

共鳴計算は難しいのか?¹

名古屋大学 山本章夫

1.はじめに

中性子と原子核の相互作用を示す反応断面積は、中性子の入射エネルギーに対して非常に複雑な挙動を示す(図 1)。これは断面積の共鳴と呼ばれ、中性子の入射エネルギーがわずかに変化しただけで反応断面積が数桁変わることもまれではない。原子炉の設計においては、中性子と原子核の反応を正確に評価する必要があることから、この共鳴の取扱いが計算上のキーポイントとなる。

仮に、断面積の共鳴がなく、原子核と中性子の反応確率が中性子のエネルギーにかかわらず一定であれば、原子炉物理ははるかに簡単なものになり、炉物理ははるか昔に完成の域に達していたであろうと思われる。逆に、共鳴があるために、炉物理は難しく、複雑に(そして面白く)なっている側面があるといえる。

本稿では、炉物理における共鳴計算について思うところを書き連ねてみたい。

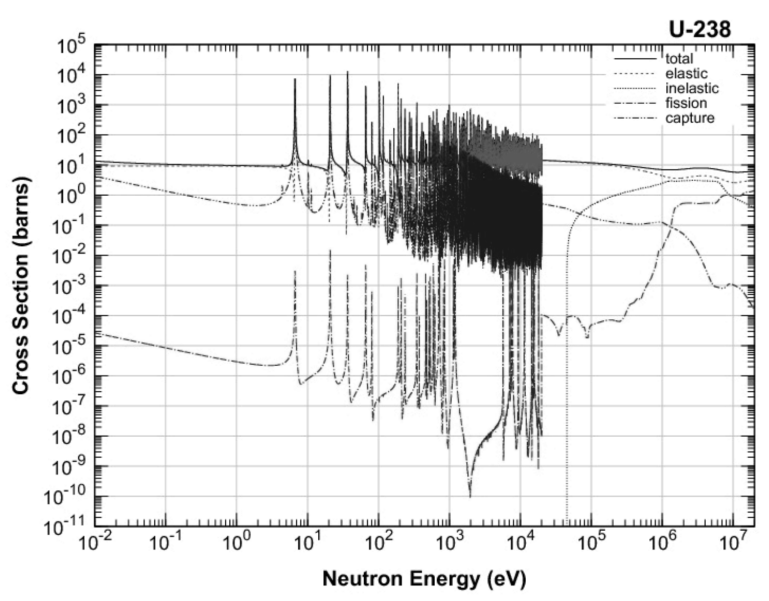


図 1 U238 の断面積[2]

¹ 第 51 回(2018 年度)の原子力学会賞論文賞を三菱重工業(株)の小池啓基氏とともに受賞させていただいた。受賞対象となった研究のタイトルは”Radially and azimuthally dependent resonance self-shielding treatment for general multi-region geometry based on a unified theory(統合理論に基づく一般的な多領域形状における径方向及び方位角方向依存の共鳴自己遮蔽効果の取り扱い)”[1]であり、小池氏の博士論文の成果の一部でもある。なお、小池氏の博士論文は名古屋大学のレポジトリで公開されており、当研究室の HP からアクセス可能である。

(http://www.fermi.energy.nagoya-u.ac.jp/research.html#results_of_study の研究紹介→炉心解析手法を参照。あるいは、名古屋大学 山本研究室で検索、研究内容→研究紹介→炉心解析手法から)

2. 共鳴計算の本質は単純

炉物理計算において、断面積の共鳴領域における複雑なエネルギー依存性を正確に取り扱う方法は原理的にはすでに確立されている。それは、超多群計算である。超多群計算では、エネルギーを離散化しない中性子輸送方程式である(1)式を、(2)式の形に多群化する。この際、断面積のエネルギー依存性を精度よく再現できるよう、エネルギーを十分な数（一般的には、数万群～数十万群）に分割する必要がある。

$$\begin{aligned} \Omega \cdot \nabla \psi(\mathbf{r}, E, \Omega) + \Sigma_t(\mathbf{r}, E) \psi(\mathbf{r}, E, \Omega) \\ = \int dE' \int d\Omega' \Sigma_s(\mathbf{r}, E' \rightarrow E, \Omega' \rightarrow \Omega) \psi(\mathbf{r}, E', \Omega') \\ + \frac{1}{k_{eff}} \frac{\chi(\mathbf{r}, E)}{4\pi} \int dE' \int d\Omega' \nu \Sigma_f(\mathbf{r}, E') \psi(\mathbf{r}, E', \Omega') \end{aligned} \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \Omega \cdot \nabla \psi_g(\mathbf{r}, \Omega) + \Sigma_{t,g}(\mathbf{r}) \psi_g(\mathbf{r}, \Omega) = \\ = \sum_{g'} \int d\Omega' \Sigma_{s,g}(\mathbf{r}, \Omega' \rightarrow \Omega) \psi_g(\mathbf{r}, \Omega') \\ + \frac{1}{k_{eff}} \frac{\chi_g(\mathbf{r})}{4\pi} \sum_{g'} \int d\Omega' \nu \Sigma_{f,g}(\mathbf{r}) \psi_g(\mathbf{r}, \Omega') \end{aligned} \quad (2)$$

(2)式は、通常の多群輸送方程式であり、エネルギー点ごとの断面積は核データから与えられるため、動力炉のように非均質な体系であれば、例えばキャラクタースティクス法などを用いることで数値的に解くことが可能である。つまり、断面積の共鳴を数値計算で扱うこと自体は、本質的には多群輸送方程式を解くことと等価であり、単純なことであるといえる。

3. なぜ難しくなるのか

炉物理の教科書を読むと、共鳴計算の説明があり、複雑な理論が色々書いてある。先に説明したように、本質的には単純なことを取り扱うのに、なぜこのように小難しいことをやる必要があるのだろうか。あえて難しそうなおことをやって自己満足に浸っているのだろうか。

先ほどはサラッと書いたが、ここのポイントは「エネルギーを十分な数に分割する必要がある」ところである。原子炉で使用されるウラン、プルトニウムなどの重核種の断面積は、図 1 に示すように非常に複雑な共鳴構造を有しているため、これを離散化したエネルギー一点で精度よく表そうとすると、数万～数十万点が必要となる。すなわち、数万～数十万のエネルギー群の多群輸送方程式を炉心体系で解く必要が生じる。現代の PC を使えば、キャラクタースティクス法で軽水炉の二次元全炉心体系をエネルギー 10 群程度で計算することはさほど時間を要しない。キャラクタースティクス法で、少し粗い計算条件を用いれば、数分で解を得ることが可能である。また、エネルギー群数が 10 群程度であれば、Planar MOC 法を用いれば、三次元体系においても実用的な計算時間で解を得ることが可能である。

しかし、共鳴を正確に扱うためには数十万群が必要であり、たとえ 2 次元体系であったとしても、炉心解析を直接行うことは困難であるといえる。

従って、実用的な計算量でこの問題を解決するためには、エネルギー点を粗くとる必要がある。しかしながら、たとえ 1000 のエネルギー群を取ったとしても、図 1 に示されるような複雑な共鳴断面積のエネルギー依存性を表すには遠く及ばず、まったく計算精度が出ないであろう。そこで、計算精度をできるだけ落とさずに計算量を減らす計算モデル上の種々のテクニックが開発されてきた。このテクニックこそが共鳴計算を難しくしている(そして共鳴計算マニアたちにとってはこれを面白くしている)張本人である、というのが私の理解である。

4.先人たちの苦勞

(1) Narrow Resonance(NR)近似

現代の計算機でも難しい 3 次元炉心体系における数万～数十万群の輸送計算を昔の計算機で行うことは当然無理である。先人たちは、この問題を扱うために、まず、着目している物質領域が無限に広がっていると仮定した場合(均質体系)について取り扱いを検討したと思われる。空間依存性を考えない 0 次元の取扱いであれば、エネルギー群の依存性のみを考慮すればよい。しかしながら、数万～数十万群のエネルギー群を扱う「超多群計算」は、空間依存性を考慮しなかったとしても、1940 年代の炉物理の黎明期の計算機には取り扱いが難しかった。そのため、「解析的に」中性子スペクトルのエネルギー依存性を表す手法が検討された。以下、厳密な説明ではないが、Narrow Resonance(NR)近似と呼ばれる手法の概略を説明する。より詳細な説明については、文献[3]を参照してほしい。

空間依存性を考慮しない場合、中性子の飛行方向にも偏りが生じず、角度依存性も考慮する必要がなくなる。従って、(1)式の輸送方程式は(3)式のように簡略化できる。

$$\Sigma_t(E)\phi(E) = \int_E^{\infty} dE' \Sigma_s(E' \rightarrow E)\phi(E') + Q(E) \quad (3)$$

ここで $\phi(E)$ は中性子束、 $Q(E)$ は核分裂に起因する中性子源を表す。一般的に断面積の共鳴を考慮しなければならないエネルギー領域は 1eV～10⁴eV 程度であり、一方、核分裂中性子が発生する際のエネルギーは 10⁶eV 程度とはるかに高い。そこで、共鳴エネルギー領域を考慮すると、(3)式は、さらに簡略化することができる。

$$\Sigma_t(E)\phi(E) = \int_E^{\infty} dE' \Sigma_s(E' \rightarrow E)\phi(E') \quad (4)$$

(4)式を解析的に解くためには、右辺の積分を解析的に行う必要があり、そのためには、散乱断面積がある特定の形(後述する)でなければならない。しかし、図 1 を見ると、共鳴領域において、散乱断面積は複雑なエネルギー依存性をとることから、(4)式を解析に解くことは絶望的に見える。

(4)式を解析的に解くためには、① $\Sigma_t(E)$ は一定値 Σ_t でありエネルギー依存性はない、②散

乱断面積は(5)式で与えられるという条件を課す必要がある。この条件が満たされている場合、(6)式で解が与えられる。

$$\Sigma_s(E' \rightarrow E) = \frac{\Sigma_p}{E'} \approx \frac{\Sigma_t}{E'} \quad (5)$$

$$\phi(E) = \frac{C}{E} \propto \frac{1}{E} \quad (6)$$

ここで、 Σ_p は巨視的ポテンシャル散乱断面積と呼ばれる量であり、原子核の大きさに起因する散乱に対する断面積であることから、入射エネルギーによらず一定値をとる。(5)式は、「吸収断面積が小さく、散乱断面積と全断面積がほぼ等しい」ということも仮定している。

(5)式では、散乱断面積が「入射エネルギー E' からあるエネルギー E に散乱される中性子の数は、 E' に反比例する」という形になっている。この形はやや奇妙に思われるかもしれないが、 E' で散乱した中性子が $E \sim E + dE$ の間に散乱される確率が dE/E' に比例すると考えると分かりやすいかもしれない。例えば、1000eVで散乱された中性子が、51-50eVの間に散乱される確率は1/1000、1-2eVの間に散乱される確率も1/1000、100eVで散乱された中性子が、91-90eVの間に散乱される確率も1/100、ということである。言い換えると、散乱後のエネルギーは、入射エネルギーの E' からエネルギー0まで、等確率に分布することを示している。

さて、(4)式を解析に解くために二つの仮定を置いた。特に仮定①は断面積にエネルギー依存性がなく一定値としているものであり、そもそも断面積のエネルギー依存性を考慮するために行っている共鳴計算と自己矛盾している。しかし、この仮定を置かないと解析的に解くことができない。炉物理的な考察から、この無理な仮定を何とか正当化できないだろうか。

まず、仮定②については、(軽水炉では)減速の多くが減速材である水素による散乱で発生すること、(a)水素の散乱断面積は共鳴エネルギー領域では約 20 barn で一定であること、(b)水素の吸収断面積は小さく、全断面積と散乱断面積がおおむね等しいこと、(c)水素と中性子の質量はほぼ同じであり、一回の散乱によって入射エネルギーからエネルギー0の範囲においておおむね等確率で減速されること、から妥当といえそうである。ただし、共鳴吸収を発生させるウランなどの燃料物質による散乱や吸収が小さいという大胆な仮定を暗黙においていることに注意しよう。

では、仮定①はどうであろうか。これはさすがに正当化できないように思える。そこで、もう一度よく(4)式を見てみると、右辺の積分を何らかの形で解析的に実行できれば、その積分値を $\Sigma_t(E)$ で割ることにより、中性子束のエネルギー依存性を計算することができそうである。ただし、そのためには、中性子束 $\phi(E)$ を求める必要があり、いわゆる自己撞着に陥る。そこで、仮定①、②をおいて算出した(6)式を(4)式の右辺のみに適用することはできないか、というアイデアに行き着く。では、このアイデアは正当化できるだろうか。

(4)式の右辺は、エネルギーに関する「積分」であるため、仮定①、②が積分範囲内の大

部分のエネルギー領域で成り立てば、正当化できそうである。これはすなわち、積分範囲の中で、断面積のエネルギー変化がある、すなわち共鳴部分が占める割合が小さければよさそう、ということである。言い換えると、(4)式の右辺のエネルギー積分の範囲に比べて、共鳴の幅が十分に小さければ、妥当であるといえそうである。

具体的に考えるために、エネルギーの積分範囲に一つだけ共鳴がある状況を考える。ここでは、簡単のため、エネルギー $E_{r,low} \sim E_{r,high}$ において、ピークの断面積の大きさが Σ_{reso} の「矩形」の共鳴を考える。全エネルギー領域で $\phi(E) \propto \frac{1}{E}$ を仮定すると、

$$\begin{aligned} \int_E^\infty dE' \Sigma_s(E' \rightarrow E) \phi(E) &= \int_E^{E_{r,low}} \frac{\Sigma_p}{E'} \frac{1}{E'} dE' + \int_{E_{r,low}}^{E_{r,high}} \frac{\Sigma_{reso}}{E'} \frac{1}{E'} dE' + \int_{E_{r,high}}^\infty \frac{\Sigma_p}{E'} \frac{1}{E'} dE' \\ &= \Sigma_p \left(\frac{1}{E} - \frac{1}{E_{r,low}} + \frac{1}{E_{r,high}} - \frac{1}{\infty} \right) + \Sigma_{reso} \left(\frac{1}{E_{r,low}} - \frac{1}{E_{r,high}} \right) \quad (7) \\ &= \Sigma_p \frac{1}{E} + (\Sigma_{reso} - \Sigma_p) \left(\frac{1}{E_{r,low}} - \frac{1}{E_{r,high}} \right) \end{aligned}$$

となる。従って、 $(\Sigma_{reso} - \Sigma_p) \left(\frac{1}{E_{r,low}} - \frac{1}{E_{r,high}} \right) = (\Sigma_{reso} - \Sigma_p) \frac{E_{r,high} - E_{r,low}}{E_{r,low} E_{r,high}}$ が十分に小さければ、

$$\int_E^\infty dE' \Sigma_s(E' \rightarrow E) \phi(E) = \Sigma_p \frac{1}{E} \quad (8)$$

と近似できる。

これは、幅の狭い共鳴、つまり narrow な resonance を仮定することから、Narrow Resonance 近似、あるいは NR 近似と呼ばれている。なお、教科書によっては、「着目している共鳴の吸収が、(8)式で表される散乱中性子源に影響を与えない」という観点から、「着目している共鳴の計算を行う際、全ての散乱中性子は共鳴の外（高エネルギー側）からやってくる」と説明しているものもある。理解しやすいイメージで覚えておくとよいであろう。

(8)式を(4)式の右辺に代入することにより、次式を得る。

$$\phi(E) = \frac{\Sigma_p}{\Sigma_t(E)} \frac{1}{E} \propto \frac{1}{\Sigma_t(E)} \frac{1}{E} \quad (9)$$

(9)式は、中性子束のエネルギー依存性は、物質の全断面積に反比例することを示しており、直感的な結果とも一致しているといえる。

中性子束のエネルギースペクトルが分かれば、

$$\Sigma_{x,g} = \frac{\int_{E_{g,lower}}^{E_{g,upper}} \Sigma_x(E) \phi(E) dE}{\int_{E_{g,lower}}^{E_{g,upper}} \phi(E) dE} \quad (10)$$

として、反応 x に対するあるエネルギー群の平均(実効)断面積を求めることができ、 $\Sigma_{x,g}$ を用いて後続の計算を行うことにより、近似的にはあるが、吸収、散乱などの反応率を保存した計算が可能になる。

NR 近似は、非常に単純な形で中性子束のエネルギースペクトルを記述できることから、現在の炉心解析でも幅広く使われている。数百 eV より低いエネルギーにおける U238 の「幅が広い共鳴」などを除いて、NR 近似は実用上十分な精度を与えることが知られており、現在の核計算でも活用されている。表 1, 2 に NR 近似を用いた場合の U235 及び U238 の実効断面積の計算精度を示す。

ただし、NR 近似には、これまでに述べてきたように、「大胆な近似」がいくつも使われており、「精度が確認された条件のみで使える手法」とみておくほうが良い。

表 1 U235 の実効断面積の比較。S.D.は、(3)式を直接数値計算した参照解、N.R.は Narrow Resonance 近似、W.R.は本稿では説明していないが、Wide Resonance 近似。(XMAS172 群、背景断面積 1000barn、温度 293K)[3]

Group number (XMAS 172 group)	Upper energy[eV]	Calculation method			Difference[%]	
		S.D.	N.R.	W.R.	(N.R.-S.D.)/S.D.	(W.R.-S.D.)/S.D.
45	1.11E+04	1.063	1.063	1.063	0.00	0.00
46	9.12E+03	1.216	1.216	1.216	0.00	0.00
47	7.47E+03	1.261	1.261	1.261	0.00	0.00
48	5.53E+03	1.246	1.246	1.246	0.00	0.00
49	5.00E+03	1.458	1.458	1.458	0.01	0.00
50	3.53E+03	1.667	1.667	1.667	0.00	0.00
51	3.35E+03	1.825	1.825	1.825	0.00	0.00
52	2.25E+03	3.948	3.948	3.950	0.00	0.04
53	2.03E+03	3.292	3.292	3.293	-0.01	0.03
54	1.51E+03	2.801	2.801	2.802	0.00	0.04
55	1.43E+03	3.460	3.460	3.462	-0.02	0.04
56	1.23E+03	4.392	4.392	4.395	0.00	0.06
57	1.01E+03	5.085	5.084	5.088	-0.01	0.06
58	9.14E+02	4.505	4.505	4.507	-0.01	0.03
59	7.49E+02	4.798	4.796	4.806	-0.04	0.17
60	6.77E+02	5.226	5.225	5.232	-0.02	0.12
61	4.54E+02	5.069	5.069	5.073	-0.01	0.06
62	3.72E+02	7.121	7.120	7.128	-0.02	0.09
63	3.04E+02	8.422	8.423	8.449	0.01	0.32
64	2.04E+02	10.840	10.837	10.861	-0.03	0.20
65	1.49E+02	10.432	10.427	10.440	-0.05	0.07
66	1.37E+02	12.841	12.834	12.855	-0.06	0.11
67	9.17E+01	12.150	12.128	12.162	-0.17	0.10
68	7.57E+01	11.336	11.322	11.323	-0.12	-0.11
69	6.79E+01	13.380	13.381	13.394	0.01	0.11
70	5.56E+01	18.998	18.985	19.001	-0.07	0.02
71	5.16E+01	31.862	31.845	31.854	-0.05	-0.02
72	4.83E+01	15.778	15.768	15.763	-0.07	-0.09
73	4.55E+01	20.648	20.639	20.653	-0.04	0.02
74	4.02E+01	18.433	18.380	18.408	-0.29	-0.13
75	3.73E+01	38.266	38.331	38.328	0.17	0.16
76	3.37E+01	37.883	37.813	37.856	-0.18	-0.07
77	3.05E+01	9.621	9.622	9.621	0.01	0.00
78	2.76E+01	6.655	6.653	6.652	-0.03	-0.04
79	2.50E+01	41.271	41.293	41.279	0.05	0.02
80	2.26E+01	28.951	28.899	28.927	-0.18	-0.08
81	1.95E+01	33.076	32.867	32.933	-0.63	-0.43
82	1.59E+01	14.145	14.135	14.134	-0.07	-0.08
83	1.37E+01	66.431	66.467	66.524	0.05	0.14
84	1.12E+01	6.232	6.233	6.234	0.02	0.03
85	9.91E+00	17.173	17.189	17.186	0.09	0.08
86	9.19E+00	63.474	63.361	63.344	-0.18	-0.21
87	8.32E+00	4.426	4.427	4.426	0.01	0.00
88	7.52E+00	56.860	57.016	56.963	0.27	0.18
89	6.16E+00	5.579	5.578	5.577	-0.02	-0.05
90	5.35E+00	3.515	3.515	3.515	0.00	0.00
91	5.04E+00	21.761	21.734	21.716	-0.13	-0.21
92	4.13E+00	2.133	2.133	2.133	0.00	0.00

表 2 U238 の実効断面積の比較 S.D.は、(3)式を直接数値計算した参照解、N.R.は Narrow Resonance 近似、W.R.は本稿では説明していないが、Wide Resonance 近似。

(XMAS172 群、背景断面積 50barn、温度 293K)[3]

Group number (XMAS 172 group)	Upper energy[eV]	Calculation method			Difference[%]	
		S.D.	N.R.	W.R.	(N.R.-S.D.)/S.D.	(W.R.-S.D.)/S.D.
45	1.11E+04	0.649	0.648	0.661	-0.19	1.80
46	9.12E+03	0.592	0.592	0.640	-0.03	7.97
47	7.47E+03	0.730	0.730	0.817	0.00	11.93
48	5.53E+03	0.776	0.773	0.838	-0.33	7.97
49	5.00E+03	0.736	0.734	0.875	-0.24	18.93
50	3.53E+03	0.749	0.747	1.020	-0.24	36.13
51	3.35E+03	0.940	0.937	1.229	-0.28	30.75
52	2.25E+03	0.745	0.746	1.027	0.17	37.82
53	2.03E+03	0.878	0.873	1.385	-0.54	57.77
54	1.51E+03	0.663	0.665	0.946	0.32	42.73
55	1.43E+03	0.999	0.983	1.406	-1.63	40.76
56	1.23E+03	1.334	1.322	1.833	-0.91	37.44
57	1.01E+03	1.084	1.064	2.159	-1.89	99.18
58	9.14E+02	1.289	1.261	1.750	-2.23	35.73
59	7.49E+02	1.390	1.374	1.685	-1.11	21.22
60	6.77E+02	1.323	1.291	1.855	-2.44	40.20
61	4.54E+02	1.397	1.374	1.502	-1.65	7.50
62	3.72E+02	0.751	0.680	1.143	-9.45	52.19
63	3.04E+02	1.814	1.654	2.297	-8.78	26.65
64	2.04E+02	1.567	1.262	2.184	-19.49	39.33
65	1.49E+02	1.287	1.289	1.217	0.15	-5.44
66	1.37E+02	2.757	2.085	3.304	-24.38	19.84
67	9.17E+01	2.129	2.103	1.993	-1.23	-6.38
68	7.57E+01	0.370	0.363	0.373	-1.87	0.84
69	6.79E+01	4.700	3.599	4.845	-23.43	3.09
70	5.56E+01	0.101	0.101	0.101	0.00	0.00
71	5.16E+01	0.144	0.144	0.144	-0.04	-0.01
72	4.83E+01	0.173	0.173	0.173	-0.06	0.01
73	4.55E+01	0.516	0.512	0.517	-0.82	0.20
74	4.02E+01	5.747	5.296	6.111	-7.85	6.32
75	3.73E+01	25.430	16.285	25.851	-35.96	1.66
76	3.37E+01	0.874	0.881	0.874	0.78	0.03
77	3.05E+01	0.398	0.399	0.398	0.08	0.00
78	2.76E+01	0.459	0.459	0.459	-0.03	0.00
79	2.50E+01	1.151	1.143	1.153	-0.64	0.17
80	2.26E+01	27.522	24.430	26.354	-11.23	-4.24
81	1.95E+01	1.175	1.193	1.175	1.56	0.04
82	1.59E+01	0.349	0.349	0.349	0.05	-0.01
83	1.37E+01	0.342	0.342	0.342	-0.07	0.00
84	1.12E+01	0.849	0.850	0.847	0.11	-0.24
85	9.91E+00	0.507	0.507	0.507	-0.01	0.00
86	9.19E+00	0.866	0.866	0.867	-0.04	0.02
87	8.32E+00	2.403	2.400	2.404	-0.12	0.08
88	7.52E+00	45.674	48.196	45.455	5.52	-0.48
89	6.16E+00	5.218	5.259	5.212	0.80	-0.12
90	5.35E+00	1.903	1.903	1.903	0.02	-0.01
91	5.04E+00	1.215	1.216	1.215	0.03	-0.02
92	4.13E+00	0.783	0.783	0.783	0.00	0.00

(2) 等価原理の概要

等価原理は、共鳴計算における先人の偉大な発明であるとともに、共鳴計算を複雑に、そして分かりにくくしている主犯でもある。

前節で説明した NR 近似を用いることにより、近似的ながら共鳴物質を含む均質体系における中性子スペクトル、ひいては実効断面積の評価が可能となる。しかしながら、多くの原子炉は燃料と減速材が分離されたいわゆる非均質な構造となっている。従って、非均質な燃料形状の影響を考慮した中性子スペクトルを評価する必要がある。もちろん、キャラクターリスティクス法など数値的な方法により非均質の効果を考慮するのではなく、何らかの解析的な方法によってこれを達成することを考える必要がある。

まず、最も単純、かつ実用的な条件として、燃料と減速材の 2 領域からなる非均質体系を考える。この条件において、空間的な中性子バランスを考慮した減速方程式は、(11)式で与えられる。

$$\begin{aligned} \Sigma_{t,f}(E)\varphi_f(E)V_f &= P_{f\rightarrow f}(E)V_f \int_E^\infty dE' \Sigma_{s,f}(E' \rightarrow E)\varphi_f(E') \\ &+ P_{m\rightarrow f}(E)V_m \int_E^\infty dE' \Sigma_{s,m}(E' \rightarrow E)\varphi_m(E') \end{aligned} \quad (11)$$

ここで

$\Sigma_{t,f}(E)$: 燃料領域の全断面積

$\Sigma_{s,f}(E' \rightarrow E)$: 燃料領域の散乱断面積

$\Sigma_{s,m}(E' \rightarrow E)$: 減速材領域の散乱断面積

$\varphi_f(E), \varphi_m(E)$: 燃料領域と減速材領域の中性子束

V_f, V_m : 燃料と減速材の体積

$P_{f\rightarrow f}(E), P_{m\rightarrow f}(E)$: 燃料で発生した中性子が燃料内で衝突する確率、減速材で発生した中性子が燃料に衝突する確率

である。

(11)式の意味は以下の通りである。右辺の $P_{f\rightarrow f}(E)V_f \int_0^\infty dE' \Sigma_{s,f}(E' \rightarrow E)\varphi_f(E')$ は、燃料領域で散乱し、エネルギー E になったあと、燃料領域で衝突する中性子の総数であり、 $P_{m\rightarrow f}(E)V_m \int_0^\infty dE' \Sigma_{s,m}(E' \rightarrow E)\varphi_m(E')$ は、減速材領域で散乱し、エネルギー E になったあと、燃料領域で衝突する中性子の総数である。右辺は、結局のところ、エネルギー E において、単位時間当たり単位エネルギー当たりに燃料領域で衝突する中性子の数を表しており、これは、左辺の $\Sigma_{t,f}(E)\varphi_f(E)V_f$ を意味する。

このように、(11)式の意味は比較的単純であるが、これを解析的に解こうとするとかなり大変であり、①右辺の積分をどのように扱うか、②右辺の衝突確率をどのように扱うか、を考えねばならない。

まず、積分については、先に説明した NR 近似を用いることで、以下のように計算することができる。

$$\begin{aligned} V_f \int_0^\infty dE' \Sigma_{s,f}(E' \rightarrow E)\varphi_f(E') &= V_f \int_0^\infty dE' \frac{\Sigma_{p,f}}{E'} \frac{1}{E'} = V_f \Sigma_{p,f} \frac{1}{E} \\ V_m \int_0^\infty dE' \Sigma_{s,m}(E' \rightarrow E)\varphi_m(E') &= V_m \int_0^\infty dE' \frac{\Sigma_{p,m}}{E'} \frac{1}{E'} = V_m \Sigma_{p,m} \frac{1}{E} \end{aligned} \quad (12)$$

ここで、 $\Sigma_{p,f}, \Sigma_{p,m}$ はポテンシャル散乱断面積であり、散乱断面積のうち、エネルギーに依存せず一定の値をとる部分である。これにより、(11)式は、

$$\Sigma_{t,f}(E)\varphi_f(E)V_f = P_{f\rightarrow f}(E)V_f \Sigma_{p,f} \frac{1}{E} + P_{m\rightarrow f}(E)V_m \Sigma_{p,m} \frac{1}{E} \quad (13)$$

となる。

さて、残るは衝突確率 ($P_{f \rightarrow f}(E)$ 、 $P_{m \rightarrow f}(E)$) であり、これを断面積や幾何形状などの関数として表す必要がある。まず、直感的にはあるが、 $P_{f \rightarrow f}(E)$ や $P_{m \rightarrow f}(E)$ は、以下の性質を持つであろう。

- ①燃料の全断面積が大きいほど大きくなる。(燃料の断面積が大きいほど、燃料部分で中性子が衝突しやすいため)
- ②燃料の体積が大きいほど大きくなる。(燃料の体積が大きいほど、燃料部分で中性子が衝突しやすいため)

もしも現在、同じ課題が与えられたら、平板、円柱、球など、様々な幾何形状と寸法を仮定し、これらの体系で全断面積を変化させてモンテカルロ法による数値計算により衝突確率を計算し、何らかの関数でフィッティングするかもしれない²。しかし先人は、「数学的、物理的な考察」と「直感(?)」により、衝突確率が以下の式で近似できることを見出したと推測している。

$$\begin{aligned}
 P_{f \rightarrow f}(E) &= \frac{\Sigma_{t,f}(E)\bar{l}}{\Sigma_{t,f}(E)\bar{l} + 1} \\
 P_{m \rightarrow f}(E) &= \frac{V_f \Sigma_{t,f}(E)}{V_m \Sigma_{p,m}} \frac{1}{\Sigma_{t,f}(E)\bar{l} + 1}
 \end{aligned}
 \tag{14}$$

ここで、 \bar{l} は平均弦長と呼ばれる量であり、ある立体を考え、その立体を横切る線を引いたとき、その線が立体により切り取られる長さの平均値である。 \bar{l} は、あらゆる形状の立体に対し、 $\bar{l} = 4 \times \text{体積} / \text{表面積}$ で与えられることが知られている³。(これはこれで、驚異的な等式ではあるが、ここでは深入りしないでおく。興味ある人は自分で計算してみしてほしい。例えば、パックマンのような円に切り込みが入った形状にも適用可能である)。

(14)式は、確かに①、②の性質を満たしているが、ほかにも①、②を満たす関数はいくらかでもありそうである。例えば、 $P_{f \rightarrow f}(E) = 1 - \exp(-\Sigma_{t,f}(E)\bar{l})$ でも①、②を満たしている。先人たちが、あえて(14)式を選んだ理由は後ほど明らかになる。ここには、恐るべき深慮遠謀が隠されているのである。

さて、(14)式を(13)式に代入すると、次式を得る。

$$\begin{aligned}
 \varphi_f(E) &= \frac{1}{E} \left(\left(1 - \frac{1}{\Sigma_{t,f}(E)\bar{l} + 1} \right) \frac{\Sigma_{p,f}}{\Sigma_{t,f}(E)} + \frac{1}{\Sigma_{t,f}(E)\bar{l} + 1} \right) \\
 &= \frac{1}{E} \frac{\Sigma_{p,f}\bar{l} + 1}{\Sigma_{t,f}(E)\bar{l} + 1}
 \end{aligned}
 \tag{15}$$

² いわゆる Reduced Order Model や Surrogate Model といわれる考え方。

³ 例えば、一辺が a の立方体の場合、 $\frac{4a^3}{6a^2} = \frac{2}{3}a$ となる。半径 r の円柱の場合は、 $\frac{4\pi r^2}{2\pi r} = 2r$ 、厚さ a の平板の場合、 $\frac{4a}{2} = 2a$ となる。

$$\begin{aligned}
 &= \frac{1}{E} \frac{\Sigma_{p,f} + 1/\bar{l}}{\Sigma_{t,f}(E) + 1/\bar{l}} \\
 &= \frac{1}{E} \frac{\Sigma_{p,f} + \Sigma_e}{\Sigma_{t,f}(E) + \Sigma_e}
 \end{aligned}$$

ここで、 $\Sigma_e = 1/\bar{l}$ であり、巨視的断面積と同じ次元[1/cm]を持っているために、断面積と同じ扱いをすることとして、これを巨視的脱出断面積と呼んでいる。平均弦長の逆数を巨視的断面積扱いするとは、無理筋にもほどがあるという気がするが、あえてこのように扱う理由も後で明らかになる。

さて、以上から、燃料と減速材の 2 領域からなる非均質体系における燃料内のエネルギースペクトルは(15)式として求まった。(15)式の右辺は全て既知の値であり、容易に計算することが可能である。なお、中性子スペクトルは、断面積のエネルギー群縮約に使用することから、エネルギーに関する相対的な形のみが分かればよい。従って、

$$\varphi_f(E) \propto \frac{1}{E} \frac{1}{\Sigma_{t,f}(E) + \Sigma_e} \tag{16}$$

であり、燃料内の中性子スペクトルは、燃料部分の全断面積 $\Sigma_{t,f}(E)$ 、燃料領域の大きさを表す平均弦長の逆数 Σ_e のみで決まることが分かる。興味深いことに、(16)式には、減速材の特性を表すパラメータは、まったく現れない。

さて、均質体系における中性子のエネルギースペクトルの(9)式と非均質体系に対する(16)式を比較してみよう。これらはかなり似通った形をしていることが分かる。燃料領域が大きい場合（平均弦長 \bar{l} が大きく、脱出断面積 Σ_e が小さい場合）、(16)式と(9)式は一致する。大きな燃料領域は、中性子からは燃料のみからなる均質な体系と等価であり、物理的にも妥当であるといえる。

ある燃料領域を考える。例えば、一般の動力炉では、燃料として UO_2 が使用されており、主として U235 , U238 , O16 から構成されている。このように、燃料領域が複数の燃料物質からなるときの均質体系における中性子スペクトルを考える。複数の核種のうち、実効断面積を計算したい核種のみを共鳴を有する核種と仮定し、その他の核種については、断面積は一定であると仮定する。実際は、この仮定は適切でないことも多いが、いったんここではこの仮定が正しいとして議論を進める。この場合、(9)式は以下のように変形することができる。ここで、共鳴を持たないその他の核種については、吸収断面積は小さく、微視的全断面積と微視的ポテンシャル散乱断面積（一定値）がほぼ等しいとしている。

$$\phi(E) \propto \frac{1}{\Sigma_t(E)} \frac{1}{E} \approx \frac{1}{N_r \sigma_{t,r}(E) + \sum_k N_k \sigma_{p,k}} \frac{1}{E} \propto \frac{1}{\sigma_{t,r}(E) + \frac{\sum_k N_k \sigma_{p,k}}{N_r}} \frac{1}{E} \tag{17}$$

ここで、

N_r : 共鳴核種 r の原子数密度

$\sigma_{t,r}(E)$: 共鳴核種 r のエネルギー E における微視的全断面積

N_k : その他の核種 k の原子数密度

$\sigma_{p,k}$: その他の核種 k のポテンシャル散乱断面積(一定値)

である。

同様に、(16)式を変形してみよう。

$$\begin{aligned} \phi(E) &\propto \frac{1}{E} \frac{1}{\Sigma_{t,f}(E) + \Sigma_e} \\ &\approx \frac{1}{N_r \sigma_{t,r}(E) + \sum_k N_k \sigma_{p,k} + \Sigma_e} \frac{1}{E} \\ &\propto \frac{1}{\sigma_{t,r}(E) + \frac{\sum_k N_k \sigma_{p,k} + \Sigma_e}{N_r}} \frac{1}{E} \end{aligned} \quad (18)$$

いかがであろうか。(17)式と(18)式を見ると、明らかに類似点があり、両方とも以下のように変形できることが分かる。

$$\phi(E) \propto \frac{1}{\sigma_{t,r}(E) + \sigma_b} \frac{1}{E} \quad (19)$$

ここで、 σ_b は背景(あるいはバックグラウンド)断面積であり、以下のように与えられる。

$$\sigma_b = \frac{\sum_k N_k \sigma_{p,k}}{N_r} : \text{均質体系の場合}$$

$$\sigma_b = \frac{\sum_k N_k \sigma_{p,k} + \Sigma_e}{N_r} : \text{非均質体系の場合}$$

両者の違いは、 Σ_e が入っているか、いないかだけの違いに帰着することになる。

以上のことをまとめると、近似的にはあるが、均質体系と非均質体系の中性子束は、いずれも(19)式で表すことができる。イメージをつかむため、背景断面積の変化と中性子束、そして最終的に得られる実効断面積の関係を図 2 に示す。

文章で説明すると簡単だが、意味するところは重大である。先に述べたように、「非均質体系における中性子スペクトルの評価は、まじめにやると非常に時間を要する」が、(19)式は「どのような非均質体系のスペクトルであっても、均質体系において、 σ_b を調整することでそのスペクトルを近似的に再現することができる」ことを示しているからである。これは、非均質体系の中性子スペクトルと均質体系の中性子スペクトルを統一された方法で計算できることを示しており、この観点から(非均質体系と均質体系の)等価原理、と呼ばれている。等価原理は計算機が非力であった時代、核特性解析にとって非常に大きな福音であったはずであり、また、ブレークスルーであったと考えられる。

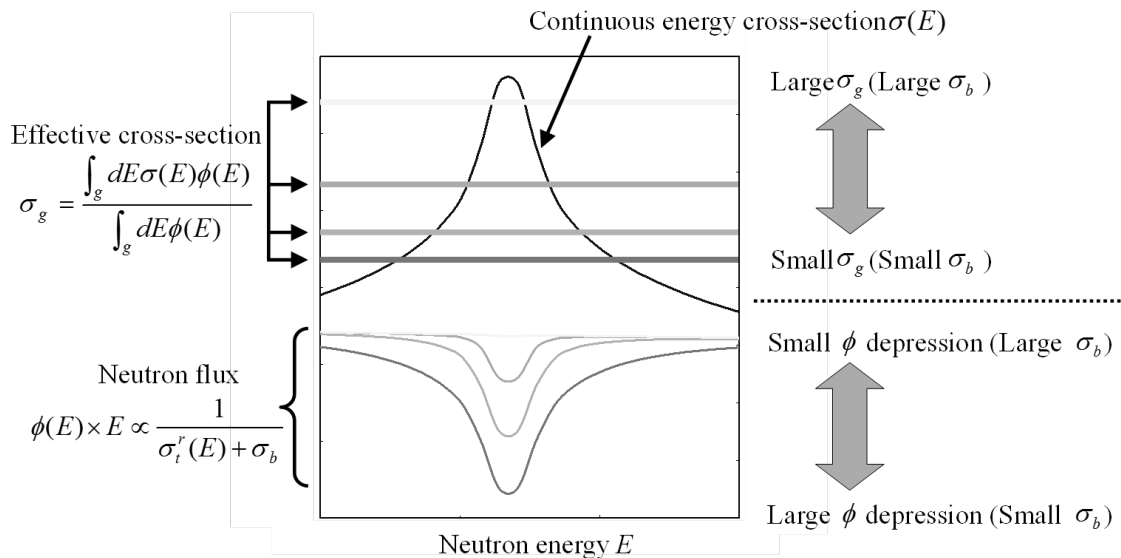


図2 バックグラウンド断面積と、中性子スペクトルの関係[1]

ここで、脱出断面積 Σ_e についてももう少し解説しておこう。まず、均質体系において、共鳴を有する核種の濃度が非常に小さい場合、共鳴吸収による中性子スペクトルの変化が生じないので、中性子スペクトルは $\frac{1}{E}$ に比例する。これは、共鳴核種以外の核種、つまり、共鳴核種の背後あるいは背景(background)にある核種の断面積が大きいということである。

逆に、共鳴核種の濃度が非常に大きい場合、中性子スペクトルは $\frac{1}{\sigma_{t,r}(E)E}$ に比例する。これは、

背後にある核種の断面積が非常に小さい場合である。さて、非均質体系において、簡単のため、燃料領域が共鳴核種のみから構成されているとしよう。仮に、燃料領域が非常に小さければ、燃料領域は周囲の減速材と同じ中性子スペクトルになることは想像できると思う。減速材中の中性子スペクトルは、共鳴核種が存在しないため、 $\frac{1}{E}$ であり、従って、燃料領域が小さい場合、燃料領域中の中性子スペクトルも $\frac{1}{E}$ となる。逆に、燃料領域が非常に大

きければ、共鳴核種のみからなる均質体系と同じスペクトル $\frac{1}{\sigma_{t,r}(E)E}$ になる。つまり、「燃料

領域の大きさの変化」が「背景断面積の変化」にちょうど対応していることが分かる。そのため、 $\Sigma_e = 1/\bar{l}$ を巨視的背景断面積と見立てて、非均質体系と均質体系を等価として扱っているのである。ここでは、「寸法を巨視的断面積に変換する」という発想の飛躍があり、個人的には炉物理の三大発明⁴の一つである気がしている。

ここまで来て、ようやく、(14)式のからくりを説明することができる。これまでの説明で感づいた方もおられるかもしれないが、衝突確率を(14)式のように近似する場合にのみ、非均質体系と均質体系の等価原理を導くことができる。おそらくではあるが、先人たちは非

⁴ 私見では、①固有値計算、②等価原理、③不連続因子。

均質体系と均質体系の中性子スペクトルの変化に類似性があることを認識した上、「このように衝突確率を設定すればよいのだ」というようにして等価原理を開発したのではないかと推測している。

(3) 等価原理の難点

原子炉の解析を行う上で、非常に有益な等価原理であるが、以下に示すように、様々な近似を使用している。

- ・ 共鳴を有する核種は 1 つだけであり、他の核種の断面積は一定でかつ吸収断面積は無視できる。
- ・ 散乱による中性子のエネルギー変化は、 $\Sigma_s(E' \rightarrow E) \approx \frac{\Sigma_s}{E'}$ と近似できる。(このように近似できるのは、水素によって散乱された場合のみである)
- ・ 共鳴のエネルギー幅は狭いという **Narrow Resonance** 近似を用いている。
- ・ 衝突確率が(14)式で近似できる。

このため、等価原理は、ある意味「突っ込みどころ満載」ではあるが、その有益さのため、現在でも実際の原子炉の設計に幅広く使用されている。また、上記の近似に起因する誤差をできるだけ小さくするため、様々な努力がはらわれてきており、現在でも炉物理の研究トピックスの一つになっている。

一例として、衝突確率の近似を取り上げてみよう。(14)式では、「燃料で発生した中性子が燃料で衝突する確率」を考えたが、ここでは、「燃料で発生した中性子が燃料で衝突せず、燃料の外に脱出する確率 $P_e(E)$ 」を考える。これは、定義から、以下で与えられる。

$$P_e(E) = 1 - P_{f \rightarrow f}(E) = \frac{1}{\Sigma_{t,f}(E)\bar{l} + 1} \quad (20)$$

(20)式は **Wigner** の近似式と呼ばれている。**Wigner** の有理式近似は、簡単ではあるが、図 3, 4 に示すように精度が良くない。特に、軽水炉の解析で重要となる巨視的断面積と燃料の平均弦長の掛け算 $\Sigma_{t,f}(E)\bar{l}$ (光学距離、**optical length** と呼ばれる) が 1.0 近辺での精度が悪い。そのため、様々な改良が考えられてきた。ただし、先に述べたように、(20)式の形 (有理式) でないと、非均質体系と均質体系の等価原理が成り立たないところが難しい点である。

改良として、多分真っ先に思いつくのは、小手先ではあるが調整因子を導入することである。共鳴計算では、この調整因子は **Bell** 因子と呼ばれている。

$$P_e(E) = 1 - P_{f \rightarrow f}(E) = \frac{a}{\Sigma_{t,f}(E)\bar{l} + a} \quad (21)$$

ここで、 a は **Bell** 因子である。**Bell** 因子を調整することにより、誤差を小さくすることはできるが、図 3 に示すように、すべての光学距離(従って、様々なサイズの幾何形状と断面積の大きさ)について、精度を高めることはできない。

そこで、次に考えられたのは、「複数の有理式を足し合わせて使ってはどうか」というアイデアである。本稿では詳細は記載しないが、衝突確率(脱出確率)を有理式の足し合わせであらわすことができれば、非均質体系と均質体系の等価原理を依然として用いることができる。Carlvik は、動力炉でよく使用される円柱状の燃料領域に対し、以下の「二項有理式近似」を提案した。

$$P_e(E) = 2 \frac{2}{\Sigma_{t,f}(E)\bar{l} + 2} - \frac{3}{\Sigma_{t,f}(E)\bar{l} + 3} \tag{22}$$

また、同様に Roman は、平板上の燃料に対して、以下の式を提案した。

$$P_e(E) = 1.1 \frac{1.4}{\Sigma_{t,f}(E)\bar{l} + 1.4} - 0.1 \frac{1.1}{\Sigma_{t,f}(E)\bar{l} + 1.1} \tag{23}$$

Carlvik の二項有理式近似は、係数が整数であり、「適当に選んでいる」ように思えるが、図 4 に示すように良い精度で脱出確率を与える。そのため、現代の格子計算コード、例えば CASMO などで依然として利用されている。

なお、脱出確率を複数の有理式であらわすことができれば、等価原理が成り立つということ考えると、①さらに多くの項数の有理多項式を使用する、②正確な脱出確率を再現するよう有理多項式の係数を最適化する、というアイデアに行き着く。すなわち、代表的な燃料の幾何形状に対し、断面積を変化させたうえで MOC を用いて燃料からの脱出確率を数値的に計算し、その結果を再現するよう有理多項式の項数と係数を調整するのである。例えば、この方法は、小池氏の博士論文[1]で用いられている。

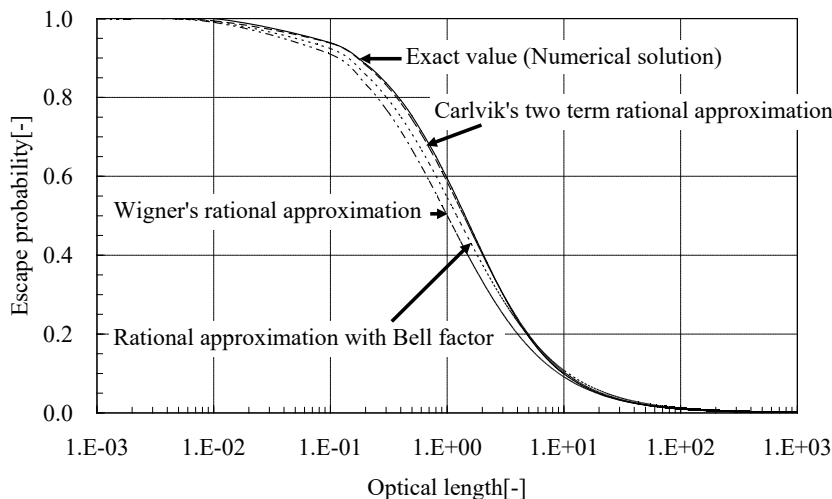


図 3 円柱形状を有する燃料領域で発生した中性子とその燃料領域を脱出する確率[3]

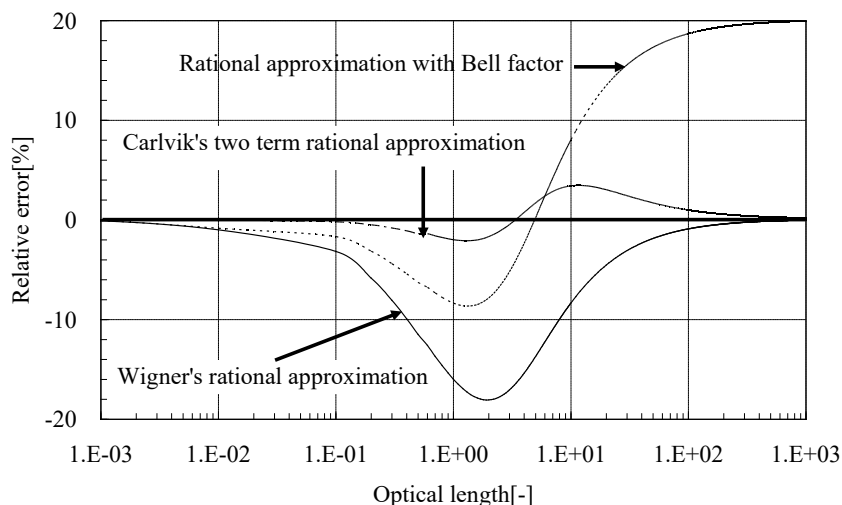


図 4 円柱形状を有する燃料領域で発生した中性子とその燃料領域を脱出する確率の誤差 [3]

(4) 共鳴計算の留意点

これまで、決定論的手法で用いられる共鳴計算手法のうち、動力炉の設計でよく用いられている「等価原理」を用いた実効断面積計算手法についてその概要を説明してきた。「等価原理の難点」でも示したように、等価原理は非常に多くの近似に基づいていることをよく認識しておく必要がある。また、等価原理が比較的複雑であり、また、その導出過程で用いられている近似が明確に整理されていない場合も多く、どのような状況でどの程度の誤差が発生するのか定量的な判断が難しい場合も多い。

例えば、等価原理では、先に説明したように（燃料領域から減速材領域への）脱出確率という概念が用いられている。この概念の背景には、「燃料の周りは減速材で囲まれている」という暗黙の仮定がある。しかしながら、減速材に燃料が高濃度で溶けていたらどうなるだろうか？ 実際、再処理工場の燃料溶解過程では、このような状況が発生することがあり、この体系の計算をする際、何も考えずに等価原理を使って実効断面積を計算すると、大きな誤差につながる可能性がある。

そのため、これまでに経験がない体系の解析を行う場合には、実効断面積の誤差を含め、連続エネルギーモンテカルロコードなど、より近似が少ない解析手法と比較し、計算精度を確認することが重要である。

5. 共鳴計算の今後

現在、共鳴計算に広く用いられているのは等価原理、超多群計算、サブグループ法の 3 つの手法である。先に述べたように、これらの手法はそれぞれ長所と短所がある。本稿の依頼の発端となった受賞論文は、これら 3 つの手法のいいところどりをした手法であり、

①等価原理で用いられる脱出確率の有理多項式を用いて高速に超多群計算を行い、②超多群計算の結果からサブグループ法に必要なパラメータを計算、③サブグループパラメータを用いて集合体/炉心体系で輸送計算を実施して、その結果から実効断面積を計算、という流れになる。ある意味、既存の手法の「究極の進化形」といえるかもしれない。一方、異なる領域間での共鳴干渉効果を陽に扱えない、などの課題もまだ残っている。実用的かつ汎用的な計算手法が確立されていないという意味では、共鳴計算は、現在の炉物理における未解決問題の一つであろう。

現在、まったく新しい考え方に基づいた共鳴計算手法の検討を進めている。原子炉内には、多数の燃料領域があるが、これらの燃料領域においてみられる中性子スペクトルが類似の形状をしていることに着目し、「中性子スペクトルに関する直交基底関数」で中性子スペクトルを展開、展開係数に対する輸送方程式を数値計算する方法である[4][5]。この手法は、従来の共鳴計算手法が持っていた課題を解決できる可能性があるが、計算精度及び計算機資源(メモリや計算スピード)などの観点で、動力炉の設計に使用できる第 4 の実用的な手法になり得るかどうかは、まだ今後の開発にかかっていると考えており、研究開発を進めている段階である。

ある燃料領域(の一部)の共鳴核種の実効断面積は、①注目する燃料領域の幾何形状、核種の種類と原子数密度、温度、②その燃料領域の周辺の領域の幾何形状、核種の種類と原子数密度、温度の関数となる。等価原理は、①、②の情報を背景断面積に押し込め、実効断面積が背景断面積の関数になっていると考える、非常に単純化された計算モデルになっている。本来複雑な物理現象を簡易なモデルで代替しているという意味で、等価原理は Reduced Order Model (ROM) といえるであろう。つまり、共鳴計算手法の開発は、いかに効率的な ROM を作るか、ということでもある。

先に述べたように、実効断面積は、比較的少数(数個～数十個)のパラメータに対する関数である。そのため、炉型や使用条件を限定すれば、機械学習の適用がうまくいくかもしれない。これは、今後の研究テーマとなり得るだろう。

6.まとめ

本稿は、これまで等価原理についてあまりなじみがない読者を想定し、その歴史、概念、限界などを説明した。共鳴計算は、現在でも炉物理計算における最も難しい部分の一つであり、また、高速で汎用性があり、実装が簡単な手法は開発されていない未解決の課題を含んでいる。次に実用化されるのは、どのような手法だろうか？

参考文献

- [1] H. Koike, *Development of a Unified Resonance Self-Shielding Methodology for Lattice Physics Calculation in Light Water Reactor Core Analysis*, Ph.D. Thesis, (2018).
https://nagoya.repo.nii.ac.jp/?action=pages_view_main&active_action=repository_view_main_item_detail&item_id=25272&item_no=1&page_id=28&block_id=27
- [2] Homepage for Nuclear data center in Japanese Atomic Energy Agency
(<http://www.ndc.jaea.go.jp/index.html>)
- [3] D. G. Cacuci ed., *Handbook of Nuclear Engineering, Chap.9, Lattice Physics Computations*, Springer, 2010, ISBN:978-0387981307.
- [4] A. Yamamoto, T. Endo, S. Takeda, H. Koike, K. Yamaji, K. Ieyama, D. Sato, "A Resonance Calculation Method Using Energy Expansion Bases Based on a Reduced Order Model," *Proc. M&C2019*, Aug.25-29, 2019, Portland, OR (2019).
- [5] R. Kondo, T. Endo, A. Yamamoto, S. Takeda, H. Koike, K. Yamaji, D. Sato, "Performance of the RSE (Resonance calculation using energy Spectral Expansion) Method for Heterogeneous Pin-cell Geometry," *Proc. RPHA2019, KURNS-EKR-5*, Dec.1-3, 2019, Osaka, Japan, ISSN-2434-1088.