_I^G} = -D_{g,I+1,J}^G \frac{\bar{\Phi}_{g,I+1,J}^G - \bar{\Phi}_{s,g,I+1,J}^{G,x-}}{\Delta x_{I+1}^G} = \bar{J}_{g,I+1,J}^{G,x-} \quad (4.51)$$

(4.49)式を用いて、上式から $\bar{\Phi}_{s,g,I+1,J}^{G,x-}$ を消去した後、 $\bar{\Phi}_{s,g,I,J}^{G,x+}$ について解くことで、次式が得られる。

$$\bar{\Phi}_{s,g,I,J}^{G,x+} = f_{g,I+1,J}^{x-} \frac{D_{g,I,J}^G \Delta x_{I+1}^G \bar{\Phi}_{g,I,J}^G + D_{g,I+1,J}^G \Delta x_I^G \bar{\Phi}_{g,I+1,J}^G}{f_{g,I+1,J}^{x-} D_{g,I,J}^G \Delta x_{I+1}^G + f_{g,I,J}^{x+} D_{g,I+1,J}^G \Delta x_I^G} \quad (4.52)$$

上式を(4.49)式に代入することで、次式が得られる。

$$\bar{\Phi}_{s,g,I+1,J}^{G,x-} = f_{g,I,J}^{x+} \frac{D_{g,I,J}^G \Delta x_{I+1}^G \bar{\Phi}_{g,I,J}^G + D_{g,I+1,J}^G \Delta x_I^G \bar{\Phi}_{g,I+1,J}^G}{f_{g,I+1,J}^{x-} D_{g,I,J}^G \Delta x_{I+1}^G + f_{g,I,J}^{x+} D_{g,I+1,J}^G \Delta x_I^G} \quad (4.53)$$

(4.52)式を(4.51)式に代入することで、正味の中性子流 $\bar{J}_{g,I,J}^{G,x+} = \bar{J}_{g,I+1,J}^{G,x-}$ に関する次式が得られる。

$$\bar{J}_{g,I,J}^{G,x+} = \bar{J}_{g,I+1,J}^{G,x-} = -\frac{2D_{g,I,J}^G D_{g,I+1,J}^G (f_{g,I+1,J}^{x-} \bar{\Phi}_{g,I+1,J}^G - f_{g,I,J}^{x+} \bar{\Phi}_{g,I,J}^G)}{f_{g,I+1,J}^{x-} D_{g,I,J}^G \Delta x_{I+1}^G + f_{g,I,J}^{x+} D_{g,I+1,J}^G \Delta x_I^G} \quad (4.54)$$

以上より、global 体系の粗メッシュ間の境界面における正味の中性子流を、不連続因子と粗メッシュの全中性子束を用いて表現することができた。

次に、global 体系の外部境界面における正味の中性子流について考える。本項では、境界条件として、アルベド境界条件を与えた場合を対象とする。(I,J)番目メッシュのx負/正方向の境界が外部境界である場合、global 計算におけるアルベド境界条件は次式で記述できる。

$$\bar{J}_{g,I,J}^{in,G,x-/x+} = \bar{\alpha}_{g,I,J}^{G,x-/x+} \bar{J}_{g,I,J}^{out,G,x-/x+} \quad (4.55)$$

上式中の変数の意味は以下の通りである。

$\bar{J}_{g,I,J}^{in,G,x-/x+}$: (I,J)番目メッシュのx負/正方向外部境界面におけるエネルギーg群流入部分中性子流

$\bar{J}_{g,I,J}^{out,G,x-/x+}$: (I,J)番目メッシュのx負/正方向外部境界面におけるエネルギーg群流出部分中性子流

$\bar{\alpha}_{g,I,J}^{G,x-/x+}$: (I,J)番目メッシュのx負/正方向外部境界面におけるエネルギーg群アルベド値

詳細メッシュ計算を再現するような粗メッシュ計算を行うには、外部境界面で「local 計算の正味の中性子流の面平均値」と「global 計算の正味の中性子流」が保存されるようにしなければならない。この条件が成立するためには、次式が成り立てばよい。

$$\bar{J}_{g,I,J}^{in,G,x-/x+} = \bar{J}_{g,I,J}^{in,L,x-/x+}, \quad \bar{J}_{g,I,J}^{out,G,x-/x+} = \bar{J}_{g,I,J}^{out,L,x-/x+} \quad (4.56)$$

上式が成り立つとき、アルベド境界条件は次式のように記述できる。

$$\bar{J}_{g,I,J}^{in,L,x-/x+} = \bar{\alpha}_{g,I,J}^{G,x-/x+} \bar{J}_{g,I,J}^{out,L,x-/x+} \quad (4.57)$$

2.2.4 項で説明したように、 $\bar{J}_{g,I,J}^{in,L,x-/x+}$ および $\bar{J}_{g,I,J}^{out,L,x-/x+}$ は表面中性子束の面平均値 $\bar{\phi}_{s,g,I,J}^{L,x-/x+}$ および正味の中性子流の面平均値 $\bar{J}_{g,I,J}^{L,x-/x+}$ を用いてそれぞれ(4.58)式および(4.59)式で記述できる。

$$\bar{J}_{g,I,J}^{in,L,x-/x+} = \frac{1}{4} \bar{\phi}_{s,g,I,J}^{L,x-/x+} \pm \frac{1}{2} \bar{J}_{g,I,J}^{L,x-/x+} \quad (4.58)$$

$$\bar{J}_{g,I,J}^{out,L,x-/x+} = \frac{1}{4} \bar{\phi}_{s,g,I,J}^{L,x-/x+} \mp \frac{1}{2} \bar{J}_{g,I,J}^{L,x-/x+} \quad (4.59)$$

以上の関係を踏まえ、 x 負方向の正味の中性子流を、表面中性子束を用いずに中性子束 $\phi_{g,I,J}^G$ のみを用いて表す。以下では、 (I,J) 番目の粗メッシュにおいて、 x 負方向の境界面が外部境界面であるとする。(4.57)式に(4.58)式および(4.59)式を代入することで、次式が得られる。

$$\frac{1}{4} \bar{\phi}_{s,g,I,J}^{L,x-} + \frac{1}{2} \bar{J}_{g,I,J}^{L,x-} = \bar{\alpha}_{g,I,J}^{G,x-} \left(\frac{1}{4} \bar{\phi}_{s,g,I,J}^{L,x-} - \frac{1}{2} \bar{J}_{g,I,J}^{L,x-} \right) \quad (4.60)$$

不連続因子に関する(4.42)式および(4.43)式より、上式は、global 計算で得られる量を用いて次式で記述できる。

$$\frac{1}{4} f_{g,I,J}^{x-} \bar{\phi}_{s,g,I,J}^{G,x-} + \frac{1}{2} \bar{J}_{g,I,J}^{G,x-} = \bar{\alpha}_{g,I,J}^{G,x-} \left(\frac{1}{4} f_{g,I,J}^{x-} \bar{\phi}_{s,g,I,J}^{G,x-} - \frac{1}{2} \bar{J}_{g,I,J}^{G,x-} \right) \quad (4.61)$$

ここで、正味の中性子流 $\bar{J}_{g,I,J}^{G,x-}$ は、次式より計算できる。

$$\bar{J}_{g,I,J}^{G,x-} = -D_{g,I,J}^G \frac{\bar{\phi}_{g,I,J}^G - \bar{\phi}_{s,g,I,J}^{G,x+}}{\Delta x_I^G} \quad (4.62)$$

上式を(4.61)式に代入し、表面中性子束 $\bar{\phi}_{s,g,I,J}^{G,x-}$ について解くことで、次式が得られる。

$$\bar{\phi}_{s,g,I,J}^{G,x-} = \frac{4(1 + \bar{\alpha}_{g,I,J}^{G,x-}) D_{g,I,J}^G}{4(1 + \bar{\alpha}_{g,I,J}^{G,x-}) D_{g,I,J}^G + f_{g,I,J}^{x-} (1 - \bar{\alpha}_{g,I,J}^{G,x-}) \Delta x_I^G} \bar{\phi}_{g,I,J}^G \quad (4.63)$$

上式を(4.62)式に代入することで、次式が得られる。

$$\bar{J}_{g,I,J}^{G,x-} = -\frac{2f_{g,I,J}^{x-} (1 - \bar{\alpha}_{g,I,J}^{G,x-}) D_{g,I,J}^G}{4(1 + \bar{\alpha}_{g,I,J}^{G,x-}) D_{g,I,J}^G + f_{g,I,J}^{x-} (1 - \bar{\alpha}_{g,I,J}^{G,x-}) \Delta x_I^G} \bar{\phi}_{g,I,J}^G \quad (4.64)$$

x 正方向の外部境界面についても同様にして、次式が得られる。

$$\bar{J}_{g,I,J}^{G,x+} = \frac{2f_{g,I,J}^{x+}(1 - \bar{\alpha}_{g,I,J}^{G,x+})D_{g,I,J}^G}{4(1 + \bar{\alpha}_{g,I,J}^{G,x+})D_{g,I,J}^G + f_{g,I,J}^{x+}(1 - \bar{\alpha}_{g,I,J}^{G,x+})\Delta x_I^G} \bar{\phi}_{g,I,J}^G \quad (4.65)$$

こうして、global 体系の外部境界面の正味の中性子流を、全中性子束 $\bar{\phi}_{g,I,J}^G$ を用いて表現できた。

以上より、不連続因子を適用した場合の消滅係数 $A_{g,I,J}^{x-/x+}$ はそれぞれ(4.66)式および(4.67)式から計算できる。

$$A_{g,I,J}^{x-} = \begin{cases} -\frac{2f_{g,I,J}^{x-}(1 - \bar{\alpha}_{g,I,J}^{G,x-})D_{g,I,J}^G}{\{4(1 + \bar{\alpha}_{g,I,J}^{G,x-})D_{g,I,J}^G + f_{g,I,J}^{x-}(1 - \bar{\alpha}_{g,I,J}^{G,x-})\Delta x_I^G\}\Delta x_I^G} & (O.B.x-) \\ -\frac{2D_{g,I-1,J}^G D_{g,I,J}^G f_{g,I-1,J}^{x+}}{\{f_{g,I,J}^{x-}D_{g,I-1,J}^G \Delta x_I^G + f_{g,I-1,J}^{x+}D_{g,I,J}^G \Delta x_{I-1}^G\}\Delta x_I^G} & (else) \end{cases} \quad (4.66)$$

$$A_{g,I,J}^{x+} = \begin{cases} -\frac{2f_{g,I,J}^{x+}(1 - \bar{\alpha}_{g,I,J}^{G,x+})D_{g,I,J}^G}{\{4(1 + \bar{\alpha}_{g,I,J}^{G,x+})D_{g,I,J}^G + f_{g,I,J}^{x+}(1 - \bar{\alpha}_{g,I,J}^{G,x+})\Delta x_I^G\}\Delta x_I^G} & (O.B.x+) \\ -\frac{2D_{g,I,J}^G D_{g,I+1,J}^G f_{g,I+1,J}^{x-}}{\{f_{g,I+1,J}^{x-}D_{g,I,J}^G \Delta x_{I+1}^G + f_{g,I,J}^{x+}D_{g,I+1,J}^G \Delta x_I^G\}\Delta x_I^G} & (else) \end{cases} \quad (4.67)$$

上式中の $O.B.x-/x+$ は、 (I,J) 番目メッシュの x 負/正方向の境界面が外部境界であることを意味し、 $else$ は、それ以外の空間メッシュを意味する。同様に、 $A_{g,I,J}^{y-/y+}$ はそれぞれ(4.68)式および(4.69)式で計算できる。

$$A_{g,I,J}^{y-} = \begin{cases} -\frac{2f_{g,I,J}^{y-}(1 - \bar{\alpha}_{g,I,J}^{G,y-})D_{g,I,J}^G}{\{4(1 + \bar{\alpha}_{g,I,J}^{G,y-})D_{g,I,J}^G + f_{g,I,J}^{y-}(1 - \bar{\alpha}_{g,I,J}^{G,y-})\Delta y_J^G\}\Delta y_J^G} & (O.B.y-) \\ -\frac{2D_{g,I-1,J}^G D_{g,I,J}^G f_{g,I-1,J}^{y+}}{\{f_{g,I,J}^{y-}D_{g,I-1,J}^G \Delta y_J^G + f_{g,I-1,J}^{y+}D_{g,I,J}^G \Delta y_{J-1}^G\}\Delta y_J^G} & (else) \end{cases} \quad (4.68)$$

$$A_{g,I,J}^{y+} = \begin{cases} -\frac{2f_{g,I,J}^{y+}(1 - \bar{\alpha}_{g,I,J}^{G,y+})D_{g,I,J}^G}{\{4(1 + \bar{\alpha}_{g,I,J}^{G,y+})D_{g,I,J}^G + f_{g,I,J}^{y+}(1 - \bar{\alpha}_{g,I,J}^{G,y+})\Delta y_J^G\}\Delta y_J^G} & (O.B.y+) \\ -\frac{2D_{g,I,J}^G D_{g,I,J+1}^G f_{g,I,J+1}^{y-}}{\{f_{g,I,J+1}^{y-}D_{g,I,J}^G \Delta y_{J+1}^G + f_{g,I,J}^{y+}D_{g,I,J+1}^G \Delta y_J^G\}\Delta y_J^G} & (else) \end{cases} \quad (4.69)$$

また、 $A_{g,I,J}^0$ は次式より計算できる。

$$A_{g,I,J}^0 = \Sigma_{r,g,I,J} - B_{g,I,J}^{x-}A_{g,I,J}^{x-} - B_{g,I,J}^{x+}A_{g,I,J}^{x+} - B_{g,I,J}^{y-}A_{g,I,J}^{y-} - B_{g,I,J}^{y+}A_{g,I,J}^{y+} \quad (4.70)$$

ただし、 $B_{g,I,J}^{x-}, B_{g,I,J}^{x+}, B_{g,I,J}^{y-}, B_{g,I,J}^{y+}$ はそれぞれ(4.71)式-(4.74)式で定義される。

$$B_{g,I,J}^{x-} = \begin{cases} 1.0 & (O.B.x-) \\ \frac{f_{g,I,J}^{x-}}{f_{g,I-1,J}^{x+}} & (else) \end{cases} \quad (4.71)$$

$$B_{g,I,J}^{x+} = \begin{cases} 1.0 & (O.B.x+) \\ \frac{f_{g,I,J}^{x+}}{f_{g,I+1,J}^{x-}} & (else) \end{cases} \quad (4.72)$$

$$B_{g,I,J}^{y-} = \begin{cases} 1.0 & (O.B.y-) \\ \frac{f_{g,I,J}^{y-}}{f_{g,I,J-1}^{y+}} & (else) \end{cases} \quad (4.73)$$

$$B_{g,I,J}^{y+} = \begin{cases} 1.0 & (O.B.y+) \\ \frac{f_{g,I,J}^{y+}}{f_{g,I,J+1}^{y-}} & (else) \end{cases} \quad (4.74)$$

こうして得られた係数行列のもと、global 計算の内部反復は ADI 法[13]、外部反復はべき乗法を用いて拡散方程式を解く。global 計算では、異なる単一集合体間の結合効果を考慮した計算を行う。このため、global 計算より得られる部分中性子流を活用することで、より適切な集合体境界面の面平均アルベド値を推定できる。

4.2.4 rebalance factor による POD 展開係数の規格化

本項では、rebalance factor による POD 展開係数の規格化について説明する。

異なる集合体間の全中性子束分布、すなわち POD 展開係数の相対的高さを決めるために、local/global 反復計算が収束した際の global 計算より得られた粗メッシュ全中性子束を利用する。すなわち、次式のように rebalance factor ($\bar{\phi}_{g,I,J}^G / \bar{\phi}_{g,I,J}^{L,before}$) をかけることで、local 計算で得られた各集合体の POD 展開係数の高さを規格化する。

$$\bar{h}_{g,I,J}^{L,new} = \frac{\bar{\phi}_{g,I,J}^G}{\bar{\phi}_{g,I,J}^{L,before}} \bar{h}_{g,I,J}^{L,before} \quad (4.75)$$

上式中の各変数の意味は以下のとおりである。

$\bar{h}_{g,I,J}^L$: (I,J)番目の集合体におけるエネルギーg群の POD 展開係数ベクトル

上添え字before/new : rebalance factor による規格化前/後の量

4.2.5 NUMA 法による local 体系の境界条件更新

本項では、NUMA 法を用いた local 体系のアルベド境界条件更新手法について述べる。

本章では、LG 反復の local 計算として固有値計算を実施し、各 local 計算の境界条件がアルベド値によって与えられる。この場合、LG 反復計算では、global 計算結果を活用して、local 計算に与える境界条件（アルベド値）を更新する。ただし、global 計算は、体系が均質化された粗メッシュ拡散計算である。このため、global 計算結果から評価可能な量は、集合体間境界面の面平均アルベド値のみである。すなわち、global 計算結果のみから、local 計算で与えるべき、集合体境界面におけるアルベド値空間分布を評価できない。そこで、NUMA 法では、global 計算のみではなく、local 計算結果を組み合わせるアルベド値を計算する。local 計算では、集合体の詳細メッシュ計算を再現する POD 展開係数が得られる。POD 展開

係数と POD 基底を用いることで、集合体境界面の詳細メッシュ全中性子束を再構成できる。したがって、global 計算と rebalance factor により規格化された local 計算の計算結果を組み合わせることで、アルベド値の詳細な空間分布を評価できると考えられる。本項では特に、 x 負/正側境界面を対象とし、 (I,J) 番目集合体と $(I+1,J)$ 番目集合体間の境界面における NUMA 法を用いたアルベド値空間分布評価法を説明する。

● 補正因子を用いた表面中性子束および正味の中性子流評価

アルベド値の空間分布を求めるためには、まず境界面における表面中性子束および正味の中性子流の空間分布を評価する必要がある。通常の拡散計算では、(4.45)式と(4.46)式のように、領域表面で表面中性子束と正味の中性子流が連続であることを仮定する。この時、表面中性子束と正味の中性子流は、全中性子束 $\phi_{g,i,j}$ を用いて、それぞれ(4.76)式および(4.77)式で記述できる。

$$\phi_{s,g,i+1/2,j} = \frac{D_{g,i,j}\Delta x_{i+1}\phi_{g,i,j} + D_{g,i+1,j}\Delta x_i\phi_{g,i+1,j}}{D_{g,i,j}\Delta x_{i+1} + D_{g,i+1,j}\Delta x_i} \quad (4.76)$$

$$J_{g,i+1/2,j} = -\frac{2D_{g,i,j}D_{g,i+1,j}}{D_{g,i,j}\Delta x_{i+1} + D_{g,i+1,j}\Delta x_i}(\phi_{g,i+1,j} - \phi_{g,i,j}) \quad (4.77)$$

しかし、PODLG 反復の収束過程では、表面中性子束および正味の中性子流は集合体境界面で不連続となる。したがって、上式に基づき、 $\phi_{s,g,i+1/2,j}$ および $J_{g,i+1/2,j}$ を評価した場合、計算誤差が大きくなってしまう。このような表面中性子束および正味の中性子流の不連続性に起因する誤差を低減するために、補正因子を導入する。表面中性子束の不連続性を補正する因子として、 $FS_{g,I,J}^{x+}$ および $FS_{g,I+1,J}^{x-}$ をそれぞれ(4.78)式および(4.79)式より評価する。

$$FS_{g,I,J}^{x+} = \frac{f_{g,I,J}^{x+}\bar{\phi}_{s,g,I,J}^{G,x+}}{\bar{\phi}_{s,g,I,J}^{L,x+,new}} \quad (4.78)$$

$$FS_{g,I+1,J}^{x-} = \frac{f_{g,I+1,J}^{x-}\bar{\phi}_{s,g,I+1,J}^{G,x-}}{\bar{\phi}_{s,g,I+1,J}^{L,x-,new}} \quad (4.79)$$

また、正味の中性子流の不連続性を補正する因子として、 $FJ_{g,I,J}^{x+}$ および $FJ_{g,I+1,J}^{x-}$ をそれぞれ(4.80)式および(4.81)式より評価する。

$$FJ_{g,I,J}^{x+} = \frac{\bar{J}_{g,I,J}^{G,x+}}{\bar{J}_{g,I,J}^{L,x+,new}} \quad (4.80)$$

$$FJ_{g,I+1,J}^{x-} = \frac{\bar{J}_{g,I+1,J}^{G,x-}}{\bar{J}_{g,I+1,J}^{L,x-,new}} \quad (4.81)$$

LG 反復計算が収束に向かうほど、(4.78)式–(4.81)式で定義した4つの補正量は、1.0に漸近する。さらに、各補正量は集合体境界面で空間的に一様であり、空間依存性を持たない。定義式(4.78)式–(4.81)式より、 $FS_{g,I,J}$ は、面平均表面中性子束の不連続因子とみなせ、 $FJ_{g,I,J}$ は、面平均正味の中性子流の不連続因子とみなせる。

以下で、これら4つの補正係数を用いて、表面中性子束および正味の中性子流を求める。

まず、 (I, J) 番目の集合体と $(I + 1, J)$ 番目の集合体間の境界面において、前項で説明した不連続因子を用いた表面中性子束の条件(4.49)式と同様に、(4.82)式および(4.83)式が成り立つとする。

$$FS_{g,I,J}^{x+} \phi_{s,g,i,j}^{x+} = FS_{g,I+1,J}^{x-} \phi_{s,g,i+1,j}^{x-} = \phi_{s,g,i+1/2,j} \quad (4.82)$$

$$FJ_{g,I,J}^{x+} J_{g,i,j}^{x+} = FJ_{g,I+1,J}^{x-} J_{g,i+1,j}^{x-} = J_{g,i+1/2,j} \quad (4.83)$$

上式が成り立つとき、集合体境界面で表面中性子束および正味の中性子流の面平均値が global 計算で得られる値と一致するように補正される。ここで、正味の中性子流 $J_{g,i,j}^{x+}$ および $J_{g,i+1,j}^{x-}$ はそれぞれ(4.84)式および(4.85)式のように記述できる。

$$\begin{aligned} J_{g,i,j}^{x+} &= -2D_{g,i,j}^L \frac{\phi_{s,g,i,j}^{x+} - \phi_{g,i,j}^{L,new}}{\Delta x_i^L} \\ &= -2D_{g,i,j}^L \frac{\phi_{s,g,i+1/2,j}/FS_{g,I,J}^{x+} - \phi_{g,i,j}^{L,new}}{\Delta x_i^L} \end{aligned} \quad (4.84)$$

$$\begin{aligned} J_{g,i+1,j}^{x-} &= -2D_{g,i+1,j}^L \frac{\phi_{g,i+1,j}^{L,new} - \phi_{s,g,i+1,j}^{x-}}{\Delta x_{i+1}^L} \\ &= -2D_{g,i+1,j}^L \frac{\phi_{g,i+1,j}^{L,new} - \phi_{s,g,i+1/2,j}/FS_{g,I+1,J}^{x-}}{\Delta x_{i+1}^L} \end{aligned} \quad (4.85)$$

上式を(4.83)式に代入することで、(4.86)式が得られる。

$$\begin{aligned} &-2FJ_{g,I,J}^{x+} D_{g,i,j}^L \frac{\phi_{s,g,i+1/2,j}/FS_{g,I,J}^{x+} - \phi_{g,i,j}^{L,new}}{\Delta x_i^L} \\ &= -2FJ_{g,I+1,J}^{x-} D_{g,i+1,j}^L \frac{\phi_{g,i+1,j}^{L,new} - \phi_{s,g,i+1/2,j}/FS_{g,I+1,J}^{x-}}{\Delta x_{i+1}^L} \end{aligned} \quad (4.86)$$

上式を $\phi_{s,g,i+1/2,j}$ について解くことで、次式が得られる。

$$\phi_{s,g,i+1/2,j} = FS_{g,I,J}^{x+} FS_{g,I+1,J}^{x-} \frac{D_{g,i,j}^{x+} \Delta x_{i+1}^L \phi_{g,i,j}^{L,new} + D_{g,i+1,j}^{x-} \Delta x_i^L \phi_{g,i+1,j}^{L,new}}{FS_{g,I+1,J}^{x-} D_{g,i,j}^{x+} \Delta x_{i+1}^L + FS_{g,I,J}^{x+} D_{g,i+1,j}^{x-} \Delta x_i^L} \quad (4.87)$$

ただし、 $D_{g,i,j}^{x+}$ および $D_{g,i+1,j}^{x-}$ はそれぞれ(4.88)式および(4.89)式で定義される。

$$D_{g,i,j}^{x+} = FJ_{g,I,J}^{x+} D_{g,i,j}^L \quad (4.88)$$

$$D_{g,i+1,j}^{x-} = FJ_{g,I+1,J}^{x-} D_{g,i+1,j}^L \quad (4.89)$$

(4.87)式を(4.84)式に代入して整理することで、次式が得られる。

$$\begin{aligned} J_{g,i+1/2,j} &= -\frac{2D_{g,i,j}^{x+} D_{g,i+1,j}^{x-}}{FS_{g,I+1,J}^{x-} D_{g,i,j}^{x+} \Delta x_{i+1}^L + FS_{g,I,J}^{x+} D_{g,i+1,j}^{x-} \Delta x_i^L} \\ &\quad \times (FS_{g,I+1,J}^{x-} \phi_{g,i,j}^{L,new} - FS_{g,I,J}^{x+} \phi_{g,i+1,j}^{L,new}) \end{aligned} \quad (4.90)$$

- アルベド値評価

(4.87)式および(4.90)式より評価された $\phi_{s,g,i+1/2,j}$ および $J_{g,i+1/2,j}$ を用いて、 (i,j) 番目メッシュの x 正方向境界面における流入部分中性子流 $J_{g,i,j}^{in,x+}$ および $J_{g,i,j}^{out,x+}$ はそれぞれ(4.91)式および(4.92)式より評価できる。

$$J_{g,i,j}^{in,x+} = \frac{1}{4}\phi_{s,g,i+1/2,j} - \frac{1}{2}J_{g,i+1/2,j} \quad (4.91)$$

$$J_{g,i+1/2,j}^{out,x+} = \frac{1}{4}\phi_{s,g,i+1/2,j} + \frac{1}{2}J_{g,i+1/2,j} \quad (4.92)$$

同様に、 $(i+1,j)$ 番目メッシュの x 負方向境界面における流入部分中性子流 $J_{g,i+1,j}^{in,x-}$ および $J_{g,i+1,j}^{out,x-}$ はそれぞれ(4.93)式および(4.94)式より評価できる。

$$J_{g,i+1,j}^{in,x-} = \frac{1}{4}\phi_{s,g,i+1/2,j} + \frac{1}{2}J_{g,i+1/2,j} \quad (4.93)$$

$$J_{g,i+1,j}^{out,x-} = \frac{1}{4}\phi_{s,g,i+1/2,j} - \frac{1}{2}J_{g,i+1/2,j} \quad (4.94)$$

上式は、(4.91)式および(4.92)式と比べて、 $J_{g,i+1/2,j}$ の符号が反転している。

(4.91)式および(4.92)式で求めた $J_{g,i,j}^{in/out,x+}$ より、 x 正方向境界面におけるアルベド値 $\alpha_{g,i,j}^{x+}$ は次式で計算できる。

$$\alpha_{g,i,j}^{x+} = \frac{J_{g,i,j}^{in,x+}}{J_{g,i,j}^{out,x+}} \quad (4.95)$$

同様にして、(4.93)式および(4.94)式で求めた $J_{g,i+1,j}^{in/out,x-}$ より、 x 負方向境界面におけるアルベド値 $\alpha_{g,i+1,j}^{x-}$ は次式で計算できる。

$$\alpha_{g,i+1,j}^{x-} = \frac{J_{g,i+1,j}^{in,x-}}{J_{g,i+1,j}^{out,x-}} \quad (4.96)$$

y 負/正側境界面におけるアルベド値も x 負/正側境界面と同様にして評価できる。

4.2.6 各集合体内の中性子束分布再構成

POD LG 反復が収束した後、POD 基底と rebalance factor により規格化された POD 展開係数ベクトル $\vec{h}_{g,l,j}^L$ を用いて、各集合体内の詳細メッシュ全中性子束空間分布を次式で再構成する。

$$\vec{\phi}_{g,l,j}^L = \mathbf{U}_{g,l,j}^L \vec{h}_{g,l,j}^{L,new} \quad (4.97)$$

ただし、 $\vec{\phi}_{g,l,j}^L$ は (l,j) 番目の集合体内のエネルギー g 群全中性子束分布である。行列 $\mathbf{U}_{g,l,j}^L$ は次式のように、 (l,j) 番目の集合体内のエネルギー g 群 POD 基底 $\vec{u}_{b,g,l,j}^L$ を r 本並べた行列として定義される。

$$\mathbf{U}_{g,l,j}^L = (\vec{u}_{1,g,l,j}^L \quad \cdots \quad \vec{u}_{r,g,l,j}^L) \quad (4.98)$$

4.3 2次元多集合体体系における検証

2次元多集合体体系を対象として、NUMA法を用いたPOD LG反復法により、詳細メッシュ拡散計算を精度よく再現可能か検証する。4.3.1項で本検証の計算条件を説明する。4.3.2項で、POD LG反復計算で用いた各集合体のPOD基底評価手順および結果を示す。4.3.3項でNUMA法を用いたPOD LG反復法の有効性検証結果を示す。

4.3.1 計算条件

本検証で用いた燃料集合体は、Fig. 4.4に示したC5G7ベンチマーク体系[14]のUO₂燃料集合体とMOX燃料集合体の二種類であり、各集合体内を17×17の空間メッシュに分割した。各集合体の1メッシュサイズは1.26 cmであり、1メッシュが1ピンセルに対応する。エネルギー群数は2群とした。本研究では、自作した2次元拡散コードを用いて検証を実施した。ピンセル単位の均質化およびエネルギー群縮約は、輸送計算コードGENESIS[15],[16]を用いて実施した。Fig. 4.5に多集合体系の幾何形状を示す。境界条件は、 x, y 負方向表面に完全反射境界条件を与え、 x, y 正方向表面にアルベド境界条件を与えた。各集合体に境界条件として与えたアルベド値は空間的に一様とした。境界条件として与えたアルベド値をTable 4.1に示す。このアルベド値は反射体による中性子反射効果を表す値であり、C5G7ベンチマーク体系の詳細メッシュ拡散計算結果に基づいて、決定した。各物質の断面積・拡散係数をTable 4.2–Table 4.7に示す。各計算の外部反復の収束条件をTable 4.8に示す。local計算では、内部反復でLU分解を用いた。全炉心詳細計算およびglobal計算では、内部反復でADI法[13]を用いた。全炉心詳細計算およびglobal計算の内部反復収束条件はともに 1×10^{-9} とした。

本検証では、NUMA法に基づく各集合体間境界面のアルベド値評価のために必要な流入/流出部分中性子流計算に対して、後退加速を適用した。例として、 (i, j) 番目メッシュの x 正方向境界面におけるアルベド値評価に対する後退加速適用法を説明する。(4.91)式および(4.92)式から求めた流入/流出部分中性子流を $J_{g,i,j}^{in/out,x+, (n-1/2)}$ とする。 n 回目のPOD LG反復における流入/流出部分中性子流 $J_{g,i,j}^{in/out,x+, (n)}$ を次式で計算した。

$$J_{g,i,j}^{in/out,x+, (n)} = \left(1 - w_{g,I+1/2,J}^{(n)}\right) J_{g,i,j}^{in/out,x+, (n-1/2)} + w_{g,I+1/2,J}^{(n)} \frac{J_{g,I,J}^{G,in/out,x+, (n)}}{J_{g,I,J}^{G,in/out,x+, (n-1)}} J_{g,i,j}^{in/out,x+, (n-1)} \quad (4.99)$$

上式中の各変数の意味は以下のとおりである。

上添え字 n : POD LG反復回数

$w_{g,I+1/2,J}$: (I, J) 番目集合体と $(I + 1, J)$ 番目のメッシュ間の境界面におけるエネルギー g 群の部分中性子流に対する後退加速因子 (重み)

重み $w_{g,l+1/2,J}^{(n)}$ が1.0に近いほど、POD LG 反復1回あたりの部分中性子流更新量が小さくなる。 $J_{g,i,j}^{in/out,x+,(n)}$ を計算後、(4.95)式に基づき、アルベド値を評価した。本検証では、重み $w_{g,l+1/2,J}$ は、次式で定義される $DFerr_{g,l+1/2,J}$ に基づいて決定した。

$$DFerr_{g,l+1/2,J} = \max(FS_{g,l,J}^{x+} - 1.0, FS_{g,l+1,J}^{x-} - 1.0, FJ_{g,l,J}^{x+} - 1.0, FJ_{g,l+1,J}^{x-} - 1.0) \quad (4.100)$$

各補正因子 $FS_{g,l,J}^{x\pm}$, $FJ_{g,l,J}^{x\pm}$ は、反復計算が収束にむかうほど1.0に漸近するため、 $DFerr_{g,l+1/2,J}$ は0に漸近する。A)小規模正方形多集合体体系では、次式より重み $w_{g,l+1/2,J}$ を評価した。

$$w_{g,l+1/2,J} = \begin{cases} 1.0 & \text{for } 1.0 \leq DFerr_{g,l+1/2,J} \\ 0.9 & \text{for } 1 \times 10^{-3} \leq DFerr_{g,l+1/2,J} < 1.0 \\ 0.86 & \text{for } DFerr_{g,l+1/2,J} < 1 \times 10^{-3} \end{cases} \quad (4.101)$$

B)大規模凸型多集合体体系では、(4.101)式と以下で示す(4.102)式で定義される2パターンの重み $w_{g,l+1/2,J}$ を用いて部分中性子流を更新し、アルベド値を評価した。

$$w_{g,l+1/2,J} = \begin{cases} 1.0 & \text{for } 1.0 \leq DFerr_{g,l+1/2,J} \\ 0.9 & \text{for } DFerr_{g,l+1/2,J} < 1.0 \end{cases} \quad (4.102)$$

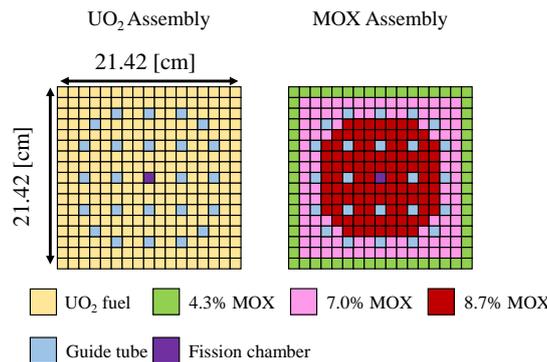
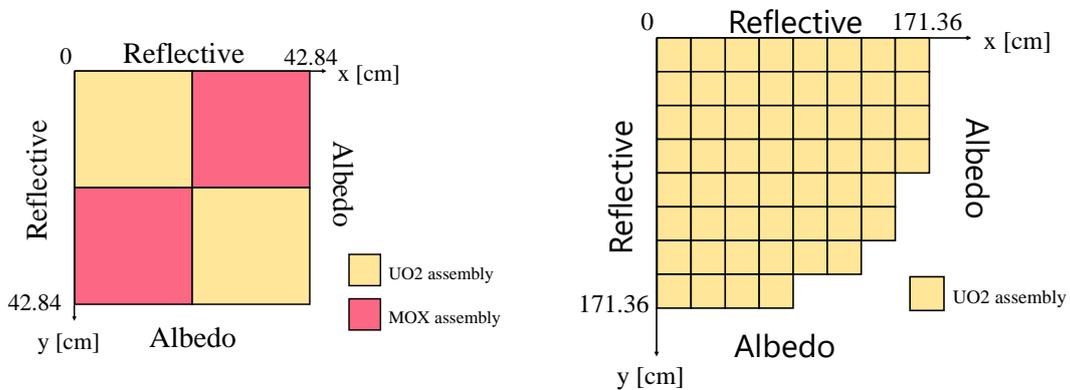


Fig. 4.4 UO₂燃料集合体およびMOX燃料集合体の幾何形状



A) 小規模正方形多集合体系

B) 大規模凸型多集合体系

Fig. 4.5 多集合体体系の幾何形状

Table 4.1 境界条件として与えた各集合体のアルベド値

g	UO ₂ 燃料集合体	MOX 燃料集合体
1	0.4068614	0.4109699
2	1.3031729	1.6999535

Table 4.2 UO₂ 燃料領域の巨視的断面積・拡散係数

g	$\Sigma_{a,g}$ [cm ⁻¹]	$\nu\Sigma_{f,g}$ [cm ⁻¹]	χ_g [-]	D_g [cm]	$\Sigma_{s,1\rightarrow g}$ [cm ⁻¹]	$\Sigma_{s,2\rightarrow g}$ [cm ⁻¹]
1	1.004868E-2	7.285493E-3	1.0	8.938528E-1	3.432982E-1	2.699352E-5
2	9.826820E-2	1.615601E-1	0.0	3.299141E-1	1.957058E-2	9.120693E-1

Table 4.3 Guide Tube 領域の巨視的断面積・拡散係数

g	$\Sigma_{a,g}$ [cm ⁻¹]	$\nu\Sigma_{f,g}$ [cm ⁻¹]	χ_g [-]	D_g [cm]	$\Sigma_{s,1\rightarrow g}$ [cm ⁻¹]	$\Sigma_{s,2\rightarrow g}$ [cm ⁻¹]
1	3.484490E-4	0.0	0.0	1.037233E+0	2.893333E-1	1.219670E-5
2	1.806611E-2	0.0	0.0	2.761785E-1	3.168611E-2	1.188871E+0

Table 4.4 Fission Chamber 領域の巨視的断面積・拡散係数

g	$\Sigma_{a,g}$ [cm ⁻¹]	$\nu\Sigma_{f,g}$ [cm ⁻¹]	χ_g [-]	D_g [cm]	$\Sigma_{s,1\rightarrow g}$ [cm ⁻¹]	$\Sigma_{s,2\rightarrow g}$ [cm ⁻¹]
1	3.488735E-4	8.044248E-7	1.0	1.037457E+0	2.893229E-1	1.223093E-5
2	1.804620E-2	1.718044E-6	0.0	2.764201E-1	3.162672E-2	1.187836E+0

Table 4.5 4.7%MOX 燃料領域の巨視的断面積・拡散係数

g	$\Sigma_{a,g}$ [cm ⁻¹]	$\nu\Sigma_{f,g}$ [cm ⁻¹]	χ_g [-]	D_g [cm]	$\Sigma_{s,1\rightarrow g}$ [cm ⁻¹]	$\Sigma_{s,2\rightarrow g}$ [cm ⁻¹]
1	1.029049E-2	8.416387E-3	1.0	8.937964E-1	3.441155E-1	5.186572E-5
2	1.638511E-1	2.133865E-1	0.0	3.406867E-1	1.853498E-2	8.145130E-1

Table 4.6 7.0%MOX 燃料領域の巨視的断面積・拡散係数

g	$\Sigma_{a,g}$ [cm ⁻¹]	$\nu\Sigma_{f,g}$ [cm ⁻¹]	χ_g [-]	D_g [cm]	$\Sigma_{s,1\rightarrow g}$ [cm ⁻¹]	$\Sigma_{s,2\rightarrow g}$ [cm ⁻¹]
1	1.266134E-2	1.298374E-2	1.0	8.853259E-1	3.458158E-1	6.362693E-5
2	2.370509E-1	3.132646E-1	0.0	3.192240E-1	1.803200E-2	8.070841E-1

Table 4.7 8.7%MOX 燃料領域の巨視的断面積・拡散係数

g	$\Sigma_{a,g}$ [cm^{-1}]	$\nu\Sigma_{f,g}$ [cm^{-1}]	χ_g [-]	D_g [cm]	$\Sigma_{s,1\rightarrow g}$ [cm^{-1}]	$\Sigma_{s,2\rightarrow g}$ [cm^{-1}]
1	1.271824E-2	1.303236E-2	1.0	8.848117E-1	3.458555E-1	6.201553E-5
2	2.41219E-1	3.224457E-1	0.0	3.156114E-1	1.815423E-2	8.148764E-1

Table 4.8 各計算の外部反復の収束条件

	条件を与える物理量	収束条件
参照解	実効増倍率 $\epsilon_{k_{\text{eff}}}^{\text{outer}}$	1.0E-8
	全中性子束 $\epsilon_{\phi}^{\text{outer}}$	1.0E-8
POD LG	実効増倍率 (local 計算) $\epsilon_{k_{\text{eff}}}^{L,\text{outer}}$	1.0E-8
	POD 展開係数 (local 計算) $\epsilon_h^{L,\text{outer}}$	1.0E-8
	実効増倍率 (global 計算) $\epsilon_{k_{\text{eff}}}^{G,\text{outer}}$	1.0E-8
	全中性子束 (global 計算) $\epsilon_{\phi}^{G,\text{outer}}$	1.0E-8
	実効増倍率 (POD LG 反復計算) $\epsilon_{k_{\text{eff}}}^{\text{POD LG,outer}}$	1.0E-8

4.3.2 POD 基底評価手順および結果

本項では、POD 基底評価手順を説明した後、得られた POD 基底空間分布を示す。

第 3 章で説明した POD 展開次数探索手法に基づくことで、 UO_2 燃料集合体および MOX 燃料集合体の POD 基底を評価した。本検証計算では、POD 基底評価時に回転によるデータ拡張を用いた。POD 展開次数探索において、境界条件としてランダムなアルベド境界条件を与えた。アルベド値は各境界面で空間的に一様とし、その値は一様乱数により決定した。各集合体のアルベド値の一様乱数範囲を **Table 4.9** に示す。本乱数範囲は、空間均質化・エネルギー群縮約した C5G7 ベンチマーク体系における、各集合体境界面上のアルベド値を含むように決定した。

Table 4.9 各燃料集合体のアルベド値の一様乱数範囲

g	UO_2 燃料集合体	MOX 燃料集合体
1	[0.4, 1.3]	[0.4, 1.3]
2	[0.5, 1.6]	[1.0, 1.8]

本検証では、目標誤差を(4.103)式の全中性子束相対誤差の平均値である rRMSE および (4.104)式の実効増倍率誤差 Δk_{eff} で定義した。具体的には、目標誤差を「全中性子束の rRMSE が 0.1%以下」かつ「 Δk_{eff} が 0.01%以下」とした。

$$\text{rRMSE} = \sqrt{\frac{1}{NG \times NX \times NY} \sum_{g=1}^{NG} \sum_{i=1}^{NX} \sum_{j=1}^{NY} \left(\frac{\phi_{g,i,j}^{POD LG}}{\phi_{g,i,j}^{ref}} - 1 \right)^2} \quad (4.103)$$

$$\Delta k_{\text{eff}} = |k_{\text{eff}}^{POD LG} - k_{\text{eff}}^{ref}| \quad (4.104)$$

上式において、上添え字 ref および $POD LG$ はそれぞれ参照解および $POD LG$ 反復計算より得られた物理量を意味する。

最終的に得られた UO_2 燃料集合体および MOX 燃料集合体の POD 展開次数はそれぞれ、41 次および 42 次であった。 UO_2 燃料集合体の 1-8 次の高速群および熱群の POD 基底空間分布をそれぞれ **Fig. 4.6** および **Fig. 4.7** に示す。次に、 MOX 燃料集合体の 1-8 次の高速群および熱群の POD 基底空間分布をそれぞれ **Fig. 4.8** および **Fig. 4.9** に示す。さらに、各集合体の各エネルギー群の次数に対する特異値の変化を **Fig. 4.10** に示す。**Fig. 4.10** において、青丸が高速群の特異値であり、赤×が熱群の特異値をそれぞれ示している。各燃料集合体内の空間メッシュ数は $17 \times 17 = 289$ であるため、次式で定義される UO_2 燃料集合体および MOX 燃料集合体の次元削減率 DRP は、ともに約 86% であった。

$$DRP = 1 - \frac{\text{POD 基底の総数}}{\text{空間メッシュ数}} \quad (4.105)$$

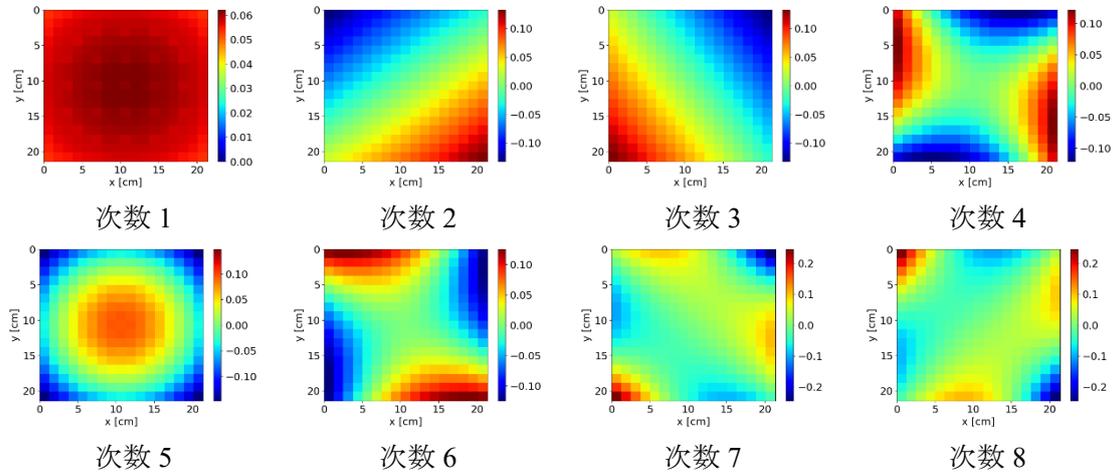


Fig. 4.6 高速群 POD 基底空間分布 (UO_2 燃料集合体)

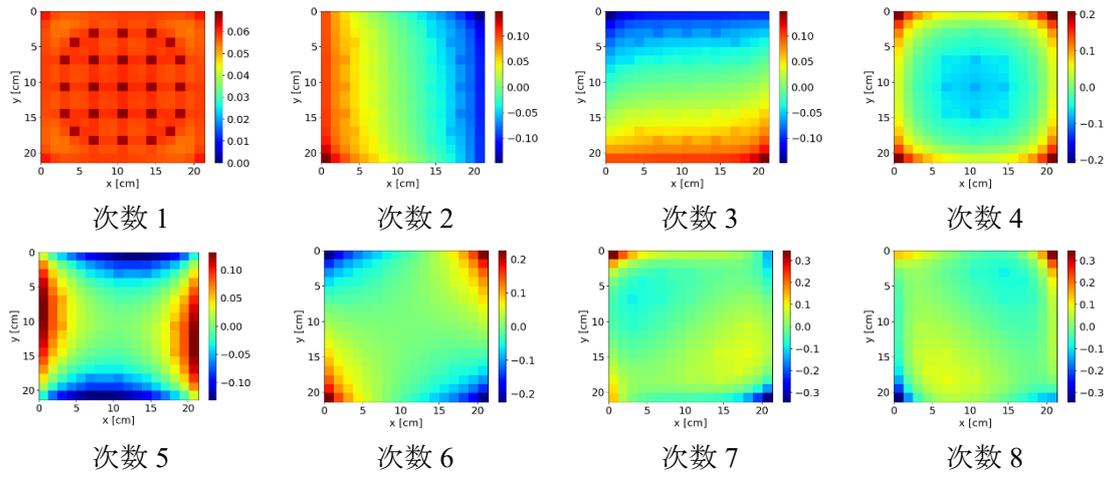


Fig. 4.7 熱群 POD 基底空間分布 (UO₂ 燃料集合体)

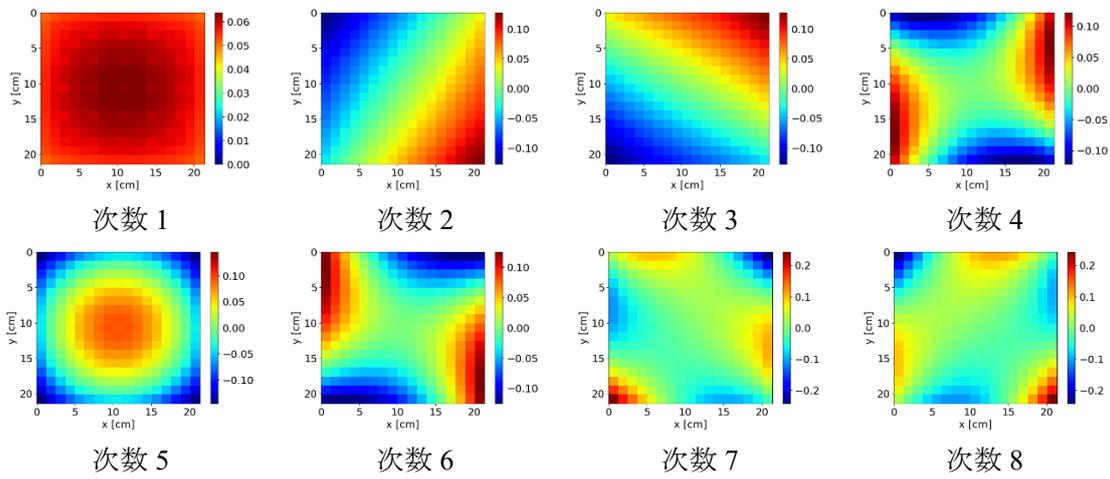


Fig. 4.8 高速群 POD 基底空間分布 (MOX 燃料集合体)

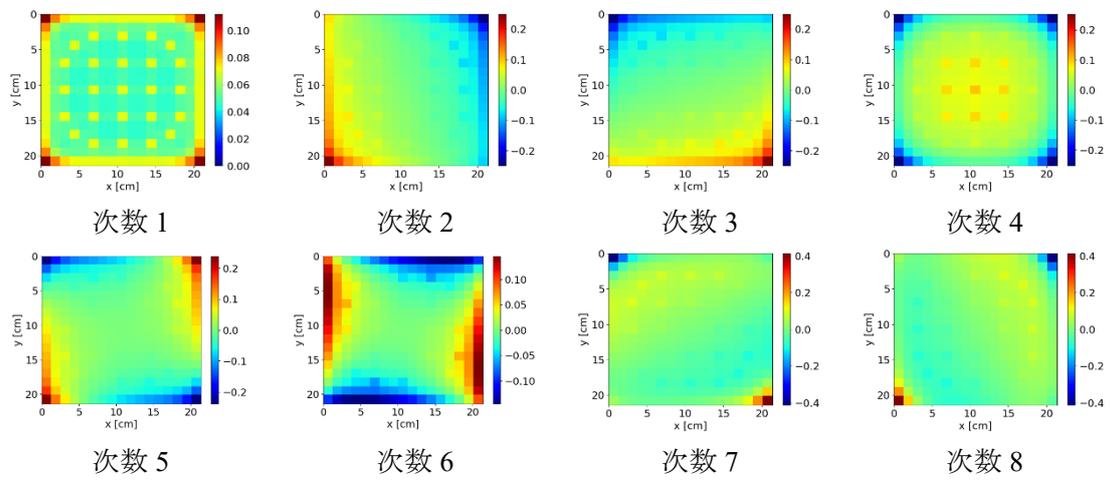


Fig. 4.9 熱群 POD 基底空間分布 (MOX 燃料集合体)

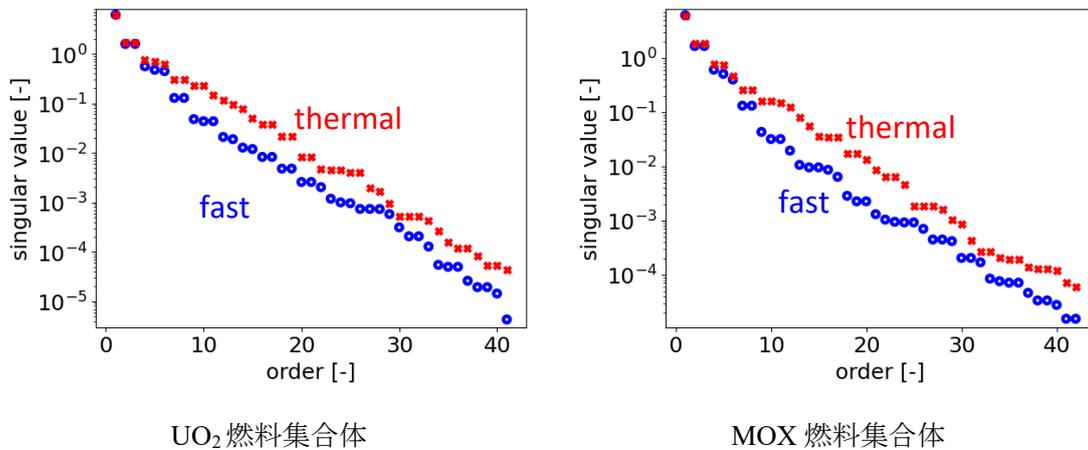


Fig. 4.10 次数に対する特異値変化 (各燃料集合体)

4.3.3 検証結果

本項では、提案手法の計算誤差の調査結果を示す。NUMA 法の影響を明らかとするために、Fig. 4.5 に示した各多集合体体系における、アルベド値空間分布を一様と近似した NUMA 法未適用の POD LG 反復計算と NUMA 法を用いた POD LG 反復計算の計算結果および計算誤差を示す。

まず、小規模正方多集合体体系の検証結果を示す。次に、大規模多集合体体系の検証結果を示す。最後に、提案手法の課題点を整理する。

- 小規模正方形多集合体体系

まず Fig. 4.11 の青枠で囲われた集合体間境界面アルベド値分布の参照解および POD LG 反復計算より得られたアルベド値を示す。ただし、隣接する 2 つの集合体のうち、 x 負方向の集合体のアルベド値を示すこととする。もう一方 (x 正方向) の集合体に関するアルベド値は今回評価したアルベド値の逆数に対応する。

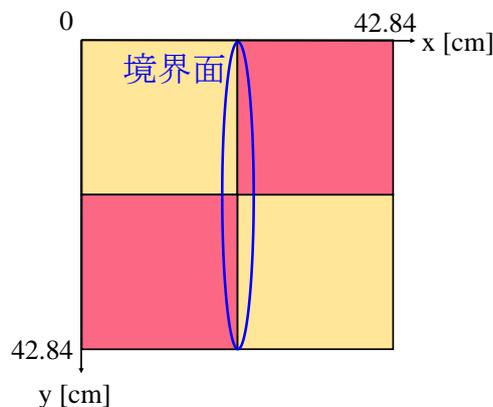


Fig. 4.11 アルベド値を評価した集合体境界面

NUMA 法未適用の POD LG 反復計算より得られたアルベド値空間分布を Fig. 4.12 に示す。実線が参照解であり、点線が POD LG 反復計算で得られたアルベド値である。次式で評価したアルベド値相対誤差空間分布 $\Delta\alpha_{g,j}$ を Fig. 4.13 に示す。

$$\Delta\alpha_{g,j} = \frac{\alpha_{g,j}^{POD LG}}{\alpha_{g,j}^{ref}} - 1.0 \quad (4.106)$$

上式における、 $\alpha_{g,j}$ は y 方向メッシュ番号 j におけるエネルギー g 群アルベド値である。青点線が高速群、赤実線が熱群のアルベド値相対誤差を意味する。次に NUMA 法を用いた POD LG 反復計算より得られたアルベド値空間分布を Fig. 4.14 に示し、アルベド値相対誤差空間分布を Fig. 4.15 に示す。Fig. 4.12 より、NUMA 法を用いない場合、各集合体境界面における面平均アルベド値しか評価できない。一方、Fig. 4.14 より、NUMA 法を用いることで、アルベド値の空間分布を評価できることがわかる。Fig. 4.13 および Fig. 4.15 より、NUMA 法を用いることで、 $\Delta\alpha_{g,j}$ の絶対値 $|\Delta\alpha_{g,j}|$ の最大値を約 20%から約 0.3%程度まで低減できる。

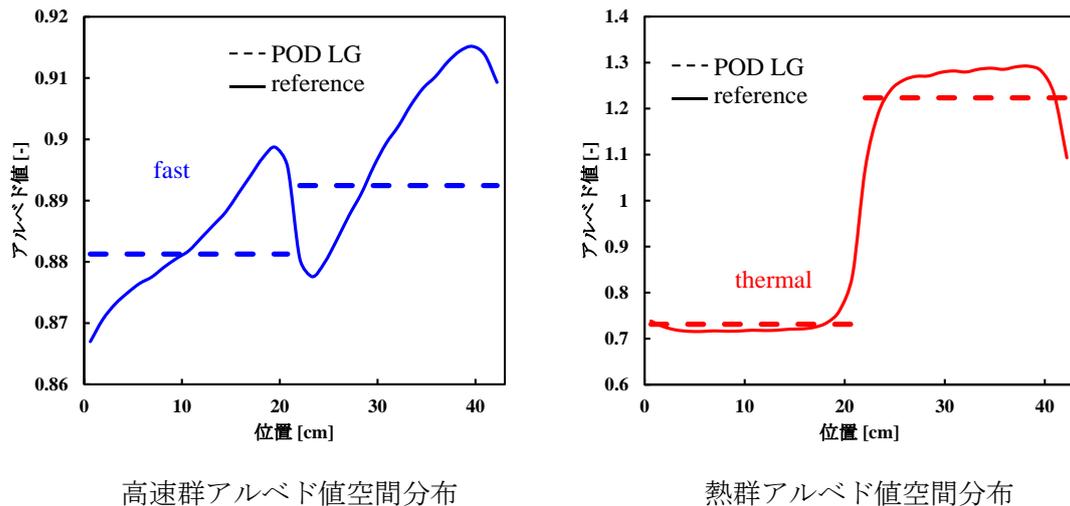


Fig. 4.12 小規模正方形体系のアルベド値空間分布 (NUMA 法未適用の POD LG)

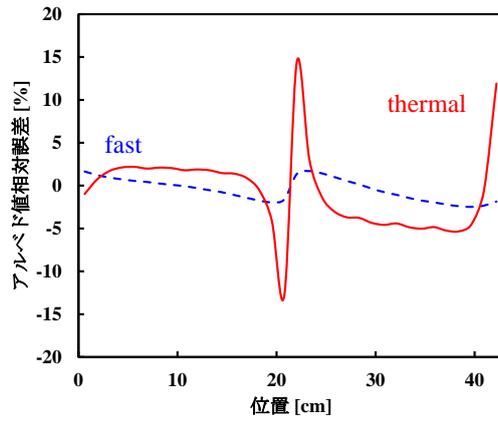
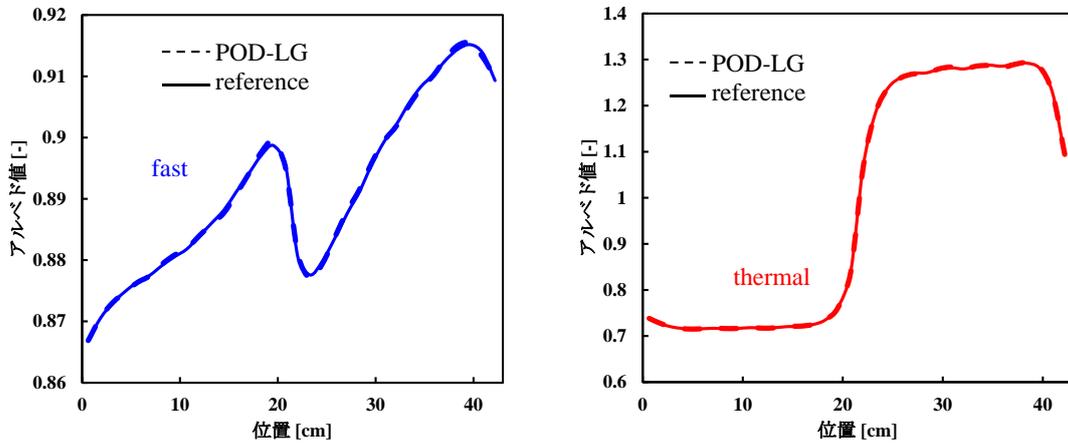


Fig. 4.13 小規模正方形体系のアルベド値誤差分布 (NUMA 法未適用の POD LG)



高速群アルベド値空間分布

熱群アルベド値空間分布

Fig. 4.14 小規模正方形体系のアルベド値空間分布 (NUMA 法を用いた POD LG)

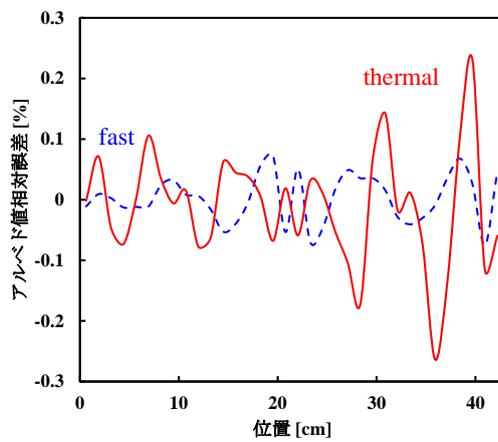


Fig. 4.15 小規模正方形体系のアルベド値誤差分布 (NUMA 法を用いた POD LG)

次に、POD LG 反復計算より得られた全中性子束空間分布について、NUMA 法未適用の場合の中性子束分布を **Fig. 4.16**、NUMA 法を用いた場合の中性子束分布を **Fig. 4.17** に、それぞれ示す。各計算における実効増倍率計算値および実効増倍率誤差、全中性子束相対誤差の最大値、最小値および rRMSE を **Table 4.10** に示す。

NUMA 法を用いない場合、全中性子束 rRMSE および実効増倍率誤差 Δk_{eff} がそれぞれ約 3% および約 0.05% と誤差が大きく、目標誤差「全中性子束の rRMSE が 0.1% 以下」かつ「 Δk_{eff} が 0.01% 以下」を満足しない。一方、NUMA 法を用いた場合、全中性子束 rRMSE および実効増倍率誤差 Δk_{eff} がそれぞれ約 0.03% および約 $7 \times 10^{-5}\%$ であり、NUMA 法を用いない場合と比較して、それぞれ約 1/100 および約 1/1000 と大きく減少し、目標誤差を満足した。以上の検討結果より、NUMA 法を用いることで、アルベド値空間分布を推定でき、小規模な正方形の多集合体内の中性子束分布を高精度に再現できるといえる。

最後に、各計算の全中性子束相対誤差分布を比較する。各エネルギー群の全中性子束相対誤差分布 $\Delta\phi_{g,i,j}$ は、次式より評価した。

$$\Delta\phi_{g,i,j} = \frac{\phi_{g,i,j}^{\text{POD LG}}}{\phi_{g,i,j}^{\text{ref}}} - 1.0 \quad (4.107)$$

POD LG 反復計算より得られた全中性子束相対誤差の空間分布について、NUMA 法未適用の場合の誤差分布を **Fig. 4.18** に、NUMA 法を用いた場合の誤差分布を **Fig. 4.19** にそれぞれ示す。**Fig. 4.18** より、NUMA 法未適用の POD LG 反復計算では、体系中心で熱群の全中性子束相対誤差がピークをもつことが確認できる。**Fig. 4.13** より、アルベド値相対誤差も同様に体系中心で大きくなっている。したがって、この相対誤差のピークは、アルベド値空間分布を適切に評価できていないことに起因すると考えられる。一方、**Fig. 4.19** より、NUMA 法を用いた場合、体系中心の誤差ピークは持たないが、**Fig. 4.18** と比べて誤差分布がより凹凸をもった分布となっており、体系外側で全中性子束相対誤差が大きい。**Fig. 4.15** より、体系外側ほどアルベド値相対誤差が大きい。そのため、体系外側で全中性子束相対誤差が大きくなったと考えられる。また、誤差分布がより凹凸をもった分布となる要因は、「POD 基底による全中性子束の展開」に起因すると考えられる。前項で示したように、高次の POD 基底ほど、空間分布は複雑な形状となる。そのような POD 基底で展開したとき、誤差分布（展開次数を打ち切ることで、表現しきれなかった残差項）もまた、凹凸をもった分布になったと考えられる。

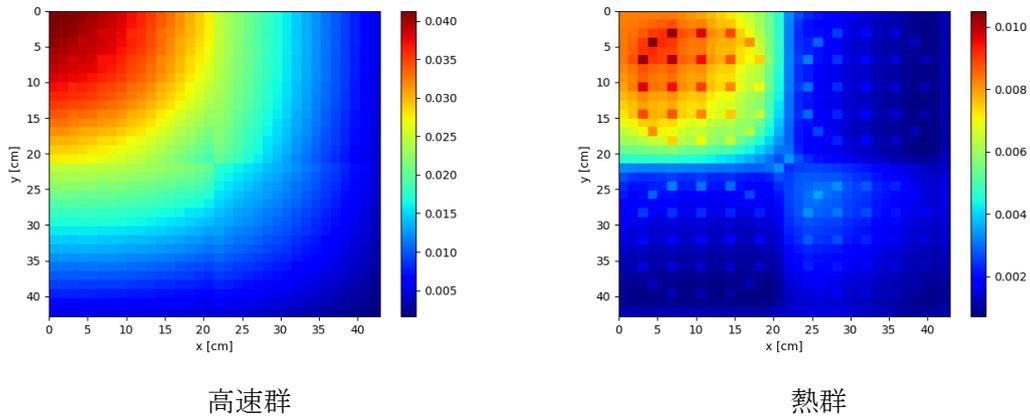


Fig. 4.16 小規模正方形体系の全中性子束空間分布（NUMA 法未適用の POD LG）

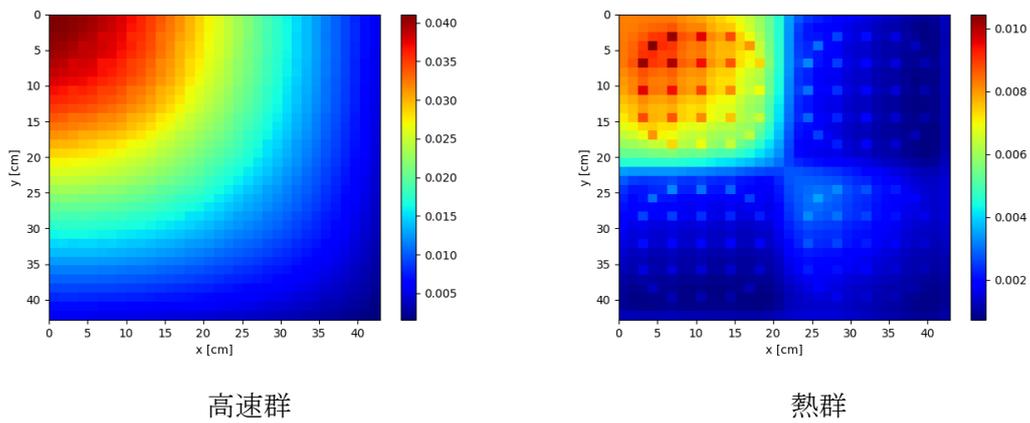


Fig. 4.17 小規模正方形体系の全中性子束空間分布（NUMA 法を用いた POD LG）

Table 4.10 k_{eff} 値と k_{eff} 誤差値、全中性子束相対誤差値（小規模正方形体系）

		参照解	NUMA 法未適用の POD LG 反復計算	NUMA 法を用いた POD LG 反復計算
k_{eff}		1.2006341	1.2011408	1.2006348
実効増倍率誤差 Δk_{eff} [%]		-	5067×10^{-5}	7×10^{-5}
全中性子束 相対差異 [%]	最大	-	30	0.35
	最小	-	-14	-0.25
	rRMSE	-	3	0.03

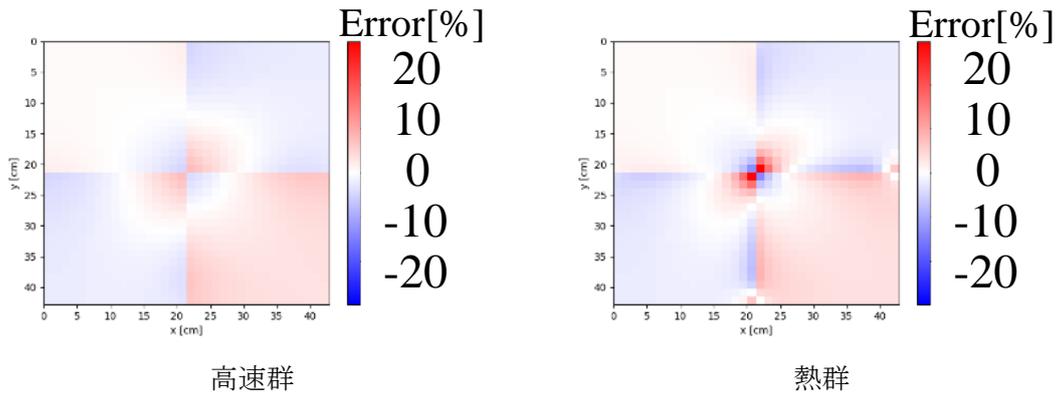


Fig. 4.18 小規模正方形体系の全中性子束相対誤差の空間分布
(NUMA 法未適用の POD LG)

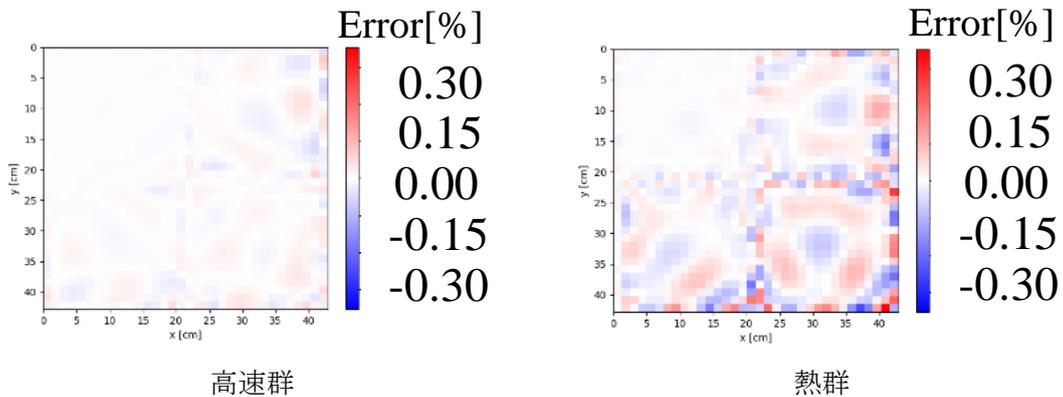


Fig. 4.19 小規模正方形体系の全中性子束相対誤差の空間分布
(NUMA 法を用いた POD LG)

- 大規模凸型多集合体体系

小規模正方形多集合体体系と同様に、(4.101)式で評価される重みを用いて、POD LG 反復計算を実施した結果、POD LG 反復計算が収束しなかった。そこで、(4.102)式で評価される重みを用いて、POD LG 反復計算を実施した。(4.102)式の重みは(4.101)式の重みと比べて、反復計算後半の重みが大きく、1回の POD LG 反復あたりの部分中性子流更新量が小さい。その結果、本体系の POD LG 反復計算の収束解を得ることができた。以降では、(4.102)式で評価される重みを用いた POD LG 反復計算結果についてまとめる。

まず Fig. 4.20 の色付き枠で囲われた 3 つの集合体間境界面 (境界面 1,2,3) におけるアルベド値分布の参照解および POD LG 反復計算より得られたアルベド値を示す。ただし、隣接する 2 つの集合体のうち、 x 負方向の集合体のアルベド値を示す。

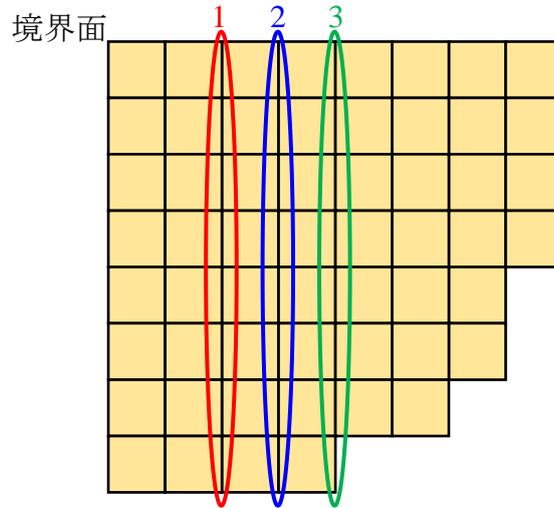


Fig. 4.20 アルベド値評価を実施した集合体境界面（大規模凸型体系）

NUMA 法未適用の POD LG より得られたアルベド値空間分布を Fig. 4.21 に示す。実線が参照解であり、点線が POD LG 反復計算で得られたアルベド値である。(4.106)式で評価したアルベド値相対誤差空間分布 $\Delta\alpha_{g,j}$ を Fig. 4.22 に示す。

$$\Delta\alpha_{g,j} = \frac{\alpha_{g,j}^{POD LG}}{\alpha_{g,j}^{ref}} - 1.0 \quad (4.106)$$

再掲

青点線が高速群、赤実線が熱群のアルベド値相対誤差を意味する。次に NUMA 法を用いた POD LG より得られたアルベド値空間分布を Fig. 4.23 に示し、アルベド値相対誤差空間分布を Fig. 4.24 に示す。Fig. 4.22 より、NUMA 法を用いない POD LG 反復計算では、 $\Delta\alpha_{g,j}$ の絶対値 $|\Delta\alpha_{g,j}|$ の最大値は、境界面 3 で最も大きく、約 25%であった。一方、Fig. 4.24 より NUMA 法を用いることで、境界面 3 の $|\Delta\alpha_{g,j}|$ の最大値を約 0.3%まで低減できる。その他境界面 1,2 についても NUMA 法を用いた場合、 $|\Delta\alpha_{g,j}|$ の最大値は 0.4%以下と小さい。

次に、POD LG 反復計算より得られた全中性子束空間分布について、NUMA 法未適用の場合の中性子束分布を Fig. 4.25、NUMA 法を用いた場合の中性子束分布を Fig. 4.26 に、それぞれ示す。各計算における実効増倍率計算値および実効増倍率誤差、中性子束相対誤差の最大値、最小値および rRMSE を Table 4.11 に示す。

NUMA 法を用いない場合、全中性子束 rRMSE および実効増倍率誤差 Δk_{eff} がそれぞれ約 2%および約 0.003%であった。 Δk_{eff} は目標誤差を満たすが、rRMSE は目標誤差を満足しない結果となった。一方、NUMA 法を用いることで、全中性子束 rRMSE および実効増倍率誤差 Δk_{eff} がそれぞれ 0.01%および $2 \times 10^{-5}\%$ であり、NUMA 法を用いない場合と比較して、rRMSE および Δk_{eff} がともに約 1/100 と大きく減少し、目標誤差を満足した。以上の検討結果より、NUMA 法を用いることで、アルベド値空間分布を推定でき、凸型の大規模な多集合体内の中性子束分布を高精度に再現できるといえる。

小規模正方形の多集合体系の検証結果と本結果より、集合体境界面の「アルベド値空間分

布を一樣」として準備した snapshot データを用いて得られた POD 基底により、集合体境界面で「アルベド値が空間分布をもつ」場合の集合体内中性子束分布を高精度に再現可能であるといえる。

最後に、2つの計算の全中性子束相対誤差分布を比較する。各エネルギー群の全中性子束相対誤差分布 $\Delta\phi_{g,i,j}$ は、(4.107)式より評価した。

$$\Delta\phi_{g,i,j} = \frac{\phi_{g,i,j}^{POD LG}}{\phi_{g,i,j}^{ref}} - 1.0 \quad (4.107)$$

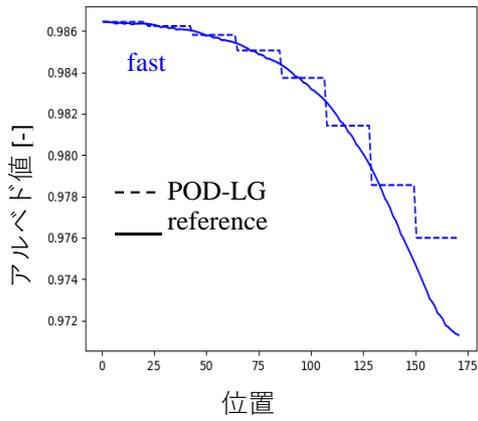
再掲

POD LG 反復計算より得られた全中性子束相対誤差の空間分布について、NUMA 法未適用の場合の誤差分布を Fig. 4.27 に、NUMA 法を用いた場合の誤差分布を Fig. 4.28 に、それぞれ示す。Fig. 4.27 および Fig. 4.28 より、誤差分布は、小規模な正方体系と同様に体系外周部で大きいことが確認できる。大規模な凸型体系では、特に多集合体体系の凸部 (x, y 正方向の端、図右下) に位置する集合体で相対誤差が大きい。Fig. 4.21–Fig. 4.24 より、Fig. 4.20 の外部境界面を含む境界面 3 では、外部境界面付近でアルベド値空間分布が大きく変化し、アルベド値相対誤差が大きいことがわかる。本検証で用いた大規模凸型体系は同一の UO_2 集合体からなるため、体系内部の集合体境界面のアルベド値は 1.0 に近くなる。一方、各集合体の外部境界面に対する境界条件として、以下のアルベド値を与えた。

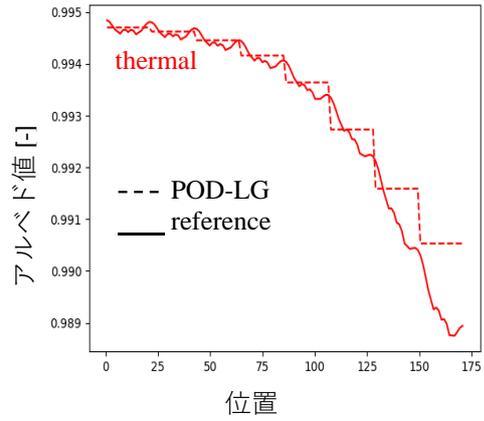
高速群 : 0.4

熱群 : 1.3

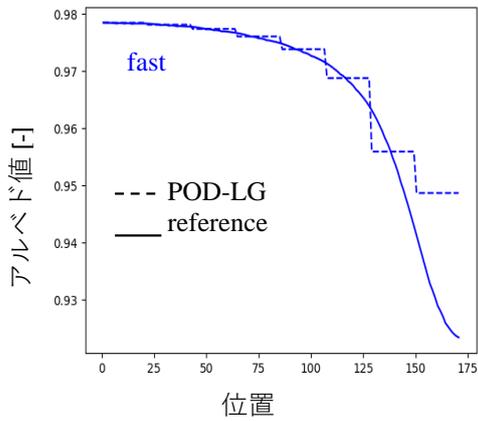
このように境界条件で与えたアルベド値が 1.0 と比べて大きいため、多集合体体系の凸部の集合体間境界面でアルベド値空間分布が急峻となり、計算誤差が大きくなったと考えられる。



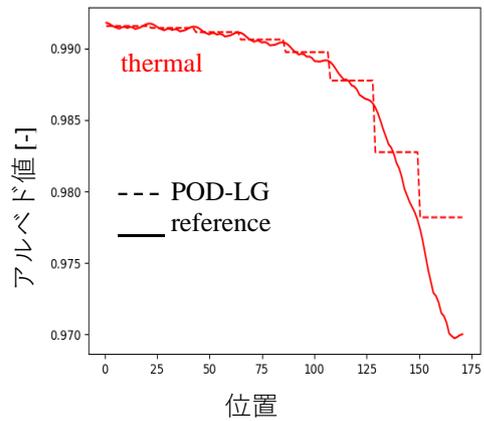
高速群 境界面 1



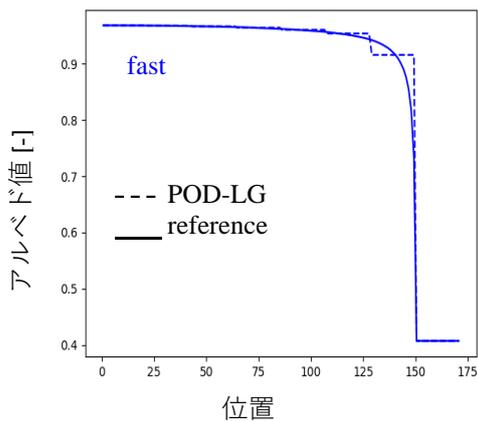
熱群 境界面 1



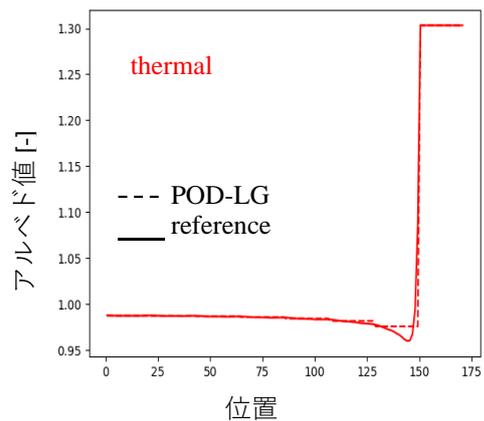
高速群 境界面 2



熱群 境界面 2



高速群 境界面 3



熱群 境界面 3

Fig. 4.21 大規模凸型体系のアルベド値空間分布 (NUMA 法未適用の POD LG)

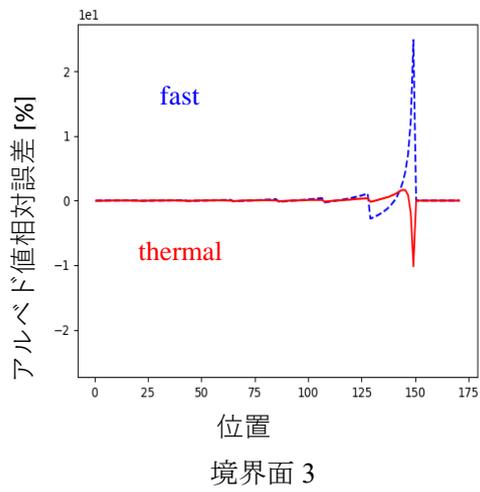
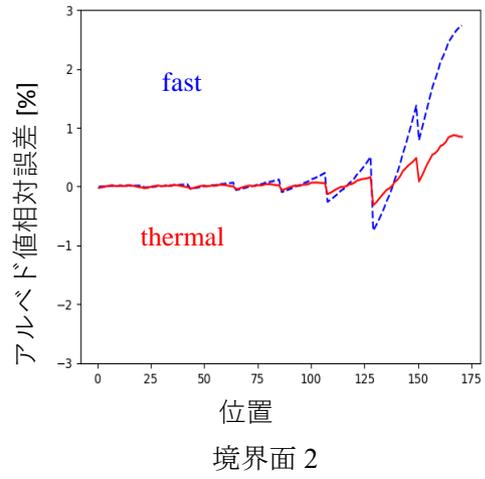
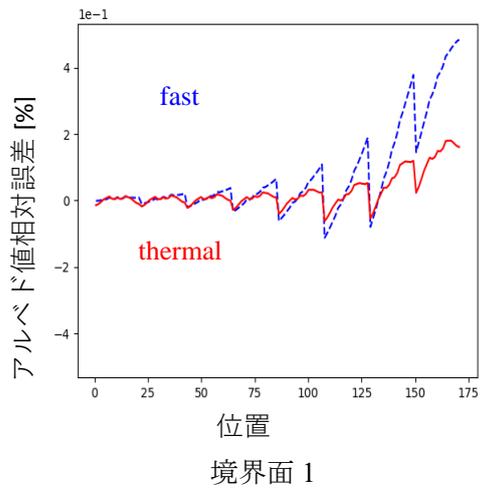
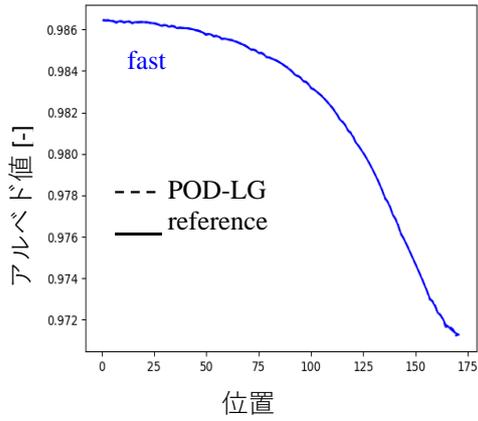
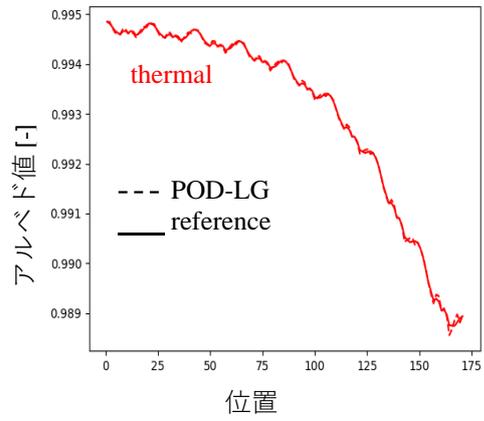


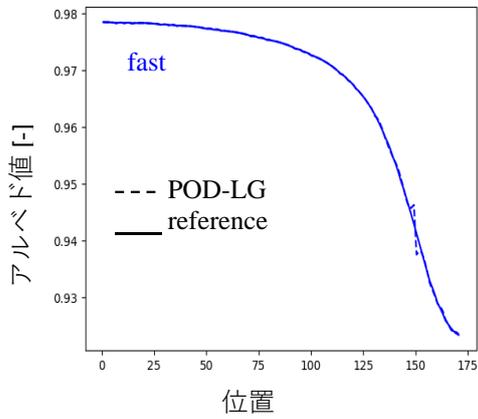
Fig. 4.22 大規模凸型体系のアルベド値誤差分布 (NUMA 法未適用の POD LG)



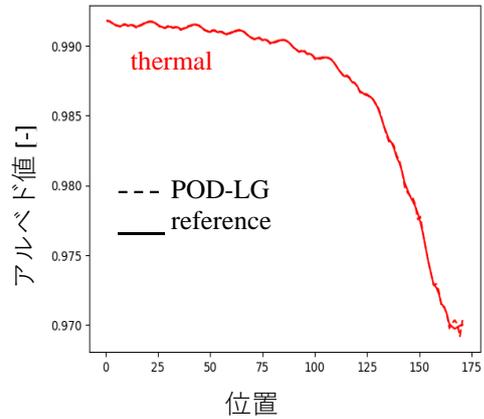
高速群 境界面 1



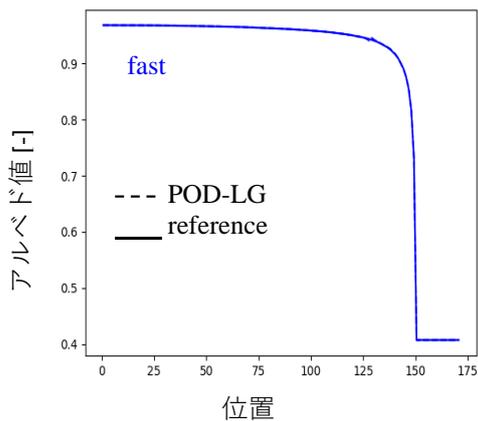
熱群 境界面 1



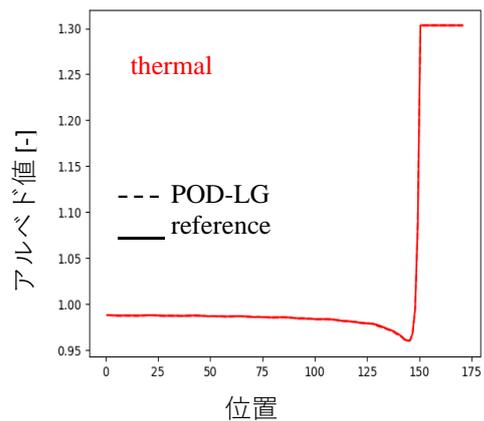
高速群 境界面 2



熱群 境界面 2

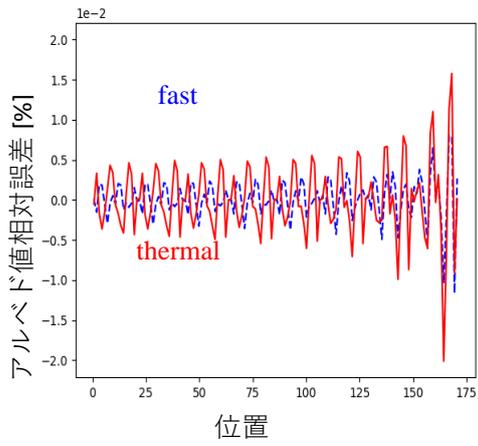


高速群 境界面 3

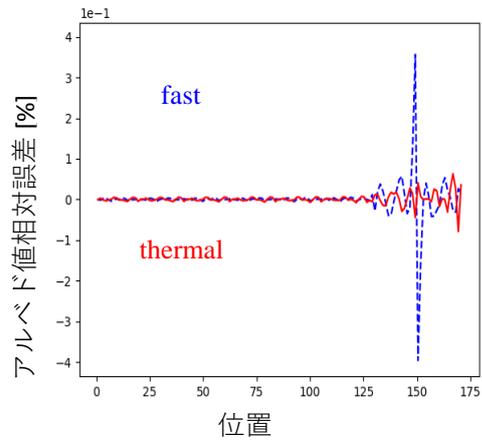


熱群 境界面 3

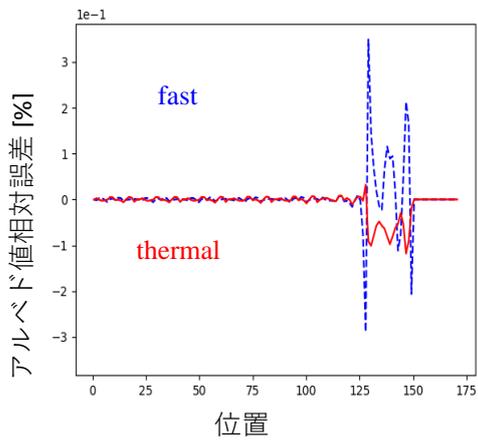
Fig. 4.23 大規模凸型体系のアルベド値空間分布 (NUMA 法を用いた POD LG)



境界面 1

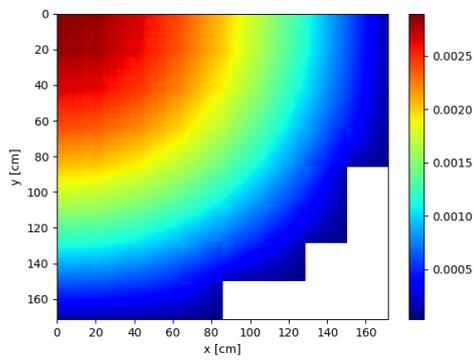


境界面 2

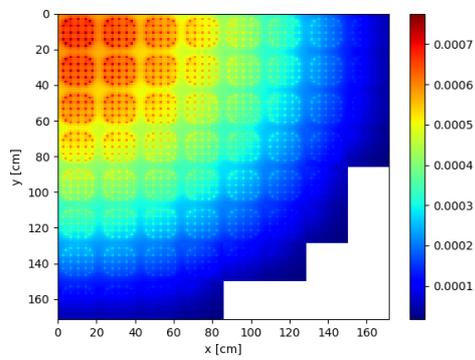


境界面 3

Fig. 4.24 大規模凸型体系のアルベド値誤差分布 (NUMA 法を用いた POD LG)



高速群



熱群

Fig. 4.25 大規模凸型体系の全中性子束空間分布 (NUMA 法未適用の POD LG)

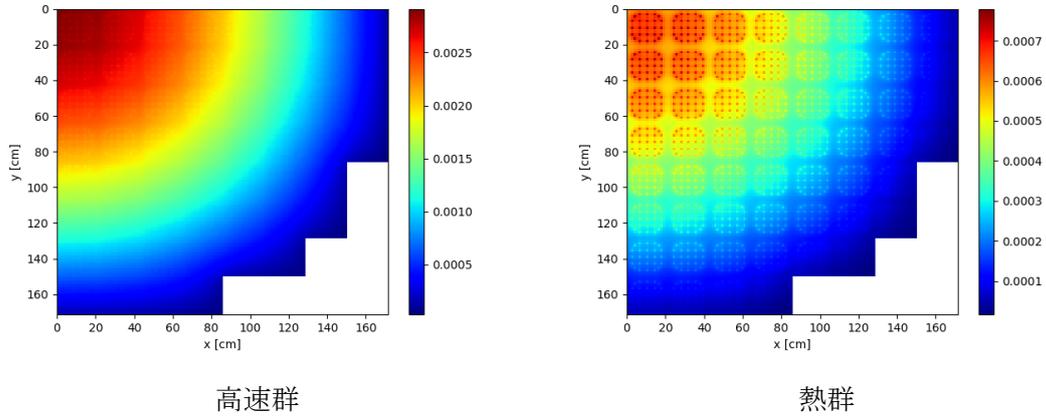


Fig. 4.26 大規模凸型体系の全中性子束空間分布 (NUMA 法を用いた POD LG)

Table 4.11 k_{eff} 値と k_{eff} 誤差値、全中性子束相対誤差値

		参照解	NUMA 法未適用 の POD LG 反復 計算	NUMA 法を用い た POD LG 反復計 算
k_{eff}		1.32840593	1.32843794	1.32840599
実効増倍率誤差 Δk_{eff} [%]		-	3201×10^{-6}	6×10^{-6}
全中性子束 相対差異 [%]	最大	-	36	0.160
	最小	-	-20	-0.146
	rRMSE	-	2	0.009

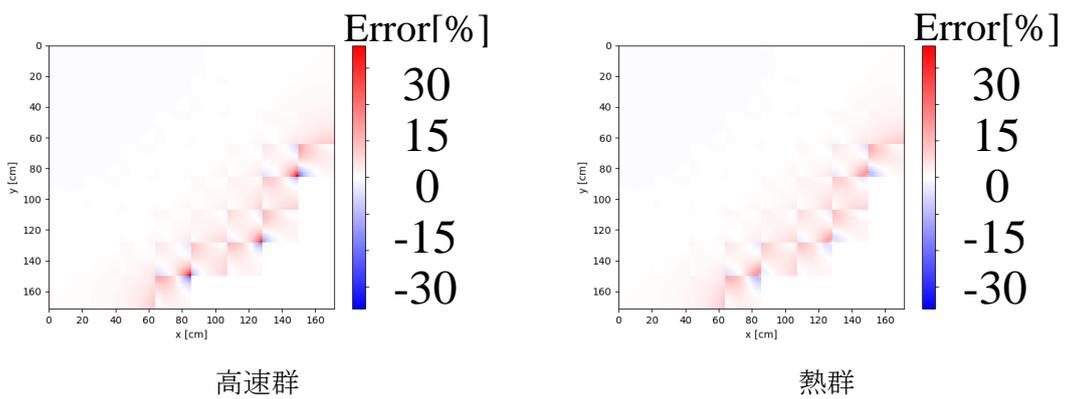


Fig. 4.27 大規模凸型体系の全中性子束相対誤差の空間分布 (NUMA 法未適用の POD LG)

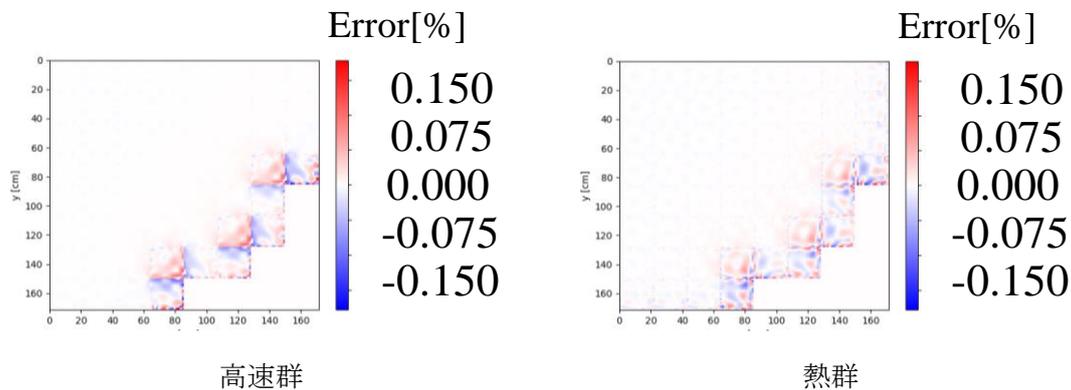


Fig. 4.28 大規模凸型体系の全中性子束相対誤差の空間分布
(NUMA 法を用いた POD LG)

● 提案手法の課題

本検証計算を通じて、NUMA 法を用いた POD LG 反復法に基づく拡散計算が、多集合体系内の詳細メッシュ拡散計算結果を高精度に再現できることを確認できた。しかし、本手法には、①POD LG 反復計算の数値的に不安定となる点、②反射体を含む実機炉心体系への適用が困難である点、といった2つの課題がある。

まず、数値計算の不安定性について説明する。提案手法では、NUMA 法に基づく各集合体間境界面のアルベド値評価のために必要な流入/流出部分中性子流計算に、後退加速を適用していた。(4.101)式および(4.102)式で定義したように、POD LG 反復計算の重み w は最低でも 0.86 とした。これは、POD LG 反復 1 回あたり、部分中性子流が最大 14%しか更新されないことを意味する。このように、LG 反復計算を安定に収束させるためには、POD LG 反復 1 回あたりの部分中性子流の更新量を制限する必要がある。また、前述したように、小規模な正方体系で収束した重みを用いても、大規模な凸型体系では POD LG 反復計算が収束しなかった。すなわち、計算の収束性は、幾何形状・燃料集合体配置に依存する。炉心解析では、多数の燃料配置パターンに対して、数値計算を実施する必要がある。したがって、計算体系によっては、重みを大きくしても収束解が得られない場合があることが想定される。また仮に収束解が得られるとしても、多数の計算体系で収束するためには、重み w を大きくする必要があると想定される。重み w を大きくすれば収束性は安定するが、LG 反復回数が増加してしまい、計算コストが増大する。その結果 POD による計算コスト低減効果が小さくなってしまう。

次に、炉心体系への適用の困難さについて説明する。本手法では、local 計算として固有値計算を実施する必要がある。炉心体系では、本検証で用いた多集合体系の周りを反射体領域で囲んだ体系である。反射体領域は、 H_2O のみからなる領域であり、核分裂反応を起こさない。すなわち、単一の反射体領域に対して k_{eff} 固有値計算は実施することができない。したがって、反射体を含んだ炉心体系に対して提案手法を適用することは困難である。

4.4 本章のまとめ

本章では、NUMA 法を用いた POD local/global 反復計算 (POD LG 反復計算) を提案し、小規模正方形多集合体体系と大規模な凸型多集合体体系で提案手法の有効性を検証した。本検証結果より、2次元多集合体体系の全中性子束分布を高精度に評価できることを確認することができた。

4.2 節では、NUMA 法を用いた POD LG 反復計算理論を説明した。POD LG 反復法では、各集合体の詳細メッシュ拡散計算 (local 計算) に POD を適用し、体系全体の粗メッシュ拡散計算 (global 計算) と交互に反復する。本章では、local 計算を固有値計算とし、各 local 計算の境界条件をアルベド値で与えた。POD LG 反復計算の収束過程で、新たに考案した NUMA 法を用いて集合体境界面のアルベド値を更新する。NUMA 法では、local 計算結果と global 計算結果を組み合わせることで、集合体境界面のアルベド値空間分布を評価する。

こうした反復計算により、集合体境界面のアルベド値を適切に更新でき、最終的に各 local 体系内の詳細な全中性子束分布を評価できる。

4.3 節では、提案手法の有効性検証内容および結果を説明した。本検証では、目標誤差を「全中性子束相対誤差平均値 $rRMSE$ が 0.1%以下」および「実効増倍率誤差 Δk_{eff} が 0.01%以下」とした。

UO₂ 燃料集合体および MOX 燃料集合体の POD 基底は、Wilks の手法を用いた POD 展開次数探索手法により評価した。得られた UO₂ 燃料集合体および MOX 燃料集合体の POD 展開次数は、それぞれ 41, 42 次であった。

詳細メッシュ拡散計算結果を参照解として、提案手法の誤差を評価した結果、小規模正方形多集合体体系と大規模な凸型多集合体体系において、①NUMA 法を用いることで、集合体間境界面のアルベド値空間分布を適切に推定できること②提案手法により、全中性子束 $rRMSE$ および実効増倍率誤差 Δk_{eff} が目標誤差をともに満足することを確認できた。

本検証結果より、NUMA 法を用いた POD LG 反復法により、2次元多集合体体系を対象とした拡散計算に適用可能な POD 計算を実現できた。一方で、提案手法により収束解を得るためには、NUMA 法を用いたアルベド値評価時に後退加速を用いる必要があり、数値的に不安定であるという課題が明らかとなった。また、反射体を含めた炉心体系への適用が困難な点、といった根本的な課題があることも述べた。

これらの課題を解決すべく、次章では local 計算を固定源計算とした POD LG 反復法の開発を目指す。

4.5 参考文献

- [1] R. Elzohery and J. Roberts, “Modeling neutronic transients with Galerkin projection onto a greedy-sampled, POD subspace,” *Ann. Nucl. Energy*, **162**, 108487 (2021); <https://doi.org/10.1016/j.anucene.2021.108487>.
- [2] K. Tsujita, T. Endo, and A. Yamamoto, “Fast reproduction of time-dependent diffusion calculations using the reduced order model based on the proper orthogonal and singular value decompositions”, *J. Nucl. Sci. Technol.*, **58**(2), pp.173–183 (2021); <https://doi.org/10.1080/00223131.2020.1814891>.
- [3] K. Tsujita, T. Endo, and A. Yamamoto, “Efficient reduced order model based on the proper orthogonal decomposition for time-dependent MOC calculations,” *J. Nucl. Sci. Technol.*, **60**(3), pp. 343–357 (2023); <https://doi.org/10.1080/00223131.2022.2097963>.
- [4] N. Z. Cho, S. Yuk, and J. Lee, “Overlapping local/global iteration framework for monte carlo/diffusion nodal calculations,” *Trans. Am. Nucl. Soc.*, **102**(1), pp. 528–532 (2010).
- [5] N. Z. Cho, S. Yuk, H. J. Yoo et al , “Overlapping local/global iteration framework for whole-core transport solution,” *Nucl. Sci. Eng.*, **175**(3), pp. 227–238 (2013); <https://doi.org/10.13182/NSE12-68>.
- [6] S. Yuk and N. Z. Cho, “Whole-core transport solutions with 2-D/1-D fusion kernel via p-CMFD acceleration and p-CMFD embedding of nonoverlapping local/global iterations,” *Nucl. Sci. Eng.*, **181**(1), pp.1–16 (2015); <https://doi.org/10.13182/NSE14-88>.
- [7] B. Cho and N. Z. Cho, “A nonoverlapping local/global iterative method with 2-D/1-D fusion transport kernel and p-CMFD wrapper for transient reactor analysis,” *Ann. Nucl. Energy*, **85**, pp.937–957 (2016); <https://doi.org/10.1016/j.anucene.2015.07.012>.
- [8] B. Cho and N. Z. Cho, “Nonoverlapping local/global iterations with 2-D/1-D fusion transport kernel and p-CMFD wrapper for transient reactor analysis—II: parallelization and predictor–corrector quasi-static method application,” *Ann. Nucl. Energy*, **90**, pp.284–302 (2016); <https://doi.org/10.1016/j.anucene.2015.12.018>.
- [9] K. T. Clarno and M. L. Adams, “Capturing the effects of unlike neighbors in single–assembly calculations,” *Nucl. Sci. Eng.*, **149**(2), pp.182–196 (2005); <https://doi.org/10.13182/NSE04-31>.
- [10] S. S. Wilks, “Determination of sample sizes for setting tolerance limits,” *Ann. Math. Stat.*, **12**(1), pp. 91–96 (1941).
- [11] K. S. Smith, “Assembly homogenization techniques for light water reactor analysis,” *Prog. Nucl. Energy*, **17**(3), pp.303–335 (1986); [https://doi.org/10.1016/0149-1970\(86\)90035-1](https://doi.org/10.1016/0149-1970(86)90035-1).
- [12] T. Kozłowski, Y. Xu, T. J. Downar et al., “Cell homogenization method for pin-by-pin neutron transport calculations,” *Nucl. Sci. Eng.*, **169**(1), pp.1–18 (2011); <https://doi.org/10.13182/NSE08-85>.

- [13] 辻田浩介, “Characteristics 法を用いた動特性計算に関する研究”, 修士論文, 名古屋大学 (2013).
- [14] OECD/NEA, *Benchmark on deterministic transport calculations without spatial homogenization*, Nuclear Energy Agency, (2005).
- [15] A. Yamamoto, A. Giho, Y. Kato, et al., “GENESIS A three-dimensional heterogeneous transport solver based on the Legendre polynomial expansion of angular flux method,” *Nucl. Sci. Technol.*, **186**(1), pp. 1–22 (2017); <https://doi.org/10.1080/00295639.2016.1273002>.
- [16] A. Yamamoto, A. Giho, T. Endo, “Recent developments in the GENESIS code based on the Legendre polynomial expansion of angular flux method,” *Nucl. Eng. Technol.*, **49**(6), pp. 1143–1156 (2017); <https://doi.org/10.1016/j.net.2017.06.016>.

第5章 Fixed POD local/global 反復法に基づく拡散計算手法

5.1 本章の概要

前章で考案した NUMA 法を用いた POD local/global 反復法 (NUMA 法を用いた POD LG 反復法) には、①数値的に不安定かつ②反射体を含めた炉心体系への適用が困難といった 2 つの課題があった。本章では、上述した課題を解決することを目的とした。

前章では、local 計算を固有値計算としたが、local 計算を固定源計算としても LG 反復計算を実施できる[1]–[3]。本論文では、local 計算を固定源計算とした local/global 反復法を Fixed LG 反復法と呼ぶ。本手法における local 計算では、流入部分中性子流および核分裂源を固定源とする。ゆえに、核分裂が生じない反射体領域においても、流入部分中性子流が 0 でなければ、local 計算を実施できる。すなわち、Fixed LG 反復法を用いることで、反射体領域を含む炉心体系内の全中性子束分布を評価できる。

以上を踏まえて、本章では、Fixed LG 反復法[1]–[3]と POD を組み合わせた Fixed POD LG 反復法を提案する。提案手法を用いて 2 次元小規模正方形炉心体系および大規模凸型炉心体系で、詳細メッシュ拡散計算を精度よく再現可能か調査する。さらに、p-CMFD 加速法を用いた全炉心詳細メッシュ拡散計算と提案手法による拡散計算の計算時間を比較する。

5.2 節では、提案手法の計算理論について説明する。まず、local/global 反復計算の全体像を説明する。その後、各計算部分について、より詳細に説明する。まず local 計算について説明し、均質化および補正係数の計算、global 計算、流入部分中性子流および核分裂源の更新、各集合体内の全中性子束分布再構成の順に説明を続ける。

5.3 節では、2 次元炉心体系への提案手法の適用結果を説明する。まず、提案手法を適用する計算体系および計算条件を説明する。次に、2 次元単一集合体および反射体領域の POD 基底評価手順を説明し、得られた POD 基底を示す。最後に、2 次元炉心体系に対して提案手法を適用した結果を示す。

最後に 5.4 節で、本章のまとめを述べる。

5.2 計算理論

本節では、local 計算を固定源計算とした POD local/global 反復法 (Fixed POD LG 反復法) に基づく拡散計算理論を説明する。

Fixed POD LG 反復法に基づく拡散計算フローを **Fig. 5.1**

に示す。

まず、POD LG 反復計算を実施する前に、前章と同様にして、各集合体の POD 基底を事前に計算する。重要な点は、アルベド値を与えた固有値計算により準備した snapshot データに基づいて集合体の POD 基底を評価する点である。すなわち、Fixed POD LG では、固有値計算により評価した POD 基底を用いて、各 local 体系の固定源計算を実施する。詳細な POD 基底評価手順は 5.3.2 項で説明する。

POD LG 反復法では、まず炉心を構成するそれぞれの単一集合体を対象とした詳細メッシ

拡散計算（local 計算）を実施する。local 計算では、核分裂源および流入部分中性子流が固定源として与えられる。この時、POD を活用して次元削減した POD 展開係数に関する方程式を解くことで、POD 展開係数を得る。次に、local 計算より得られた POD 展開係数と POD 基底を用いて、単一集合体の均質化、部分中性子流の補正係数計算を実施する。集合体内均質化断面積および補正係数を用いて、全炉心の粗メッシュ拡散計算（global 計算）を実施する。その後、local 計算結果および global 計算結果を用いて単一集合体間の流入部分中性子流 J^{in} および核分裂源 P を更新する。このとき、 J^{in} および P の空間分布は local 計算結果に基づいて更新され、その大きさは global 計算結果で規格化される。更新された流入部分中性子流および核分裂源の下、再度 local 計算を実施する。local/global 反復計算が収束した後、POD 展開係数と POD 基底を用いて、各集合体内の詳細メッシュ全中性子束分布を再構成する。

本手法では、local 計算を並列化した。固定源を与えれば、各 local 計算は互いに独立であるため、比較的容易に並列化できる。

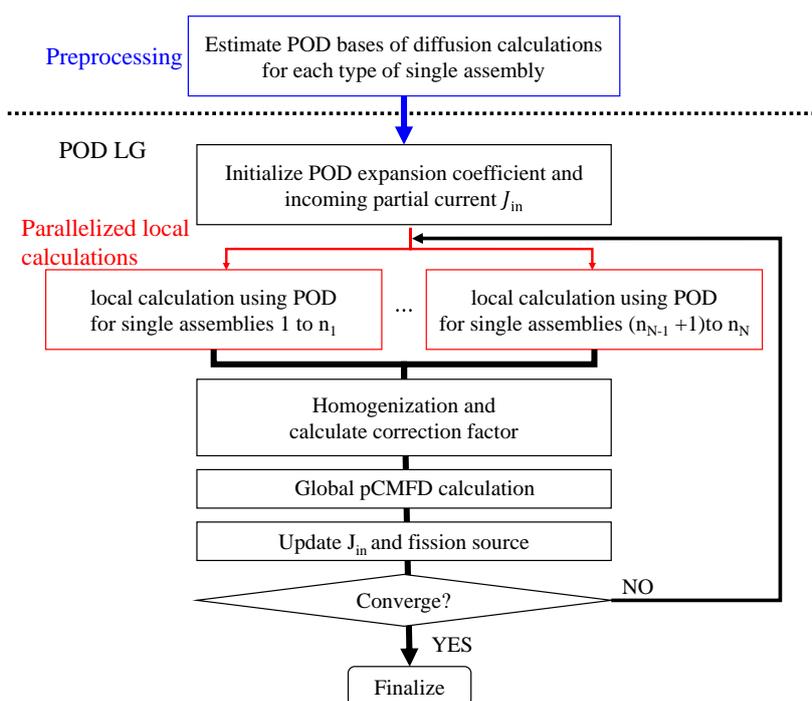


Fig. 5.1 Fixed POD LG 反復法に基づく拡散計算フロー

5.2.1 POD を用いた固定源 local 計算

本項では、POD を用いた固定源 local 計算を説明する。集合体内の x,y 方向空間メッシュ数をそれぞれ NX,NY とし、総メッシュ数を NR とする。また、POD 基底数を r とする。まず、固定源拡散計算で解くべき方程式の導出過程を簡単に説明する。次に、POD を用いた固定源拡散計算について説明する。

● 固定源拡散方程式

2.2.5 項で説明したように、エネルギー・空間的に離散化された 2 次元拡散方程式は次式で記述できる。

$$\frac{J_{g,i,j}^{x+} - J_{g,i,j}^{x-}}{\Delta x_i} + \frac{J_{g,i,j}^{y+} - J_{g,i,j}^{y-}}{\Delta y_j} + \Sigma_{r,g,i,j} \phi_{g,i,j} = P_{g,i,j} + \sum_{g' \neq g} \Sigma_{s,g' \rightarrow g,i,j} \phi_{g',i,j} \quad (5.1)$$

上式中の各変数の意味は以下のとおりである。

- $\phi_{g,i,j}$: (i,j) 番目のメッシュ、エネルギー g 群、全中性子束
- $J_{g,i,j}^{x\mp}$: (i,j) 番目のメッシュの X 負/正方向境界面におけるエネルギー g 群、正味の中性子流
- Δx_i : x 方向の i 番目メッシュにおける x 方向メッシュ長さ
- Δy_j : y 方向の j 番目メッシュにおける y 方向メッシュ長さ
- $\Sigma_{r,g,i,j}$: (i,j) 番目のメッシュ、エネルギー g 群の除去断面積
- $P_{g,i,j}$: (i,j) 番目のメッシュ、エネルギー g 群の核分裂源
- $\Sigma_{s,g' \rightarrow g,i,j}$: (i,j) 番目のメッシュ、エネルギー $g' \rightarrow g$ への散乱断面積

x 方向メッシュ境界面における正味の中性子流は、有限体積法に基づくと、次式のように記述できる。

$$J_{g,i,j}^{x\mp} = \pm \frac{2D_{g,i,j}D_{g,i\mp 1,j}}{D_{g,i,j}\Delta x_{i\mp 1} + D_{g,i\mp 1,j}\Delta x_i} (\phi_{g,i\mp 1,j} - \phi_{g,i,j}) \quad (5.2)$$

上式中の $D_{g,i,j}$ は (i,j) 番目のメッシュ、エネルギー g の拡散係数である。

固定源計算では、流入部分中性子流により境界条件を与える。ゆえに、固定源拡散計算で解くべき方程式を導出するためには、local 体系の外部境界面における正味の中性子流を全中性子束および流入部分中性子流で表現する必要がある。

まず、 (i,j) 番目メッシュの x 負方向境界面を考える。2.2.4 項で説明したように、この境界面で流入部分中性子流は、表面中性子束 $\phi_{s,g,i,j}^{x-}$ および正味の中性子流 $J_{g,i,j}^{x-}$ を用いて次式で記述できる。

$$J_{g,i,j}^{in,x-} = \frac{1}{4} \phi_{s,g,i,j}^{x-} + \frac{1}{2} J_{g,i,j}^{x-} \quad (5.3)$$

上式中の各変数の意味は以下のとおりである。

- $\phi_{s,g,i,j}^{x-}$: (i,j) 番目メッシュの x 負方向境界面上のエネルギー g 群表面中性子束
- $J_{g,i,j}^{x-}$: (i,j) 番目メッシュの x 負方向境界面上のエネルギー g 群、正味の中性子流
- $J_{g,i,j}^{in,x-}$: (i,j) 番目メッシュの x 負方向境界面に境界条件として与えたエネルギー g 群、流入部分中性子流

有限体積法に基づくと、正味の中性子流 $J_{g,i,j}^{x-}$ は $\phi_{s,g,i,j}^{x-}$ を用いて次式で記述できる。

$$J_{g,i,j}^{x-} = -\frac{2D_{g,i,j}}{\Delta x_i} (\phi_{g,i,j} - \phi_{s,g,i,j}^{x-}) \quad (5.4)$$

(5.4)式を(5.3)式に代入することで、次式が得られる。

$$\frac{1}{4}\phi_{s,g,i,j}^{x-} - \frac{D_{g,i,j}}{\Delta x_i} (\phi_{g,i,j} - \phi_{s,g,i,j}^{x-}) = J_{g,i,j}^{in,x-} \quad (5.5)$$

(5.5)式を $\phi_{s,g,i,j}^{x-}$ について解くことで、次式が得られる。

$$\phi_{s,g,i,j}^{x-} = \frac{4D_{g,i,j}}{4D_{g,i,j} + \Delta x_i} \phi_{g,i,j} + \frac{4\Delta x_i}{4D_{g,i,j} + \Delta x_i} J_{g,i,j}^{in,x-} \quad (5.6)$$

さらに(5.6)式を(5.4)式に代入することで、正味の中性子流に関する(5.7)式が得られる。

$$J_{g,i,j}^{x-} = -\frac{2D_{g,i,j}}{4D_{g,i,j} + \Delta x_i} \phi_{g,i,j} + \frac{8D_{g,i,j}}{4D_{g,i,j} + \Delta x_i} J_{g,i,j}^{in,x-} \quad (5.7)$$

(5.7)式の第1項は、P1近似における Marshak の真空境界条件 ($J^{in} = 0$) 下の正味の中性子流と一致する。

同様に、 (i,j) 番目メッシュの x 正方向境界面における表面中性子束 $\phi_{s,g,i,j}^{x+}$ は次式のよ
うに記述できる。

$$\phi_{s,g,i,j}^{x+} = \frac{4D_{g,i,j}}{4D_{g,i,j} + \Delta x_i} \phi_{g,i,j} + \frac{4\Delta x_i}{4D_{g,i,j} + \Delta x_i} J_{g,i,j}^{in,x+} \quad (5.8)$$

上添え字 $x+$ は、注目するメッシュの x 正方向境界面を意味する。正味の中性子流は、次式
のように記述できる。

$$J_{g,i,j}^{x+} = \frac{2D_{g,i,j}}{4D_{g,i,j} + \Delta x_i} \phi_{g,i,j} - \frac{8D_{g,i,j}}{4D_{g,i,j} + \Delta x_i} J_{g,i,j}^{in,x+} \quad (5.9)$$

x 正方向境界面における正味の中性子流に関する(5.9)式の右辺は、 x 負方向境界面における
正味の中性子流に関する(5.7)式の右辺と符号が反転している点に留意されたい。

y 方向の正味の中性子流についても同様に計算できる。以上の手順で正味の中性子流
を全中性子束と流入部分中性子流を用いて表現することで(5.1)式は(5.10)式のように記述
できる。

$$\begin{aligned} & A_{g,i,j}^{x-} \phi_{g,i-1,j} + A_{g,i,j}^{x+} \phi_{g,i+1,j} + A_{g,i,j}^{y-} \phi_{n',g,i,j-1} + A_{g,i,j}^{y+} \phi_{g,i,j+1} + A_{g,i,j}^0 \phi_{g,i,j} \\ &= P_{g,i,j} + \sum_{g' \neq g} \Sigma_{s,g' \rightarrow g,i,j} \phi_{0,g',i,j} + \sum_{x=y} (D_{g,i,j}^{in,x-} J_{g,i,j}^{in,x-} + D_{g,i,j}^{in,x+} J_{g,i,j}^{in,x+}) \end{aligned} \quad (5.10)$$

上式中の消滅係数 $A_{g,i,j}^{x\mp}$, $A_{g,i,j}^{y\mp}$, $A_{g,i,j}^0$ および $D_{g,i,j}^{in,x\mp}$, $D_{g,i,j}^{in,y\mp}$ は、それぞれ(5.11)式-(5.15)式で記述
できる。

$$A_{g,i,j}^{x\mp} = \begin{cases} -\frac{2D_{g,i,j}}{(4D_{g,i,j} + \Delta x_i)\Delta x_i} & (O.B. x\mp) \\ -\frac{2D_{g,i,j}D_{g,i\mp 1,j}}{(D_{g,i,j}\Delta x_{i\mp 1} + D_{g,i\mp 1,j}\Delta x_i)\Delta x_i} & (not O.B. x\mp) \end{cases} \quad (5.11)$$

$$A_{g,i,j}^{y\mp} = \begin{cases} -\frac{2D_{g,i,j}}{(4D_{g,i,j} + \Delta y_j)\Delta y_j} & (O.B.y\mp) \\ -\frac{2D_{g,i,j}D_{g,i,j\mp 1}}{(D_{g,i,j}\Delta y_{j\mp 1} + D_{g,i,j\mp 1}\Delta y_j)\Delta y_j} & (not O.B.y\mp) \end{cases} \quad (5.12)$$

$$A_{g,i,j}^0 = \Sigma_{r,g,i,j} - A_{g,i,j}^{x-} - A_{g,i,j}^{x+} - A_{g,i,j}^{y-} - A_{g,i,j}^{y+} \quad (5.13)$$

$$D_{g,i,j}^{in,x\mp} = \begin{cases} \frac{8D_{g,i,j}}{(4D_{g,i,j} + \Delta x_i)\Delta x_i} & (O.B.x\mp) \\ 0 & (not O.B.x\mp) \end{cases} \quad (5.14)$$

$$D_{g,i,j}^{in,y\mp} = \begin{cases} \frac{8D_{g,i,j}}{(4D_{g,i,j} + \Delta y_j)\Delta y_j} & (O.B.y\mp) \\ 0 & (not O.B.y\mp) \end{cases} \quad (5.15)$$

上式中の各記号の意味は以下の通りである

$O.B.X\mp$: local 体系の X 負/正方向の外部境界面に接する空間メッシュ

$not O.B.X\mp$: local 体系の X 負/正方向の外部境界面に接しない空間メッシュ

外部境界における消滅係数 $A_{g,i,j}^{x\mp}$, $A_{g,i,j}^{y\mp}$, $A_{g,i,j}^0$ は、2.2.4 項で説明した拡散計算に関するアルベド境界条件下の消滅係数についてアルベド値をともに 0 とした、すなわち P1 近似における Marshak の真空境界条件 ($J^{in} = 0$) とした係数と一致する。

local 体系全体の拡散方程式(5.1)式は 1 組の連立方程式をなす。この連立方程式を行列とベクトルを用いて表現することで、固定源 local 計算で解くべき方程式を(5.16)式で記述できる。

$$\mathbf{A}_g^{M.V.} \vec{\phi}_g = \vec{P}_g + \sum_{g' \neq g} \mathbf{S}_{g' \rightarrow g} \vec{\phi}_{g'} + \sum_{X=x,y} (\mathbf{D}_g^{in,X-} \vec{j}_g^{in,X-} + \mathbf{D}_g^{in,X+} \vec{j}_g^{in,X+}) \quad (5.16)$$

上式中の各変数の意味は以下のとおりである。

$\vec{\phi}_g \in \mathbb{R}^{NR}$: エネルギー g 群の全中性子束分布

$\vec{P}_g \in \mathbb{R}^{NR}$: エネルギー g 群の核分裂源分布

$\mathbf{A}_g^{M.V.} \in \mathbb{R}^{NR \times NR}$: P1 近似における Marshak の真空境界条件 ($J^{in} = 0$) におけるエネルギー g 群の消滅係数行列

$\mathbf{S}_{g' \rightarrow g} \in \mathbb{R}^{NR \times NR}$: エネルギー g' 群 $\rightarrow g$ 群への散乱断面積行列

$\vec{j}_g^{in,X\mp} \in \mathbb{R}^{NR}$: X 負/正方向の集合体外部境界から流入する流入部分中性子流

$\mathbf{D}_g^{in,X\mp} \in \mathbb{R}^{NR \times NR}$: X 負/正方向の集合体外部境界から体系への中性子流入量に関する係数行列

消滅行列 $\mathbf{A}_g^{M.V.}$ 、散乱断面積行列 $\mathbf{S}_{g' \rightarrow g}$ 、流入係数行列 $\mathbf{D}_g^{in,X\mp}$ 、全中性子束の空間分布 $\vec{\phi}_g$ 、核

ただし、(5.17)式中の消滅係数 $A_{g,i,j}^{x\mp}$ 、 $A_{g,i,j}^{y\mp}$ 、 $A_{g,i,j}^0$ は、(5.11)式–(5.13)式で定義した消滅係数である。 $J_{g,i,j}^{in,x\mp}$ は、 X 負/正方向の外部境界面で、境界条件として与えた流入部分中性子流値をとり、メッシュ境界面では0である。

● **POD を用いた固定源拡散計算**

(5.16)式の固定源計算に POD を用いた次元削減を適用する。具体的には、固有値計算に対する次元削減適用手順と同様に、(5.16)式の $\vec{\phi}_g$ に次式を代入した後、(5.16)式の左から \mathbf{U}_g の転置行列 \mathbf{U}_g^T をかける。

$$\vec{\phi}_g = \mathbf{U}_g \vec{h}_g \quad (5.22)$$

POD 展開次数を r とすると、行列 \mathbf{U}_g は次式のように、集合体内の全中性子束に関するエネルギー g 群 POD 基底 $\vec{u}_{b,g}$ を r 本並べた行列として定義される。

$$\mathbf{U}_g = (\vec{u}_{1,g} \quad \cdots \quad \vec{u}_{r,g}) \quad (5.23)$$

上記の手順により POD を用いた次元削減を適用することで、次式の POD 展開係数に関する方程式が得られる。

$$\hat{\mathbf{A}}_g^{M.V.} \vec{h}_g = \vec{p}_g + \sum_{g' \neq g} \hat{\mathbf{S}}_{g' \rightarrow g} \vec{h}_{g'} + \sum_{X=x,y} (\hat{\mathbf{D}}_g^{in,X-} \vec{j}_g^{in,X-} + \hat{\mathbf{D}}_g^{in,X+} \vec{j}_g^{in,X+}) \quad (5.24)$$

ただし、上式中の $\hat{\mathbf{A}}_g^{M.V.}$ 、 $\hat{\mathbf{S}}_{g' \rightarrow g}$ は r 行 r 列の正方行列であり、それぞれ(5.25)式および(5.26)式で定義される。

$$\hat{\mathbf{A}}_g^{M.V.} = \mathbf{U}_g^T \mathbf{A}_g^{M.V.} \mathbf{U}_g \quad (5.25)$$

$$\hat{\mathbf{S}}_{g' \rightarrow g} = \mathbf{U}_g^T \mathbf{S}_{g' \rightarrow g} \mathbf{U}_{g'} \quad (5.26)$$

上式の上添え字 \mathbf{T} は行列の転置を意味する。 \vec{p}_g は r 次元のベクトルであり、次式で定義される。

$$\vec{p}_g = \mathbf{U}_g^T \vec{p}_g \quad (5.27)$$

$\hat{\mathbf{D}}_g^{in,X\mp}$ は r 行 NR 列の正方行列であり、次式で定義される。

$$\hat{\mathbf{D}}_g^{in,X\mp} = \mathbf{U}_g^T \mathbf{D}_g^{in,X\mp} \quad (5.28)$$

流入部分中性子流 $\vec{j}_g^{in,x\mp}$ 、 $\vec{j}_g^{in,y\mp}$ および核分裂源 $\vec{\delta}_g$ は、local 計算結果と global 計算結果を用いて更新される。核分裂源および流入部分中性子流の更新手順は項で詳しく説明する。

本研究では、LU 分解により POD 展開係数に関する方程式(5.24)式を解く。さらに、提案手法による計算時間を高速化するために、OpenMP[4]を用いて、local 計算を並列で実行する。

5.2.2 部分中性子流の補正係数評価

local 計算後、local 体系の詳細メッシュを 1 集合体 1 メッシュとして均質化した上で、global 計算を実施する。global 計算を実施するためには、①均質化断面積と②正味の中性子流の補正係数が必要である。各断面積の均質化手順は、4.2.4 項と同様である。第 4 章では、不連続因子[5]を用いて正味の中性子流を補正した。一方本章では、p-CMFD 法[6]に基づき、正味の中性子流を補正する。本項では、local 計算結果を用いた p-CMFD 法に基づく部分中性子流の補正係数評価手順を説明する。

以下では、 (i, j) 番目メッシュと $(i + 1, j)$ 番目メッシュの境界面 $(i + 1/2, j)$ を考える。正味の中性子流 J は (i, j) 番目メッシュの x 正方向境界面における流入/流出部分中性子流 $J^{in/out}$ を用いて次式で記述できる。

$$J_{g,i+1/2,j} = J_{g,i,j}^{out,x+} - J_{g,i,j}^{in,x+} \quad (5.29)$$

上式より、各部分中性子流が保存される場合、正味の中性子流も保存される。本手法では、各部分中性子流を補正するために p-CMFD 法[6]に基づく補正係数を用いる。ここで、 $J_{g,i,j}^{in,x+}$ は境界面 $(i + 1/2, j)$ を通って、 $(i + 1, j)$ 番目のメッシュから流出する部分中性子流であり、(5.30)式が成り立つ。

$$J_{g,i,j}^{in,x+} = J_{g,i+1,j}^{out,x-} \quad (5.30)$$

(5.30)式を(5.29)式に代入することで、境界面 $(i + 1/2, j)$ における正味の中性子流は次式で記述できる。

$$J_{g,i+1/2,j} = J_{g,i,j}^{out,x+} - J_{g,i+1,j}^{out,x-} \quad (5.31)$$

上式より、各流出部分中性子流の補正係数が得られれば、正味の中性子流を保存できる。ここで、local/global 反復計算では、local 計算結果から補正係数を計算しなければならない。この場合、補正係数を求める準備として、local 計算における単一集合体境界面における流出部分中性子流を求める必要がある。そのために、まず表面中性子束および正味の中性子流を求める。以下では、Fig. 4.3 のように境界面 $(i + 1/2, j)$ が、 (I, J) 番目の local 体系と $(I, J + 1)$ 番目の local 体系の境界面に属するとする。local 計算では、境界条件として、流入部分中性子流が与えられる。 x 負方向境界面では、表面中性子束 ϕ_s および正味の中性子流 J はそれぞれ (5.6)式および(5.7)式で表現でき、 x 正方向境界面では、(5.8)式および(5.9)式で表現できる。

P1 近似では、 x 負/正方向の流出部分中性子流は、表面中性子束と正味の中性子流を用いて、それぞれ(5.32)式および(5.33)式から計算できる。

$$J_{g,i+1,j}^{out,L,x-} = \frac{1}{4} \phi_{s,g,i+1,j}^{L,x-} - \frac{1}{2} J_{g,i+1,j}^{L,x-} \quad (5.32)$$

$$J_{g,i+1,j}^{out,L,x+} = \frac{1}{4}\phi_{s,g,i+1,j}^{L,x+} + \frac{1}{2}J_{g,i+1,j}^{L,x+} \quad (5.33)$$

上添え字 L は local 体系の量を意味する。(5.32)式に(5.6)式および(5.7)式を代入し、(2.205)式に(5.8)式および(5.9)式を代入し、整理することで(5.34)式および(5.35)式が得られる。

$$J_{g,i+1,j}^{out,L,x-} = \frac{2D_{g,i+1,j}}{4D_{g,i+1,j} + \Delta x_{i+1}}\phi_{g,i+1,j} - \frac{4D_{g,i+1,j} - \Delta x_{i+1}}{4D_{g,i+1,j} + \Delta x_{i+1}}J_{g,i+1,j}^{in,x-} \quad (5.34)$$

$$J_{g,i,j}^{out,L,x+} = \frac{2D_{g,i,j}}{4D_{g,i,j} + \Delta x_i}\phi_{g,i,j} - \frac{4D_{g,i,j} - \Delta x_i}{4D_{g,i,j} + \Delta x_i}J_{g,i,j}^{in,x+} \quad (5.35)$$

以上のようにして、全中性子束 ϕ_g および流入部分中性子流 J_g^{in} を用いて、流出部分中性子流 J_g^{out} を表現できる。

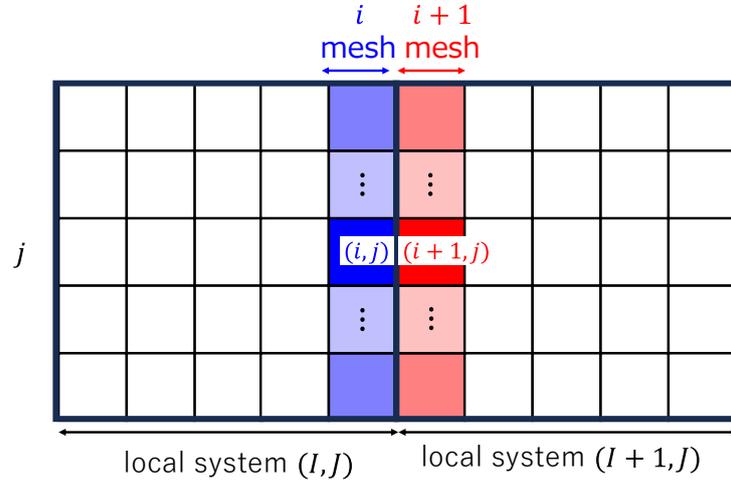


Fig. 5.2 (i, j) 番目メッシュと $(i+1, j)$ 番目メッシュの位置

次に、 $J_{g,i+1,j}^{out,L,x-}$ および $J_{g,i,j}^{out,L,x+}$ を用いて、流出部分中性子流の補正係数を求める。p-CMFD法では、global 体系の流出部分中性子流 $\bar{J}_{g,i+1,j}^{out,G,x-}$ および $\bar{J}_{g,i,j}^{out,G,x+}$ はそれぞれ(5.36)式および(5.37)式から計算される[1],[2]。

$$\bar{J}_{g,i+1,j}^{out,G,x-} = \frac{D_{g,i,j}^G D_{g,i+1,j}^G (\bar{\phi}_{g,i+1,j}^G - \bar{\phi}_{g,i,j}^G)}{D_{g,i,j}^G \Delta x_{i+1}^G + D_{g,i+1,j}^G \Delta x_i^G} + D_{g,i+1,j}^{cor,x-} \bar{\phi}_{g,i+1,j}^G \quad (5.36)$$

$$\bar{J}_{g,i,j}^{out,G,x+} = -\frac{D_{g,i,j}^G D_{g,i+1,j}^G (\bar{\phi}_{g,i+1,j}^G - \bar{\phi}_{g,i,j}^G)}{D_{g,i,j}^G \Delta x_{i+1}^G + D_{g,i+1,j}^G \Delta x_i^G} + D_{g,i,j}^{cor,x+} \bar{\phi}_{g,i,j}^G \quad (5.37)$$

上式中の変数の意味は以下のとおりである。

上添え字 G : global 体系の量

$D_{g,i,j}^{cor,x-/x+}$: (I, J) 番目メッシュの x 負/正方向境界面におけるエネルギー g 群部分中性子流の補正係数

(5.36)式および(5.37)式を補正係数 $D_{g,I,J}^{cor,x-/x+}$ について解くことで、(5.38)式および(5.39)式が得られる。

$$D_{g,I+1,J}^{cor,x-} = \frac{\bar{J}_{g,I+1,J}^{out,G,x-} - \frac{D_{g,I,J}^G D_{g,I+1,J}^G (\bar{\phi}_{g,I+1,J}^G - \bar{\phi}_{g,I,J}^G)}{D_{g,I,J}^G \Delta x_{I+1}^G + D_{g,I+1,J}^G \Delta x_I^G}}{\bar{\phi}_{g,I+1,J}^G} \quad (5.38)$$

$$D_{g,I,J}^{cor,x+} = \frac{\bar{J}_{g,I,J}^{out,G,x+} + \frac{D_{g,I,J}^G D_{g,I+1,J}^G (\bar{\phi}_{g,I+1,J}^G - \bar{\phi}_{g,I,J}^G)}{D_{g,I,J}^G \Delta x_{g,I+1}^G + D_{g,I+1,J}^G \Delta x_I^G}}{\bar{\phi}_{g,I,J}^G} \quad (5.39)$$

LG 反復では、local 計算結果を用いて、補正係数 $D_{g,I+1,J}^{cor,x-}$ および $D_{g,I,J}^{cor,x+}$ を評価する。具体的には、補正係数 $D_{g,I+1,J}^{cor,x-}$ および $D_{g,I,J}^{cor,x+}$ は、(5.38)式および(5.39)式中の $\bar{\phi}_{g,I,J}^G$ および $\bar{J}_{g,I+1,J}^{out,G,x-}$ 、 $\bar{J}_{g,I,J}^{out,G,x+}$ を local 計算値に置き換えた(5.40)式および(5.41)式からそれぞれ計算する。

$$D_{g,I+1,J}^{cor,x-} = \frac{\bar{J}_{g,I+1,J}^{out,L,x-} - \frac{D_{g,I,J}^G D_{g,I+1,J}^G (\bar{\phi}_{g,I+1,J}^L - \bar{\phi}_{g,I,J}^L)}{D_{g,I,J}^G \Delta x_{I+1}^G + D_{g,I+1,J}^G \Delta x_I^G}}{\bar{\phi}_{g,I+1,J}^L} \quad (5.40)$$

$$D_{g,I,J}^{cor,x+} = \frac{\bar{J}_{g,I,J}^{out,L,x+} + \frac{D_{g,I,J}^G D_{g,I+1,J}^G (\bar{\phi}_{g,I+1,J}^L - \bar{\phi}_{g,I,J}^L)}{D_{g,I,J}^G \Delta x_{g,I+1}^G + D_{g,I+1,J}^G \Delta x_I^G}}{\bar{\phi}_{g,I,J}^L} \quad (5.41)$$

上式中の $\bar{\phi}_{g,I,J}^L$ は (I,J) 番目の local 体系内のエネルギー g 群全中性子束体積平均値であり、 $\bar{J}_{g,I,J}^{out,L,x-/x+}$ は (I,J) 番目 local 体系の x 負/正方向境界面におけるエネルギー g 群流出部分中性子流の面平均値である。 $\bar{\phi}_{g,I,J}^L$ および $\bar{J}_{g,I,J}^{out,L,x-/x+}$ はそれぞれ(5.42)式および(5.43)式で計算する。

$$\bar{\phi}_{g,I,J}^L = \frac{\sum_{(i,j) \in L_{I,J}} \phi_{g,i,j}^L \Delta x_i^L \Delta y_j^L}{S_{I,J}} \quad (5.42)$$

$$\bar{J}_{g,I,J}^{out,L,x-/x+} = \frac{\sum_{j \in LS_{I,J}^{x-/x+}} J_{g,i,j}^{out,L,x-/x+} \Delta y_j^L}{\sum_{j \in LS_{I,J}^{x-/x+}} \Delta y_j^L} \quad (5.43)$$

上式中の変数の意味は以下の通りである。

$S_{I,J}$: (I,J) 番目のメッシュの面積

$\sum_{(i,j) \in L_{I,J}}$: (I,J) 番目の local 体系内の空間メッシュの総和

$\sum_{j \in LS_{I,J}^{x-/x+}}$: (I,J) 番目の local 体系の x 負/正方向境界面に接するメッシュの総和

(5.40)式および(5.41)式で評価された補正係数により、均質化前後で local 計算の流出部分中性子流の面平均値を保存できる。同様にして、 (I,J) 番目と $(I,J+1)$ 番目のメッシュ境界面を考える。 y 方向の部分中性子流の補正係数 $D_{g,I,J+1}^{cor,y-}$ および $D_{g,I,J}^{cor,y+}$ は(5.44)式および(5.45)式から計算する。

$$D_{g,l,J+1}^{cor,y-} = \frac{\bar{J}_{g,l,J+1}^{out,L,y-} - \frac{D_{g,l,J}^G D_{g,l,J+1}^G (\bar{\phi}_{g,l,J+1}^L - \bar{\phi}_{g,l,J}^L)}{D_{g,l,J}^G \Delta y_{J+1}^G + D_{g,l,J+1}^G \Delta y_J^G}}{\bar{\phi}_{g,l,J+1}^L} \quad (5.44)$$

$$D_{g,l,J}^{cor,y+} = \frac{\bar{J}_{g,l,J}^{out,L,y+} + \frac{D_{g,l,J}^G D_{g,l,J+1}^G (\bar{\phi}_{g,l,J+1}^L - \bar{\phi}_{g,l,J}^L)}{D_{g,l,J}^G \Delta y_{J+1}^G + D_{g,l,J+1}^G \Delta y_J^G}}{\bar{\phi}_{g,l,J}^L} \quad (5.45)$$

$\bar{J}_{g,l,J}^{out,L,y-/y+}$ は (l,J) 番目メッシュの y 負/正方向境界面における流出部分中性子流であり、次式で計算する。

$$\bar{J}_{g,l,J}^{out,L,y-/y+} = \frac{\sum_{i \in LS_{l,J}^{y-/y+}} \bar{J}_{g,i,j}^{out,L,y-/y+} \Delta x_i^L}{\sum_{i \in LS_{l,J}^{y-/y+}} \Delta x_i^L} \quad (5.46)$$

ただし、 $\sum_{i \in LS_{l,J}^{y-/y+}}$ は (l,J) 番目の local 体系の y 負/正方向境界面に接するメッシュの総和を意味する。

こうして、local 計算結果に基づき、部分中性子流の補正係数を評価することができる。

5.2.3 p-CMFD 法に基づく global 計算

本項では、p-CMFD 法[6]に基づく粗メッシュ拡散計算について説明する。

(5.40)式および(5.41)式より求めた補正係数 $D_{g,l+1,J}^{cor,x-}$ および $D_{g,l,J}^{cor,x+}$ を用いて、 $(l+1/2,J)$ 境界面における x 方向の正味の中性子流は次式で記述できる。

$$\bar{J}_{g,l+1/2,J}^G = -\frac{2D_{g,l,J}^G D_{g,l+1,J}^G (\bar{\phi}_{g,l+1,J}^G - \bar{\phi}_{g,l,J}^G)}{D_{g,l,J}^G \Delta x_{l+1}^G + D_{g,l+1,J}^G \Delta x_l^G} + D_{g,l,J}^{cor,x+} \bar{\phi}_{g,l,J}^G - D_{g,l+1,J}^{cor,x-} \bar{\phi}_{g,l+1,J}^G \quad (5.47)$$

同様に、(5.44)式および(5.45)式から求めた補正係数 $D_{g,l,J+1}^{cor,y-}$ および $D_{g,l,J}^{cor,y+}$ を用いて、 $(l,J+1/2)$ 境界面における y 方向の正味の中性子流は次式で記述できる。

$$\bar{J}_{g,l,J+1/2}^G = -\frac{2D_{g,l,J}^G D_{g,l,J+1}^G (\bar{\phi}_{g,l,J+1}^G - \bar{\phi}_{g,l,J}^G)}{D_{g,l,J}^G \Delta y_{J+1}^G + D_{g,l,J+1}^G \Delta y_J^G} + D_{g,l,J}^{cor,y+} \bar{\phi}_{g,l,J}^G - D_{g,l,J+1}^{cor,y-} \bar{\phi}_{g,l,J+1}^G \quad (5.48)$$

ここで、離散化された 2 次元拡散方程式は次式で記述される。

$$\begin{aligned} & \frac{\bar{J}_{g,l+1/2,J}^G - \bar{J}_{g,l-1/2,J}^G}{\Delta x_l^G} + \frac{\bar{J}_{g,l,J+1/2}^G - \bar{J}_{g,l,J-1/2}^G}{\Delta y_J^G} + \Sigma_{r,g,l,J}^G \bar{\phi}_{g,l,J}^G \\ & = \frac{\chi_{g,l,J}^G}{k_{\text{eff}}} \sum_{g'} \nu \Sigma_{f,g',l,J}^G \bar{\phi}_{g',l,J}^G + \sum_{g' \neq g} \Sigma_{s,g' \rightarrow g,l,J}^G \phi_{g',l,J}^G \end{aligned} \quad (5.49)$$

(5.49)式に(5.47)式および(5.48)式を代入して整理することで、次式のような 5 点階差の方程式が得られる。

$$\begin{aligned}
& A_{g,l,j}^{x-} \bar{\phi}_{g,l-1,j}^G + A_{g,l,j}^{x+} \bar{\phi}_{g,l+1,j}^G + A_{g,l,j}^{y-} \bar{\phi}_{g,l,j-1}^G + A_{g,l,j}^{y+} \bar{\phi}_{g,l,j+1}^G + A_{g,l,j}^0 \bar{\phi}_{g,l,j}^G \\
& = \frac{\chi_{g,l,j}^G}{k_{\text{eff}}^G} \sum_{g'} \nu \Sigma_{f,g',l,j}^G \bar{\phi}_{g',l,j}^G + \sum_{g' \neq g} \Sigma_{s,g' \rightarrow g,l,j}^G \phi_{g',l,j}^G
\end{aligned} \tag{5.50}$$

ただし、 $A_{g,l,j}^{x-/x+}$, $A_{g,l,j}^{y-/y+}$, $A_{g,l,j}^0$ はそれぞれ(5.51)式-(5.55)式で定義される。

$$A_{g,l,j}^{x-} = -\frac{2D_{g,l-1,j}^G D_{g,l,j}^G}{(D_{g,l-1,j}^G \Delta x_l^G + D_{g,l,j}^G \Delta x_{l-1}^G) \Delta x_l^G} - \frac{D_{g,l-1,j}^{\text{cor},x+}}{\Delta x_l^G} \tag{5.51}$$

$$A_{g,l,j}^{x+} = -\frac{2D_{g,l,j}^G D_{g,l+1,j}^G}{(D_{g,l,j}^G \Delta x_{l+1}^G + D_{g,l+1,j}^G \Delta x_l^G) \Delta x_l^G} - \frac{D_{g,l+1,j}^{\text{cor},x-}}{\Delta x_l^G} \tag{5.52}$$

$$A_{g,l,j}^{y-} = -\frac{2D_{g,l,j-1}^G D_{g,l,j}^G}{(D_{g,l,j-1}^G \Delta y_j^G + D_{g,l,j}^G \Delta y_{j-1}^G) \Delta y_j^G} - \frac{D_{g,l,j-1}^{\text{cor},y+}}{\Delta y_j^G} \tag{5.53}$$

$$A_{g,l,j}^{y+} = -\frac{2D_{g,l,j}^G D_{g,l,j+1}^G}{(D_{g,l,j}^G \Delta y_{j+1}^G + D_{g,l,j+1}^G \Delta y_j^G) \Delta y_j^G} - \frac{D_{g,l,j+1}^{\text{cor},y-}}{\Delta y_j^G} \tag{5.54}$$

$$\begin{aligned}
A_{g,l,j}^0 & = \Sigma_{r,g,l,j}^G - (A_{g,l,j}^{x-} + A_{g,l,j}^{x+} + A_{g,l,j}^{y-} + A_{g,l,j}^{y+}) \\
& + \frac{(D_{g,l,j}^{\text{cor},x-} - D_{g,l-1,j}^{\text{cor},x+}) + (D_{g,l,j}^{\text{cor},x+} - D_{g,l+1,j}^{\text{cor},x-})}{\Delta x_l^G} \\
& + \frac{(D_{g,l,j}^{\text{cor},y-} - D_{g,l,j-1}^{\text{cor},y+}) + (D_{g,l,j}^{\text{cor},y+} - D_{g,l,j+1}^{\text{cor},y-})}{\Delta y_j^G}
\end{aligned} \tag{5.55}$$

得られた各係数に基づき、内部反復は点ヤコビ前処理付き BiCGSTAB 法[7]、外部反復はべき乗法を用いて拡散方程式を解く。BiCGSTAB 法は数値計算ライブラリ Eigen::BiCGSTAB[8]を用いて実行する。本検証では Eigen::BiCGSTAB による数値計算を OpenMP[4]により並列化する。

global 計算では、全炉心粗メッシュ計算を実施する。そのため、単一集合体間の結合効果を直接的に考慮でき、各集合体境界面のより適切な流入部分中性子流面平均値および全炉心の実効増倍率 k_{eff} を推定できる。

5.2.4 local 体系の境界条件および核分裂源更新

本項では、local 体系の流入部分中性子流による境界条件および核分裂源更新手順を説明する。

- 流入部分中性子流による境界条件更新

(I, J) 番目集合体に各境界面を通して流入する流入中性子流更新手順を説明する。

local 体系の固定源計算では、流入部分中性子流を境界条件とする。 n 回目の POD LG 反復後、流出部分中性子流が得られる。ここで、集合体境界面における部分中性子流の連続性より、「ある表面における流入部分中性子流が隣接する集合体から流出する部分中性子流に等しい」といった条件が成り立つ。本条件に基づき、 $n + 1$ 回目の local 計算の境界条件は次式

のように更新される。

$$\tilde{j}_{g,I,J}^{in,L,x-/x+,(n+1)} = \frac{\tilde{j}_{g,I,J}^{in,G,x-/x+,(n)}}{\tilde{j}_{g,I\mp 1,J}^{out,L,x+/x-,(n)}} \tilde{j}_{g,I\mp 1,J}^{out,L,x+/x-,(n)} \quad (5.56)$$

$$\tilde{j}_{g,I,J}^{in,L,y-/y+,(n+1)} = \frac{\tilde{j}_{g,I,J}^{in,G,y-/y+,(n)}}{\tilde{j}_{g,I,J\mp 1}^{out,L,y+/y-,(n)}} \tilde{j}_{g,I,J\mp 1}^{out,L,y+/y-,(n)} \quad (5.57)$$

上式中の各変数の意味は以下のとおりである。

上添え字 n : POD LG 反復回数

$\tilde{j}_{g,I,J}^{in,L,x-/x+}$: (I, J) 番目集合体の X 負/正方向境界面におけるエネルギー g 群流入部分中性子流分布

$\tilde{j}_{g,I,J}^{out,L,x-/x+}$: (I, J) 番目集合体の X 負/正方向境界面におけるエネルギー g 群流出部分中性子流分布

例えば x 方向の流出部分中性子流の空間分布は 5.2.2 項の(5.34)式および(5.35)式より計算できる。(5.56)式および(5.57)式では、流入部分中性子流 j^{in} の面平均値が global 計算値に一致するように、 J^{in} を規格化する。これにより、少ない POD LG 反復回数で集合体間の結合効果をより正確に与えることができる。

● 核分裂源更新

核分裂源を計算するためには、全中性子束分布と実効増倍率 k_{eff} が必要である。しかし、local 計算は固定源計算であるため、固有値である実効増倍率 k_{eff} を計算できない。一方、global 計算は k_{eff} 固有値計算であるため、体系全体の k_{eff} を計算できる。そこで、global 計算より得られた k_{eff}^G を用いて、次式のように核分裂源 $\vec{\tilde{p}}_g$ を更新する。

$$\vec{\tilde{p}}_{g,I,J}^{(n+1)} = \frac{1}{k_{\text{eff}}^G} \sum_{g'} \hat{\mathbf{F}}_{g' \rightarrow g, I, J}^L \frac{\bar{\phi}_{g', I, J}^{G, (n)}}{\bar{\phi}_{g', I, J}^{L, (n)}} \vec{h}_{g', I, J}^{L, (n)} \quad (5.58)$$

上式中の各変数の意味は以下のとおりである。

$\vec{\tilde{p}}_{g, I, J} \in \mathbb{R}^{\text{(POD 基底数 } r)}$: (I, J) 番目集合体内のエネルギー g 群核分裂源ベクトル

$\vec{h}_{g, I, J} \in \mathbb{R}^r$: (I, J) 番目集合体内のエネルギー g 群 POD 展開係数ベクトル

$\hat{\mathbf{F}}_{g' \rightarrow g, I, J}^L$ は r 行 r 列の正方行列であり、 (I, J) 番目集合体のエネルギー g' 群 $\rightarrow g$ 群への核分裂断面積行列 $\mathbf{F}_{g' \rightarrow g, I, J}^L$ を、次式のように左右から POD 基底行列で挟んだ行列である。

$$\hat{\mathbf{F}}_{g' \rightarrow g, I, J}^L = \mathbf{U}_{g, I, J}^{L, T} \mathbf{F}_{g' \rightarrow g, I, J}^L \mathbf{U}_{g', I, J}^L \quad (5.59)$$

(5.58)式では、 $\bar{\phi}_{g, I, J}^G / \bar{\phi}_{g, I, J}^L$ を用いて、各エネルギー群の POD 展開係数ベクトル、すなわち

全中性子束分布を global 計算結果に一致するよう、規格化する。

5.2.5 各集合体内の中性子束分布再構成

POD LG 反復が収束した後、POD 展開係数ベクトル $\vec{h}_{g,I,J}^L$ と POD 基底を用いて、 (I,J) 番目の集合体内の詳細メッシュ全中性子束空間分布を次式で再構成する。

$$\vec{\phi}_{g,I,J}^L = \mathbf{U}_{g,I,J}^L \vec{h}_{g,I,J}^L \quad (5.60)$$

ただし、 $\vec{\phi}_{g,I,J}^L$ は (I,J) 番目の集合体内のエネルギー g 群全中性子束分布である。

5.3 2次元炉心体系における検証

2次元炉心体系を対象として、Fixed POD LG 法により、詳細メッシュ拡散計算を精度よく再現可能か検証する。さらに、p-CMFD 加速法を適用した全炉心詳細メッシュ拡散計算と提案手法による拡散計算の計算時間を比較する。5.3.1 項で本検証に用いた計算体系および計算条件を説明する。5.3.2 項で、POD LG 反復計算で用いた各集合体および反射体領域の POD 基底評価手順および結果を示す。5.3.3 項で Fixed POD LG 反復法の有効性検証結果を示す。

5.3.1 計算条件

本検証で用いた燃料集合体および反射体領域の幾何形状を **Fig. 5.3** に示す。燃料集合体は、C5G7 ベンチマーク体系[9]の UO_2 燃料集合体と MOX 燃料集合体の二種類であり、各集合体内を 17×17 の空間メッシュに分割した。各集合体の 1 メッシュサイズは 1.26 cm であり、1 メッシュが 1 ピンセルに対応する。また、集合体と同様に反射体領域も 1 メッシュサイズを 1.26 cm とし、 17×17 に分割した。エネルギー群数は 2 群とした。本研究では、自作した 2次元拡散コードを用いて検証を実施した。ピンセル単位の均質化およびエネルギー群縮約は、輸送計算コード GENESIS[10],[11]を用いて実施した。本検証は、均質化された C5G7 ベンチマーク体系(小規模正方形炉心)および C5G7 ベンチマーク拡張体系(大規模凸型炉心)を用いて実施した。小規模正方形炉心は 4 体の燃料集合体からなり、大規模凸型炉心は 193 体の燃料集合体からなる。**Fig. 5.4** に各炉心体系の幾何形状を示す。小規模正方形炉心では境界条件として、 x, y 負方向表面に完全反射境界条件を与え、 x, y 正方向表面に真空境界条件を与えた。大規模凸型炉心では、境界条件として全面真空境界条件を与えた。

本検証では OpenMP[4]を用いて、local 計算を並列で実行した。小規模正方形炉心体系および大規模凸型炉心体系における local 計算並列化時のスレッド数をそれぞれ 9 および 18 とした。

各物質の断面積・拡散係数を **Table 5.1–Table 5.7** に示す。各計算の外部反復の収束条件を **Table 5.8** に示す。local 計算では、内部反復で LU 分解を用いた。全炉心詳細計算および global 計算では、内部反復で点ヤコビ前処理付き BiCGSTAB 法[7]を用いた。BiCGSTAB 法は数値

計算ライブラリ Eigen::BiCGSTAB[8]により実行した。本検証では Eigen::BiCGSTAB による数値計算を OpenMP[4]により並列化した。全炉心詳細計算および global 計算の内部反復収束条件はともに 1×10^{-9} とした。

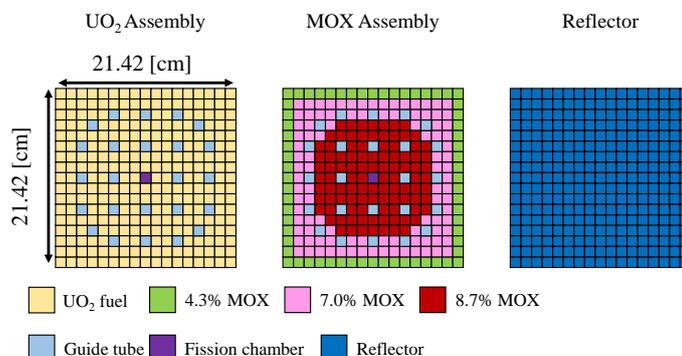
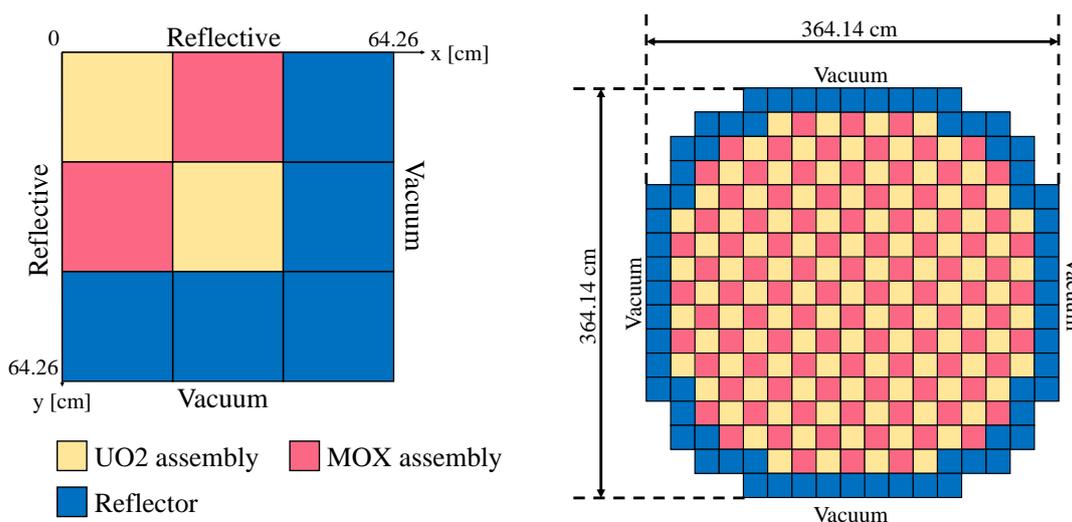


Fig. 5.3 UO₂燃料集合体およびMOX燃料集合体、反射体領域の幾何形状



小規模正方形炉心体系

大規模凸型炉心体系

Fig. 5.4 炉心体系の幾何形状

Table 5.1 UO₂燃料領域の巨視的断面積・拡散係数

g	$\Sigma_{a,g}$ [cm ⁻¹]	$\nu\Sigma_{f,g}$ [cm ⁻¹]	χ_g [-]	D_g [cm]	$\Sigma_{s,1 \rightarrow g}$ [cm ⁻¹]	$\Sigma_{s,2 \rightarrow g}$ [cm ⁻¹]
1	1.004868E-2	7.285493E-3	1.0	8.938528E-1	3.432982E-1	2.699352E-5
2	9.826820E-2	1.615601E-1	0.0	3.299141E-1	1.957058E-2	9.120693E-1

Table 5.2 Guide Tube 領域の巨視的断面積・拡散係数

g	$\Sigma_{a,g}$ [cm^{-1}]	$\nu\Sigma_{f,g}$ [cm^{-1}]	χ_g [-]	D_g [cm]	$\Sigma_{s,1\rightarrow g}$ [cm^{-1}]	$\Sigma_{s,2\rightarrow g}$ [cm^{-1}]
1	3.484490E-4	0.0	0.0	1.037233E+0	2.893333E-1	1.219670E-5
2	1.806611E-2	0.0	0.0	2.761785E-1	3.168611E-2	1.188871E+0

Table 5.3 Fission Chamber 領域の巨視的断面積・拡散係数

g	$\Sigma_{a,g}$ [cm^{-1}]	$\nu\Sigma_{f,g}$ [cm^{-1}]	χ_g [-]	D_g [cm]	$\Sigma_{s,1\rightarrow g}$ [cm^{-1}]	$\Sigma_{s,2\rightarrow g}$ [cm^{-1}]
1	3.488735E-4	8.044248E-7	1.0	1.037457E+0	2.893229E-1	1.223093E-5
2	1.804620E-2	1.718044E-6	0.0	2.764201E-1	3.162672E-2	1.187836E+0

Table 5.4 4.7%MOX 燃料領域の巨視的断面積・拡散係数

g	$\Sigma_{a,g}$ [cm^{-1}]	$\nu\Sigma_{f,g}$ [cm^{-1}]	χ_g [-]	D_g [cm]	$\Sigma_{s,1\rightarrow g}$ [cm^{-1}]	$\Sigma_{s,2\rightarrow g}$ [cm^{-1}]
1	1.029049E-2	8.416387E-3	1.0	8.937964E-1	3.441155E-1	5.186572E-5
2	1.638511E-1	2.133865E-1	0.0	3.406867E-1	1.853498E-2	8.145130E-1

Table 5.5 7.0%MOX 燃料領域の巨視的断面積・拡散係数

g	$\Sigma_{a,g}$ [cm^{-1}]	$\nu\Sigma_{f,g}$ [cm^{-1}]	χ_g [-]	D_g [cm]	$\Sigma_{s,1\rightarrow g}$ [cm^{-1}]	$\Sigma_{s,2\rightarrow g}$ [cm^{-1}]
1	1.266134E-2	1.298374E-2	1.0	8.853259E-1	3.458158E-1	6.362693E-5
2	2.370509E-1	3.132646E-1	0.0	3.192240E-1	1.803200E-2	8.070841E-1

Table 5.6 8.7%MOX 燃料領域の巨視的断面積・拡散係数

g	$\Sigma_{a,g}$ [cm^{-1}]	$\nu\Sigma_{f,g}$ [cm^{-1}]	χ_g [-]	D_g [cm]	$\Sigma_{s,1\rightarrow g}$ [cm^{-1}]	$\Sigma_{s,2\rightarrow g}$ [cm^{-1}]
1	1.271824E-2	1.303236E-2	1.0	8.848117E-1	3.458555E-1	6.201553E-5
2	2.41219E-1	3.224457E-1	0.0	3.156114E-1	1.815423E-2	8.148764E-1

Table 5.7 反射体領域の巨視的断面積・拡散係数

g	$\Sigma_{a,g}$ [cm^{-1}]	$\nu\Sigma_{f,g}$ [cm^{-1}]	χ_g [-]	D_g [cm]	$\Sigma_{s,1\rightarrow g}$ [cm^{-1}]	$\Sigma_{s,2\rightarrow g}$ [cm^{-1}]
1	4.640312E-4	0.0	0.0	8.988792E-1	3.220575E-1	3.128504E-6
2	3.087974E-2	0.0	0.0	1.479406E-1	4.831061E-2	2.222273E+0

Table 5.8 各計算の外部反復の収束条件

	条件を与える物理量	収束条件
参照解	実効増倍率 $\varepsilon_{k_{\text{eff}}}^{\text{outer}}$	1.0E-8
	全中性子束 $\varepsilon_{\phi}^{\text{outer}}$	1.0E-8
POD LG	POD 展開係数 (local 計算) $\varepsilon_h^{L,\text{outer}}$	1.0E-5
	実効増倍率 (global 計算) $\varepsilon_{k_{\text{eff}}}^{G,\text{outer}}$	1.0E-8
	全中性子束 (global 計算) $\varepsilon_{\phi}^{G,\text{outer}}$	1.0E-8
	実効増倍率 (POD LG 反復計算) $\varepsilon_{k_{\text{eff}}}^{\text{POD LG,outer}}$	1.0E-8

本検証では、目標誤差を(5.61)式の全中性子束相対誤差の平均値であるrRMSEおよび(5.62)式の実効増倍率誤差 Δk_{eff} で定義した。具体的には、目標誤差を「全中性子束の rRMSE が 0.1% 以下」かつ「 Δk_{eff} が 0.01%以下」とした。

$$\text{rRMSE} = \sqrt{\frac{1}{NG \times NX \times NY} \sum_{g=1}^{NG} \sum_{i=1}^{NX} \sum_{j=1}^{NY} \left(\frac{\phi_{g,i,j}^{\text{POD LG}}}{\phi_{g,i,j}^{\text{ref}}} - 1 \right)^2} \quad (5.61)$$

$$\Delta k_{\text{eff}} = |k_{\text{eff}}^{\text{POD LG}} - k_{\text{eff}}^{\text{ref}}| \quad (5.62)$$

上式において、上添え字 ref および $POD LG$ はそれぞれ参照値および POD LG 反復計算より得られた物理量を意味する。

5.3.2 POD 基底評価手順および結果

本項では、POD 基底評価手順を説明した後、得られた POD 基底空間分布を示す。まず、各燃料集合体の POD 基底評価手順および結果を述べる。次に、反射体領域の POD 基底評価手順および結果を述べる。最後に、各燃料集合体および反射体領域の次元削減率を示す。

● 燃料集合体の POD 基底

UO2 燃料集合体および MOX 燃料集合体の POD 基底は第 4 章と同一の基底を用いた。以下で、POD 基底評価手順を、再度説明する。

第 3 章で説明した POD 展開次数探索手法に基づき、各燃料集合体の POD 基底を評価した。本検証では、POD 基底評価時に回転によるデータ拡張を用いた。POD 展開次数探索に

において、境界条件としてランダムなアルベド境界条件を与えた。アルベド値は各境界面で空間的に一様とし、その値は一様乱数により決定した。各集合体のアルベド値の一様乱数範囲を **Table 4.9** に示す。本乱数範囲は、空間均質化・エネルギー群縮約した C5G7 ベンチマーク体系における、各集合体境界面上のアルベド値を含むように決定した。

Table 4.9 各燃料集合体のアルベド値の一様乱数範囲 (再掲)

g	UO ₂ 燃料集合体	MOX 燃料集合体
1	[0.4, 1.3]	[0.4, 1.3]
2	[0.5, 1.6]	[1.0, 1.8]

POD 展開次数探索における目標誤差は、「全中性子束の rRMSE が 0.1%以下」かつ「 Δk_{eff} が 0.01%以下」とした。本検証では、統計的評価手法である Wilks の手法を用いて、目標誤差を満足するか判定した。

最終的に得られた UO₂ 燃料集合体および MOX 燃料集合体の POD 展開次数はそれぞれ、41 次および 42 次であった。各 POD 基底空間分布は 4.3.2 項を参照されたい。

POD 展開次数探索アルゴリズムでは、固有値計算により、POD 基底が目標誤差を満足するか判定した。

● 反射体領域の POD 基底

第 3 章で説明した POD 展開次数探索手法では、snapshot を準備するために、固有値計算を多数回実施する必要がある。しかし、前述したように反射体領域では、核分裂が生じないため、固有値計算を実施できず、Wilks の手法を用いた POD 展開次数探索手法を適用できない。そこで本検証では、**Fig. 5.5** の 1/4 大規模凸型炉心体系における詳細メッシュ固有値計算結果を用いて POD 基底を計算した。本体系の UO₂ 燃料集合体および反射体領域の幾何形状は、**Fig. 5.3** と同様であるため、本項では省略する。境界条件として、 x, y 負方向表面に完全反射境界条件を与え、 x, y 正方向表面に真空境界条件を与えた。得られた詳細全中性子束分布のうち、**Fig. 5.5** の太枠で囲われた 9 つの反射体領域内の分布を用いて、各エネルギー群の snapshot を準備した。この際、回転・反転によるデータ拡張を用いた。回転によるデータ拡張では、詳細メッシュ単一集合体計算で得られた全中性子束分布 $\vec{\phi}_g$ を集合体中心周りで 90°、180°、270° 回転させる。反転によるデータ拡張では、 $\vec{\phi}_g$ を集合体の対角線を軸として反転させる。ゆえに、回転・反転によるデータ拡張により snapshot データ量はそれぞれ 4 倍および 2 倍に増加する。以上より、本検証の場合、エネルギー g 群の snapshot は合計 $9 \times 4 \times 2 = 72$ 通りの全中性子束からなる。

POD 基底数は、低ランク近似に基づいて評価した。具体的には、熱群の特異値のうち、次式を満たす次数の POD 基底のみを用いることとした。

$$\frac{\sigma_b}{\sigma_1} > 1 \times 10^{-7} \quad (5.63)$$

ただし、 σ_b は**b**次の熱群の特異値である。高速群全中性子束の POD 基底数も、熱群全中性子束の特異値に基づいて決定した。

最終的に得られた反射体領域の POD 展開次数は、54 次であった。1-8 次の高速群および熱群の POD 基底空間分布をそれぞれ Fig. 5.6 および Fig. 5.7 に示す。各エネルギー群の次数に対する特異値の変化を Fig. 5.8 に示す。Fig. 5.8 において、青丸が高速群の特異値であり、赤×が熱群の特異値をそれぞれ示している。

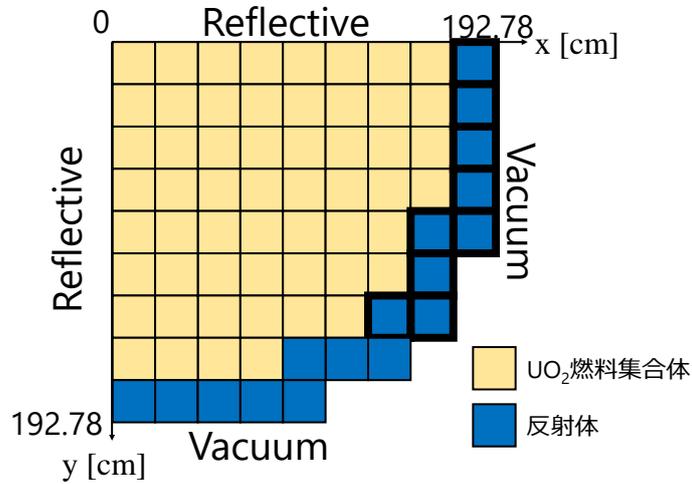


Fig. 5.5 1/4 大規模凸型炉心体系

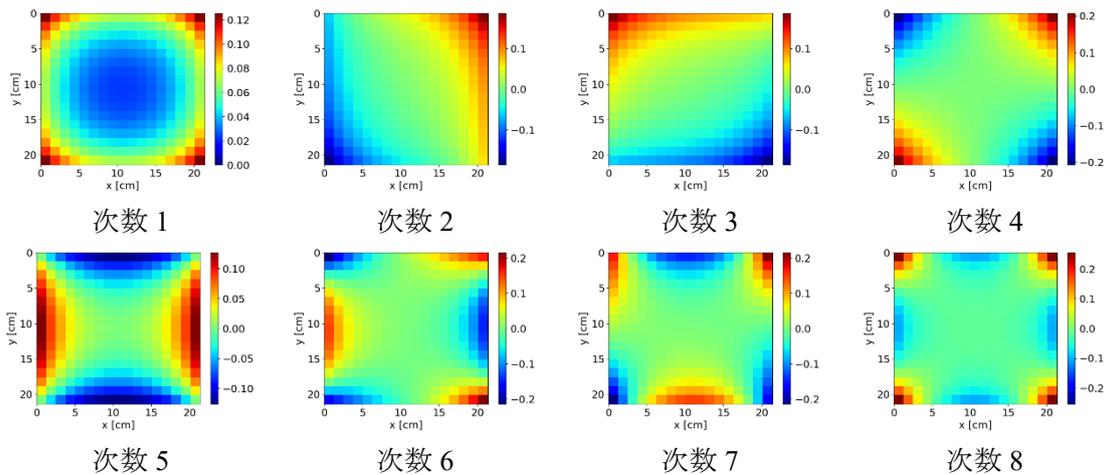


Fig. 5.6 高速群 POD 基底空間分布 (反射体領域)

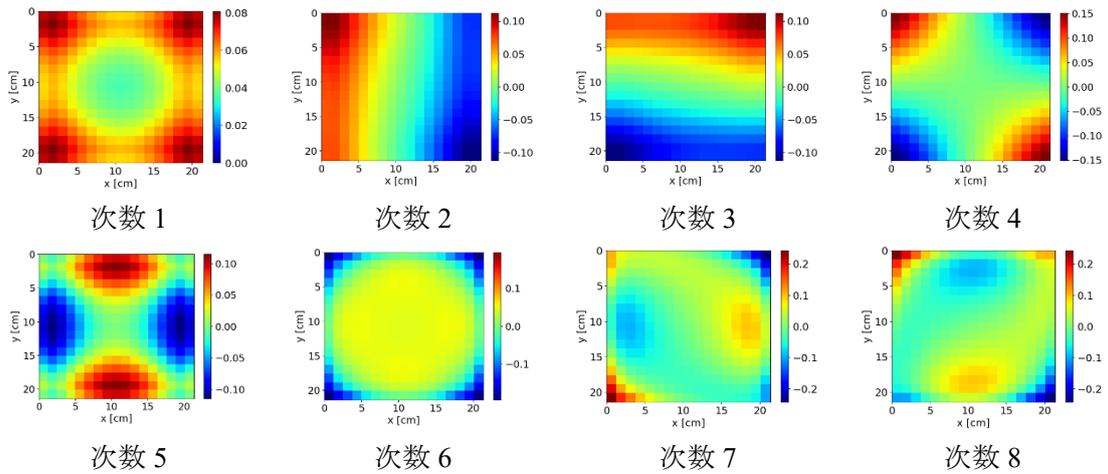


Fig. 5.7 熱群 POD 基底空間分布（反射体領域）

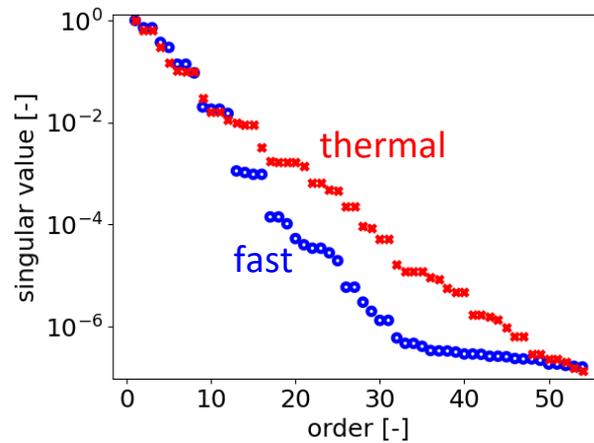


Fig. 5.8 反射体領域の次数に対する特異値変化

- 次元削減率

各燃料集合体および反射体領域の空間メッシュ数および、POD 展開次数、次式で定義した次元削減率DRPを Table 5.9 にまとめる。

$$DRP = 1 - \frac{\text{POD 基底の総数}}{\text{空間メッシュ数}} \quad (5.64)$$

Table 5.9 より、各燃料集合体および反射体領域で次元削減率は 80%以上であった。

Table 5.9 各領域の空間メッシュ数、POD 展開次数、DRP

	空間メッシュ数	POD 展開次数	DRP [%]
UO ₂ 燃料集合体	289	41	86
MOX 燃料集合体	289	42	85
反射体領域	289	54	81

5.3.3 検証結果

本項では、提案手法の有効性検証結果を示す。まず、全炉心詳細メッシュ拡散計算を参照解として、提案手法の計算誤差を示す。次に、「p-CMFD 加速法を用いた全炉心詳細メッシュ拡散計算」と提案手法の計算時間を比較する。

まず、提案手法より得られた小規模正方形炉心および大規模凸型炉心の全中性子束空間分布をそれぞれ Fig. 5.9 および Fig. 5.10 に示す。次に、各体系の次式で定義される核分裂率 $P_{i,j}$ の空間分布を Fig. 5.11 に示す。

$$P_{i,j} = \sum_g \nu \Sigma_{f,g,i,j} \phi_{0,g,i,j} \quad (5.65)$$

定義式より核分裂率 $P_{i,j}$ は、核分裂反応が生じない領域で 0 であるため、Fig. 5.11 では反射体領域を除いて図示した。

続いて、各体系における実効増倍率計算値および実効増倍率誤差、全中性子束相対誤差の最大値、最小値および rRMSE を Table 5.10 に示す。

Table 5.10 より、両体系で目標誤差「全中性子束の rRMSE が 0.1%以下」かつ「 Δk_{eff} が 0.01%以下」を満足する。また、核分裂率の rRMSE も両体系で 0.03%以下と十分小さい。本結果より、①燃料集合体において「アルベド値を与えた単一集合体の固有値計算結果」を snapshot データとして得られた POD 基底を用いて、「流入部分中性子流と核分裂源を与えた単一集合体の固定源計算」の次元を削減できる②反射体領域において、snapshot データと幾何形状や燃料配置が異なる体系の全中性子束分布を再現できることが確認できた。さらに本検証では、前章と異なり LG 反復過程で後退加速を用いておらず、両体系の収束解を安定に得られた。以上の検討結果より、提案手法を用いて、小規模正方形炉心体系および大規模凸型炉心体系の全中性子束を安定かつ高精度に再現できるといえる。

さらに、各体系の全中性子束相対誤差分布 $\Delta\phi_{g,i,j}$ をそれぞれ Fig. 5.12 および Fig. 5.13 に示し、相対誤差の絶対値をとり、カラーバーを対数表示とした全中性子束相対誤差分布を Fig. 5.14 および Fig. 5.15 に示す。Fig. 5.14 および Fig. 5.15 では、0.01%未満の誤差値は十分小さいとして、0.01%に切り上げて表示した。以下で全中性子束相対誤差の空間分布について考察する。

- 相対誤差分布が大きい領域

Fig. 5.12–Fig. 5.15 より、燃料領域の外周部および反射体領域の外周部で相対誤差が大きいことが確認できる。

燃料領域の外周部に位置する集合体は反射体と接する。ゆえに、炉心中心と比較して、外周部集合体内の全中性子束分布は傾きが大きくなり、全中性子束を高精度に再現するうえ

で、より多数の POD 基底を要する。したがって、燃料領域の外周部で相対誤差が大きくなったと考えられる。

反射体では、核分裂により中性子が生じないため、外周部の中性子量が極めて小さい。POD では、snapshot データの主成分として POD 基底を評価するが、全中性子束が相対的に小さい領域の空間分布は主成分ではないとして軽視される。このため、外周部の空間分布を正確に再構成できず、反射体外周部で相対誤差が大きくなったと考えられる。

● 相対誤差分布の非対称性

Fig. 5.4 に示した通り、小規模正方形炉心は、 UO_2 燃料集合体を通る対角線上に対称であり、大規模凸型炉心は体系中心で 1/4 回転対称である。しかし、特に燃料集合体領域の相対誤差分布は、これら体系の対称性を満足していない。これは、本検証で用いた燃料集合体の POD 基底が対角線に対する対称性を満足していないためと考えられる。

燃料集合体の snapshot 準備時には、回転によるデータ拡張のみを用いており、反転によるデータ拡張を用いていない。そのため、燃料集合体の POD 基底は対角線に対して線対称ではない。

反射体領域の snapshot 準備時には、回転・反転によるデータ拡張を用いており、POD 基底は 1/4 回転対称性および対角線に対する対称性を有する。したがって、反射体領域の相対誤差の非対称性は、燃料集合体内の相対誤差の非対称性が伝播したことで生じたと考えられる。

各体系の核分裂率相対誤差分布を **Fig. 5.16** に示す。**Fig. 5.16** より、核分裂率相対誤差の空間分布は、全中性子束相対誤差と同様に、①外周部で相対誤差が大きく、②相対誤差分布が非対称であることが確認できる。

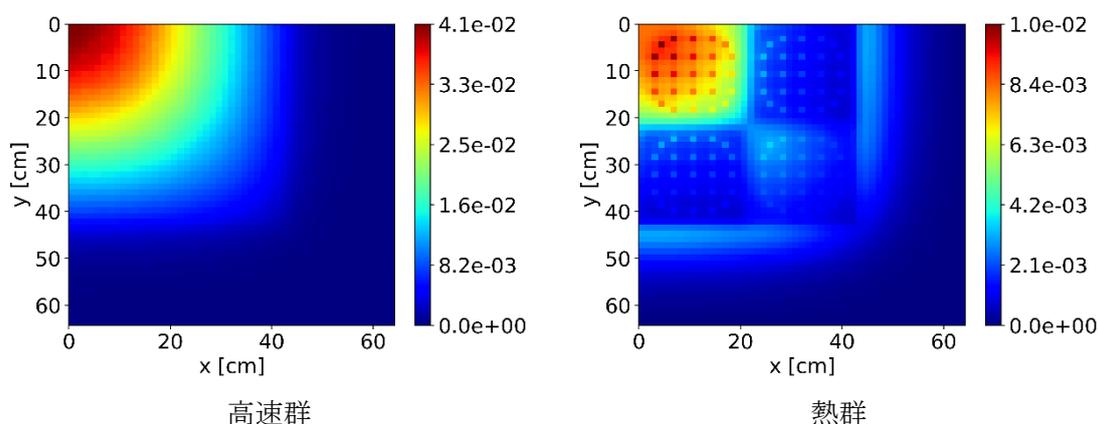


Fig. 5.9 全中性子束空間分布（小規模正方形炉心体系）

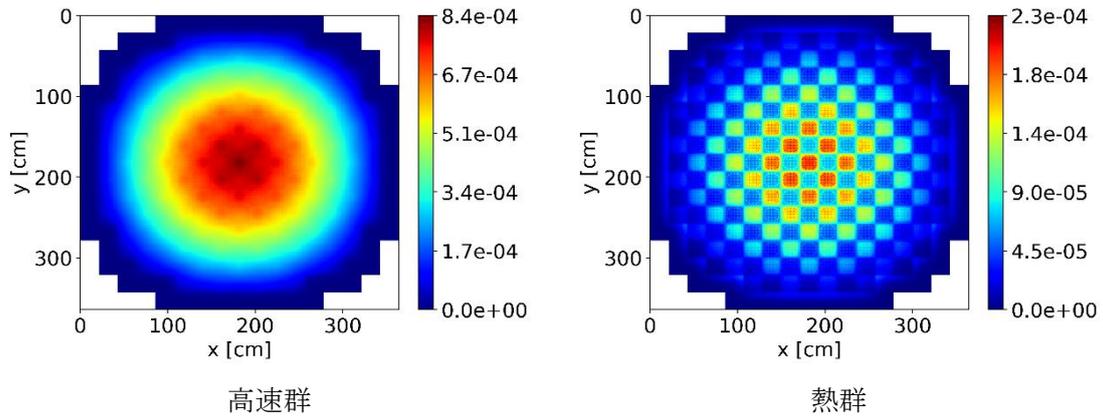


Fig. 5.10 全中性子束空間分布（大規模凸型炉心体系）

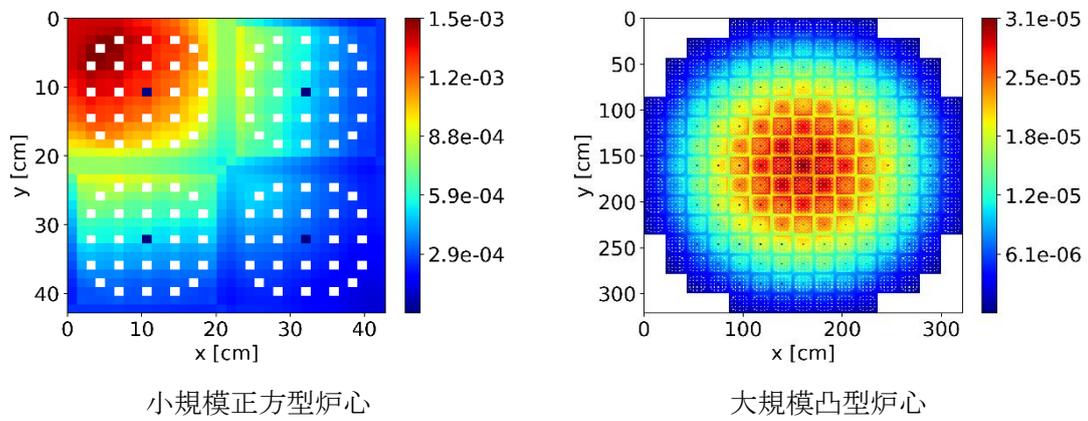


Fig. 5.11 核分裂率空間分布

Table 5.10 k_{eff} 値と k_{eff} 誤差値、全中性子束相対誤差値

		小規模正方形炉心	大規模凸型炉心
k_{eff} 計算値 (k_{eff} 参照値)		1.2007262 (1.2007260)	1.2451103 (1.2451091)
実効増倍率誤差 Δk_{eff} [%]		0.00002	0.00012
全中性子束 相対誤差 [%]	最大	0.32	2.02
	最小	-0.34	-1.81
	rRMSE	0.02	0.05
核分裂率 相対誤差 [%]	最大	0.24	0.45
	最小	-0.14	-0.66
	rRMSE	0.02	0.03

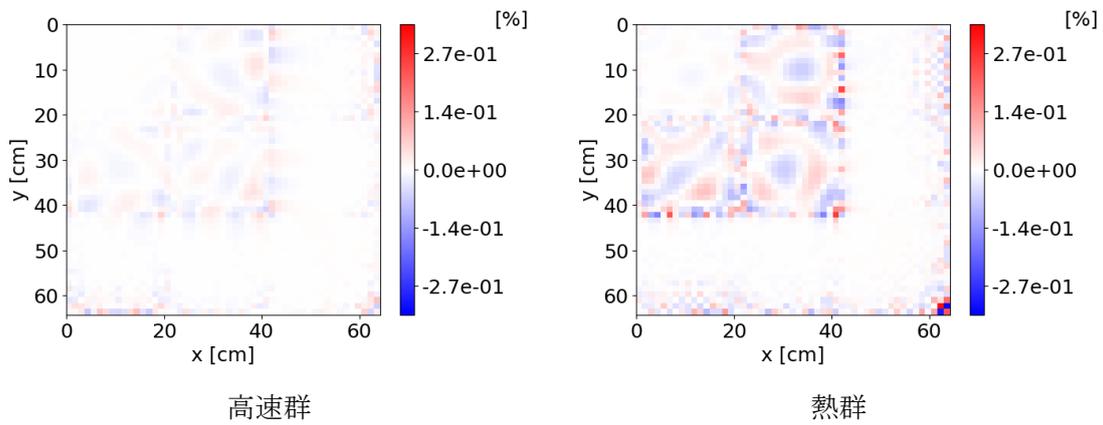


Fig. 5.12 全中性子束相対誤差分布 (小規模正方形炉心体系)

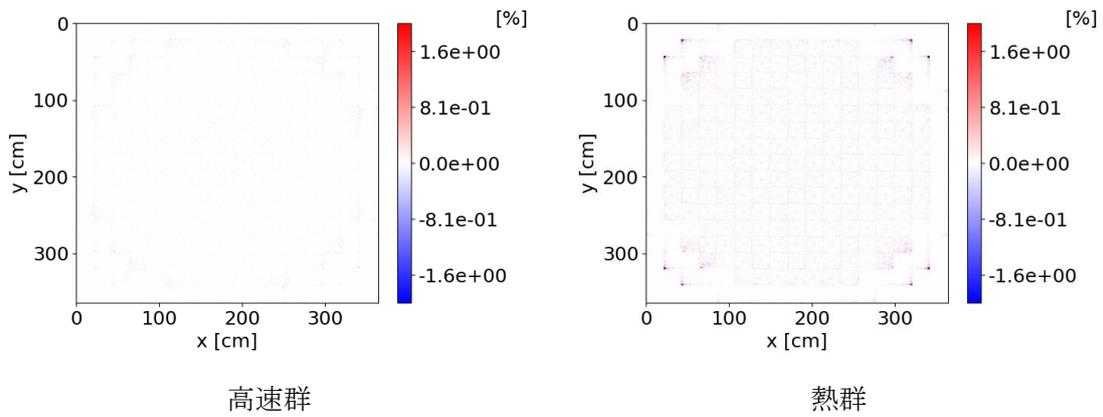


Fig. 5.13 全中性子束相対誤差分布 (大規模凸型炉心体系)

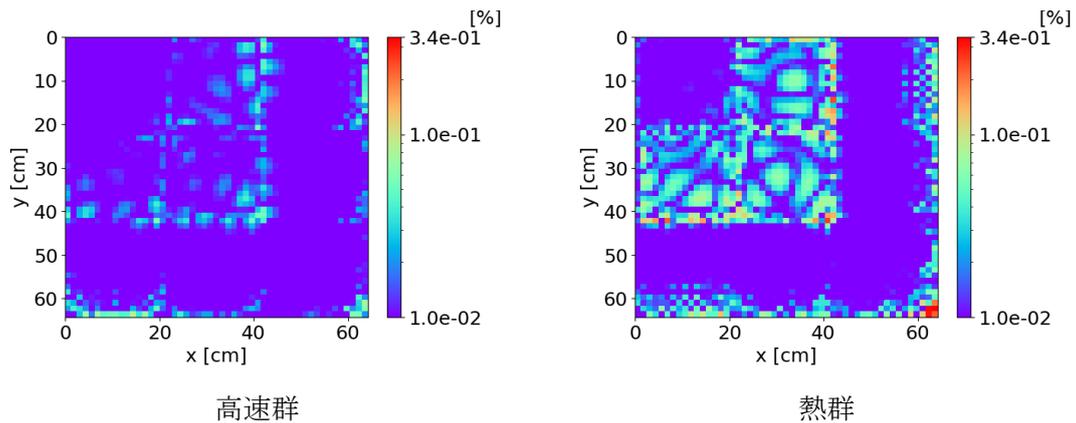


Fig. 5.14 対数表示の全中性子束相対誤差分布 (小規模正方形炉心体系)

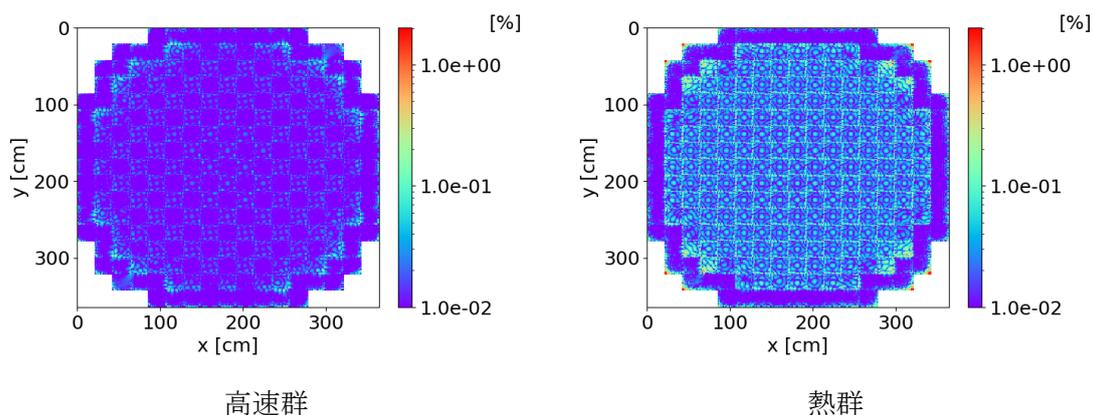


Fig. 5.15 対数表示の全中性子束相対誤差分布 (大規模凸型炉心体系)

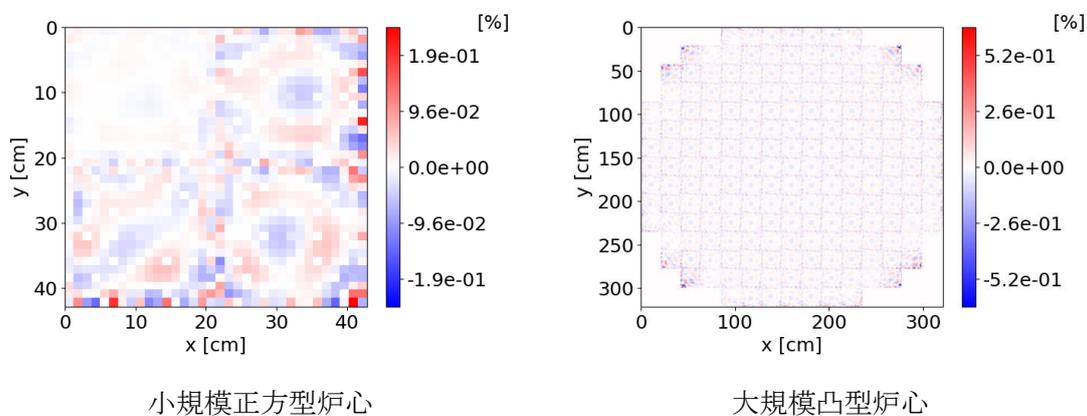


Fig. 5.16 核分裂率相対誤差分布

最後に、p-CMFD 加速法[6]を用いた従来の拡散計算と Fixed POD LG 反復法を用いた拡散計算の計算時間を Table 5.11 に示す。各計算時間を比較することを目的として、次式のように、各計算時間比を speed up 率として定義する。

$$\text{speed up 率} = \frac{\text{提案手法計算時間 [s]}}{\text{従来法計算時間 [s]}} \quad (5.66)$$

Table 5.11 より、提案手法を用いることで、従来法と比較して小規模正方形体系で 13 倍、大規模凸型体系で 55 倍の高速化に成功した。

Table 5.11 計算時間および speed up 率

	小規模正方形炉心	大規模凸型炉心
p-CMFD 加速法計算時間* [s]	44.0×10^{-2}	36.03
Fixed POD LG 反復法 計算時間* [s]	3.3×10^{-2}	0.65
speed up 率	13	55

* : Intel® core™ i9 (2.99 GHz)で計算

以上の検証より、提案手法を用いることで、詳細メッシュ全炉心拡散計算結果を高精度に再現でき、かつ計算時間を短縮できることが確認できた。ただし、PODを用いた炉心解析の更なる高度化のためには、輸送計算に対してPODを効果的に適用できる計算手法を開発する必要がある。

5.4 本章のまとめ

本章では、local 計算を固定源計算とした POD local/global 反復法 (Fixed POD LG 反復法) に基づく拡散計算手法を提案し、小規模正方形炉心体系と大規模凸型炉心体系で提案手法の有効性を検証した。本検証結果より、2次元炉心体系の全中性子束分布を安定かつ高精度に評価でき、かつ計算時間を短縮できることが確認できた。

5.2 節では、Fixed POD LG 反復法に基づく拡散計算理論を説明した。第4章との違いとして、提案手法では、PODを用いた local 計算として固定源計算を実施する。この時、流入部分中性子流および核分裂源を固定源とする。本手法においては、反射体領域のような核分裂しない領域でも、流入部分中性子流が0でなければ、local 計算を実施できる。

5.3 節では、提案手法の有効性検証および結果を示した。本検証では、目標誤差を「全中性子束相対誤差平均値 rRMSE が 0.1%以下」および「実効増倍率誤差 Δk_{eff} が 0.01%以下」とした。

燃料集合体の POD 基底は、Wilks の手法を用いた POD 展開次数探索手法により評価した。反射体領域の POD 基底は、1/4 大規模凸型炉心の拡散計算結果を snapshot として、低ランク近似を用いて評価した。得られた UO₂ 燃料集合体、MOX 燃料集合体、反射体領域の POD 展開次数は、それぞれ 41, 42, 54 次であった。

詳細メッシュ拡散計算結果を参照解として、提案手法の誤差を評価した結果、小規模正方形炉心体系および大規模凸型炉心体系で、目標誤差をともに満足した。さらに、p-CMFD 加速法による詳細計算時間と比較して、それぞれ 13 倍および 55 倍の高速化を達成した。

本章の検証結果より、大規模凸型かつ非均質な 2 次元炉心体系を対象とした拡散計算に適用可能な POD 計算を実現できた。更なる POD を用いた炉心解析の高度化のためには、輸送計算に対して POD を効果的に適用できる計算手法を開発する必要がある。本章で提案した Fixed POD LG 反復法において、local 計算として行列形式の固定源 SP3 計算を実施することで、輸送計算に対しても POD の有効性を十分に発揮できると考えた。以上を踏まえて、次章では、Fixed POD LG 反復法に基づく SP3 計算手法の開発を目指す。

5.5 参考文献

- [1] S. Yuk and N. Z. Cho, “Whole-core transport solutions with 2-D/1-D fusion kernel via p-CMFD acceleration and p-CMFD embedding of nonoverlapping local/global iterations,” *Nucl. Sci. Eng.*, **181**(1), pp.1–16 (2015); <https://doi.org/10.13182/NSE14-88>.
- [2] B. Cho and N. Z. Cho, “A nonoverlapping local/global iterative method with 2-D/1-D fusion transport kernel and p-CMFD wrapper for transient reactor analysis,” *Ann. Nucl. Energy*, **85**, pp.937–957 (2016); <https://doi.org/10.1016/j.anucene.2015.07.012>.
- [3] B. Cho and N. Z. Cho, “Nonoverlapping local/global iterations with 2-D/1-D fusion transport kernel and p-CMFD wrapper for transient reactor analysis—II: parallelization and predictor–corrector quasi-static method application,” *Ann. Nucl. Energy*, **90**, pp.284–302 (2016); <https://doi.org/10.1016/j.anucene.2015.12.018>.
- [4] “OpenMP”, <https://www.openmp.org/> (2023/12/15 参照).
- [5] T. Kozłowski, Y. Xu, T. J. Downar et al., “Cell homogenization method for pin-by-pin neutron transport calculations,” *Nucl. Sci. Eng.*, **169**(1), pp.1–18 (2011); <https://doi.org/10.13182/NSE08-85>.
- [6] N. Z. Cho, G. S. Lee, and C. J. Park, “Partial current-based CMFD acceleration of the 2D/1D fusion method for 3D whole-core transport calculations,” *Trans. Am. Nucl. Soc.*, **88**, pp.594–596 (2003).
- [7] H. A. V. D. Vorst, “Iterative Krylov methods for large linear systems”, Cambridge University Press (2003).
- [8] “Eigen::BiCGSTAB”, https://eigen.tuxfamily.org/dox/classEigen_1_1BiCGSTAB.html (2024/1/30 参照).
- [9] OECD/NEA, *Benchmark on deterministic transport calculations without spatial homogenization*, Nuclear Energy Agency, (2005).
- [10] A. Yamamoto, A. Giho, Y. Kato, et al., “GENESIS A three-dimensional heterogeneous transport solver based on the Legendre polynomial expansion of angular flux method,” *Nucl. Sci. Technol.*, **186**(1), pp. 1–22 (2017); <https://doi.org/10.1080/00295639.2016.1273002>.
- [11] A. Yamamoto, A. Giho, T. Endo, “Recent developments in the genesis code based on the

Legendre polynomial expansion of angular flux method,” *Nucl. Eng. Technol.*, **49**(6), pp. 1143–1156 (2017); <https://doi.org/10.1016/j.net.2017.06.016>.

第6章 Fixed POD local/global 法に基づく SP3 計算手法

6.1 本章の概要

前章で local 計算を固定源計算とした local/global 反復法[1]-[3]と POD を組み合わせた Fixed POD LG 反復法に基づく拡散計算を提案し、提案手法の有効性を確認できた。

本章では、Simplified P3 計算 (SP3 計算) に対する Fixed POD LG 反復法の適用を試みる。SP3 計算では、角度中性子束の飛行方向に関する P3 展開係数を近似的に取り扱うことで、拡散計算よりも中性子の飛行方向に関する効果をより正確に扱うことができる。本手法では、各 local 体系の SP3 計算に POD を適用する。エネルギー・空間が離散化された SP3 方程式は、行列とベクトルを用いた連立方程式で表現できるため、POD による次元削減を拡散計算と同様の手順で SP3 計算に適用できる。

6.2 節では、提案手法の計算理論について説明する。まず前章との相違点を示した後、各計算部分について説明する。local 計算として POD を用いた固定源 SP3 計算について説明し、均質化および補正係数の計算、global 計算、流入部分中性子流および核分裂源の更新、各集合体内の全中性子束分布再構成の順に説明を続ける。

6.3 節では、2 次元炉心体系への提案手法の適用結果を説明する。まず、提案手法を適用する計算体系および計算条件を説明する。次に、2 次元単一集合体および反射体領域の POD 基底評価手順を説明し、得られた POD 基底を示す。最後に、2 次元炉心体系に対して提案手法を適用した結果を示す。

最後に 6.4 節で、本章のまとめを述べる。

6.2 計算理論

本節では、local 計算を固定源計算とした POD local/global 反復法 (Fixed POD LG 反復法) に基づく SP3 計算理論を説明する。提案手法の基本的な流れは、5.2 節と同様である。大きな違いは、①POD 基底計算に用いる snapshot データとして、「アルベド値を与えた SP3 固有値計算」より得られた中性子束分布を与える点と②local 計算として SP3 計算を実施する点である。local 計算では、1,3 次の流入部分中性子流および核分裂源を固定源とする。global 計算については前章と同様に、粗メッシュ拡散計算を実施する。

6.2.1 local 体系における POD を用いた固定源 SP3 計算

本項では、local 体系における POD を用いた固定源 SP3 計算を説明する。集合体内の空間メッシュ数を NR とし、POD 基底数を r とする。まず、固定源 SP3 計算で解くべき方程式の導出過程を簡単に説明する。次に、POD を用いた固定源 SP3 計算について説明する。

● 固定源 SP3 方程式

2.2.5 項で説明したように、エネルギー・空間的に離散化された 2 次元 SP3 方程式は(6.1)式および(6.2)式で記述できる。

$$\frac{J_{1,g,i,j}^{x+} - J_{1,g,i,j}^{x-}}{\Delta x_i} + \frac{J_{1,g,i,j}^{y+} - J_{1,g,i,j}^{y-}}{\Delta y_j} + \Sigma_{r,g,i,j} \phi_{0,g,i,j} = P_{g,i,j} + \sum_{g' \neq g} \Sigma_{s,g' \rightarrow g,i,j} \phi_{0,g',i,j} \quad (6.1)$$

$$\begin{aligned} & \frac{3J_{3,g,i,j}^{x+} - J_{3,g,i,j}^{x-}}{5} + \frac{3J_{3,g,i,j}^{y+} - J_{3,g,i,j}^{y-}}{5} - \frac{2}{5} \Sigma_{r,g,i,j} \phi_{0,g,i,j} + \Sigma_{tr,g,i,j} \phi_{2,g,i,j} \\ & = -\frac{2}{5} \left(P_{g,i,j} + \sum_{g' \neq g} \Sigma_{s,g' \rightarrow g,i,j} \phi_{0,g',i,j} \right) \end{aligned} \quad (6.2)$$

上式中の各変数の意味は以下のとおりである。

$\phi_{m,g,i,j}$: (i,j) 番目のメッシュ、エネルギー g 群、 m 次の中性子束

$J_{m,g,i,j}^{X\mp}$: (i,j) 番目のメッシュの X 負/正方向境界面におけるエネルギー g 群、 m 次の正味の中性子流

Δx_i : x 方向の i 番目メッシュにおける x 方向メッシュ長さ

Δy_j : y 方向の j 番目メッシュにおける y 方向メッシュ長さ

$\Sigma_{r,g,i,j}$: (i,j) 番目のメッシュ、エネルギー g 群の除去断面積

$\Sigma_{tr,g,i,j}$: (i,j) 番目のメッシュ、エネルギー g 群の輸送断面積

$P_{g,i,j}$: (i,j) 番目のメッシュ、エネルギー g 群の核分裂源

$\Sigma_{s,g' \rightarrow g,i,j}$: (i,j) 番目のメッシュ、エネルギー $g' \rightarrow g$ への散乱断面積

x 方向メッシュ境界面における 1,3 次の正味の中性子流は、有限体積法に基づくと、それぞれ(6.3)式および(6.4)式のように記述できる。

$$J_{1,g,i,j}^{x\mp} = \pm \frac{2D_{g,i,j}D_{g,i\mp 1,j}}{D_{g,i,j}\Delta x_{i\mp 1} + D_{g,i\mp 1,j}\Delta x_i} (\phi_{0,g,i\mp 1,j} + 2\phi_{2,g,i\mp 1,j} - \phi_{0,g,i,j} - 2\phi_{2,g,i,j}) \quad (6.3)$$

$$J_{3,g,i,j}^{x\mp} = \pm \frac{2D_{3,g,i,j}D_{3,g,i\mp 1,j}}{D_{3,g,i,j}\Delta x_{i\mp 1} + D_{3,g,i\mp 1,j}\Delta x_i} (\phi_{2,g,i\mp 1,j} - \phi_{2,g,i,j}) \quad (6.4)$$

上式中の $D_{g,i,j}$ は (i,j) 番目のメッシュ、エネルギー g の拡散係数である。 $D_{3,g,i,j}$ は拡散係数 $D_{g,i,j}$ を用いて、次式で定義される。

$$D_{3,g,i,j} = \frac{9}{7} D_{g,i,j} \quad (6.5)$$

固定源計算では、流入部分中性子流により境界条件を与える。ゆえに、固定源 SP3 計算で解くべき方程式を導出するためには、local 体系の外部境界面における 1,3 次の正味の中性子流を 0,2 次の中性子束および流入部分中性子流で表現する必要がある。固定源 SP3 方程式の導出過程にあたり、式展開を見やすくするため、次式で定義される $\Phi_{g,i,j}$ を用いる。

$$\Phi_{g,i,j} = \phi_{0,g,i,j} + 2\phi_{2,g,i,j} \quad (6.6)$$

上式中の $\phi_{m,g,i,j}$ は、 (i,j) 番目のメッシュにおけるエネルギー g 群、 m 次の中性子束である。

まず、 (i,j) 番目メッシュの x 負方向境界面を考える。この境界面で1,3次の流入部分中性子流は、 $\Phi_{g,i,j}$ の表面中性子束 $\Phi_{s,g,i,j}^{x-}$ および2次の表面中性子束 $\phi_{s,2,g,i,j}^{x-}$ 、正味の中性子流 $J_{m,g,i,j}^{x-}$ を用いて、それぞれ(6.7)式および(6.8)式で記述できる[4]。

$$J_{1,g,i,j}^{in,x-} = \frac{1}{4}\Phi_{s,g,i,j}^{x-} + \frac{1}{2}J_{1,g,i,j}^{x-} - \frac{3}{16}\phi_{s,2,g,i,j}^{x-} \quad (6.7)$$

$$J_{3,g,i,j}^{in,x-} = -\frac{1}{16}\Phi_{s,g,i,j}^{x-} + \frac{1}{2}J_{3,g,i,j}^{x-} + \frac{7}{16}\phi_{s,2,g,i,j}^{x-} \quad (6.8)$$

上式中の各変数の意味は以下のとおりである。

- $\Phi_{s,g,i,j}^{x-}$: (i,j) 番目メッシュの x 負方向境界面上のエネルギー g 群、 Φ の表面中性子束
- $\phi_{s,2,g,i,j}^{x-}$: (i,j) 番目メッシュの x 負方向境界面上のエネルギー g 群、2次の表面中性子束
- $J_{1,g,i,j}^{x-}$: (i,j) 番目メッシュの x 負方向境界面上のエネルギー g 群、1次の正味の部分中性子流
- $J_{m,g,i,j}^{in,x-}$: (i,j) 番目メッシュの x 負方向境界面に境界条件として与えたエネルギー g 群、 m 次の流入部分中性子流

有限体積法に基づくと、正味の中性子流 $J_{m,g,i,j}^{x-}$ は $\Phi_{s,g,i,j}^{x-}$ および $\phi_{s,2,g,i,j}^{x-}$ を用いてそれぞれ(6.9)式および(6.10)式で記述できる。

$$J_{1,g,i,j}^{x-} = -\frac{2D_{g,i,j}}{\Delta x_i}(\Phi_{g,i,j} - \Phi_{s,g,i,j}^{x-}) \quad (6.9)$$

$$J_{3,g,i,j}^{x-} = -\frac{2D_{3,g,i,j}}{\Delta x_i}(\phi_{2,g,i,j} - \phi_{s,2,g,i,j}^{x-}) \quad (6.10)$$

(6.9)式および(6.10)式を(6.7)式および(6.8)式に代入することで、(6.11)式および(6.12)式が得られる。

$$\frac{1}{4}\Phi_{s,g,i,j}^{x-} - \frac{D_{g,i,j}}{\Delta x_i}(\Phi_{g,i,j} - \Phi_{s,g,i,j}^{x-}) - \frac{3}{16}\phi_{s,2,g,i,j}^{x-} = J_{1,g,i,j}^{in,x-} \quad (6.11)$$

$$-\frac{1}{16}\Phi_{s,g,i,j}^{x-} - \frac{D_{3,g,i,j}}{\Delta x_i}(\phi_{2,g,i,j} - \phi_{s,2,g,i,j}^{x-}) + \frac{7}{16}\phi_{s,2,g,i,j}^{x-} = J_{3,g,i,j}^{in,x-} \quad (6.12)$$

(6.11)式および(6.12)式を $\Phi_{s,g,i,j}^{x-}$ および $\phi_{s,2,g,i,j}^{x-}$ について解くことで、(6.13)式および(6.14)式が得られる。

$$\begin{aligned} \Phi_{s,g,i,j}^{x-} &= \frac{b_{(1,1),g,i,j}^x}{b_{g,i,j}^x} \left(\frac{D_{g,i,j}}{\Delta x_i} \Phi_{g,i,j} + J_{1,g,i,j}^{in,x-} \right) \\ &+ \frac{b_{(0,1),g,i,j}^x}{b_{g,i,j}^x} \left(\frac{D_{3,g,i,j}}{\Delta x_i} \phi_{2,g,i,j} + J_{3,g,i,j}^{in,x-} \right) \end{aligned} \quad (6.13)$$

$$\begin{aligned}\phi_{s,2,g,i,j}^{x-} &= \frac{b_{(1,0)}}{b_{g,i,j}^x} \left(\frac{D_{g,i,j}}{\Delta x_i} \Phi_{g,i,j} + J_{1,g,i,j}^{in,x-} \right) \\ &+ \frac{b_{(0,0),g,i,j}^x}{b_{g,i,j}^x} \left(\frac{D_{3,g,i,j}}{\Delta x_i} \phi_{2,g,i,j} + J_{3,g,i,j}^{in,x-} \right)\end{aligned}\quad (6.14)$$

ただし、上式中の係数 $b_{(m,m),g,i,j}^x$ ($m = 0,1$)および $b_{(0,1)}$ 、 $b_{(1,0)}$ 、 $b_{g,i,j}^x$ はそれぞれ(6.15)式–(6.19)式で定義される。

$$b_{(0,0),g,i,j}^x = \frac{D_{g,i,j}}{\Delta x_i} + \frac{1}{4} \quad (6.15)$$

$$b_{(1,1),g,i,j}^x = \frac{D_{3,g,i,j}}{\Delta x_i} + \frac{7}{16} \quad (6.16)$$

$$b_{(0,1)} = \frac{3}{16} \quad (6.17)$$

$$b_{(1,0)} = \frac{1}{16} \quad (6.18)$$

$$b_{g,i,j}^x = b_{(0,0),g,i,j}^x b_{(1,1),g,i,j}^x - b_{(0,1)} b_{(1,0)} \quad (6.19)$$

(6.15)式–(6.19)式に示した各係数は、2.2.4 項の(2.136)式–(2.140)式で定義した係数と真空境界条件下 ($J^{in} = 0$) で一致する。(6.13)式および(6.14)式を(6.9)式および(6.10)式に代入することで、1,3 次の正味の中性子流に関する(6.20)式および(6.21)式が得られる。

$$\begin{aligned}J_{1,g,i,j}^{x-} &= -\frac{2D_{g,i,j}}{\Delta x_i} \left(1 - \frac{b_{(1,1),g,i,j}^x D_{g,i,j}}{b_{g,i,j}^x \Delta x_i} \right) \Phi_{g,i,j} + \frac{2D_{g,i,j} D_{3,g,i,j} b_{(0,1)}}{\Delta x_i^2 b_{g,i,j}^x} \phi_{2,g,i,j} \\ &+ \frac{2D_{g,i,j} b_{(1,1),g,i,j}^x}{\Delta x_i b_{g,i,j}^x} J_{1,g,i,j}^{in,x-} + \frac{2D_{g,i,j} b_{(0,1)}}{\Delta x_i b_{g,i,j}^x} J_{3,g,i,j}^{in,x-}\end{aligned}\quad (6.20)$$

$$\begin{aligned}J_{3,g,i,j}^{x-} &= \frac{2D_{g,i,j} D_{3,g,i,j} b_{(1,0)}}{\Delta x_i^2 b_{g,i,j}^x} \Phi_{g,i,j} - \frac{2D_{3,g,i,j}}{\Delta x_i} \left(1 - \frac{b_{(0,0),g,i,j}^x D_{3,g,i,j}}{b_{g,i,j}^x \Delta x_i} \right) \phi_{2,g,i,j} \\ &+ \frac{2D_{3,g,i,j} b_{(1,0)}}{\Delta x_i b_{g,i,j}^x} J_{1,g,i,j}^{in,x-} + \frac{2D_{3,g,i,j} b_{(0,0),g,i,j}^x}{\Delta x_i b_{g,i,j}^x} J_{3,g,i,j}^{in,x-}\end{aligned}\quad (6.21)$$

$\Phi_{g,i,j}$ は(6.6)式で定義したように、 $\phi_{0,g,i,j}$ と $\phi_{2,g,i,j}$ から計算できる。以上のようにして、1,3 次の正味の中性子流を 0,2 次の中性子束および流入部分中性子流で表現できる。(6.20)式および(6.21)式の第1,2 項は、真空境界条件($J_{1,g,i,j}^{in,x-} = J_{3,g,i,j}^{in,x-} = 0$)における正味の中性子流と一致する。

同様にして、 (i,j) 番目メッシュの x 正方向境界面における Φ の表面中性子束 $\Phi_{s,g,i,j}^{x+}$ および2 次の表面中性子束 $\phi_{s,2,g,i,j}^{x+}$ はそれぞれ(6.22)式および(6.23)式のように記述できる。

$$\begin{aligned}\Phi_{s,g,i,j}^{x+} &= \frac{b_{(1,1),g,i,j}^x}{b_{g,i,j}^x} \left(\frac{D_{g,i,j}}{\Delta x_i} \Phi_{g,i,j} + J_{1,g,i,j}^{in,x+} \right) \\ &+ \frac{b_{(0,1)}^x}{b_{g,i,j}^x} \left(\frac{D_{3,g,i,j}}{\Delta x_i} \phi_{2,g,i,j} + J_{3,g,i,j}^{in,x+} \right)\end{aligned}\quad (6.22)$$

$$\begin{aligned}\phi_{s,2,g,i,j}^{x+} &= \frac{b_{(1,0)}^x}{b_{g,i,j}^x} \left(\frac{D_{g,i,j}}{\Delta x_i} \Phi_{g,i,j} + J_{1,g,i,j}^{in,x+} \right) \\ &+ \frac{b_{(0,0),g,i,j}^x}{b_{g,i,j}^x} \left(\frac{D_{3,g,i,j}}{\Delta x_i} \phi_{2,g,i,j} + J_{3,g,i,j}^{in,x+} \right)\end{aligned}\quad (6.23)$$

上添え字 $x+$ は、注目するメッシュの x 正方向境界面を意味する。1,3次の正味の中性子流は、それぞれ(6.24)式および(6.25)式のように記述できる。

$$\begin{aligned}J_{1,g,i,j}^{x+} &= \frac{2D_{g,i,j}}{\Delta x_i} \left(1 - \frac{b_{(1,1),g,i,j}^x}{b_{g,i,j}^x} \frac{D_{g,i,j}}{\Delta x_i} \right) \Phi_{g,i,j} - \frac{2D_{g,i,j}D_{3,g,i,j}}{\Delta x_i^2} \frac{b_{(0,1)}}{b_{g,i,j}^x} \phi_{2,g,i,j} \\ &- \frac{2D_{g,i,j}}{\Delta x_i} \frac{b_{(1,1),g,i,j}^x}{b_{g,i,j}^x} J_{1,g,i,j}^{in,x+} - \frac{2D_{g,i,j}}{\Delta x_i} \frac{b_{(0,1)}}{b_{g,i,j}^x} J_{3,g,i,j}^{in,x+}\end{aligned}\quad (6.24)$$

$$\begin{aligned}J_{3,g,i,j}^{x+} &= -\frac{2D_{g,i,j}D_{3,g,i,j}}{\Delta x_i^2} \frac{b_{(1,0)}}{b_{g,i,j}^x} \Phi_{g,i,j} + \frac{2D_{3,g,i,j}}{\Delta x_i} \left(1 - \frac{b_{(0,0),g,i,j}^x}{b_{g,i,j}^x} \frac{D_{3,g,i,j}}{\Delta x_i} \right) \phi_{2,g,i,j} \\ &- \frac{2D_{3,g,i,j}}{\Delta x_i} \frac{b_{(1,0)}}{b_{g,i,j}^x} J_{1,g,i,j}^{in,x+} - \frac{2D_{3,g,i,j}}{\Delta x_i} \frac{b_{(0,0),g,i,j}^x}{b_{g,i,j}^x} J_{3,g,i,j}^{in,x+}\end{aligned}\quad (6.25)$$

x 負方向境界面の正味の中性子流に関する(6.20)式および(6.21)式の右辺は、 x 正方向境界面の正味の中性子流に関する(6.24)式および(6.25)式の右辺と符号が反転している点に留意されたい。

方向の正味の中性子流についても同様にして計算できる。以上の手順で1,3次の正味の中性子流を0,2次の中性子束および流入部分中性子流を用いて表現することで、(6.1)式および(6.2)式は、(6.26)式および(6.27)式のように記述できる。

$$\begin{aligned}&\sum_{n'=0,2} \left(A_{(0,n'),g,i,j}^{x-} \phi_{n',g,i-1,j} + A_{(0,n'),g,i,j}^{x+} \phi_{n',g,i+1,j} \right. \\ &\quad \left. + A_{(0,n'),g,i,j}^{y-} \phi_{n',g,i,j-1} + A_{(0,n'),g,i,j}^{y+} \phi_{n',g,i,j+1} + A_{(0,n'),g,i,j}^0 \phi_{n',g,i,j} \right) \\ &= P_{g,i,j} + \sum_{g' \neq g} \Sigma_{s,g' \rightarrow g,i,j} \phi_{0,g',i,j} \\ &+ \sum_{n'=0,2} \left(D_{(0,n'),g,i,j}^{in,x-} J_{n'+1,g,i,j}^{in,x-} + D_{(0,n'),g,i,j}^{in,x+} J_{n'+1,g,i,j}^{in,x+} \right. \\ &\quad \left. + D_{(0,n'),g,i,j}^{in,y-} J_{n'+1,g,i,j}^{in,y-} + D_{(0,n'),g,i,j}^{in,y+} J_{n'+1,g,i,j}^{in,y+} \right)\end{aligned}\quad (6.26)$$

$$\begin{aligned}
& \sum_{n'=0,2} \left(A_{(2,n'),g,i,j}^{x-} \phi_{n',g,i-1,j} + A_{(2,n'),g,i,j}^{x+} \phi_{n',g,i+1,j} \right. \\
& \quad \left. + A_{(2,n'),g,i,j}^{y-} \phi_{n',g,i,j-1} + A_{(2,n'),g,i,j}^{y+} \phi_{n',g,i,j+1} + A_{(2,n'),g,i,j}^0 \phi_{n',g,i,j} \right) \\
& = -\frac{2}{5} \left(P_{g,i,j} + \sum_{g' \neq g} \Sigma_{s,g' \rightarrow g,i,j} \phi_{0,g',i,j} \right) \\
& \quad + \sum_{n'=0,2} \left(D_{(2,n'),g,i,j}^{in,x-} J_{n'+1,g,i,j}^{in,x-} + D_{(2,n'),g,i,j}^{in,x+} J_{n'+1,g,i,j}^{in,x+} \right. \\
& \quad \left. + D_{(2,n'),g,i,j}^{in,y-} J_{n'+1,g,i,j}^{in,y-} + D_{(2,n'),g,i,j}^{in,y+} J_{n'+1,g,i,j}^{in,y+} \right)
\end{aligned} \tag{6.27}$$

(6.2)式の3次の正味の中性子流に3/5がかかけられている点に注意すると、上式中の消滅係数 $A_{(m,n),g,i,j}^{x\mp}$, $A_{(m,n),g,i,j}^{y\mp}$, $A_{(m,n),g,i,j}^0$ および $D_{(m,n),g,i,j}^{in,x\mp}$, $D_{(m,n),g,i,j}^{in,y\mp}$ は、それぞれ(6.28)式–(6.39)式で記述できる。

$$A_{(0,0),g,i,j}^{x\mp} = \begin{cases} -\frac{2D_{g,i,j}}{\Delta x_i^2} \left(1 - \frac{b_{(1,1),g,i,j}^x D_{g,i,j}}{b_{g,i,j}^x \Delta x_i} \right) & (O.B. x\mp) \\ -\frac{2D_{g,i,j} D_{g,i\mp 1,j}}{(D_{g,i,j} \Delta x_{i\mp 1} + D_{g,i\mp 1,j} \Delta x_i) \Delta x_i} & (\text{not } O.B. x\mp) \end{cases} \tag{6.28}$$

$$A_{(0,0),g,i,j}^{y\mp} = \begin{cases} -\frac{2D_{g,i,j}}{\Delta y_j^2} \left(1 - \frac{b_{(1,1),g,i,j}^y D_{g,i,j}}{b_{g,i,j}^y \Delta y_j} \right) & (O.B. y\mp) \\ -\frac{2D_{g,i,j} D_{g,i,j\mp 1}}{(D_{g,i,j} \Delta y_{j\mp 1} + D_{g,i,j\mp 1} \Delta y_j) \Delta y_j} & (\text{not } O.B. y\mp) \end{cases} \tag{6.29}$$

$$A_{(0,0),g,i,j}^0 = \Sigma_{r,g,i,j} - A_{(0,0),g,i,j}^{x-} - A_{(0,0),g,i,j}^{x+} - A_{(0,0),g,i,j}^{y-} - A_{(0,0),g,i,j}^{y+} \tag{6.30}$$

$$A_{(0,2),g,i,j}^{x\mp} = \begin{cases} 2A_{(0,0),g,i,j}^{x\mp} + \frac{2D_{g,i,j} D_{3,g,i,j} b_{(0,1)}}{\Delta x_i^3 b_{g,i,j}^x} & (O.B. x\mp) \\ 2A_{(0,0),g,i,j}^{x\mp} & (\text{not } O.B. x\mp) \end{cases} \tag{6.31}$$

$$A_{(0,2),g,i,j}^{y\mp} = \begin{cases} 2A_{(0,0),g,i,j}^{y\mp} + \frac{2D_{g,i,j} D_{3,g,i,j} b_{(0,1)}}{\Delta y_j^3 b_{g,i,j}^y} & (O.B. y\mp) \\ 2A_{(0,0),g,i,j}^{y\mp} & (\text{not } O.B. y\mp) \end{cases} \tag{6.32}$$

$$A_{(0,2),g,i,j}^0 = -A_{(0,2),g,i,j}^{x-} - A_{(0,2),g,i,j}^{x+} - A_{(0,2),g,i,j}^{y-} - A_{(0,2),g,i,j}^{y+} \tag{6.33}$$

$$A_{(2,0),g,i,j}^{x\mp} = \begin{cases} \frac{6D_{g,i,j} D_{3,g,i,j} b_{(1,0)}}{5\Delta x_i^3 b_{g,i,j}^x} & (O.B. x\mp) \\ 0 & (\text{not } O.B. x\mp) \end{cases} \tag{6.34}$$

$$A_{(2,0),g,i,j}^{y\mp} = \begin{cases} \frac{6D_{g,i,j} D_{3,g,i,j} b_{(1,0)}}{5\Delta y_j^3 b_{g,i,j}^y} & (O.B. y\mp) \\ 0 & (\text{not } O.B. y\mp) \end{cases} \tag{6.35}$$

$$A_{(2,0),g,i,j}^0 = -\frac{2}{5}\Sigma_{r,g,i,j} - A_{(2,0),g,i,j}^{x-} - A_{(2,0),g,i,j}^{x+} - A_{(2,0),g,i,j}^{y-} - A_{(2,0),g,i,j}^{y+} \quad (6.36)$$

$$A_{(2,2),g,i,j}^{x\mp} = \begin{cases} 2A_{(2,0),g,i,j}^{x\mp} - \frac{6D_{3,g,i,j}}{5\Delta x_i^2} \left(1 - \frac{b_{(0,0),g,i,j}^x}{b_{g,i,j}^x} \frac{D_{3,g,i,j}}{\Delta x_i} \right) & (O.B. x\mp) \\ -\frac{6D_{3,g,i,j}D_{3,g,i\mp 1,j}}{5(D_{3,g,i,j}\Delta x_{i\mp 1} + D_{3,g,i\mp 1,j}\Delta x_i)\Delta x_i} & (\text{not } O.B. x\mp) \end{cases} \quad (6.37)$$

$$A_{(2,2),g,i,j}^{y\mp} = \begin{cases} 2A_{(2,0),g,i,j}^{y\mp} - \frac{6D_{3,g,i,j}}{5\Delta y_j^2} \left(1 - \frac{b_{(0,0),g,i,j}^y}{b_{g,i,j}^y} \frac{D_{3,g,i,j}}{\Delta y_j} \right) & (O.B. y\mp) \\ -\frac{6D_{3,g,i,j}D_{3,g,i,j\mp 1}}{5(D_{3,g,i,j}\Delta y_{j\mp 1} + D_{3,g,i,j\mp 1}\Delta y_j)\Delta y_j} & (\text{not } O.B. y\mp) \end{cases} \quad (6.38)$$

$$A_{(2,2),g,i,j}^0 = \Sigma_{tr,g,i,j} - A_{(2,2),g,i,j}^{x-} - A_{(2,2),g,i,j}^{x+} - A_{(2,2),g,i,j}^{y-} - A_{(2,2),g,i,j}^{y+} \quad (6.39)$$

$$D_{(0,0),g,i,j}^{in,x\mp} = \begin{cases} \frac{2D_{g,i,j}}{\Delta x_i^2} \frac{b_{(1,1),g,i,j}^x}{b_{g,i,j}^x} & (O.B. x\mp) \\ 0 & (\text{not } O.B. x\mp) \end{cases} \quad (6.40)$$

$$D_{(0,2),g,i,j}^{in,x\mp} = \begin{cases} \frac{2D_{g,i,j}}{\Delta x_i^2} \frac{b_{(0,1)}^x}{b_{g,i,j}^x} & (O.B. x\mp) \\ 0 & (\text{not } O.B. x\mp) \end{cases} \quad (6.41)$$

$$D_{(2,0),g,i,j}^{in,x\mp} = \begin{cases} \frac{6D_{3,g,i,j}}{5\Delta x_i^2} \frac{b_{(1,0)}^x}{b_{g,i,j}^x} & (O.B. x\mp) \\ 0 & (\text{not } O.B. x\mp) \end{cases} \quad (6.42)$$

$$D_{(2,2),g,i,j}^{in,x\mp} = \begin{cases} \frac{6D_{3,g,i,j}}{5\Delta x_i^2} \frac{b_{(0,0),g,i,j}^x}{b_{g,i,j}^x} & (O.B. x\mp) \\ 0 & (\text{not } O.B. x\mp) \end{cases} \quad (6.43)$$

$$D_{(0,0),g,i,j}^{in,y\mp} = \begin{cases} \frac{2D_{g,i,j}}{\Delta y_j^2} \frac{b_{(1,1),g,i,j}^y}{b_{g,i,j}^y} & (O.B. y\mp) \\ 0 & (\text{not } O.B. y\mp) \end{cases} \quad (6.44)$$

$$D_{(0,2),g,i,j}^{in,y\mp} = \begin{cases} \frac{2D_{g,i,j}}{\Delta y_j^2} \frac{b_{(0,1)}^y}{b_{g,i,j}^y} & (O.B. y\mp) \\ 0 & (\text{not } O.B. y\mp) \end{cases} \quad (6.45)$$

$$D_{(2,0),g,i,j}^{in,y\mp} = \begin{cases} \frac{6D_{3,g,i,j}}{5\Delta y_j^2} \frac{b_{(1,0)}^y}{b_{g,i,j}^y} & (O.B. y\mp) \\ 0 & (\text{not } O.B. y\mp) \end{cases} \quad (6.46)$$

$$D_{(2,2),g,i,j}^{in,y\mp} = \begin{cases} \frac{6D_{3,g,i,j}}{5\Delta y_j^2} \frac{b_{(0,0),g,i,j}^y}{b_{g,i,j}^y} & (O.B. y\mp) \\ 0 & (\text{not } O.B. y\mp) \end{cases} \quad (6.47)$$

上式中の各記号の意味は以下の通りである

$O.B.X \mp$: local 体系の X 負/正方向の外部境界面に接する空間メッシュ

$not O.B.X \mp$: local 体系の X 負/正方向の外部境界面に接しない空間メッシュ

$b_{(m,m),g,i,j}^y$ ($m = 0,1$) は、 $b_{(m,m),i,j}^x$ の第一項 $\Delta x_i \rightarrow \Delta y_j$ と変換した係数に対応する。また、 $b_{g,i,j}^y$ は $b_{g,i,j}^x$ の変数 $x \rightarrow y$ と変換した係数に対応する。外部境界における消滅係数 $A_{(m,n),g,i,j}^{x\mp}$, $A_{(m,n),g,i,j}^{y\mp}$, $A_{(m,n),g,i,j}^0$ は、2.2.4 項で説明したアルベド境界条件下の消滅係数について、1,3 次のアルベド値をとともに 0 とした、すなわち真空境界条件 ($J^{in} = 0$) とした係数と一致する。

local 体系全体の SP3 方程式(6.26)式および(6.27)式全体は 1 組の連立方程式をなす。この連立方程式を行列とベクトルを用いて表現することで、固定源 local 計算で解くべき方程式を(6.48)式および(6.49)式で記述できる。

$$\begin{aligned} & \mathbf{A}_{(0,0),g}^{vac} \vec{\phi}_{0,g} + \mathbf{A}_{(0,2),g}^{vac} \vec{\phi}_{2,g} \\ &= \vec{P}_g + \sum_{g' \neq g} \mathbf{S}_{g' \rightarrow g} \vec{\phi}_{0,g'} + \sum_{n'=0,2} \left(\begin{array}{l} \mathbf{D}_{(0,n'),g}^{in,x-} \vec{j}_{n'+1,g}^{in,x-} + \mathbf{D}_{(0,n'),g}^{in,x+} \vec{j}_{n'+1,g}^{in,x+} \\ + \mathbf{D}_{(0,n'),g}^{in,y-} \vec{j}_{n'+1,g}^{in,y-} + \mathbf{D}_{(0,n'),g}^{in,y+} \vec{j}_{n'+1,g}^{in,y+} \end{array} \right) \end{aligned} \quad (6.48)$$

$$\begin{aligned} & \mathbf{A}_{(2,0),g}^{vac} \vec{\phi}_{0,g} + \mathbf{A}_{(2,2),g}^{vac} \vec{\phi}_{2,g} \\ &= -\frac{2}{5} \left\{ \vec{P}_g + \sum_{g' \neq g} \mathbf{S}_{g' \rightarrow g} \vec{\phi}_{0,g'} \right\} + \sum_{n'=0,2} \left(\begin{array}{l} \mathbf{D}_{(2,n'),g}^{in,x-} \vec{j}_{n'+1,g}^{in,x-} + \mathbf{D}_{(2,n'),g}^{in,x+} \vec{j}_{n'+1,g}^{in,x+} \\ + \mathbf{D}_{(2,n'),g}^{in,y-} \vec{j}_{n'+1,g}^{in,y-} + \mathbf{D}_{(2,n'),g}^{in,y+} \vec{j}_{n'+1,g}^{in,y+} \end{array} \right) \end{aligned} \quad (6.49)$$

上式中の各変数の意味は以下のとおりである。

$\vec{\phi}_{n,g} \in \mathbb{R}^{NR}$: エネルギー g 群の n 次中性子束分布

$\vec{P}_g \in \mathbb{R}^{NR}$: エネルギー g 群の核分裂源分布

$\mathbf{A}_{(m,n),g}^{vac} \in \mathbb{R}^{NR \times NR}$: 真空境界条件 ($J^{in} = 0$) におけるエネルギー g 群、 (m,n) 次の消滅係数行列

$\mathbf{S}_{g' \rightarrow g} \in \mathbb{R}^{NR \times NR}$: エネルギー g' 群 $\rightarrow g$ 群への散乱断面積行列

$\vec{j}_{n+1,g}^{in,X\mp} \in \mathbb{R}^{NR}$: X 負/正方向の集合体外部境界から流入する $n+1$ 次の流入部分中性子流

$\mathbf{D}_{(m,n),g}^{in,X\mp} \in \mathbb{R}^{NR \times NR}$: X 負/正方向の集合体外部境界から体系への中性子流入量に関する (m,n) 次の係数行列

消滅行列 $\mathbf{A}_{(m,n),g}^{vac}$ 、散乱断面積行列 $\mathbf{S}_{g' \rightarrow g}$ 、流入係数行列 $\mathbf{D}_{(m,n),g}^{in,X\mp}$ 、 n 次の中性子束の空間分布 $\vec{\phi}_{n,g}$ 、核分裂源分布 \vec{P}_g 、 $n+1$ 次の流入部分中性子流 $\vec{j}_{n+1,g}^{in,X\mp}$ の定義を、飛行方向に関する下添え字を省いてそれぞれ(5.17)式,(2.162)式,(6.51)式-(6.55)式に示す。

$$\vec{J}_g^{in,y^\mp} = \begin{pmatrix} J_{g,1,1}^{in,y^\mp} \\ J_{g,2,1}^{in,y^\mp} \\ \vdots \\ J_{g,NX,1}^{in,y^\mp} \\ J_{g,1,2}^{in,y^\mp} \\ \vdots \\ J_{g,NX,NY}^{in,y^\mp} \end{pmatrix} \quad (6.55)$$

ただし、(6.50)式中の消滅係数 $A_{g,i,j}^{x^\mp}$ 、 $A_{g,i,j}^{y^\mp}$ 、 $A_{g,i,j}^0$ は、(6.28)式–(6.39)式で定義した消滅係数である。 $\mathbf{A}_{(m,n),g}^{vac}$ の各要素は、飛行方向に関する下添え字が同一の (m,n) である消滅係数 $A_{(m,n),g,i,j}^{x^\mp}$ 、 $A_{(m,n),g,i,j}^{y^\mp}$ 、 $A_{(m,n),g,i,j}^0$ に対応する点に留意されたい。 $J_{g,i,j}^{in,x^\mp}$ は、 X 負/正方向の外部境界面で、境界条件として与えた流入部分中性子流値をとり、メッシュ境界面では 0 である。

● POD を用いた固定源 SP3 計算

POD を用いた次元削減を固定源 SP3 計算に適用する。具体的には、(6.48)式および(6.49)式の $\vec{\phi}_{n,g}$ ($n = 0,2$)に(6.56)式を代入した後、左からそれぞれ $\mathbf{U}_{0,g}$ および $\mathbf{U}_{2,g}$ の転置行列 ($\mathbf{U}_{0,g}^\top$ および $\mathbf{U}_{2,g}^\top$) をかける。

$$\vec{\phi}_{n,g} = \mathbf{U}_{n,g} \vec{h}_{n,g} \quad (6.56)$$

POD 展開次数を r とすると、行列 $\mathbf{U}_{n,g}$ は次式のように、集合体内の n 次の中性子束に関するエネルギー- g 群 POD 基底 $\vec{u}_{b,n,g}$ を r 本並べた行列として定義される。

$$\mathbf{U}_{n,g} = (\vec{u}_{1,n,g} \quad \cdots \quad \vec{u}_{r,n,g}) \quad (6.57)$$

上記手順により、(6.58)式および(6.59)式で示す POD 展開係数に関する方程式が得られる。

$$\begin{aligned} & \hat{\mathbf{A}}_{(0,0),g}^{vac} \vec{h}_{0,g} + \hat{\mathbf{A}}_{(0,2),g}^{vac} \vec{h}_{2,g} \\ &= \vec{\tilde{P}}_{0,g} + \sum_{g' \neq g} \hat{\mathbf{S}}_{(0,0),g' \rightarrow g} \vec{h}_{0,g'} + \sum_{n'=0,2} \left(\hat{\mathbf{D}}_{(0,n'),g}^{in,x-} \vec{J}_{n'+1,g}^{in,x-} + \hat{\mathbf{D}}_{(0,n'),g}^{in,x+} \vec{J}_{n'+1,g}^{in,x+} \right. \\ & \quad \left. + \hat{\mathbf{D}}_{(0,n'),g}^{in,y-} \vec{J}_{n'+1,g}^{in,y-} + \hat{\mathbf{D}}_{(0,n'),g}^{in,y+} \vec{J}_{n'+1,g}^{in,y+} \right) \end{aligned} \quad (6.58)$$

$$\begin{aligned} & \hat{\mathbf{A}}_{(2,0),g}^{vac} \vec{h}_{0,g} + \hat{\mathbf{A}}_{(2,2),g}^{vac} \vec{h}_{2,g} \\ &= -\frac{2}{5} \left\{ \vec{\tilde{P}}_{2,g} + \sum_{g' \neq g} \hat{\mathbf{S}}_{(2,0),g' \rightarrow g} \vec{h}_{0,g'} \right\} + \sum_{n'=0,2} \left(\hat{\mathbf{D}}_{(2,n'),g}^{in,x-} \vec{J}_{n'+1,g}^{in,x-} + \hat{\mathbf{D}}_{(2,n'),g}^{in,x+} \vec{J}_{n'+1,g}^{in,x+} \right. \\ & \quad \left. + \hat{\mathbf{D}}_{(2,n'),g}^{in,y-} \vec{J}_{n'+1,g}^{in,y-} + \hat{\mathbf{D}}_{(2,n'),g}^{in,y+} \vec{J}_{n'+1,g}^{in,y+} \right) \end{aligned} \quad (6.59)$$

ただし、上式中の $\hat{\mathbf{A}}_{(m,n),g}^{vac}$ 、 $\hat{\mathbf{S}}_{(m,0),g' \rightarrow g}$ は r 行 r 列の正方行列であり、それぞれ(6.60)式および(6.61)式で定義される。

$$\hat{\mathbf{A}}_{(m,n),g}^{vac} = \mathbf{U}_{m,g}^\top \mathbf{A}_{(m,n),g}^{vac} \mathbf{U}_{n,g} \quad (6.60)$$

$$\hat{\mathbf{S}}_{(m,0),g' \rightarrow g} = \mathbf{U}_{m,g}^T \mathbf{S}_{(m,0),g' \rightarrow g} \mathbf{U}_{0,g'} \quad (6.61)$$

上式の上添え字 \mathbf{T} は行列の転置を意味する。 $\vec{\hat{P}}_{m,g}$ は r 次元のベクトルであり、次式で定義される。

$$\vec{\hat{P}}_{m,g} = \mathbf{U}_{m,g}^T \vec{P}_g \quad (6.62)$$

$\hat{\mathbf{D}}_{(m,n),g}^{in,X^\mp}$ は r 行 NR 列の正方行列であり、次式で定義される。

$$\hat{\mathbf{D}}_{(m,n),g}^{in,X^\mp} = \mathbf{U}_{m,g}^T \mathbf{D}_{(m,n),g}^{in,X^\mp} \quad (6.63)$$

(6.58)式および(6.59)式をさらにまとめることで、次式が得られる。

$$\hat{\mathbf{A}}_g^{vac} \vec{h}_g = \vec{\hat{P}}_g + \sum_{g' \neq g} \hat{\mathbf{S}}_{g' \rightarrow g} \vec{h}_{g'} + \begin{pmatrix} \hat{\mathbf{D}}_g^{in,x-} \vec{j}_g^{in,x-} + \hat{\mathbf{D}}_g^{in,x+} \vec{j}_g^{in,x+} \\ + \hat{\mathbf{D}}_g^{in,y-} \vec{j}_g^{in,y-} + \hat{\mathbf{D}}_g^{in,y+} \vec{j}_g^{in,y+} \end{pmatrix} \quad (6.64)$$

ただし、上式中の $\hat{\mathbf{A}}_g^{vac}$ 、 $\hat{\mathbf{S}}_{g' \rightarrow g}$ は $2 \times r$ 行 $2 \times r$ 列の正方行列であり、それぞれ(6.65)式および(6.66)式で定義される。

$$\hat{\mathbf{A}}_g^{vac} = \begin{pmatrix} \hat{\mathbf{A}}_{(0,0),g}^{vac} & \hat{\mathbf{A}}_{(0,2),g}^{vac} \\ \hat{\mathbf{A}}_{(2,0),g}^{vac} & \hat{\mathbf{A}}_{(2,2),g}^{vac} \end{pmatrix} \quad (6.65)$$

$$\hat{\mathbf{S}}_{g' \rightarrow g} = \begin{pmatrix} \hat{\mathbf{S}}_{(0,0),g' \rightarrow g} & \mathbf{0} \\ -\frac{2}{5} \hat{\mathbf{S}}_{(2,0),g' \rightarrow g} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \quad (6.66)$$

\vec{h}_g および $\vec{\hat{P}}_g$ は $2 \times r$ 次元のベクトルであり、(6.67)式および(6.68)式で定義される。

$$\vec{h}_g = \begin{pmatrix} \vec{h}_{0,g} \\ \vec{h}_{2,g} \end{pmatrix} \quad (6.67)$$

$$\vec{\hat{P}}_g = \begin{pmatrix} \vec{\hat{P}}_{0,g} \\ -\frac{2}{5} \vec{\hat{P}}_{2,g} \end{pmatrix} \quad (6.68)$$

$\hat{\mathbf{D}}_g^{in,X^\mp}$ は $2 \times r$ 行 $2 \times NR$ 列の正方行列であり、次式で定義される。

$$\hat{\mathbf{D}}_g^{in,X^\mp} = \begin{pmatrix} \hat{\mathbf{D}}_{(0,0),g}^{in,X^\mp} & \hat{\mathbf{D}}_{(0,2),g}^{in,X^\mp} \\ \hat{\mathbf{D}}_{(2,0),g}^{in,X^\mp} & \hat{\mathbf{D}}_{(2,2),g}^{in,X^\mp} \end{pmatrix} \quad (6.69)$$

\vec{j}_g^{in,X^\mp} は $2 \times NR$ 次元のベクトルであり、次式で定義される。

$$\vec{j}_g^{in,X^\mp} = \begin{pmatrix} \vec{j}_{1,g}^{in,X^\mp} \\ \vec{j}_{3,g}^{in,X^\mp} \end{pmatrix} \quad (6.70)$$

流入部分中性子流 \vec{j}_g^{in,x^\mp} 、 \vec{j}_g^{in,y^\mp} および核分裂源 $\vec{\hat{P}}_g$ およびは local 計算結果と global 計算結果を用いて更新される。流入部分中性子流および核分裂源の更新手順は 6.2.4 項で詳しく説明する。

本研究では、LU 分解により POD 展開係数に関する方程式(6.64)式を解く。さらに、提案手法による計算時間を高速化するために、OpenMP[5]を用いて、local 計算を並列で実行す

る。

6.2.2 空間均質化および部分中性子流の補正係数評価

本項では、local 計算結果に基づく空間均質化および部分中性子流の補正係数評価について説明する。

● 空間均質化

空間均質化手順は、4.2.4 項と同様である。local 体系の詳細メッシュを 1 集合体 1 メッシュとして均質化する。この時、全中性子束を重みとした体積平均値として均質化断面積を計算する。本手法では、global 計算として拡散計算を実施するため、2 次中性子束を重みとした均質化断面積は不要である。

● 部分中性子流の補正係数

5.2.2 項と同様に、p-CMFD 法[6]に基づき、流出部分中性子流の補正係数を評価する。global 計算として拡散計算を実施するため、1 次の流出部分中性子流の補正係数が得られれば良い（3 次の流出部分中性子流の補正係数は不要である）。この時、補正係数を求める準備として、local 計算における単一集合体境界面における 1 次の流出部分中性子流を求める必要がある。5.2.2 項との違いは、local 体系の流出部分中性子流計算部分である。SP3 理論では、1 次の流出部分中性子流を評価するために、6.2.1 項で求めた Φ の表面中性子束 Φ_s および 2 次の表面中性子束 $\phi_{s,2}$ 、1 次の正味の中性子流 J_1 が必要である。

以下では、Fig. 5.2 のように (i, j) 番目メッシュと $(i+1, j)$ 番目メッシュの境界面が、 (I, J) 番目の local 体系と $(I, J+1)$ 番目の local 体系の境界面に属するとする。local 計算では、境界条件として、流入部分中性子流が与えられる。 x 負方向境界面では、 Φ_s および $\phi_{s,2}$ 、 J_1 はそれぞれ(6.13)式および(6.14)式、(6.20)式で表現でき、 x 正方向境界面では、各値はそれぞれ(6.22)式–(6.24)式のように表現できる。

P3 近似では、1 次の流出部分中性子流は、 Φ および 2 次の表面中性子束と 1 次の正味の中性子流を用いて、それぞれ(6.71)式および(6.72)式から計算できる。

$$J_{1,g,i+1,j}^{out,L,x-} = \frac{1}{4}\Phi_{s,g,i+1,j}^{L,x-} - \frac{1}{2}J_{1,g,i+1,j}^{L,x-} - \frac{3}{16}\phi_{s,2,g,i+1,j}^{L,x-} \quad (6.71)$$

$$J_{1,g,i,j}^{out,L,x+} = \frac{1}{4}\Phi_{s,g,i,j}^{L,x+} + \frac{1}{2}J_{1,g,i,j}^{L,x+} - \frac{3}{16}\phi_{s,2,g,i,j}^{L,x+} \quad (6.72)$$

上添え字 L は local 体系の量を意味する。(6.71)式に(6.13)式と(6.14)式、(6.20)式を代入し、(6.72)式に(6.22)式–(6.24)式を代入し、(6.15)式–(6.19)式を用いて整理することで、(6.73)式および(6.74)式が得られる。

$$J_{1,g,i+1,j}^{out,L,x-} = \frac{2D_{g,i+1,j}}{\Delta x_{i+1}} \left(1 - \frac{D_{g,i+1,j} b_{(1,1),g,i+1,j}^x}{\Delta x_{i+1} b_{g,i+1,j}^x} \right) \Phi_{g,i+1,j} - \frac{2D_{g,i+1,j} D_{3,g,i+1,j} b_{(0,1)}}{\Delta x_{i+1}^2 b_{g,i+1,j}^x} \phi_{2,g,i+1,j} \quad (6.73)$$

$$+ \left(1 - \frac{2D_{g,i+1,j} b_{(1,1),g,i+1,j}^x}{\Delta x_{i+1} b_{g,i+1,j}^x} \right) J_{1,g,i+1,j}^{in,L,x-} - \frac{2D_{g,i+1,j} b_{(0,1)}}{\Delta x_{i+1} b_{g,i+1,j}^x} J_{3,g,i+1,j}^{in,L,x-}$$

$$J_{1,g,i,j}^{out,L,x+} = \frac{2D_{g,i,j}}{\Delta x_i} \left(1 - \frac{D_{g,i,j} b_{(1,1),g,i,j}^x}{\Delta x_i b_{g,i,j}^x} \right) \Phi_{g,i,j} - \frac{2D_{g,i,j} D_{3,g,i,j} b_{(0,1)}}{\Delta x_i^2 b_{g,i,j}^x} \phi_{2,g,i,j} \quad (6.74)$$

$$+ \left(1 - \frac{2D_{g,i,j} b_{(1,1),g,i,j}^x}{\Delta x_i b_{g,i,j}^x} \right) J_{1,g,i,j}^{in,L,x+} - \frac{2D_{g,i,j} b_{(0,1)}}{\Delta x_i b_{g,i,j}^x} J_{3,g,i,j}^{in,L,x+}$$

$\Phi_{g,i,j}$ は(6.6)式で定義したように、 $\phi_{0,g,i,j}$ と $\phi_{2,g,i,j}$ から計算できる。以上のようにして、0,2次の中性子束 $\phi_{m,g,i,j}$ と1,3次の流入部分中性子流 J_{m+1}^{in} ($m = 0,2$)を用いて、1次の流出部分中性子流 J_1^{out} を表現できる。

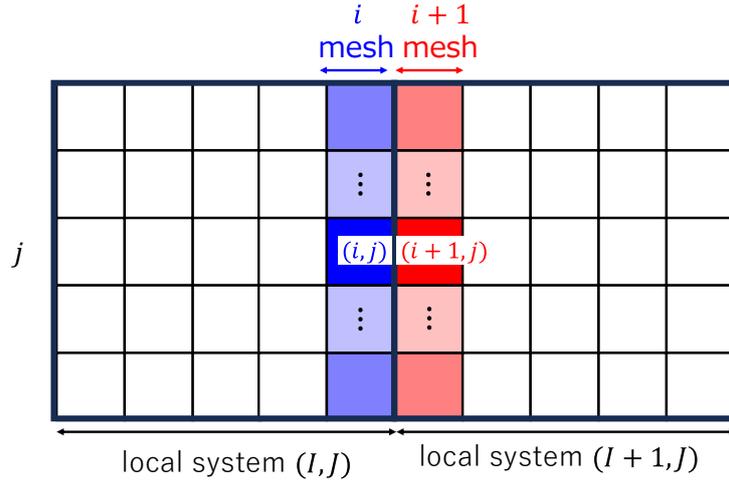


Fig. 5.2 (i, j) 番目メッシュと $(i + 1, j)$ 番目メッシュの位置 (再掲)

次に、 $J_{g,i+1,j}^{out,L,x-}$ および $J_{g,i,j}^{out,L,x+}$ を用いて、流出部分中性子流の補正係数を求める。流出部分中性子流の補正係数計算の考え方は、5.2.2項と同様であるため、本項では詳細な説明を省略し、結論のみを示す。

p-CMFD法に基づくと、local計算結果を用いて補正係数 $D_{g,I+1,J}^{cor,x-}$ および $D_{g,I,J}^{cor,x+}$ は、それぞれ(6.75)式および(6.76)式により計算できる[1],[2]。

$$D_{g,I+1,J}^{cor,x-} = \frac{J_{1,g,I+1,J}^{out,L,x-} - \frac{D_{g,I,J}^G D_{g,I+1,J}^G (\bar{\phi}_{0,g,I+1,J}^L - \bar{\phi}_{0,g,I,J}^L)}{D_{g,I,J}^G \Delta x_{I+1}^G + D_{g,I+1,J}^G \Delta x_I^G}}{\bar{\phi}_{0,g,I+1,J}^L} \quad (6.75)$$

$$D_{g,I,J}^{cor,x+} = \frac{\bar{J}_{1,g,I,J}^{out,L,x+} + \frac{D_{g,I,J}^G D_{g,I+1,J}^G (\bar{\phi}_{0,g,I+1,J}^L - \bar{\phi}_{0,g,I,J}^L)}{D_{g,I,J}^G \Delta x_{g,I+1}^G + D_{g,I+1,J}^G \Delta x_I^G}}{\bar{\phi}_{0,g,I,J}^L} \quad (6.76)$$

上式中の上添え字 G は、global 体系の量を意味する。 $\bar{\phi}_{0,g,I,J}^L$ は (I,J) 番目の local 体系内のエネルギー g 群全中性子束体積平均値であり、 $\bar{J}_{1,g,I,J}^{out,L,x-/x+}$ は (I,J) 番目 local 体系の x 負/正方向境界面におけるエネルギー g 群、1次の流出部分中性子流の面平均値である。ここで、 $\bar{\phi}_{0,g,I,J}^L$ および $\bar{J}_{g,I,J}^{out,L,x-/x+}$ はそれぞれ(6.77)式および(6.78)式で計算する。

$$\bar{\phi}_{0,g,I,J}^L = \frac{\sum_{(i,j) \in L_{I,J}} \phi_{0,g,i,j}^L \Delta x_i^L \Delta y_j^L}{S_{I,J}} \quad (6.77)$$

$$\bar{J}_{1,g,I,J}^{out,L,x-/x+} = \frac{\sum_{j \in LS_{I,J}^{x-/x+}} J_{1,g,i,j}^{out,L,x-/x+} \Delta y_j^L}{\sum_{j \in LS_{I,J}^{x-/x+}} \Delta y_j^L} \quad (6.78)$$

上式中の変数の意味は以下の通りである。

$S_{I,J}$: (I,J) 番目のメッシュの面積

$\sum_{(i,j) \in L_{I,J}}$: (I,J) 番目の local 体系内の空間メッシュの総和

$\sum_{j \in LS_{I,J}^{x-/x+}}$: (I,J) 番目の local 体系の x 正/負方向境界面に接するメッシュの総和

y 負/正方向境界面における流出部分中性子流の補正係数も同様の手順で計算できる。

6.2.3 p-CMFD 法に基づく global 計算

本項では、p-CMFD 法[6]に基づく粗メッシュ拡散計算について簡単に説明する。詳細な説明は、5.2.3 項を参照されたい。

前項より得られた均質化断面積および部分中性子流の補正係数を用いることで、各集合体の詳細メッシュ SP3 計算を再現するような全炉心粗メッシュ拡散方程式を立式できる[1]–[3]。本研究では、内部反復は点ヤコビ前処理付き BiCGSTAB 法[7]、外部反復はべき乗法により拡散方程式を解く。BiCGSTAB 法は数値計算ライブラリ Eigen::BiCGSTAB[8]を用いて実行する。本検証では Eigen::BiCGSTAB による数値計算を OpenMP[5]により並列化する。

global 計算より、各 local 体系内の全中性子束体積平均値および各集合体境界面の流入部分中性子流面平均値、全炉心の実効増倍率 k_{eff} が得られる。

6.2.4 local 体系の境界条件および核分裂源更新

本項では、local 体系の流入部分中性子流による境界条件および核分裂源更新手順を説明する。

- 流入部分中性子流による境界条件更新

(I, J) 番目集合体と $(I + 1, J)$ 番目集合体の境界面における流入中性子流更新の流れを説明する。

local 体系の固定源計算では、流入部分中性子流を境界条件とする。 n 回目の POD LG 反復後、流出部分中性子流が得られる。ここで、集合体境界面における部分中性子流の連続性より、「ある表面における流入部分中性子流が隣接する集合体から流出する部分中性子流に等しい」といった条件が成り立つ。本条件に基づき、 $n + 1$ 回目の local 計算の境界条件は次式のように更新される。

$$\tilde{j}_{m,g,I,J}^{in,L,x-/x+,(n+1)} = \frac{\tilde{j}_{1,g,I,J}^{in,G,x-/x+,(n)}}{\tilde{j}_{1,g,I\mp 1,J}^{out,L,x+/x-,(n)}} \tilde{j}_{m,g,I\mp 1,J}^{out,L,x+/x-,(n)} \quad (6.79)$$

$$\tilde{j}_{m,g,I,J}^{in,L,y-/y+,(n+1)} = \frac{\tilde{j}_{1,g,I,J}^{in,G,y-/y+,(n)}}{\tilde{j}_{1,g,I,J\mp 1}^{out,L,y+/y-,(n)}} \tilde{j}_{1,g,I,J\mp 1}^{out,L,y+/y-,(n)} \quad (6.80)$$

上式中の各変数の意味は以下のとおりである。

上添え字 n : POD LG 反復回数

$\tilde{j}_{g,I,J}^{in,L,x-/x+}$: (I, J) 番目集合体の X 負/正方向境界面におけるエネルギー g 群流入部分中性子流分布

$\tilde{j}_{g,I,J}^{out,L,x-/x+}$: (I, J) 番目集合体の X 負/正方向境界面におけるエネルギー g 群流出部分中性子流分布

例えば、 x 方向の流出部分中性子流の空間分布は 6.2.2 項の(6.73)式および(6.74)式より計算できる。本手法では、global 計算として拡散計算を実施するため、3 次の部分中性子流を評価できない。ゆえに、(6.79)式および(6.80)式では、1,3 次の部分中性子流を同じ係数 $(\tilde{j}_{1,g,I,J}^{in,G,x-/x+,(n)} / \tilde{j}_{1,g,I\mp 1,J}^{out,L,x+/x-,(n)}, \tilde{j}_{1,g,I,J}^{in,G,y-/y+,(n)} / \tilde{j}_{1,g,I,J\mp 1}^{out,L,y+/y-,(n)})$ で規格化している。

- 核分裂源更新

核分裂源を計算するためには、全中性子束分布と実効増倍率が必要である。ただし、local 計算は固定源計算であるため、固有値である実効増倍率 k_{eff} を計算できない。一方、global 計算は k_{eff} 固有値計算であるため、体系全体の k_{eff} を計算できる。そこで、global 計算より得られた k_{eff}^G を用いて、次式のように m 次の核分裂源 $\vec{\tilde{p}}_{m,g}$ を更新する。

$$\vec{\tilde{p}}_{m,g,I,J}^{(n+1)} = \frac{1}{k_{\text{eff}}^{G,(n)}} \sum_{g'} \hat{\mathbf{F}}_{(m,0)g' \rightarrow g,I,J}^L \frac{\bar{\Phi}_{0,g',I,J}^{G,(n)}}{\bar{\Phi}_{0,g',I,J}^{L,(n)}} \vec{h}_{0,g',I,J}^{L,(n)} \quad (6.81)$$

上式中の各変数の意味は以下のとおりである。

$\vec{\tilde{p}}_{m,g,I,J} \in \mathbb{R}^r$: (I, J) 番目集合体内におけるエネルギー g 群核分裂源の m 次展開係数ベクトル

$\vec{h}_{m,g,I,J} \in \mathbb{R}^r$: (I,J) 番目集合体内のエネルギー g 群 POD 展開係数ベクトル

$\hat{\mathbf{F}}_{(m,0),g' \rightarrow g,I,J}^L$ は r 行 r 列の正方行列であり、 (I,J) 番目集合体のエネルギー g' 群 $\rightarrow g$ 群への核分裂断面積行列 $\mathbf{F}_{g' \rightarrow g,I,J}^L$ を、次式のように左右から POD 基底行列で挟んだ行列である。

$$\hat{\mathbf{F}}_{(m,0),g' \rightarrow g,I,J}^L = \mathbf{U}_{m,g,I,J}^{L,T} \mathbf{F}_{g' \rightarrow g,I,J}^L \mathbf{U}_{0,g',I,J}^L \quad (6.82)$$

(5.58)式では、 $\bar{\phi}_{0,g,I,J}^{G,(n)}/\bar{\phi}_{0,g,I,J}^{L,(n)}$ を用いて、各エネルギー群の0次の中性子束に関する POD 展開係数ベクトル、すなわち全中性子束空間分布を global 計算結果に一致するよう、規格化する。

6.2.5 各集合体内の中性子束分布再構成

POD LG 反復が収束した後、 m 次の中性子束に関する POD 展開係数ベクトル $\vec{h}_{m,g,I,J}^L$ と POD 基底を用いて、 (I,J) 番目の集合体内の l 次の中性子束空間分布を次式で再構成する。

$$\vec{\phi}_{m,g,I,J}^L = \mathbf{U}_{m,g,I,J}^L \vec{h}_{m,g,I,J}^L \quad (6.83)$$

ただし、 $\vec{\phi}_{m,g,I,J}^L$ は (I,J) 番目の集合体内のエネルギー g 群、 m 次の中性子束分布である。

6.3 2次元炉心体系における検証

2次元炉心体系を対象として、Fixed POD LG 法により、詳細メッシュ SP3 計算を精度よく再現可能か検証する。さらに、p-CMFD 加速法を適用した全炉心詳細メッシュ SP3 計算と提案手法による SP3 計算の計算時間を比較する。6.3.1 項で本検証に用いた計算体系および計算条件を説明する。6.3.2 項で、POD LG 反復計算で用いた各集合体および反射体領域の POD 基底評価手順および結果を示す。6.3.3 項で Fixed POD LG 反復法に基づく SP3 計算の有効性検証結果を示す。

6.3.1 計算条件

5.3 節の検証と同様の小規模正方形炉心体系および大規模凸型炉心体系を用いた。以下で計算体系を簡単に説明する。まず、各 local 体系の幾何形状を Fig. 5.3 に示す。本検証では、各 local 体系内を 17×17 の空間メッシュに分割した。1 メッシュの大きさは $1.26 \text{ cm} \times 1.26 \text{ cm}$ とした。エネルギー群数は2群とした。本研究では、自作した2次元 SP3 コードを用いて検証を実施した。次に、炉心体系の幾何形状を Fig. 5.4 に示す。本検証では、ピンセル単位に均質化された C5G7 ベンチマーク体系[9] (小規模正方形炉心) および C5G7 ベンチマーク拡張体系 (大規模凸型炉心) を用いた。ピンセル単位の均質化およびエネルギー群縮約は、輸送計算コード GENESIS[10],[11]を用いて実施した。本検証では、GENESIS を用いた空間均質化・エネルギー群縮約時に SPH 因子[12]は用いていない。計算体系の詳細および各物質の断面積の値については、5.3.1 項を参照されたい。

本検証では OpenMP[5]を用いて、local 計算を並列で実行する。小規模正方形炉心体系および大規模凸型炉心体系における local 計算並列化時のスレッド数をそれぞれ 9 および 18 とした。

各計算の外部反復の収束条件を Table 6.1 に示す。local 計算では、内部反復で LU 分解を用いた。全炉心詳細計算および global 計算では、内部反復として、点ヤコビ前処理付き BiCGSTAB 法[7]を用いた。BiCGSTAB 法は数値計算ライブラリ Eigen::BiCGSTAB[8]により実行した。本検証では Eigen::BiCGSTAB による数値計算を OpenMP[5]により並列化した。全炉心詳細計算および global 計算の内部反復収束条件はともに 1×10^{-9} とした。

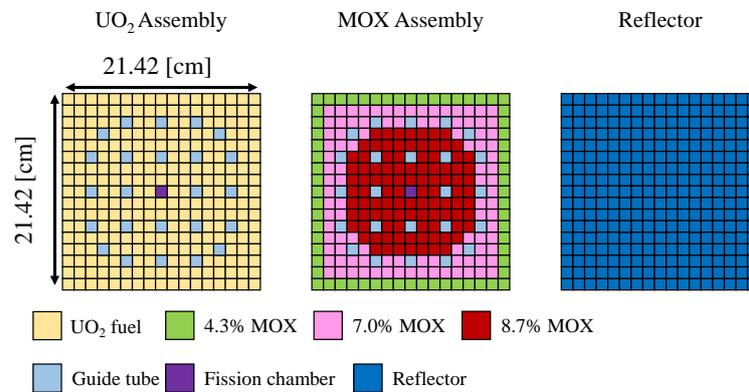
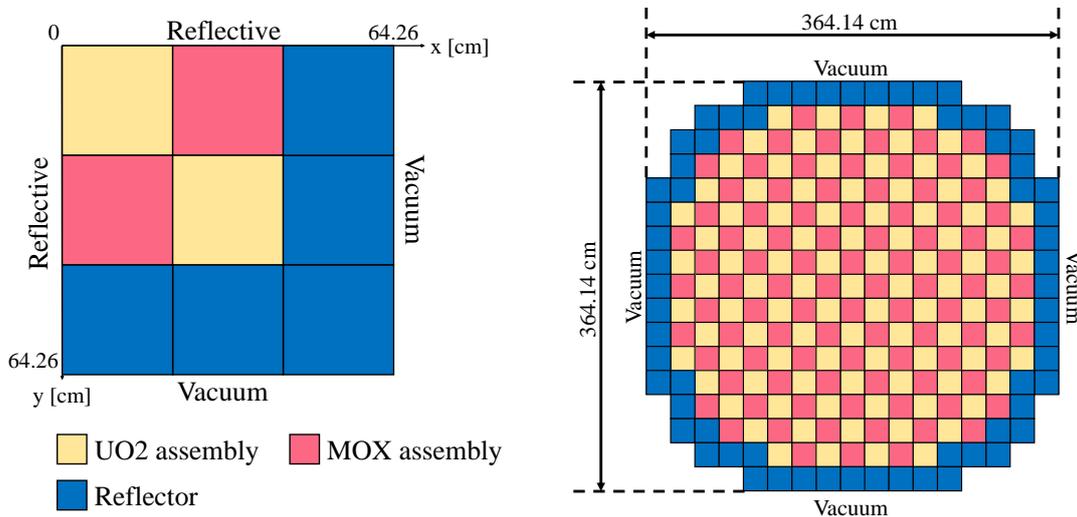


Fig. 5.3 UO₂燃料集合体および MOX 燃料集合体、反射体領域の幾何形状 (再掲)



小規模正方形炉心体系

大規模凸型炉心体系

Fig. 5.4 炉心体系の幾何形状 (再掲)

Table 6.1 各計算の外部反復の収束条件

	条件を与える物理量	収束条件
参照解	実効増倍率 $\varepsilon_{k_{\text{eff}}}^{\text{outer}}$	1.0E-8
	0,2 次の中性子束 $\varepsilon_{\phi}^{\text{outer}}$	1.0E-8
POD LG	POD 展開係数 (local 計算) $\varepsilon_h^{L,\text{outer}}$	1.0E-5
	実効増倍率 (global 計算) $\varepsilon_{k_{\text{eff}}}^{G,\text{outer}}$	1.0E-8
	0,2 次の中性子束 (global 計算) $\varepsilon_{\phi}^{G,\text{outer}}$	1.0E-8
	実効増倍率 (POD LG 反復計算) $\varepsilon_{k_{\text{eff}}}^{\text{POD LG,outer}}$	1.0E-8

本検証では、目標誤差を(6.84)式的全中性子束相対誤差の平均値であるrRMSEおよび(6.85)式の実効増倍率誤差 Δk_{eff} で定義した。具体的には、目標誤差を「全中性子束の rRMSE が 0.1% 以下」かつ「 Δk_{eff} が 0.01%以下」とした。

$$\text{rRMSE} = \sqrt{\frac{1}{NG \times NX \times NY} \sum_{g=1}^{NG} \sum_{i=1}^{NX} \sum_{j=1}^{NY} \left(\frac{\phi_{0,g,i,j}^{\text{POD LG}}}{\phi_{0,g,i,j}^{\text{ref}}} - 1 \right)^2} \quad (6.84)$$

$$\Delta k_{\text{eff}} = |k_{\text{eff}}^{\text{POD LG}} - k_{\text{eff}}^{\text{ref}}| \quad (6.85)$$

上式において、上添え字 ref および $POD LG$ はそれぞれ参照値および POD LG 反復計算より得られた物理量を意味する。

なお、本検証では、2 次中性子束分布の計算誤差については考慮しない。炉心解析では、全中性子束分布によって決まる熱出力分布を数値計算により推定し、炉心体系の安全性・経済性を評価することが目的である。したがって、全中性子束分布を高精度に計算できれば十分であると考えた。

6.3.2 POD 基底評価手順および結果

本項では、POD 基底評価手順を説明した後、得られた POD 基底空間分布を示す。まず、各燃料集合体の POD 基底評価手順および結果を述べる。次に、反射体領域の POD 基底評価手順および結果を述べる。続いて、各燃料集合体および反射体領域の次元削減率を示す。最後に、前章で得られた拡散計算に用いる POD 展開次数と比較する。

● 燃料集合体の POD 基底

第 3 章で説明した POD 展開次数探索手法に基づき、各燃料集合体の POD 基底を評価した。本検証では、POD 基底評価時に回転によるデータ拡張を用いた。POD 展開次数探索において、境界条件としてランダムなアルベド境界条件を与えた。本計算は SP3 計算であるため、各エネルギー群に対して、1 次と 3 次の部分中性子流に対するアルベド値が定義される。各アルベド値は各境界面で空間的に一様とし、その値は一様乱数により決定した。各集

合体の1次および3次のアルベド値の一様乱数範囲を **Table 6.2** に示す。本乱数範囲は、空間均質化・エネルギー群縮約した C5G7 ベンチマーク体系における、各集合体境界面上のアルベド値を含むように決定した。

Table 6.2 各燃料集合体のアルベド値の一様乱数範囲

	g	UO ₂ 燃料集合体	MOX 燃料集合体
1 次の	1	[0.4, 1.3]	[0.4, 1.3]
アルベド値 α_1	2	[0.5, 1.6]	[1.0, 1.8]
3 次の	1	[0.7, 1.1]	[0.7, 1.1]
アルベド値 α_3	2	[0.9, 1.1]	[1.0, 1.1]

POD 展開次数探索における目標誤差は、「全中性子束の rRMSE が 0.1%以下」かつ「 Δk_{eff} が 0.01%以下」とした。本検証では、統計的評価手法である Wilks の手法を用いて、目標誤差を満足するか判定した。

最終的に得られた UO₂ 燃料集合体および MOX 燃料集合体の POD 展開次数はそれぞれ 48 次および 44 次であった。UO₂ 燃料集合体の 1-8 次の高速群および熱群の全中性子束の POD 基底空間分布をそれぞれ **Fig. 6.1** および **Fig. 6.2** に示し、2 次中性子束の POD 基底空間分布をそれぞれ **Fig. 6.3** および **Fig. 6.4** に示す。次に、MOX 燃料集合体の 1-8 次の高速群および熱群の全中性子束の POD 基底空間分布をそれぞれ **Fig. 6.5** および **Fig. 6.6** に示し、2 次中性子束の POD 基底空間分布をそれぞれ **Fig. 6.7** および **Fig. 6.8** に示す。各集合体の次数に対する各エネルギー群全中性子束の特異値変化を **Fig. 6.9** に示し、2 次中性子束の特異値変化を **Fig. 6.10** に示す。**Fig. 6.9** および **Fig. 6.10** において、青丸が高速群の特異値であり、赤×が熱群の特異値をそれぞれ表している。

前章と同様に、POD 展開次数探索アルゴリズムでは、固有値計算により、POD 基底が目標誤差を満足するか判定した。

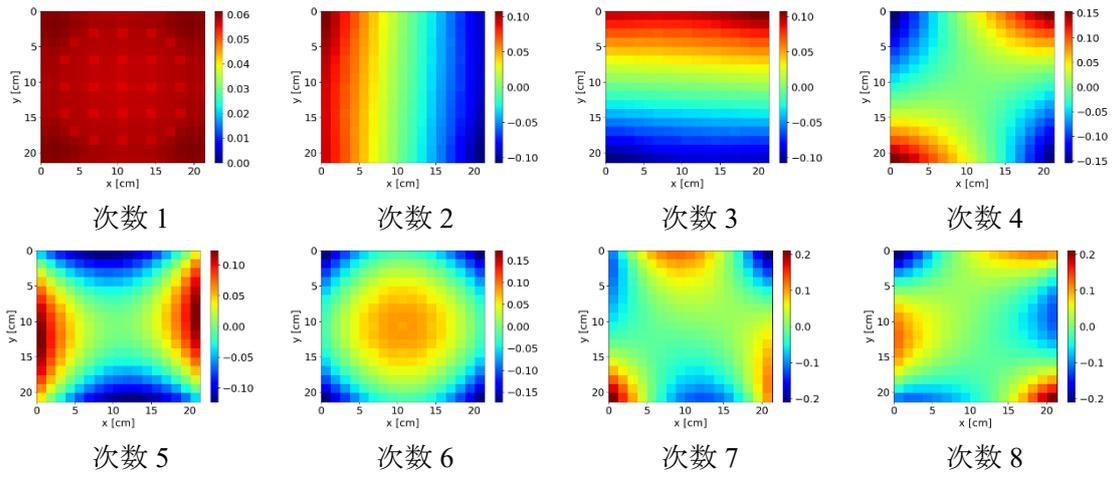


Fig. 6.1 高速群全中性子束の POD 基底空間分布 (UO₂ 燃料集合体)

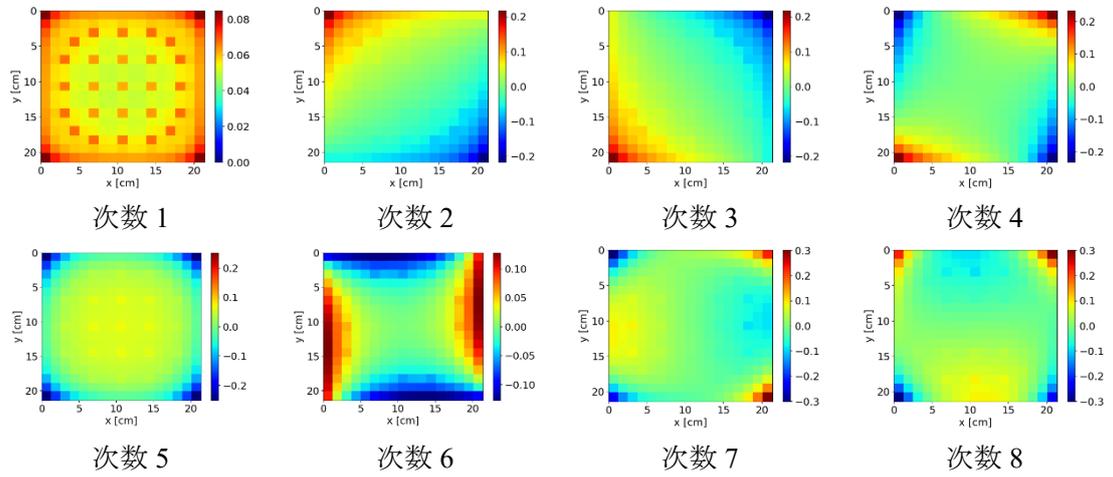


Fig. 6.2 熱群全中性子束の POD 基底空間分布 (UO₂ 燃料集合体)

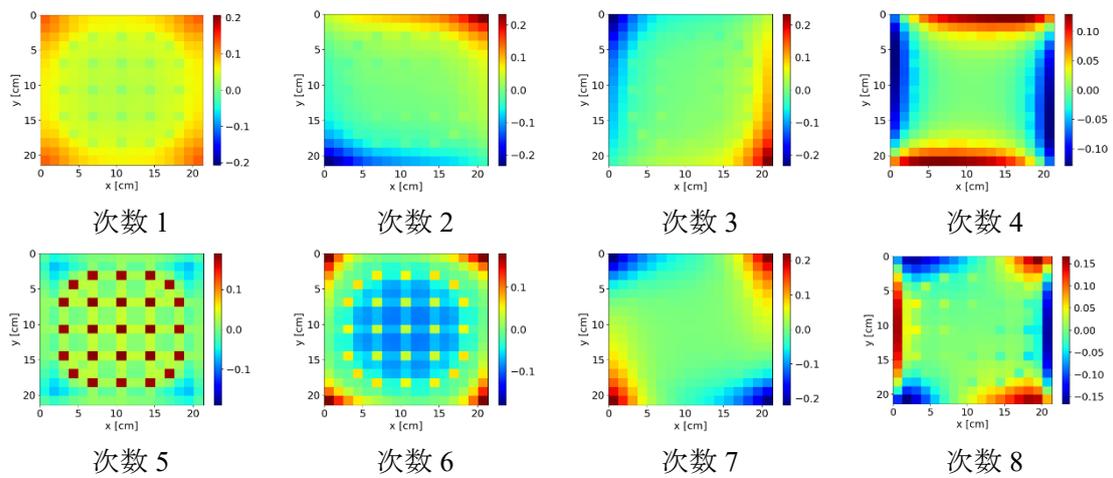


Fig. 6.3 高速群 2 次中性子束の POD 基底空間分布 (UO₂ 燃料集合体)

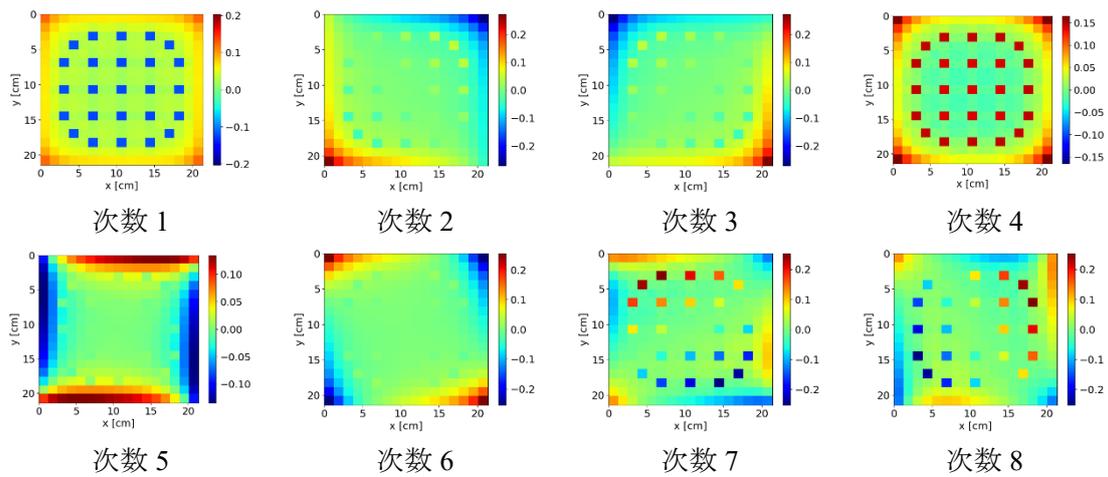


Fig. 6.4 熱群 2 次中性子束の POD 基底空間分布 (UO₂ 燃料集合体)

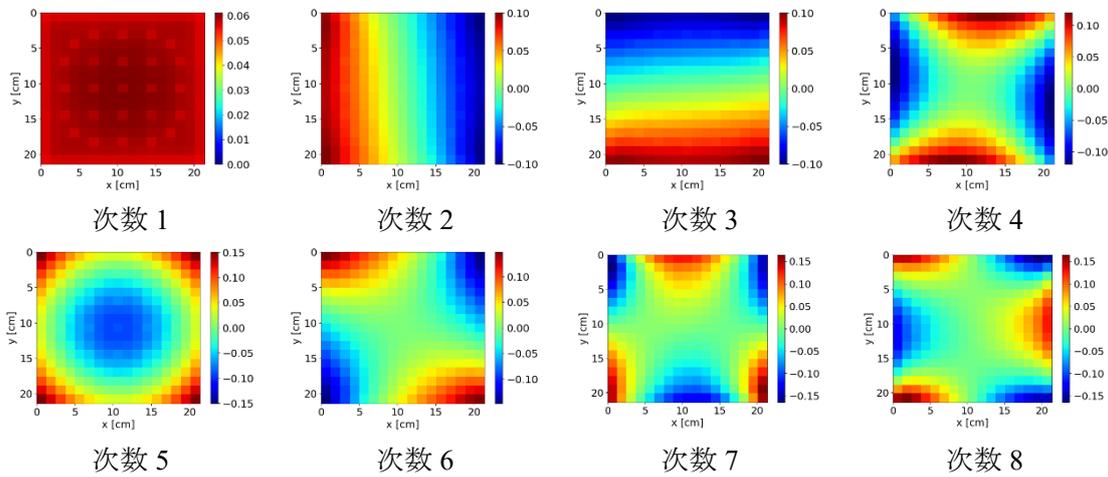


Fig. 6.5 高速群全中性子束の POD 基底空間分布 (MOX 燃料集合体)

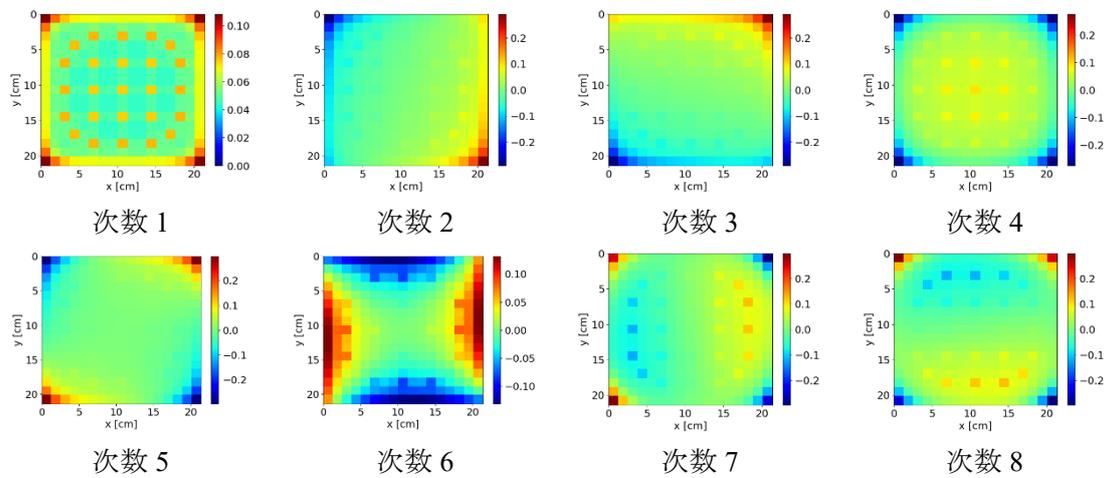


Fig. 6.6 熱群全中性子束の POD 基底空間分布 (MOX 燃料集合体)

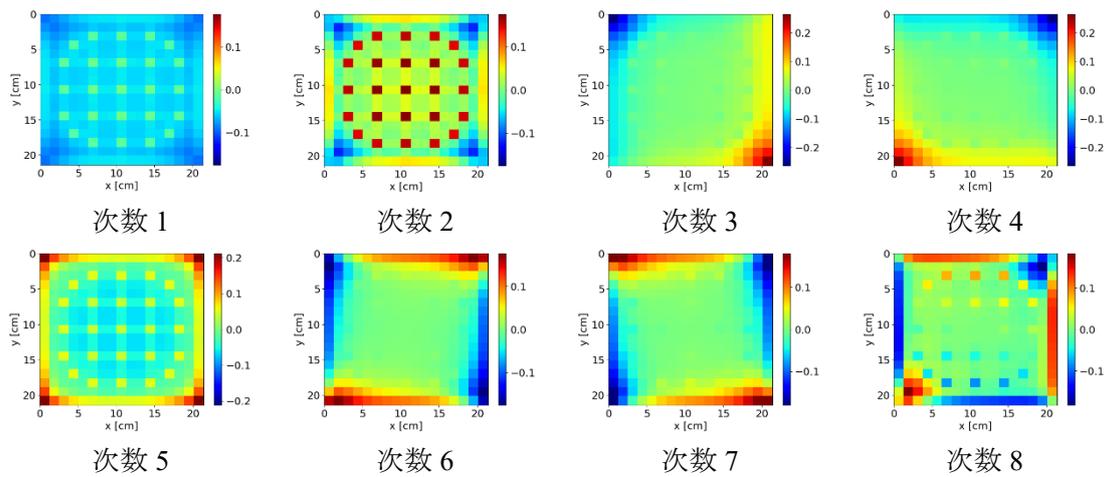


Fig. 6.7 高速群 2 次中性子束の POD 基底空間分布 (MOX 燃料集合体)

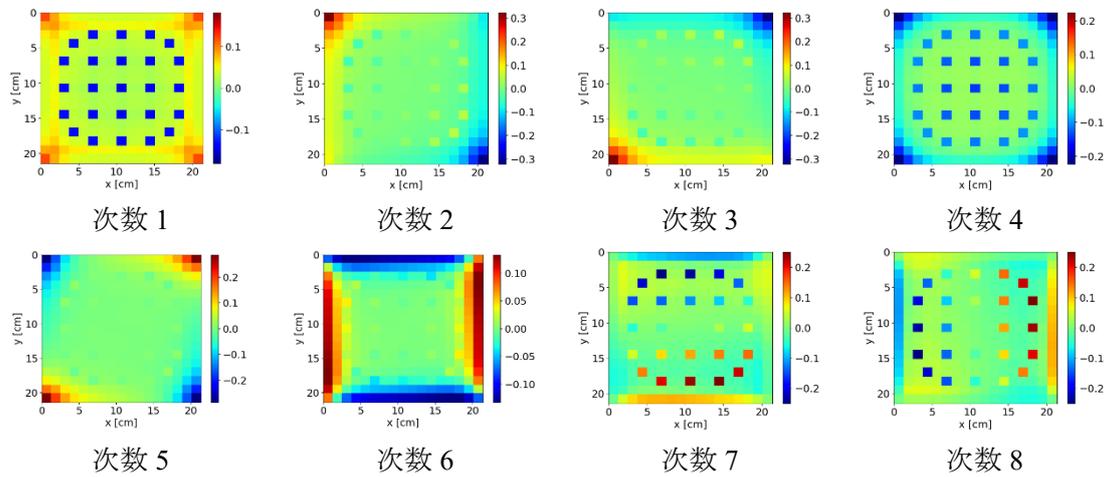
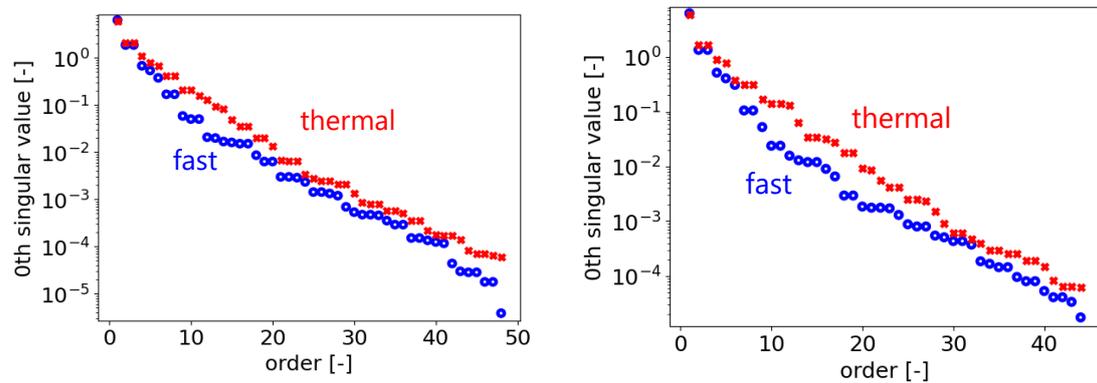


Fig. 6.8 熱群 2 次中性子束の POD 基底空間分布 (MOX 燃料集合体)



UO₂ 燃料集合体

MOX 燃料集合体

Fig. 6.9 次数に対する全中性子束の特異値変化 (各燃料集合体)

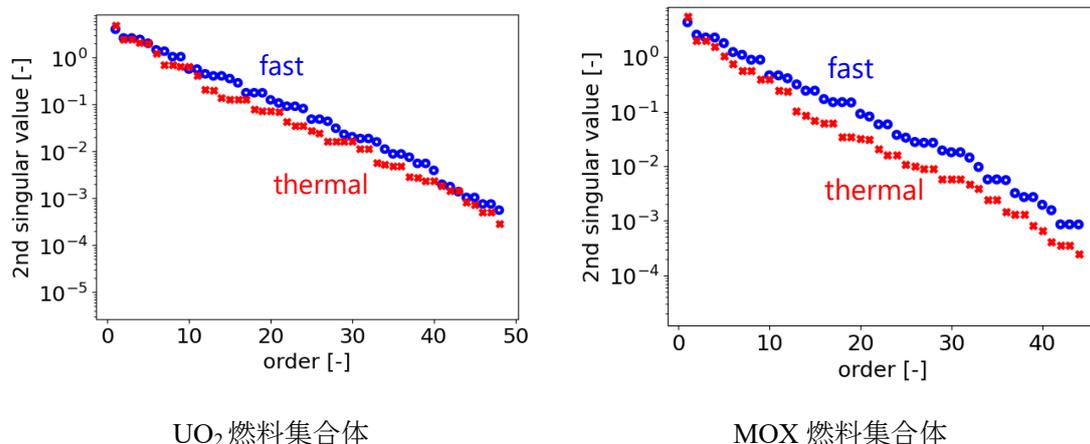


Fig. 6.10 次数に対する 2 次中性子束の特異値変化 (各燃料集合体)

● 反射体領域の POD 基底

反射体領域の POD 基底については 5.3.2 項で説明した評価手順と同様の手順を用いた。5.3.2 項との違いは、固有値拡散計算ではなく、固有値 SP3 計算結果を用いて snapshot を準備した点である。以下で反射体領域の POD 基底評価手順を再度説明する。

前章で説明したように、反射体領域では、核分裂が生じないため、固有値計算を実施できず、Wilks の手法を用いた POD 展開次数探索手法を適用できない。そこで、本検証では、Fig. 5.5 の 1/4 大規模凸型炉心体系における詳細メッシュ固有値計算結果を用いて POD 基底を計算した。本体系の UO₂ 燃料集合体および反射体領域の幾何形状は、Fig. 5.3 と同様であるため、本項では省略する。境界条件として、 x, y 負方向表面に完全反射境界条件を与え、 x, y 正方向表面に真空境界条件を与えた。得られた詳細全中性子束および 2 次中性子束分布のうち、Fig. 5.5 の太枠で囲われた 9 つの反射体領域内の分布を用いて、各エネルギー群、 m 次中性子束 ($m = 0, 2$) の snapshot を準備した。この際、回転・反転によるデータ拡張を用いた。回転によるデータ拡張では、詳細メッシュ単一集合体計算で得られた m 次の中性子束分布 $\vec{\phi}_{g,m}$ を集合体中心周りで 90° 、 180° 、 270° 回転させる。反転によるデータ拡張では、 $\vec{\phi}_{g,m}$ を集合体の対角線を軸として反転させる。回転・反転によるデータ拡張により snapshot データ量はそれぞれ 4 倍および 2 倍に増加する。すなわち、エネルギー g 群、 m 次中性子束の snapshot は合計 $9 \times 4 \times 2 = 72$ 通りの中性子束からなる。

POD 基底数は、低ランク近似に基づいて評価した。具体的には、熱群全中性子束の特異値のうち、次式を満たす次数の POD 基底のみを用いることとした。

$$\frac{\sigma_b}{\sigma_1} > 1 \times 10^{-7} \tag{6.86}$$

ただし、 σ_b は b 次の熱群全中性子束の特異値である。高速群全中性子束や 2 次中性子束の POD 基底数も、熱群全中性子束の特異値に基づいて決定した。

最終的に得られた反射体領域の POD 展開次数は、59 次であった。1-8 次の高速群および

熱群の全中性子束の POD 基底空間分布をそれぞれ Fig. 6.11 および Fig. 6.12 に示し、2 次中性子束の POD 基底空間分布をそれぞれ Fig. 6.13 および Fig. 6.14 に示す。各エネルギー群の次数に対する特異値の変化を Fig. 6.15 に示す。Fig. 6.15 において、青丸が高速群の特異値であり、赤×が熱群の特異値をそれぞれ示している。

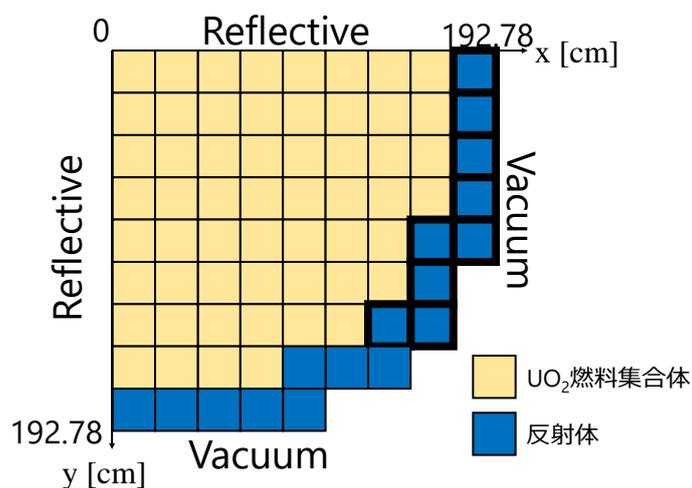


Fig. 5.5 1/4 大規模凸型炉心体系（再掲）

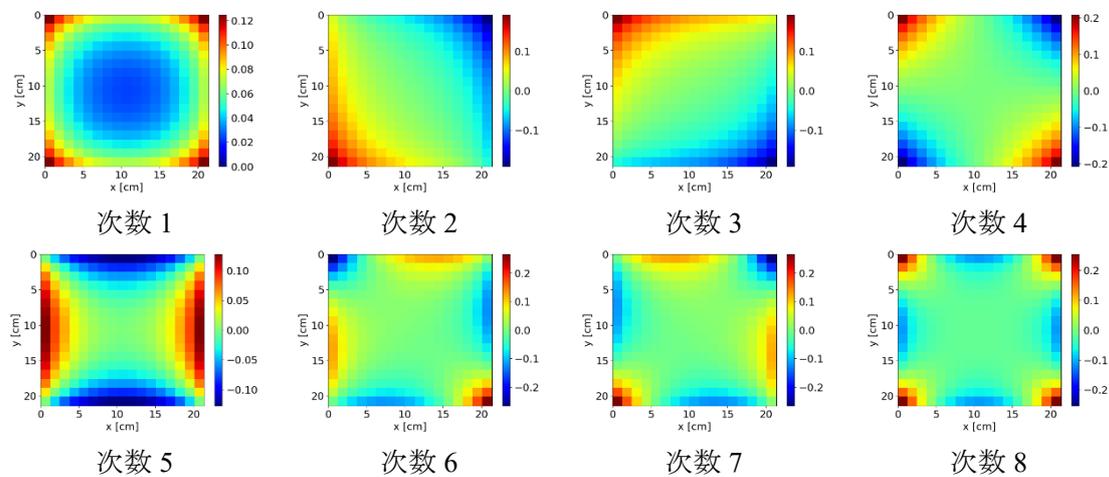


Fig. 6.11 高速群全中性子束の POD 基底空間分布（反射体領域）

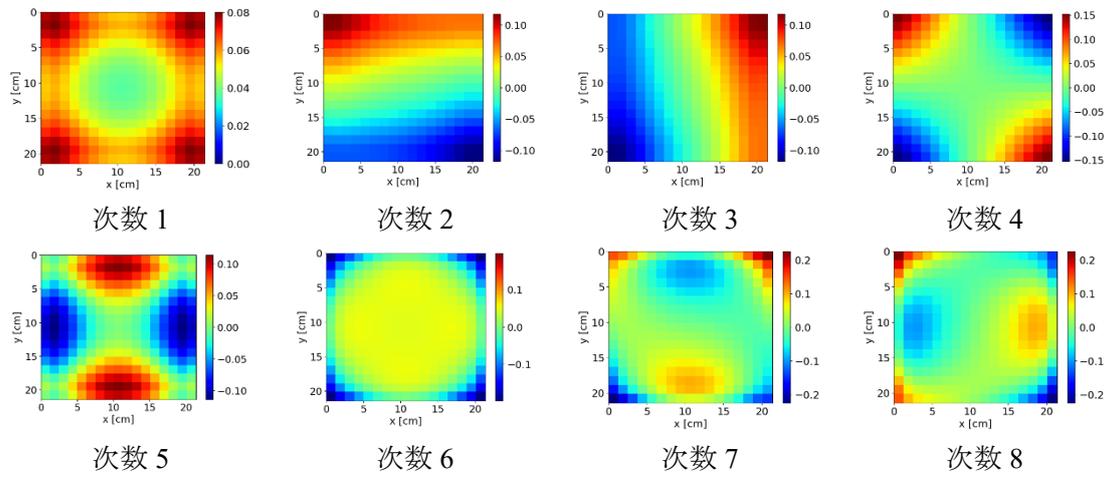


Fig. 6.12 熱群全中性子束の POD 基底空間分布 (反射体領域)

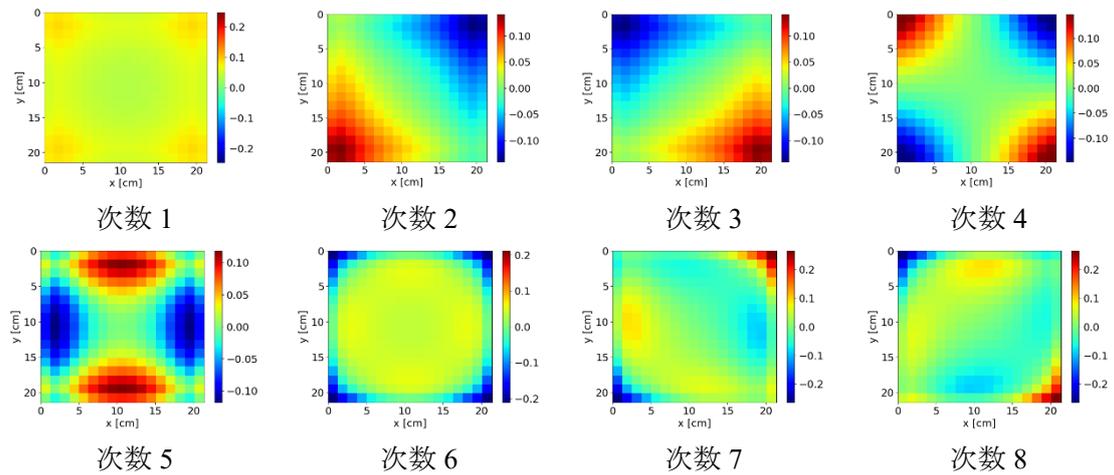


Fig. 6.13 高速群 2 次中性子束の POD 基底空間分布 (反射体領域)

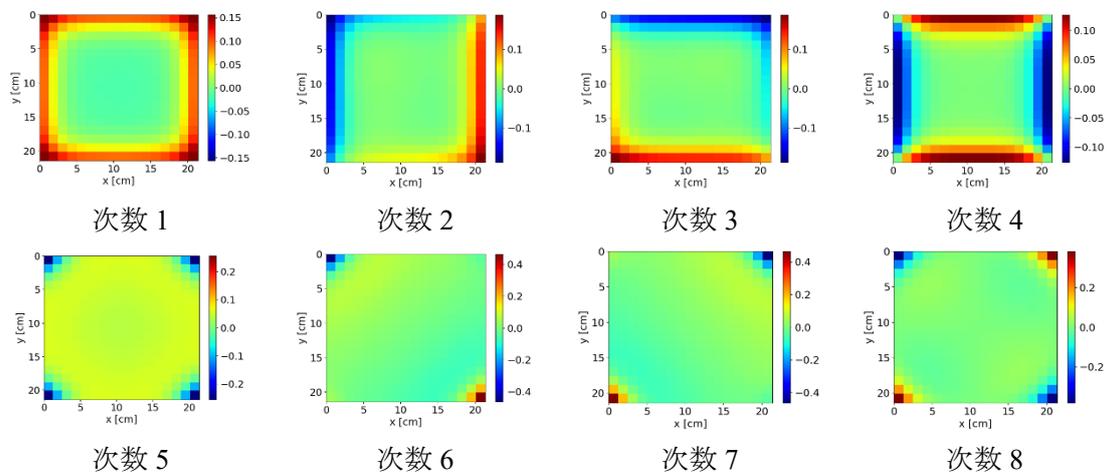


Fig. 6.14 熱群 2 次中性子束の POD 基底空間分布 (反射体領域)

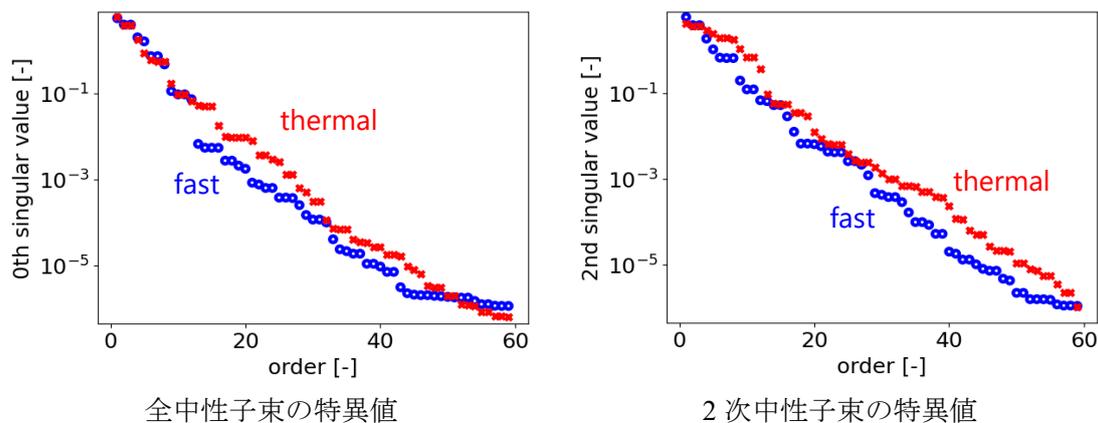


Fig. 6.15 反射体領域の次数に対する特異値変化

● 次元削減率

各燃料集合体および反射体領域の空間メッシュ数および、POD 展開次数、次式で定義した次元削減率DRPを Table 6.3 にまとめる。

$$DRP = 1 - \frac{\text{POD 基底の総数}}{\text{空間メッシュ数}} \quad (6.87)$$

Table 5.9 より、各燃料集合体および反射体領域で次元削減率は約 80%であった。

Table 6.3 各領域の空間メッシュ数、POD 展開次数、DRP

	空間メッシュ数	POD 展開次数	DRP [%]
UO ₂ 燃料集合体	289	48	83
MOX 燃料集合体	289	44	85
反射体領域	289	59	80

● POD 展開次数比較

拡散計算および SP3 計算により評価した POD 基底の展開次数を Table 6.4 に示す。Table 6.4 より、SP3 計算により評価した POD 基底の展開次数は、拡散計算と比べて 3-7 次程度とわずかに増加した。以下で燃料集合体および反射体領域の POD 展開次数が異なる要因について考察する。

燃料集合体の POD 展開次数が異なる要因は、再構成する対象の中性子束分布が多くなったためと考えられる。本検証では、POD 展開次数探索アルゴリズムにおいて、ランダムなアルベド境界条件のもと、POD 展開次数を探索した。拡散理論では、アルベド境界条件は 1 次のアルベド値によって与えられる。一方、SP3 理論では、アルベド境界条件が 1 次のアルベド値と 3 次のアルベド値によって与えられる。したがって SP3 理論では、計算条件を指定するアルベド値の自由度が拡散理論と比較して 2 倍となる。その結果として、拡散計算と

比較して、SP3 計算で再構成する対象の中性子束分布が多くなる。

反射体領域については、拡散計算および SP3 計算の計算理論および真空境界条件の定義の違いに起因すると考えられる。

Table 6.4 各領域の拡散計算および SP3 計算で得られた POD 展開次数

	拡散計算	SP3 計算
UO ₂ 燃料集合体	41	48
MOX 燃料集合体	42	44
反射体領域	54	59

6.3.3 検証結果

本項では、提案手法の有効性検証結果を示す。まず、全炉心詳細メッシュ SP3 計算を参照解として、提案手法より得られた全中性子束および実効増倍率を示す。次に、中性子飛行方向の非等方性の指標である「2 次中性子束と全中性子束の比 ϕ_2/ϕ_0 」を示す。最後に、「p-CMFD 加速法を用いた全炉心詳細メッシュ SP3 計算」と提案手法の計算時間を比較する。

- 全中性子束および核分裂率、実効増倍率 k_{eff}

まず、提案手法より得られた小規模正方形炉心および大規模凸型炉心の全中性子束空間分布をそれぞれ Fig. 6.16 および Fig. 6.17 に示す。次に、各体系の次式で定義される核分裂率 $P_{i,j}$ の空間分布を Fig. 6.18 に示す。

$$P_{i,j} = \sum_g \nu \Sigma_{f,g,i,j} \phi_{0,g,i,j} \quad (6.88)$$

定義式より核分裂率 $P_{i,j}$ は、核分裂反応が生じない領域で 0 であるため、Fig. 6.18 では反射体領域を除いて図示した。

続いて、各体系における実効増倍率計算値および実効増倍率誤差、全中性子束・核分裂率の相対誤差の最大値、最小値および rRMSE を Table 6.5 に示す。

Table 6.5 より、両体系で目標誤差「全中性子束の rRMSE が 0.1%以下」かつ「 Δk_{eff} が 0.01%以下」を満足する。また、核分裂率の rRMSE も 0.03%と十分小さい。本結果より、SP3 計算でも、①燃料集合体において「アルベド値を与えた単一集合体の固有値計算結果」を snapshot データとして得られた POD 基底を用いて、「流入部分中性子流と核分裂源を与えた単一集合体の固定源計算」を次元削減できる②反射体領域において、snapshot データと幾何形状や燃料配置が異なる体系の全中性子束分布を再現できることが確認できた。以上の検討結果より、提案手法に基づく SP3 計算により、小規模正方形炉心体系および大規模凸型炉心体系の全中性子束を高精度に再現できるといえる。

さらに、各体系の全中性子束相対誤差分布 $\Delta\phi_{0,g,i,j}$ をそれぞれ Fig. 6.19 および Fig. 6.20 に

示し、相対誤差の絶対値をとり、カラーバーを対数表示とした全中性子束相対誤差分布を **Fig. 6.21** および **Fig. 6.22** に示す。**Fig. 6.21** および **Fig. 6.22** では、0.01%未満の誤差値は十分小さいとして、0.01%に切り上げて表示した。**Fig. 6.19–Fig. 6.22** より、①燃料領域および反射体領域外周部で相対誤差が大きく、②相対誤差分布が非対称であるといった、前章と同様の傾向が確認できる。第 5 章では、全中性子束相対誤差分布に特徴①が現われる要因として、中性子束分布によって、POD 基底による中性子束展開誤差が異なる点を述べた。特徴②については、燃料集合体の POD 基底が集合体の対角線に対して線対称ではないことが要因と考えた。反射体領域では、燃料集合体の相対誤差の非対称性が伝播したと推測した。各考察の詳細については、5.3.3 項を参照されたい。

最後に、各体系の核分裂率相対誤差分布を **Fig. 6.23** に示す。**Fig. 6.23** より、核分裂率相対誤差の空間分布は、全中性子束相対誤差と同様に、①外周部で相対誤差が大きく、②相対誤差分布が非対称であることが確認できる。

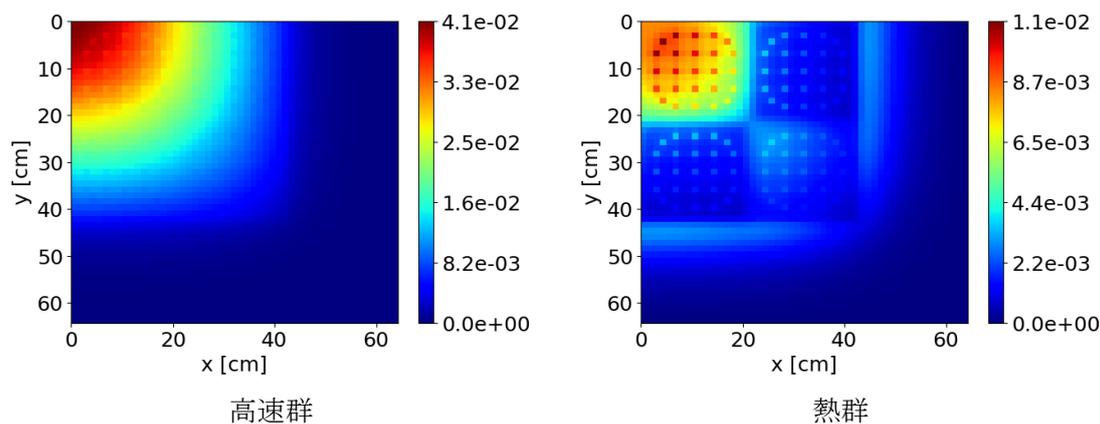


Fig. 6.16 全中性子束空間分布（小規模正方形炉心体系）

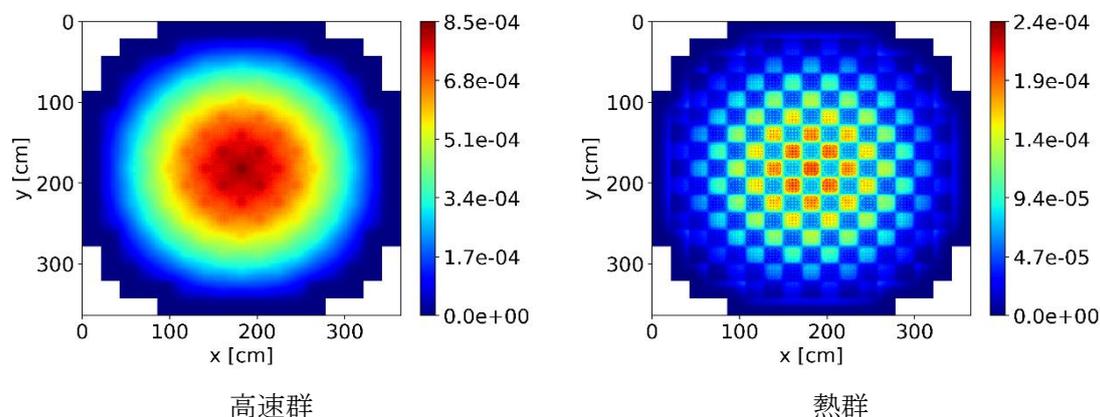


Fig. 6.17 全中性子束空間分布（大規模凸型炉心体系）

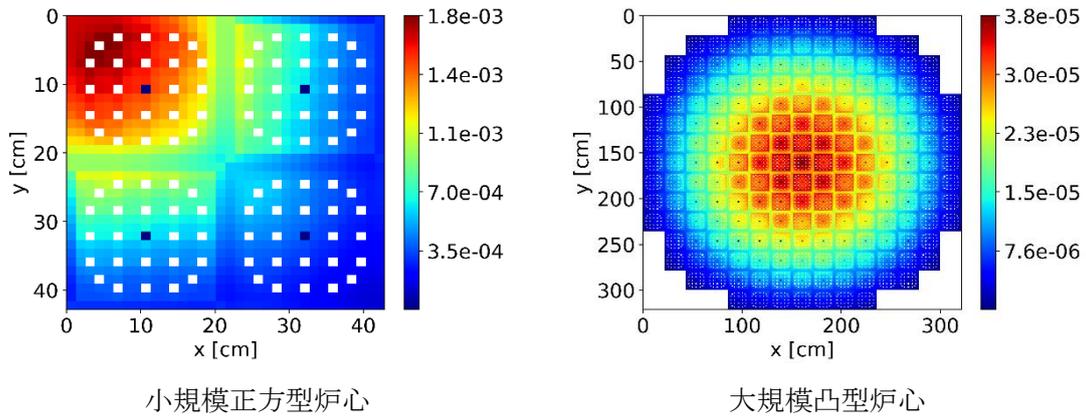


Fig. 6.18 核分裂率空間分布

Table 6.5 k_{eff} 値と k_{eff} 誤差値、全中性子束・核分裂率相対誤差値

		小規模正方形炉心	大規模凸型炉心
k_{eff} 計算値 (k_{eff} 参照値)		1.200350 (1.200347)	1.244349 (1.244347)
実効増倍率誤差 Δk_{eff} [%]		0.0003	0.0002
全中性子束 相対誤差 [%]	最大	0.59	1.69
	最小	-0.63	-1.77
	rRMSE	0.05	0.06
核分裂率 相対誤差 [%]	最大	0.26	0.38
	最小	-0.21	-0.57
	rRMSE	0.03	0.03

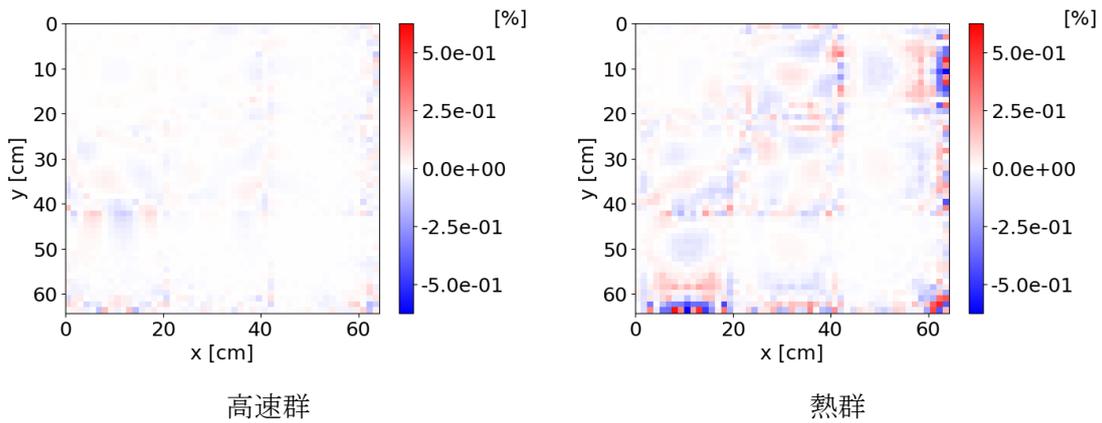
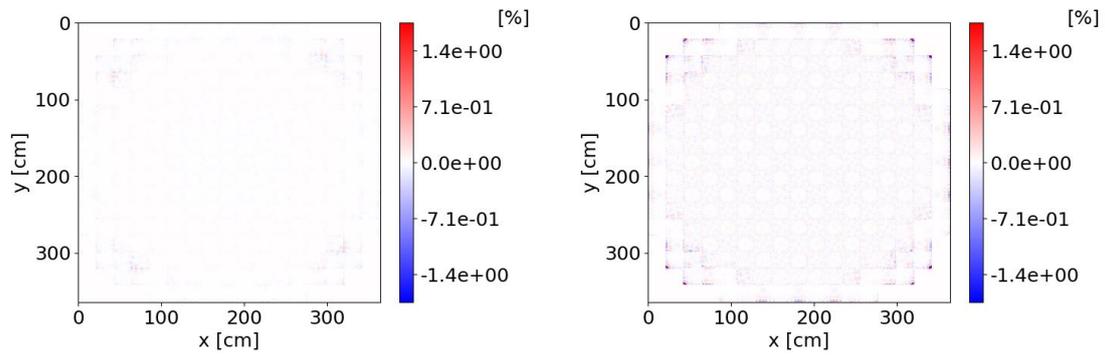


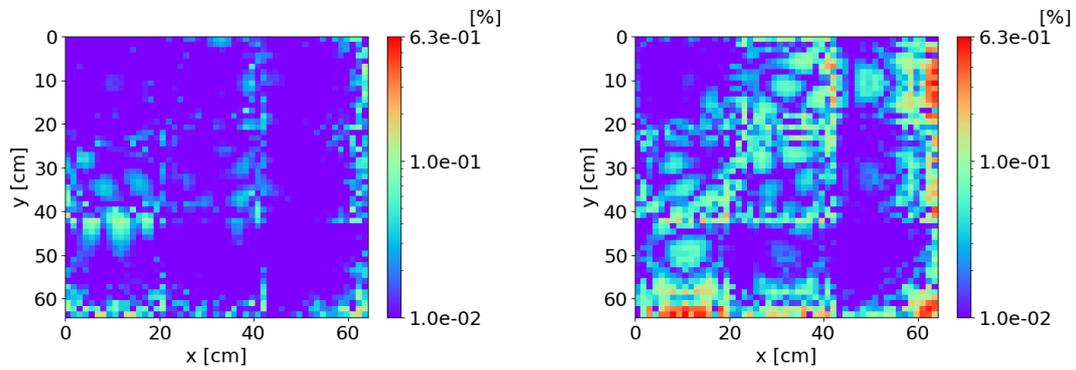
Fig. 6.19 全中性子束相対誤差分布 (小規模正方形炉心体系)



高速群

熱群

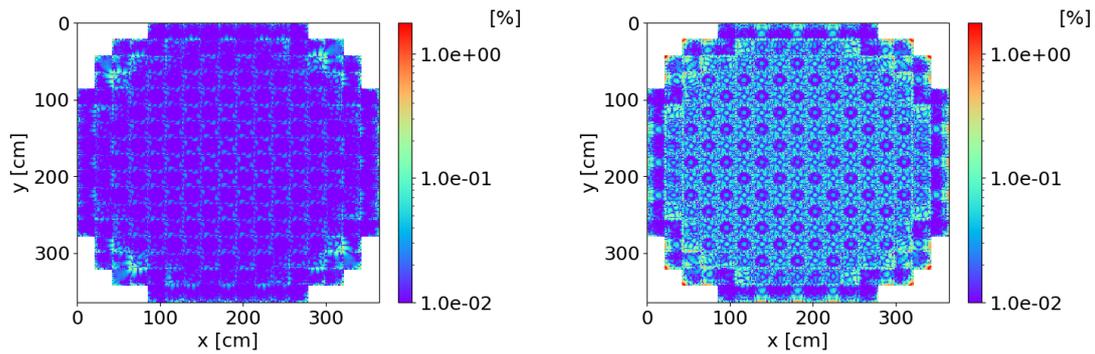
Fig. 6.20 全中性子束相対誤差分布 (大規模凸型炉心体系)



高速群

熱群

Fig. 6.21 対数表示の全中性子束相対誤差分布 (小規模正方形炉心体系)



高速群

熱群

Fig. 6.22 対数表示の全中性子束相対誤差分布 (大規模凸型炉心体系)

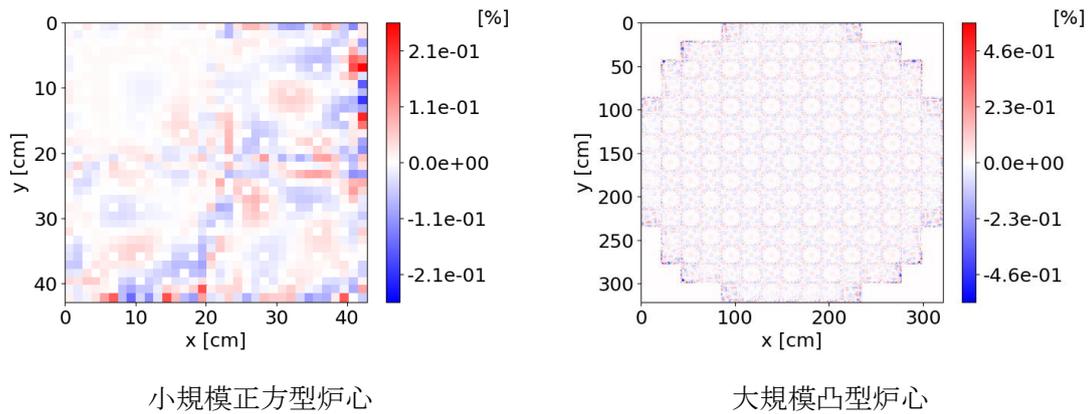


Fig. 6.23 核分裂率相対誤差分布

● 2次中性子束と全中性子束の比 ϕ_2/ϕ_0

まず、2次中性子束と全中性子束の比の意味について説明する。

SP3 計算により、全中性子束と2次中性子束を評価できる。2.2.1 項で説明したように、P3 近似において、角度中性子束 ψ は次式で記述できる。

$$\psi = \frac{1}{2}(\phi_0 P_0 + 3J_1 P_1 + 5\phi_2 P_2 + 7J_3 P_3) \quad (6.89)$$

上式中の各変数の意味は以下のとおりである。

ϕ_m : m 次の中性子束

J_m : m 次の正味の中性子流

P_m : m 次のルジャンドル多項式

1 次の正味の中性子流は、全中性子束と2次中性子束の勾配の足し合わせに比例し、3 次の正味の中性子流は、2次中性子束の勾配に比例する。高次のルジャンドル多項式ほど、関数の形状は複雑であるため、全中性子束 ϕ_0 と比べて2次中性子束 ϕ_2 が大きい場合、角度中性子束の中性子飛行は複雑となり、非等方的となる。したがって、2次中性子束と全中性子束の比 ϕ_2/ϕ_0 は中性子飛行方向の非等方性を表す指標とみなせる。

提案手法より得られた小規模正方形炉心および大規模凸型炉心における ϕ_2/ϕ_0 の空間分布をそれぞれ Fig. 6.24 および Fig. 6.25 に示す。

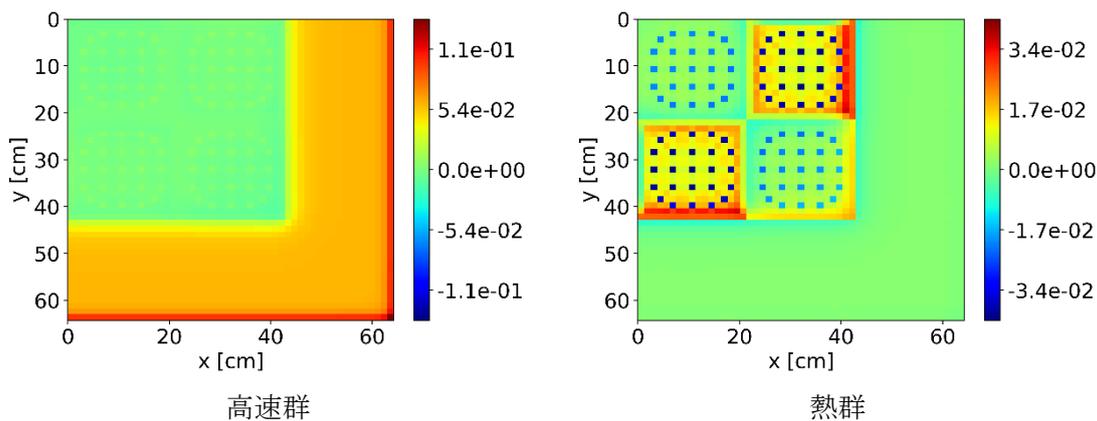


Fig. 6.24 ϕ_2/ϕ_0 空間分布 (小規模正方形炉心体系)

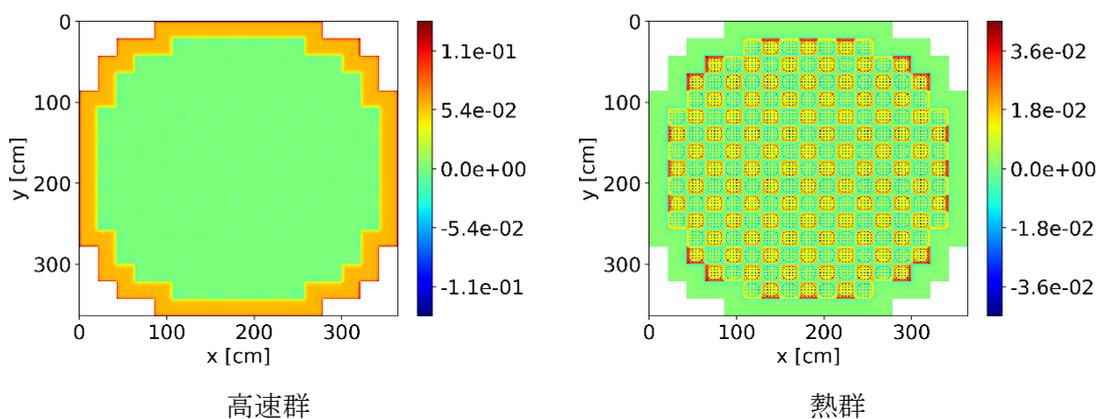


Fig. 6.25 ϕ_2/ϕ_0 空間分布 (大規模凸型炉心体系)

Fig. 6.24 および Fig. 6.25 より、燃料領域の中性子飛行方向について、高速群は等方であるが、熱群は、集合体内の減速材領域や集合体と反射体の境界面で非等方である。また、反射体領域の中性子飛行方向は、高速群で非等方であり、熱群で等方である。

まず、燃料領域について考える。燃料集合体は、燃料領域と GT,FC 領域からなる非均質な体系である。このように非均質な領域では、中性子飛行方向によって、反応の起こりやすさ（進みやすさ）が異なり、中性子流入・流出量に変化する。その結果、中性子飛行方向が非等方になると考えられる。1 衝突あたりに飛行する距離の平均値（平均自由行程）が短いほど、体系に非均質性の影響を強く受ける。そこで、高速群と熱群の平均自由行程を計算して比較する。平均自由行程は、全断面積の逆数として計算できる。本検証では、全断面積 \approx 輸送断面積と近似して、平均自由行程を計算する。この時、平均自由行程は拡散係数の3倍に一致する。一例として、 UO_2 燃料集合体の拡散係数と平均自由行程 l_g を Table 6.6 に示す。

Table 6.6 UO₂燃料集合体の拡散係数・平均自由行程

g	D_g [cm]	$l_g = 3D_g$ [cm]
1	0.89	2.68
2	0.33	0.99

平均自由行程を1空間メッシュ長さ1.26 cmと比較すると、 $l_1 > 1$ 空間メッシュ長さ $> l_2$ である。このため、高速群中性子の飛行方向依存性は、体系の非均質性の影響を受けにくい。加えて、燃料領域では核分裂反応により高速群中性子が等方的に生成される。以上より、燃料領域において高速群の中性子飛行方向は等方的であると考えられる。一方、熱群では、体系の非均質性の影響が強く、中性子飛行方向の非等方性が確認されたと考えられる。

次に、反射体領域について考える。反射体領域を飛行する中性子は、燃料集合体から漏れ出た中性子である。燃料領域から漏れ出た初期の中性子は燃料領域から炉外方向に飛行方向に飛行する。その後、反射体領域を飛行する過程で、散乱反応によってランダムな方向に散乱される。散乱反応が十分生じれば、中性子飛行方向は均されて等方的になる。散乱反応のエネルギー依存性を調べるために、反射体領域の巨視的吸収・散乱断面積を**Table 6.7**に示す。**Table 6.7**より、反射体領域において、熱群の自群散乱断面積は、高速群の自群散乱断面積と比べて1桁大きい。以降の考察では、議論を単純化するため、自群散乱断面積と比べて、値が小さい上方・下方散乱断面積は無視する。

Table 6.7 反射体領域の巨視的吸収・散乱断面積

g	$\Sigma_{a,g}$ [cm ⁻¹]	$\Sigma_{s,1 \rightarrow g}$ [cm ⁻¹]	$\Sigma_{s,2 \rightarrow g}$ [cm ⁻¹]
1	4.640312E-4	3.220575E-1	3.128504E-6
2	3.087974E-2	4.831061E-2	2.222273E+0

散乱反応が十分生じたか議論するために、エネルギー g 群の自群散乱断面積値 $\Sigma_{s,g}$ の逆数 $1/\Sigma_{s,g}$ を計算する。吸収反応を無視すれば、 $1/\Sigma_s$ は、1散乱反応当たり中性子が進む距離の平均値とみなせる。**Table 6.7**に基づくことで、各エネルギー群の $1/\Sigma_{s,g}$ は以下のように計算できる。

高速群：3.1 cm

熱群：0.45 cm

1空間メッシュ長さ1.26 cmと比較すると、 $1/\Sigma_{s,1} > 1$ 空間メッシュ長さ $> 1/\Sigma_{s,2}$ である。したがって、平均として、高速群中性子は1メッシュ内を自群散乱されることなく飛行するが、熱群中性子は1メッシュ内で自群散乱されながら飛行する。以上より、熱群では、中性

子が十分散乱されることで、中性子飛行方向が均されることで、等方的となる。一方、高速群では、散乱反応が十分生じず、反射体領域全体で中性子飛行方向が燃料領域から炉外方向に偏っている、すなわち非等方になると考えられる。

続いて、 ϕ_2/ϕ_0 の計算誤差を調査する。本検証では、物理的に重要な領域、すなわち ϕ_2/ϕ_0 が大きい領域を高精度に再現することを重要視し、 ϕ_2/ϕ_0 の計算誤差を次式で定義する。各体系における ϕ_2/ϕ_0 の誤差の最大値、最小値および RMSE を **Table 6.8** に示す。

$$\Delta(\phi_{2,g,i,j}/\phi_{0,g,i,j}) = (\phi_{2,g,i,j}/\phi_{0,g,i,j})^{POD} - (\phi_{2,g,i,j}/\phi_{0,g,i,j})^{ref} \quad (6.90)$$

Table 6.8 より、 ϕ_2/ϕ_0 の誤差値平均は $1 \times 10^{-3}\%$ 程度と小さい。本結果より、中性子飛行方向が非等方であり、 ϕ_2 による補正が必要な領域において、補正量 ϕ_2/ϕ_0 を精度よく再現できたことが確認できた。

Table 6.8 ϕ_2/ϕ_0 誤差値

	小規模正方形炉心	大規模凸型炉心
誤差最大値 [%]	0.048	0.111
誤差最小値 [%]	-0.034	-0.104
RMSE [%]	0.003	0.003

● 計算時間

p-CMFD 加速法[6]を用いた従来の SP3 計算と Fixed POD LG 反復法を用いた SP3 計算の計算時間を **Table 6.9** に示す。2つの手法による計算時間を比較することを目的として、次式のように、各計算時間比を speed up 率として定義する。

$$\text{speed up 率} = \frac{\text{提案手法計算時間 [s]}}{\text{従来法計算時間 [s]}} \quad (6.91)$$

Table 6.9 より、提案手法を用いることで、従来法と比較して小規模正方形体系で 9 倍、大規模凸型体系で 34 倍の高速化に成功した。

Table 6.9 計算時間および speed up 率

	小規模正方形炉心	大規模凸型炉心
従来法計算時間* [s]	71.8×10^{-2}	48.9
Fixed POD LG 反復法 計算時間* [s]	8.4×10^{-2}	1.4
speed up 率	8.5	34

* : Intel® core™ i9 (2.99 GHz)で計算

6.4 本章のまとめ

本章では、local 計算を固定源計算とした POD local/global 反復法 (Fixed POD LG 反復法) に基づく SP3 計算手法を提案し、小規模正方形炉心体系と大規模凸型炉心体系で提案手法の有効性を検証した。本検証結果より、2次元炉心体系の全中性子束分布を安定かつ高精度に評価でき、かつ計算時間を短縮できることが確認できた。

6.2 節では、Fixed POD LG 反復法に基づく SP3 計算理論を説明した。第 5 章との違いは、POD を用いた固定源 local 計算として SP3 計算を実施する点である。この時、1,3 次の流入部分中性子流と核分裂源を固定源とする。global 計算では、第 5 章と同様に粗メッシュ拡散計算を実施する。

6.3 節では、提案手法の有効性検証および結果を示した。本検証では、目標誤差を「全中性子束相対誤差平均値 rRMSE が 0.1%以下」および「実効増倍率誤差 Δk_{eff} が 0.01%以下」とした。2次中性子束は全中性子束を精度よく求めるための補正量にすぎないため、本検証では2次中性子束の計算誤差に対して、目標値を設定しない。

燃料集合体の POD 基底は、Wilks の手法を用いた POD 展開次数探索手法により評価した。反射体領域の POD 基底は、1/4 大規模凸型炉心の SP3 計算結果を snapshot として、低ランク近似を用いて評価した。得られた UO₂ 燃料集合体、MOX 燃料集合体、反射体領域の POD 展開次数は、それぞれ 48, 44, 59 次であった。第 5 章の拡散計算で用いた POD 基底数より約 5 次増加した。

詳細メッシュ SP3 計算結果を参照解として、提案手法の誤差を評価した結果、小規模正方形炉心体系および大規模凸型炉心体系で、目標誤差をともに満足した。さらに、p-CMFD 加速法による詳細メッシュ全炉心の SP3 計算時間と比較して、それぞれ 9 倍および 34 倍の高速化を達成した。

本章の検証結果より、2次元炉心体系を対象とした輸送計算に適用可能な POD 計算を実現できた。ただし、本検証では、燃料集合体内の物質組成は変化しない体系を取り扱った。POD を用いた炉心解析の実用化に向けては、燃焼や熱水力フィードバックにより、燃料集合体内の物質組成が変化する体系に対して有効な POD 計算手法を開発することが、今後解決すべき重要な課題である。

6.5 参考文献

- [1] S. Yuk and N. Z. Cho, “Whole-core transport solutions with 2-D/1-D fusion kernel via p-CMFD acceleration and p-CMFD embedding of nonoverlapping local/global iterations,” *Nucl. Sci. Eng.* **181**(1), pp.1–16 (2015); <https://doi.org/10.13182/NSE14-88>.

- [2] B. Cho and N. Z. Cho, “A nonoverlapping local/global iterative method with 2-D/1-D fusion transport kernel and p-CMFD wrapper for transient reactor analysis,” *Ann. Nucl. Energy*, **85**, pp.937–957 (2016); <https://doi.org/10.1016/j.anucene.2015.07.012>.
- [3] B. Cho and N. Z. Cho, “Nonoverlapping local/global iterations with 2-D/1-D fusion transport kernel and p-CMFD wrapper for transient reactor analysis—II: parallelization and predictor–corrector quasi-static method application,” *Ann. Nucl. Energy*, **90**, pp.284–302 (2016); <https://doi.org/10.1016/j.anucene.2015.12.018>.
- [4] K. Tada, A. Yamamoto, Y. Yamane et. al., “Validation of neutron current formulations for the response matrix method based on the SP3 theory,” *Ann. Nucl. Energy*, **37**(1), pp.22–27, (2010); <https://doi.org/10.1016/j.anucene.2009.10.009>.
- [5] “OpenMP”, <https://www.openmp.org/> (2023/12/15 参照).
- [6] N. Z. Cho, G. S. Lee, and C. J. Park, “Partial current-based CMFD acceleration of the 2D/1D fusion method for 3D whole-core transport calculations,” *Trans. Am. Nucl. Soc.*, **88**, pp.594–596 (2003).
- [7] H. A. V. D. Vorst, “Iterative Krylov methods for large linear systems”, Cambridge University Press (2003).
- [8] “Eigen::BiCGSTAB”, https://eigen.tuxfamily.org/dox/classEigen_1_1BiCGSTAB.html (2024/1/30 参照).
- [9] OECD/NEA, *Benchmark on deterministic transport calculations without spatial homogenization*, Nuclear Energy Agency, (2005).
- [10] A. Yamamoto, A. Giho, Y. Kato, et al., “GENESIS A three-dimensional heterogeneous transport solver based on the Legendre polynomial expansion of angular flux method,” *Nucl. Sci. Technol.*, **186**(1), pp. 1–22 (2017); <https://doi.org/10.1080/00295639.2016.1273002>.
- [11] A. Yamamoto, A. Giho, T. Endo, “Recent developments in the genesis code based on the Legendre polynomial expansion of angular flux method,” *Nucl. Eng. Technol.*, **49**(6), pp. 1143–1156 (2017); <https://doi.org/10.1016/j.net.2017.06.016>.
- [12] T. Kozłowski, Y. Xu, T. J. Downar et al., “Cell homogenization method for pin-by-pin neutron transport calculations,” *Nucl. Sci. Eng.*, **169**(1), pp.1–18 (2011); <https://doi.org/10.13182/NSE08-85>.

第7章 結論

7.1 まとめ

本研究では、固有直交分解を用いた2次元炉心解析手法に関する検討を実施した。各章のまとめを以下で述べる。

第1章では、本研究の背景および目的を説明した。

炉心解析手法として広く用いられている近代ノード法では、炉心体系を燃料集合体単位に均質化するため、燃料棒単位の出力分布計算精度向上に限界がある。そこで本研究では、燃料棒単位で高精度かつ高速な炉心解析を実現するために、固有直交分解 (Proper Orthogonal Decomposition, POD) に注目する。PODでは、中性子束分布を少数のPOD基底で展開し、求める未知数を削減することで、計算コストを削減できる。しかし、実機炉心解析に対して、PODを効果的に適用する上で、解決すべき主な課題が3つある。

1つ目の課題は、計算条件が従う統計分布を仮定せず、POD基底数 (POD展開次数) を評価することが困難な点である。従来のPOD展開次数評価手法では、POD基底による中性子束分布展開誤差推定時に計算条件 (例: アルベド値) が正規分布に従うと仮定する必要がある。

2つ目の課題は、大規模な非均質炉心体系に対する、PODの効果的な適用が困難な点である。大規模な非均質炉心のような自由度が極めて大きい体系に対してPODを直接適用した場合、中性子束展開に多数のPOD基底を要することになってしまう。

3つ目の課題は、輸送計算に対するPODの適用法が確立されていない点である。典型的な輸送計算手法であるMOCやSn法では、特定の飛行方向に沿って角度中性子束の増減を追跡するtransport sweepに基づいて、中性子束分布を評価する。そのため、拡散計算で従来適用されていたように、行列形式の連立方程式を圧縮する形で次元を削減するPODの適用が困難である。

これら3つの課題を解決することを本研究の目的とした。

第2章では、本研究で用いる基礎理論として、炉心解析手法とPODについて説明した。まず炉心解析手法として、通常用いられる拡散計算手法とSimplified P3 (SP3) 計算手法について説明した。これら2つの計算手法では、エネルギー・空間的に離散化された拡散方程式およびSP3方程式を行列形式の連立方程式で表現できる点が肝となる。

次に、炉心解析コスト低減手法としてPODに関する理論を説明した。PODでは、中性子束分布を少数のPOD基底で展開することで計算コストを低減できる。具体的には、計算に用いる各係数行列の左右からPOD基底行列 \mathbf{U}^T, \mathbf{U} を掛け、連立方程式を圧縮することで、中性子支配方程式の未知数を空間メッシュ数からPOD基底数まで削減できる。

第3章では、課題①の解決に向けて、データ拡張と Wilks の手法を用いた POD 展開次数探索手法を考案し、提案手法の有効性を検証した。

データ拡張では、中性子束分布を回転・反転等することで、詳細計算を実施することなく効率的に snapshot データを増加できる。特に、単一集合体の POD 基底の snapshot データ作成時に、回転によるデータ拡張を用いることで、少数の snapshot データから、典型的な PWR 集合体と同じ 1/4 対称性をもつ POD 基底を評価できる。

「Wilks の手法を用いた POD 展開次数探索手法」では、「目標誤差を満足するまで POD 展開次数を 1 ずつ増やす」ことで POD 展開次数を評価する。Wilks の手法を用いることで、計算条件の従う統計分布を仮定することなく、POD 基底による中性子束展開誤差が目標誤差を満足するか判定できる。

単一 UO_2 燃料集合体体系を用いて、提案手法の有効性を検証した。第3章の検証、および本研究の第4-6章において POD 展開次数探索および各章で提案する方法論による数値計算の目標誤差は全て、「全中性子束相対誤差平均値 $r\text{RMSE}$ が 0.1%以下」および「実効増倍率誤差 Δk_{eff} が 0.01%以下」とした。

snapshot データ準備時に回転によるデータ拡張を適用し、提案手法により POD 基底を評価した。その結果、提案手法により評価した 1 次の POD 基底の空間分布が典型的な PWR 集合体と同じ 1/4 対称性をもつことを確認できた。

得られた POD 基底を用いて、ランダムサンプリング法によりアルベド境界条件を変化させた 10 万通りの中性子束 $r\text{RMSE}$ および Δk_{eff} を評価した結果、99%以上の計算条件において、全中性子束と実効増倍率の誤差は両方ともに目標誤差を満足した。

本検証結果より、計算条件の従う統計分布を仮定することなく、中性子束分布を高精度に再現可能、かつ POD 展開次数が小さいような POD 基底を評価する方法論を編み出すことができた。

第4章では、課題②の解決に向けて、POD と local/global 反復法 (LG 反復法) を組み合わせた POD LG 反復法を考案した。POD LG 反復法では、各集合体の詳細メッシュ拡散計算 (local 計算) に POD を適用し、体系全体の粗メッシュ拡散計算 (global 計算) と交互に反復する。本章では、local 計算を固有値計算とし、各 local 計算の境界条件をアルベド値で与えた。さらに、LG 反復において、集合体境界面のアルベド値空間分布を評価できるような方法として、Non-linear iterative Updating fine Mesh Albedo (NUMA) 法を考案した。NUMA 法では、global 計算結果と local 計算結果を、不連続因子を考慮して組み合わせることで、アルベド値空間分布を評価できる。

反射体を含まない燃料棒単位の 2 次元小規模正方形の $\text{UO}_2\text{-MOX}$ 多集合体体系と大規模な凸型 UO_2 多集合体体系で提案手法の有効性を検証した。目標誤差は第3章と同様である。

本検証では、 UO_2 燃料集合体、MOX 燃料集合体の POD 展開次数を、Wilks の手法により基づき、それぞれ 41, 42 次とした。

本検証結果より、反射体を含まない2次元多集合体体系において、提案手法を用いることで、全中性子束 $rRMSE$ および実効増倍率誤差 Δk_{eff} が目標誤差をともに満足し、中性子束分布を高精度に再現可能であることを確認することができた。

ただし、提案手法には、(1)数値計算に不安定性の問題がある点、(2)反射体を含めた炉心体系への適用が困難である点などの課題があることが明らかとなった。

第4章で提案した NUMA 法の課題を解決するために、第5章では、Fixed POD LG 反復法に基づく拡散計算手法を考案した。第4章との違いは、local 計算として固定源計算を実施する点である。この時、流入部分中性子流および核分裂源を固定源として与える。本手法においては、反射体領域のような核分裂しない領域でも、流入部分中性子流が0でなければ、local 計算を実施できる。

反射体を含んだ燃料棒単位の2次元小規模正方形および大規模凸型 UO_2 -MOX 炉心体系で提案手法の有効性を検証した。

本検証では、「 UO_2 燃料集合体、MOX燃料集合体の POD 展開次数」を Wilks の手法、「反射体領域の POD 展開次数」を低ランク近似により決定し、それぞれ41, 42, 54次とした。

本検証結果より、提案手法を用いることで、全中性子束 $rRMSE$ および実効増倍率誤差 Δk_{eff} が目標誤差をともに満足し、中性子束分布を高精度に再現可能であることを確認することができた。さらに、Intel® core™ i9 (2.99 GHz)で提案手法を用いた拡散計算を実施した場合、小規模および大規模炉心体系の計算時間はそれぞれ0.03秒および0.7秒であった。p-CMFD 加速法を用いた詳細炉心拡散計算と比較して、それぞれ13倍および55倍の高速化を達成することができた。

本検証より、大規模かつ非均質な2次元炉心体系を対象とした拡散計算に適用可能な POD 計算を実現できた。さらに、Fixed POD LG 反復法において、local 計算として行列形式の固定源 SP3 計算を実施することで、炉心体系における輸送計算に対しても POD を適用できる見込みを得ることができた。

第6章では、課題③の解決に向けて、第5章で提案した手法を SP3 計算に応用した。第5章との違いは、POD を用いた固定源 local 計算として SP3 計算を実施する点である。

反射体を含んだ燃料棒単位の2次元小規模正方形および大規模な凸型炉心体系で提案手法の有効性を検証した。

本検証では、第5章と同様に「 UO_2 燃料集合体、MOX燃料集合体の POD 展開次数」を Wilks の手法、「反射体領域の POD 展開次数」を低ランク近似により決定し、それぞれ48, 44, 59次とした。第5章の拡散計算で用いた POD 展開次数より約5次多い。SP3 理論における未知数は、全中性子束と2次中性子束であり、その総数は拡散理論の未知数の総数（全中性子束）の2倍である。そのため、第5章の拡散計算の場合より、多くの POD 展開次数を要する。ただし、2次中性子束は全中性子束を精度よく求めるための補正量にすぎないた

め、第3章で述べたように、本検証では2次中性子束の計算誤差に対して、目標値を設定していない。そのため、POD展開次数が2倍に増加することはない。

本検証結果より、提案手法を用いることで、全中性子束 rRMSE および実効増倍率誤差 Δk_{eff} が目標誤差をともに満足し、2次元炉心体系の中性子束分布を高精度に再現可能であることを確認することができた。さらに、Intel® core™ i9 (2.99 GHz) で提案手法を用いた SP3 計算を実施した場合、小規模および大規模炉心体系の計算時間はそれぞれ 0.08 秒および 1.4 秒であった。p-CMFD 加速法を用いた詳細炉心 SP3 計算と比較して、それぞれ 9 倍および 34 倍の高速化を達成することができた。

本検証より、2次元炉心体系を対象とした輸送計算に適用可能な POD 計算を実現できた。

7.2 今後の課題

今後の課題を以下に示す。

● POD を用いた炉心解析手法と燃焼計算や熱水力計算のカップリングに関する検討

本論文では、燃料集合体内の物質組成が変化しない計算体系を扱った。しかし、実用上は、炉心解析と燃焼計算や熱水力計算をカップリングすることで、集合体内の物質組成変化を扱う必要がある。このような場合、集合体内の燃料組成分布の変化を考慮して、POD 基底を評価する必要がある。

例えば、ランダムサンプリング法に基づき、集合体内の各ピンセルメッシュの断面積を摂動させた燃焼計算等により、snapshot を準備する方法が考えられる。この時、単純に、各断面積を独立に摂動させてしまうと、snapshot データとして非現実的な中性子束分布を与えることとなり、POD 展開次数が増加することが懸念される。

したがって、POD を用いた炉心解析の実用化に向けて、カップリング効果を取り入れた POD 基底の評価法を確立する必要がある。

● 3次元炉心解析に対する POD LG 反復法の適用

本検証より、POD と local/global 反復法を組み合わせた POD LG 反復法を用いることで、2次元炉心解析において、POD の有効性が十分発揮されることを確認することができた。

卒業研究により、1次元平板の非均質集合体模擬体系では、中性子束展開に必要な POD 展開次数が7次である[1]ことを明らかとした。さらに本研究より、2次元非均質集合体体系では中性子束展開に必要な POD 展開次数が40–50次であることが分かった。以上の結果を踏まえると、1次元非均質集合体模擬体系から2次元非均質集合体体系へと次元が増加することで、中性子束展開に必要な POD 展開次数が約7倍となる。

実機 PWR 炉心における集合体体系は、径方向に非均質性が大きく、軸方向の非均質性は比較的小さい。2次元非均質集合体体系から3次元非均質集合体体系へと更に次元が増加した場合、非均質性が小さい軸方向の次元が増加する。そのため、POD 展開次数の増加率は7

倍より小さいと考えられる。卒業研究では、1次元均質平板体系の中性子束展開に必要な展開次数は5次であり[1]、1次元非均質集合体模擬体系における展開次数（7次）と比較して0.7倍であった。そこで、非均質性が比較的小さい軸方向の次元増加によるPOD展開次数増加率を $7 \times 0.7 = 4.9$ とする。この場合、3次元集合体の中性子束展開に約200次の展開次数を要する。したがって、3次元集合体計算に直接PODを適用しても、その有効性を十分発揮できないことが懸念される。従って、3次元炉心解析に対して提案手法を適用することで、上述したような問題点が発生するか否か確認するとともに、3次元炉心解析にも効果的に適用できる効率的なPOD計算手法を考案する必要がある。

- **Fixed POD LG 反復法に基づく SP3 計算に対する SPH 因子の適用**

第6章より、Fixed POD LG 反復法を用いることで、与えられたSP3方程式を精度よく計算できることを確認した。しかし、本検証では、燃料棒単位の断面積を評価する際に、燃料棒内の非均質効果を反映することができなかった。そこで、燃料棒単位の非均質効果を取り入れる手法の一つであるSPH因子[2]により、断面積を補正することで、計算精度をさらに向上できると期待している。SPH因子は、PODを用いることなく従来法と同様にして計算できる。ゆえに、SPH因子に基づき補正した断面積を用いて、第6章の計算を再度実施することで、提案手法に対するSPH因子の適用性を検証できる。

7.3 参考文献

- [1] 伊藤雅人, “固有直交分解を用いた local/global 反復法に基づく詳細炉心解析手法の開発”, 卒業研究, 名古屋大学 (2022).
- [2] G. Chiba, M. Tsuji, K. Sugiyama, et al., “A note on application of superhomogénéisation factors to integro-differential neutron transport equations,” *J. Nucl. Sci. Technol.*, **49**(2), pp.272–280 (2012); <https://doi.org/10.1080/00223131.2011.649083>.

口頭発表

- [1] 伊藤 雅人, 遠藤 知弘, 山本 章夫, 小玉 泰寛, 長野 浩明, “Wilks の手法に基づいた POD 展開次数探索アルゴリズムに関する検討,” 日本原子力学会 2023 年春の年会, 1K03, 東京大学駒場キャンパス, 3 月 13 日–15 日, (2023).
- [2] M. Ito, T. Endo, A. Yamamoto, Y. Kodama, H. Nagano, “Evaluation of neutron flux expansion error by POD bases based on Wilks’ method,” *M&C 2023*, Tu3T1-5, Niagara Falls, Ontario, Canada, August 13 – 17 (2023).
- [3] M. Ito, T. Endo, A. Yamamoto, T. Takeishi, Y. Kodama, H. Nagano, “2D neutron diffusion calculation based on local/global iterations using proper orthogonal decomposition,” *Proc. RPHA 2023*, C18, Gyeongju, Korea, October 24-25 (2023).
- [4] 伊藤 雅人, 遠藤 知弘, 山本 章夫, 竹石太一, 小玉 泰寛, 長野 浩明, “固有直交分解を用いた local/global 反復法に基づく 2 次元 SP3 輸送計算,” 日本原子力学会 2024 年春の年会, 近畿大学東大阪キャンパス, 1L10, 3 月 26 日 (2024) (発表予定).