

確率論的幾何形状モデルの軽水体系への 適用について

Applicability of Statistical Geometry Model to Light Water Moderating Systems

森 貴正 小嶋 健介 須山 賢也

Takamasa MORI, Kensuke KOJIMA and Kenya SUYAMA

原子力科学研究部門

原子力科学研究所

原子力基礎工学研究センター

核工学・炉工学ディビジョン

Nuclear Data and Research Engineering Division

Nuclear Science and Engineering Center

Nuclear Science Research Institute

Sector of Nuclear Science Research

February 2019

Japan Atomic Energy Agency

日本原子力研究開発機構

JAEA-Research

本レポートは国立研究開発法人日本原子力研究開発機構が不定期に発行する成果報告書です。
本レポートの入手並びに著作権利用に関するお問い合わせは、下記あてにお問い合わせ下さい。
なお、本レポートの全文は日本原子力研究開発機構ホームページ (<https://www.jaea.go.jp>)
より発信されています。

国立研究開発法人日本原子力研究開発機構 研究連携成果展開部 研究成果管理課
〒319-1195 茨城県那珂郡東海村大字白方 2 番地4
電話 029-282-6387, Fax 029-282-5920, E-mail:ird-support@jaea.go.jp

This report is issued irregularly by Japan Atomic Energy Agency.
Inquiries about availability and/or copyright of this report should be addressed to
Institutional Repository Section,
Intellectual Resources Management and R&D Collaboration Department,
Japan Atomic Energy Agency.
2-4 Shirakata, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken 319-1195 Japan
Tel +81-29-282-6387, Fax +81-29-282-5920, E-mail:ird-support@jaea.go.jp

© Japan Atomic Energy Agency, 2019

確率論的幾何形状モデルの軽水体系への適用について

日本原子力研究開発機構 原子力科学研究部門 原子力科学研究所
原子力基礎工学研究センター 核工学・炉工学ディビジョン
森 貴正、小嶋 健介*¹、須山 賢也*²

(2018 年 12 月 6 日 受理)

MVP/GMVP の確率論的幾何形状モデル (STGM) を軽水体系に適用した場合の特性を評価するために、連続エネルギーモンテカルロコード MVP を用いて、無限体系におけるパラメトリック・スタディと単純有限体系における使用済み燃料直接処分の臨界安全解析を実施した。その結果、STGM は UO_2 燃料球の充填率 (6.5%~63.3%) に依らず、燃料球径が大きくなると熱中性子利用率を過大評価し、その結果、無限増倍率を過大評価することが分かった。この結果は、使用する最近接球分布 (NND、モンテカルロ法 3 次元剛体球空間分布計算コード MCRDF による NND と統計的一様分布に基づく NND 解析式) には依存しない。STGM による過大評価は、中性子パスの始点によって異なる分布の平均である NND を用いて燃料球を確率論的に配置するために個々の中性子の状況 (燃料球分布の粗密と軽水領域の大きさ) が考慮されず、軽水の塊中での散乱が継続する効果を取り入れることができないことに起因すると推定された。

原子力科学研究所：〒319-1195 茨城県那珂郡東海村大字白方 2 番地の 4

*1 現所属：日本風力開発株式会社

*2 現所属：経済協力開発機構原子力機関 (OECD/NEA)

Applicability of Statistical Geometry Model to Light Water Moderating Systems

Takamasa MORI, Kensuke KOJIMA*¹ and Kenya SUYAMA*²

Nuclear Data and Research Engineering Division
Nuclear Science and Engineering Center
Nuclear Science Research Institute
Sector of Nuclear Science Research
Japan Atomic Energy Agency
Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken

(Received December 6, 2018)

In order to estimate applicability of the statistical geometry model (STGM) of MVP/GMVP, a parametric study in infinite geometry and criticality safety analyses for direct disposal of spent fuel in simple finite geometry have been carried out by using the MVP continuous energy Monte Carlo code. It has been found that calculations with STGM for larger fuel spheres give larger thermal utilization factors and larger infinite multiplication factors compared with explicit random models in the wide range of fuel sphere packing fraction between 6.5 % and 63.3 %. Substantial differences are not observed between the results with two nearest neighbor distributions (NNDs); one is given by the MCRDF packing simulation code and the other is the analytical expression of NND based on a statistically uniform distribution. It is inferred that the overestimation by STGM is caused by the facts that STGM cannot take account of the surroundings of each neutron, whether a fuel sphere rich region or a water moderator rich one, because STGM always uses an NND averaged over such surroundings and that STGM, therefore, cannot take the effect of consecutive scatterings in the water moderator into account.

Keywords: Statistical Geometry Model, Nearest Neighbor Distribution, MVP, Light Water, UO₂ Fuel, Packing Fraction, Sphere Radius

* 1 Present address: Japan Wind Development Co., Ltd.

* 2 Present address: Nuclear Energy Agency, Organization of Economic Development and Cooperation

目 次

1. はじめに -----	1
2. 無限体系 -----	4
2.1 軽水マトリックス中に配置される UO_2 球形燃料 -----	4
2.2 ボロン含有軽水マトリックス中に配置される UO_2 球形燃料 -----	14
2.3 UO_2 燃料マトリックス中に配置される軽水球 -----	18
3. 有限体系：使用済み燃料直接処分の臨界安全性評価への適用 -----	24
3.1 破損燃料と幾何形状モデル -----	24
3.2 計算条件 -----	26
3.3 計算結果と議論 -----	27
4. まとめ -----	30
参考文献 -----	31
付録 A MVP/GMVP の付属プログラム MCRDF の改良と使用法 -----	33
付録 B 統計的一様分布に基づく最近接球分布解析式 -----	41
付録 C MVP/GMVP による微小体系の取り扱いについて -----	48
付録 D MVP による 4 因子の計算 -----	49
付録 E MCRDF のランダム配置から MVP/GMVP 入力データ作成 -----	50

Contents

1. Introduction	1
2. Infinite Geometry	4
2.1 UO ₂ Fuel Spheres Randomly Distributed in Light Water Matrix	4
2.2 UO ₂ Fuel Spheres Randomly Distributed in Boron-containing Light Water Matrix	14
2.3 Light Water Spheres Randomly Distributed in UO ₂ Matrix	18
3. Finite Geometry: Application to Criticality Safety Analysis for Direct Disposal of Spent Fuel	24
3.1 Broken Fuels and their Geometry Models	24
3.2 Calculation Conditions	26
3.3 Results and Discussion	27
4. Summary	30
References	31
Appendix A Modification and How to Execute Auxiliary Program MCRDF for MVP/GMVP	33
Appendix B Analytic Expression of NND based on Statistically Uniform Distribution	41
Appendix C Treatment of Very Small Geometry with MVP/GMVP	48
Appendix D Calculation Method of 4 Factors with MVP	49
Appendix E Preparation of MVP/GMVP Geometry Data from Random Arrangement by MCRDF	50

表リスト

表 2.1	MVP 計算の幾何形状モデル	5
表 2.2	規則配列格子の特徴	5
表 2.3	UO ₂ 新燃料と軽水の原子数密度	6
表 2.4	熱群の巨視的吸収断面積と中性子束（充填率 30%、 $R_p = 3$ cm）	11
表 2.5	熱群の巨視的吸収断面積と中性子束（充填率 6.5%、 $R_p = 1$ cm）	11
表 2.6	熱群の巨視的吸収断面積と中性子束（充填率 63.3%、 $R_p = 15$ cm）	12
表 2.7	1000 ppm 天然ボロン含有軽水の原子数密度	14
表 2.8	熱群の巨視的吸収断面積と中性子束（充填率 30%、 $R_p = 3$ cm、ボロン含有軽水マトリックス）	17
表 2.9	熱群の巨視的吸収断面積と中性子束（充填率 6.5%、 $R_p = 1$ cm、ボロン含有軽水マトリックス）	17
表 2.10	熱群の巨視的吸収断面積と中性子束（充填率 63.3%、 $R_p = 15$ cm、ボロン含有軽水マトリックス）	18
表 2.11	巨視的吸収断面積と中性子束（充填率 63.3%（ $V_M/V_F = 1.72$ ）、 $R_p = 15$ cm、STG 球：軽水）	21
表 2.12	巨視的吸収断面積と中性子束（充填率 30%（ $V_M/V_F = 0.429$ ）、 $R_p = 15$ cm、STG 球：軽水）	22
表 3.1	燃料の原子数密度（/(barn·cm)）	25
表 3.2	軽水の原子数密度	25
表 3.3	無限増倍率と 4 因子	27

図リスト

図 2.1	MCRDF によるランダム配置の例（水平断面、表 2.1 の Random1）	4
図 2.2	無限増倍率 k_{∞} と 4 因子（基準規則配列格子）	7
図 2.3	基準規則配列格子と確率論的幾何形状モデルの比較（無限増倍率）	8
図 2.4	異なる幾何形状モデルによる無限増倍率と 4 因子の比較（充填率 30%）	9
図 2.5	異なる幾何形状モデルによる無限増倍率と 4 因子の比較（充填率 6.5%）	10
図 2.6	異なる幾何形状モデルによる無限増倍率と 4 因子の比較（充填率 63.3%）	10
図 2.7	充填率 30% のランダム配置 Random2 の例	13
図 2.8	最近接球分布（MCRDF-NND1、NND2、Analytic）	14
図 2.9	無限増倍率と 4 因子（基準規則配列格子、ボロン含有軽水マトリックス）	15
図 2.10	異なる幾何形状モデルによる無限増倍率と 4 因子（ボロン含有軽水中の UO_2 球形燃料、充填率 30%）	15
図 2.11	異なる幾何形状モデルによる無限増倍率と 4 因子（ボロン含有軽水中の UO_2 球形燃料、充填率 6.5%）	16
図 2.12	異なる幾何形状モデルによる無限増倍率と 4 因子（ボロン含有軽水中の UO_2 球形燃料、充填率 63.3%）	16
図 2.13	無限増倍率 k_{∞} と 4 因子（燃料マトリックス中の軽水球、基準規則配列格子）	18
図 2.14	異なる幾何形状モデルによる無限増倍率と 4 因子の比較（軽水球）	19
図 3.1	格子モデル（Lattice）	26
図 3.2	使用済み燃料の場合の実効増倍率	27
図 3.3	新燃料の場合の実効増倍率	27
図 3.4	燃料中の中性子エネルギースペクトル（格子モデル）	28

1. はじめに

確率論的幾何形状モデル (Statistical Geometry Model、STGM) は、高温ガス炉などで使用される被覆粒子燃料の不規則配列球状燃料の非均質効果を連続エネルギーモンテカルロ法中性子輸送計算でその長所を損なうことなく精度良く取り扱うために、旧日本原子力研究所において開発され、高温ガス炉臨界実験装置 VHTRC を用いた臨界実験の結果との比較を通してその有効性が確認された¹⁾³⁾。本モデルでは、以下の手順と仮定を用いている。

- 1) 被覆粒子燃料を含む領域の中性子のランダムウォーク過程において、最近接球分布 (Nearest Neighbor Distribution、NND) と呼ぶ確率分布を用いて、球状燃料位置を中性子の飛行方向 (パス) に沿って確率論的に決定する。燃料球のランダム配置によって燃料球の配置に疎密が生じるが、多数の中性子のパスに対する平均的な NND を用いる。
- 2) 最近接球分布 (NND) は中性子のパスが次の燃料球に入射する点までの距離に対する確率分布であり、次の 3 種類を考える。(1) NND1: 燃料球から漏れ出した中性子に対する NND (パスの始点が球表面)、(2) NND2: 燃料球間物質 (マトリックス) と散乱した中性子に対する NND (パスの始点がマトリックス中)、(3) 通常の幾何形状モデルで表現された空間領域から確率論的幾何形状モデルで表現された領域 (STGM 領域) に入射した中性子に対する NND (パスの始点が STGM 領域の表面上)。これら 3 種類の NND はモンテカルロ法を用いた充填模擬法による 3 次元剛体球空間分布計算コード MCRDF³⁾を用いて求められる。MCRDF による NND1 の計算では、燃料球から漏れ出る中性子の角度分布 (パス方向) は、半径ベクトル (球の中心から球面上の点に向かうベクトル) とパスの方向のなす角の余弦 μ の確率分布が $P(\mu)d\mu = 2\mu d\mu$ ($0 \leq \mu \leq 1$)、方位角 φ は一様分布 ($0 \leq \varphi \leq 2\pi$) とする。すなわち、等方中性子束を仮定している。なお、開発当時、統計的一様分布に基づく NND 解析式 (3 種類の NND で共通) が導出されたが、高温ガス試験研究炉 (HTTR) 燃料コンパクトの写真観察や MCRDF による NND との比較を通して、単純充填系に対しては近似的 NND として使用することは可能と考えられるが、HTTR 燃料コンパクトのように圧縮成形後の焼結によって作成される燃料 (一度高充填状態となった後に燃料球径が縮小して所定の充填率となっている。) への適用は難しいとされた^{1), 2)}。
- 3) 燃料球への入射中性子の角度分布は、燃料球への入射位置から燃料球の中心に向かうベクトルとパスの方向のなす角の余弦 μ の確率分布が $P(\mu)d\mu = 2\mu d\mu$ ($0 \leq \mu \leq 1$)、方位角 φ は一様分布 ($0 \leq \varphi \leq 2\pi$) とする。すなわち、等方的な中性子場を仮定している。
- 4) STGM 領域に確率論的に配置される燃料球は STGM 領域の境界と干渉しない。すなわち、燃料球が境界と干渉 (燃料球が境界面と交差してその一部が STGM 領域外となる。) した場合には、その燃料球は棄却され、新たな燃料球がサンプリングされ配置される。このために、真の燃料球充填率 f_p を再現するために、MCRDF によって実現する充填率を $f_p V/V'$ とする¹⁾。ここで、 V は STGM 領域の体積であり、 V' は V から STGM 境界領域 (厚さが燃料球半径の領域でこの境界領域内には燃料球の中心は配置されない。) の体積を除いた値である。

海外では、確率論的幾何形状モデルは“コード長サンプリング法 (Chord length sampling method)”¹⁾と呼ばれることが多いが、燃料コンパクト型あるいはペブルベッド型の高温ガス炉解析のために研究されており^{4)~7)}、幾つかの汎用モンテカルロコードに導入されている^{8),9)}。これらの研究では、NND として上記 2) で触れた統計的一様分布に基づく NND 解析式が用いられており、参考文献 6) 等では上記 4) に関連する境界効果の補正法が検討されている。また、参考文献 7) では計算の高速化を目指した簡単なモデル拡張法が報告されている。

我が国においては、2005 年に公開された MVP/GMVP 第 2 版¹⁰⁾に確率論的幾何形状モデルが導入された。導入に当たっては、幾何形状モデルの明確さ、使い勝手の良さを考慮して、上述の手順・近似のうち、2) と 4) を見直し、以下の仕様とした。

2') NND として、MCRDF で求めた分布とともに、統計的一様分布に基づく NND 確率密度分布の解析式 (詳細は付録 B 参照) :

$$p(r) = \frac{dP(r)}{dr} = \frac{3}{2} \frac{f_p}{(1-f_p)} \exp\left(-\frac{3}{2} \frac{f_p}{(1-f_p)} r\right) \quad (r: \text{球直径単位})$$

を採用する。ここで、 f_p は燃料球の充填率である。これによって、MCRDF による NND 計算が不要となり、簡便に確率論的幾何形状モデルを使用できるようになる。

4') STGM 領域に確率論的に配置される燃料球と STGM 領域境界の干渉を許す。境界面と交差して配置された燃料球は STGM 領域内では燃料領域として取り扱われ、STGM 領域外は別途定義された領域となる。すなわち、境界領域には球の一部のみの燃料が存在することになる。このような燃料球は実際には存在しないが、これを許すことによって境界効果の補正⁶⁾に伴う煩雑な手順が不要となり、充填率に対応する NND をそのまま使用することが可能となる。また、燃料球は確率論的に取り扱えるほど多いことを仮定しているので、その影響は大きくないと考えられる。

MVP/GMVP 第 2 版に導入された確率論的幾何形状モデルの妥当性は、主に HTTR の解析を通して検証された^{11)~13)}。

確率論的幾何形状モデルは、移動面積が大きく吸収の少ない黒鉛減速体系を対象として開発され検証が行われてきたが、近年、燃料デブリの臨界性解析等、軽水減速体系に使用されるようになってきた^{14)~16)}。これらの研究では、マトリックス領域の平均透過率が NND の分布形状に依存し²⁾、統計的一様分布に基づく NND 解析式はマトリックス領域の平均透過率を過大評価すること¹⁵⁾、燃料球径が大きくなると確率論的幾何形状モデルは実効増倍率を過大評価すること¹⁶⁾などが指摘されている。また、参考文献 17) では、従来の NND の代わりに燃料充填率に関する動径分布関数を定義して、これと δ -トラッキング法を組み合わせることによって、計算の効率化と高精度化を図る新たな確率論的幾何形状モデルが提案されている。

¹⁾ G. B. Zimmerman 等の研究“Algorithm for Monte Carlo Particle Transport in Binary Statistical Mixtures” (*Trans. Am. Nucl. Soc.*, vol.64 (1991) pp.287-288) に起源を持つ。彼らの研究では、2 成分の体積割合のみが与えられており、それぞれの幾何形状は定義されず、それぞれが多数の塊として存在するとされている。

²⁾ 充填率が同じであればマトリックス中の平均コード長は同じとなることが付録 B に示されている。

本研究では、MVP/GMVP の確率論的幾何形状モデルを軽水体系に適用した場合の特性を把握するために、連続エネルギーモンテカルロコード MVP を用いて、充填率、燃料球径、等を変えた無限体系パラメトリック・スタディと単純有限体系における使用済み燃料直接処分の臨界安全解析を実施した。第 2 章では、軽水マトリックス中に UO_2 新燃料球がランダムに配置された無限体系を中心に、ボロン含有軽水マトリックス中の UO_2 新燃料球、 UO_2 新燃料マトリックス中の軽水球の場合を取り扱う。第 3 章では、使用済み燃料直接処分の臨界安全性評価への適用を想定して、極めて単純化した有限体系での臨界性を取り扱い、第 4 章で結果を取りまとめる。本研究のために MCRDF を改良したが、その内容と使用法を付録 A に示す。なお、第 2 章は主に森が実施し、第 3 章は小嶋と須山が実施した。

2. 無限体系

大局的な空間分布がなく中性子束が等方に近い無限体系を対象として、確率論的幾何形状モデル（STGM）によるモンテカルロ計算の特徴を検討する。本章の計算には、最新の MVP 第 3 版¹⁸⁾と JENDL-4.0¹⁹⁾を使用した。

2.1 軽水マトリックス中に配置される UO_2 球形燃料

3 つの充填率 f_p : 6.5%、30%、63.3%³で軽水中に球形の 4.9%濃縮 UO_2 新燃料がランダムに分布した体系を対象とする。充填率 63.3%はモンテカルロ法を用いた充填模擬法による 3 次元剛体球空間分布計算コード MCRDF によって比較的容易に配置できた最大充填率である（本報告ではこれをランダム最密充填状態と呼ぶ）。図 2.1 に MCRDF による 3 つの充填率におけるランダム配置の例を示す。本図は一定直径の燃料球が配置された 3 次元空間の水平断面図である。なお、3 つの充填率はそれぞれ、減速材対燃料体積比 (V_M/V_F) : 14.4、2.33、0.580 に対応している。

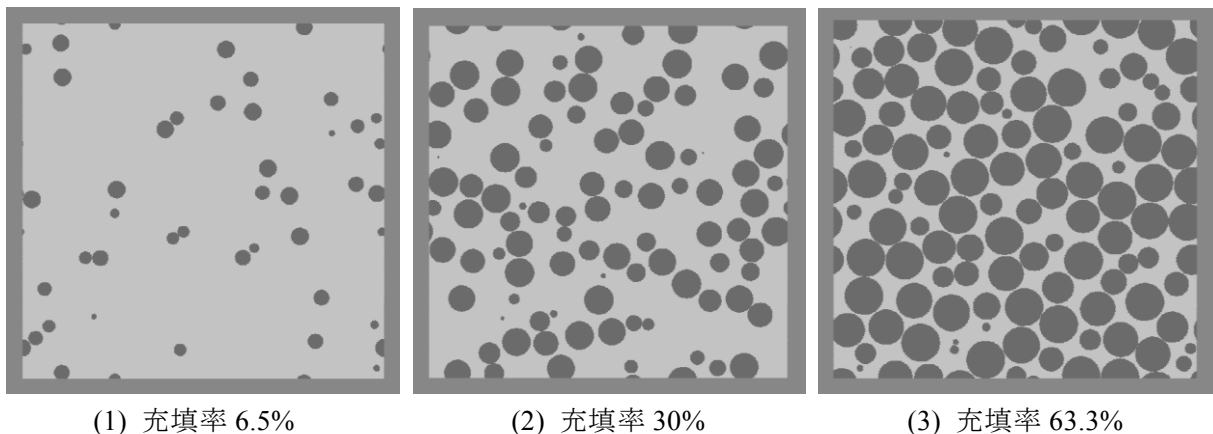


図 2.1 MCRDF によるランダム配置の例（水平断面、表 2.1 の Random1）

表 2.1 に比較した MVP 計算の幾何形状モデルをまとめた。幾何形状を陽に定義するモデルでは、MCRDF による 2 種類ランダム配置の他に、表 2.2 に特徴をまとめた規則配置（規則配列格子）も比較の対象とした。なお、規則配列格子としては、最初の 2 つの充填率では単純立方格子（SC）と面心立方格子（FCC）を対象とし、充填率 63.3%は SC では実現できないために体心立方格子（BCC）と FCC を対象とし、それぞれの充填率で球面間距離が最小となる前者の規則配列格子を比較の基準とした。また、確率論的幾何形状モデルでは、MCRDF による 2 種類の最近接球分布（NND）を用いた計算とともに、これらに対応した統計的一様分布に基づく NND 解析式による 2 種類の計算を比較した。使用した軽水と UO_2 燃料の組成は表 2.3 に示した。

³ 日本原子力研究開発機構の高温ガス試験研究炉（HTTR）の燃料ペレットの被覆粒子燃料充填率が約 30%である。

表 2.1 MVP 計算の幾何形状モデル

配置の種類	モデル略称	概 要
規則配置	SC	単純立方格子 (Simple Cubic lattice)
	BCC	体心立法格子 (Body Centered Cubic lattice)
	FCC	面心立法格子 (Face Centered Cubic lattice)
ランダム配置	Random1	MCRDF で求めた所定の充填率のランダム配置*
	Random2	MCRDF で求めたランダム最密充填状態(充填率約 63.3%)の配置から球を縮小して所定の充填率とした配置*
確率論的幾何形状モデル	STGM-MCRDF1	30 個の Random1 の配置から求めた NND**を用いた計算
	STGM-MCRDF2	30 個の Random2 の配置から求めた NND**を用いた計算
	STGM-Analytic1	所定の充填率の統計的一様分布による NND 解析式を用いた計算 (STGM-MCRDF1 に対応)
	STGM-Analytic2	ランダム最密充填率 (63.5% ⁴) の統計的一様分布による NND 解析式を用いて球 (中心に所定の充填率となる半径の燃料球、その外側に減速材) を配置する計算 (STGM-MCRDF2 に対応)

* 1,000 個の球を立方体内にランダムに配置、周期境界条件

** 各ランダム配置の NND 計算パス数は 1,000,000

表 2.2 規則配列格子の特徴

規則配列	最高充填率	球 / セル	セル長*	セル長* for f_p			最小球面間距離*		
				充填率 f_p			充填率 f_p		
				0.065	0.3	0.633	0.065	0.3	0.633
SC	$\pi/6$ (0.5236)	1	1	2.0046	1.2040	—	1.0046	0.2040	—
BCC	$\sqrt{3}\pi/8$ (0.6802)	2	$2/\sqrt{3}$ (1.1547)	2.5256	1.5169	1.1827	1.1873	0.3137	0.0242
FCC	$\sqrt{2}\pi/6$ (0.7405)	4	$\sqrt{2}$ (1.4142)	3.1821	1.9112	1.4901	1.2501	0.3514	0.0537

参考：平均球面間距離 (マトリックス中の平均コード長) (直径) 9.5897 1.5556 0.3865

最密充填状態→ f_p (球縮小) 配置の最小球面間距離 (直径) 1.1355 0.2826 —

* 球の直径に対する相対値で与えられている。

⁴ MCRDF2 の 63.3%との差異の影響が小さいことは MVP 計算により確認している。

表 2.3 UO₂ 新燃料と軽水の原子数密度

物 質	温度 (K)	核 種	原子数密度 (/ (barn・cm))
4.9%濃縮 UO ₂ 新燃料	300	U-234	8.564×10^{-6}
		U-235	1.122×10^{-3}
		U-238	2.150×10^{-2}
		O-16	4.525×10^{-2}
軽水	300	O-16	3.335×10^{-2}
		H-1	6.670×10^{-2}

MVP 計算は、規則配列格子と確率論的幾何形状モデルでは、10,000 ヒストリ×(10+1,000) バッチを基本とした。最初の 10 バッチは核分裂源分布を収束させるための計算（捨てバッチと呼ぶ）で、無限増倍率などの物理量の評価には使用していない。一方、ランダム配置の場合には、捨てバッチは 50 とした。また、燃料球径が中性子の平均自由行程と比較して小さい場合には、飛行解析事象が増え計算コストが増大するために、物理量評価に用いるバッチ数を減少した（例えば、充填率 63.3%、BCC で球半径 0.005 cm の計算では 100 バッチ）。幾何形状モデルの外部境界（立方体表面）は、規則配列格子と確率論的幾何形状モデルでは完全反射境界とし、ランダム配置の場合は図 2.1 のように周期境界とした。なお、球半径が極端に小さい場合には、飛行解析における数値誤差の影響を避けるために、付録 C に示した「長さの単位の変換」を用いて幾何形状モデルを表現した。

まず、充填率による核特性の差異を見るために、無限増倍率 k_{∞} と 4 因子の燃料球径依存性を、均質に燃料と軽水が混合した場合とともに、図 2.2 に示す。本図は基準規則配列格子（SC：充填率 6.5%と 30%、BCC：充填率 63.3%）の結果であり、以下の特徴を示している。

- ・ 充填率に依らず、燃料球径が大きくなると共鳴吸収を逃れる確率 p が先に増加し、熱中性子利用率 f は遅れて減少する。そのために、 k_{∞} にピークが現れる。充填率 63.3%では高速核分裂因子 ε の変化も大きい、 p 及び f と比較して値自身が大きいために、 k_{∞} の変化への寄与はそれほど大きくない。
- ・ p と f の非均質効果は、低い充填率（大きい減速材対燃料体積比 V_M/V_F ）の方が、小さな燃料球径から現れる。
- ・ k_{∞} のピークは、高い充填率（小さい V_M/V_F ）の方が、大きな燃料球径で現れる。
- ・ 高い充填率（小さい V_M/V_F ）の方が、 p の正の非均質効果は大きい。
- ・ 充填率が低い場合（ $f_p = 6.5\%$ ）には、燃料球径が非常に大きくなると高速核分裂因子 ε が急増し、 p が僅かに減少する。前者は、燃料中の熱中性子束が減少（空間的遮蔽効果）し（エネルギースペクトルも若干硬化）、高速中性子束は増加することによる。また、後者は、高速中性子束の燃料中と軽水中の比（ $\phi_{1,F}/\phi_{1,M}$ ）の急激な増加が、燃料の吸収断面積 $\Sigma_{a1,F}$ の減少より大きいことによると考えられる。

- ・ 充填率が高い場合 ($f_p = 63.3\%$) には、燃料球径が大きくなると ε は減少した後に増加する。これは、燃料球径の増加に伴い、 $\nu\Sigma_{f,1}/\nu\Sigma_{f,2}$ は減少 ($\nu\Sigma_{f,1}$ は減少、 $\nu\Sigma_{f,2}$ は増加) し、燃料中の中性子束の比 $\phi_{1,F}/\phi_{2,F}$ については球半径が 10 cm 程度まで変化は小さいがその後急激に増加 ($\phi_{1,F}$ 、 $\phi_{2,F}$ は微増後、それぞれ急激に増加と減少) することによる。
 - ・ 再生率 η は、充填率が高くなると少し小さくなるが、燃料球径にほとんど依存しない。
- ここで、添え字の 1 と 2 はそれぞれ、高速群 (第 1 群) と熱群 (第 2 群) を示し、 M と F は減速材 (軽水) 領域と燃料領域を示している。

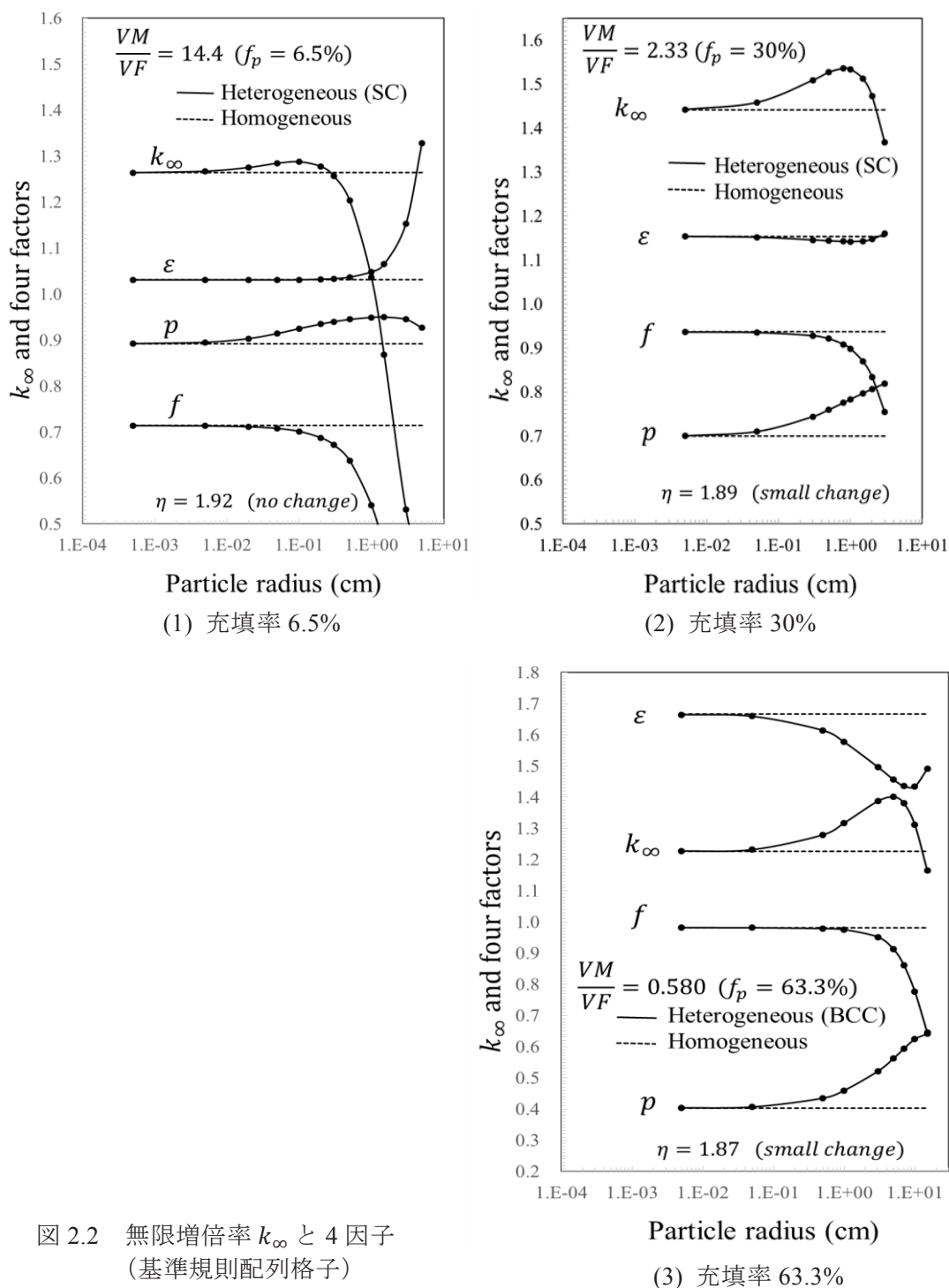


図 2.2 無限増倍率 k_∞ と 4 因子
(基準規則配列格子)

なお、MVP による 4 因子の計算法の詳細は付録 D に示したが、4.5 eV 以上を高速領域（第 1 群）、これ以下を熱領域（第 2 群）とした。また、MVP 計算の統計誤差（相対標準偏差）は、燃料球径が最小の場合が最も大きく、 k_{∞} で 0.02 % ~ 0.05 %、4 因子で 0.2 % ~ 0.4 % である。他の球径ではそれぞれ、概ね 0.01 % 以下、0.1 % 以下である。

図 2.3 に、 UO_2 燃料球径を変化させた時の無限増倍率 k_{∞} の変化について、基準規則配列格子 (SC: 充填率 6.5% と 30%、BCC: 充填率 63.3%) と確率論的幾何形状モデル (STGM-Analytic1) の比較を示す。本図では、前者の結果とこれに対する後者の結果の比が示されている。本図から以下のことが分かる。

- ・燃料球径が大きくなると、確率論的幾何形状モデル (STGM-Analytic1) は規則配列格子より大きな k_{∞} を与える。
- ・確率論的幾何形状モデルが規則配列格子より大きな k_{∞} を与える燃料球径は、充填率が高いほど大きい。
- ・差異の現れる燃料球径は非均質効果の現れる燃料球径よりかなり大きく、2 つの球径間では確率論的幾何形状モデルと規則配列格子の結果に大きな差異はない。

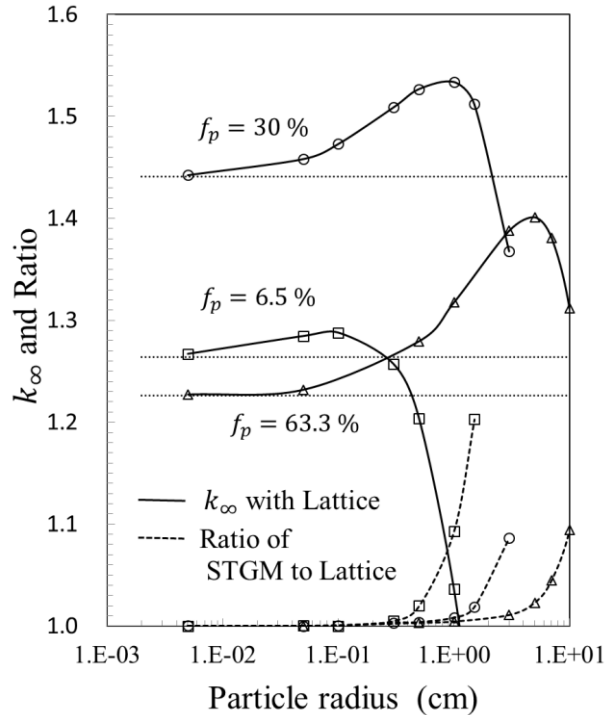


図 2.3 基準規則配列格子と確率論的幾何形状モデルの比較（無限増倍率）

幾何形状モデルの違いの影響を明らかにするために、表 2.1 に示した 8 つの幾何形状モデルで無限増倍率と 4 因子を計算した。図 2.4 に、充填率 30% の場合について、燃料球半径 R_p が 0.05 cm ~ 3 cm の範囲の 4 点の結果を示す。この図では基準規則配列格子 SC を基準とした。MVP 計算の統計誤差については、 k_{∞} はランダム配置で 0.016% 以下、他は 0.01% 以下、各因子はランダム配置で 0.11%、他は 0.09% 以下であった。本図から以下のことが分かる。

- ・幾何形状モデルによる k_{∞} の差異は、主に、熱中性子利用率 f と共鳴吸収を逃れる確率 p の差異に起因する。
- ・燃料球径が大きい場合には、 f が支配的である。基準規則配列格子 SC と比較して、ランダム配置 Random1 は小さく、これに対応する確率論的幾何形状モデル STGM-MCRDF1 と STGM-Analytic1 はともに大きい。その結果、 $R_p = 3$ cm では、確率論的幾何形状モデルは Random1 の k_{∞} を約 20% 過大評価する。Random2 は SC と FCC の結果（差異は小さい）と同様の結果であるが、これに対応する STGM-MCRDF2 の結果は約 7% 大きい。一方、STGM-Analytic2 の過大評価は約 1.4% 程度である。
- ・燃料球径が小さくなると p の寄与が増加し、 $R_p = 0.05$ cm では k_{∞} と p はほぼ同じ変化を示している。Random1 と STGM-MCRDF1、Random2 と STGM-MCRDF2 は、それぞれ、ほぼ同じ結果を与えている。NND 解析式を用いた結果 (STGM-Analytic1 と STGM-Analytic2)

は、MCRDF による NND を用いた結果（STGM-MCRDF1 と STGM-MCRDF2）と同様の傾向を示すが、僅かに小さい。

- f についての幾何形状モデルによる差異は、 $R_p = 3 \text{ cm}$ の 20% から $R_p = 0.05 \text{ cm}$ では 0.1% に減少する。 $R_p = 0.05 \text{ cm}$ では確率論的幾何形状モデルはランダム配置（Random1 と Random2）の傾向を概ね再現しているが、 $R_p \geq 0.5 \text{ cm}$ では $R_p = 3 \text{ cm}$ の場合と同じ傾向を示している。ただし、 $R_p = 3 \text{ cm}$ 見られた STGM-MCRDF2 と STGM-Analytic2 の顕著な差異は見られない。
- p については、幾何形状モデルによる差異は 0.5%~1.2% であり、 $R_p \leq 1 \text{ cm}$ ではランダム配置の結果をそれに対応する確率論的幾何形状モデルはよく再現している。ただし、NND 解析式を用いた結果には、僅かに過小評価の傾向が見られる。

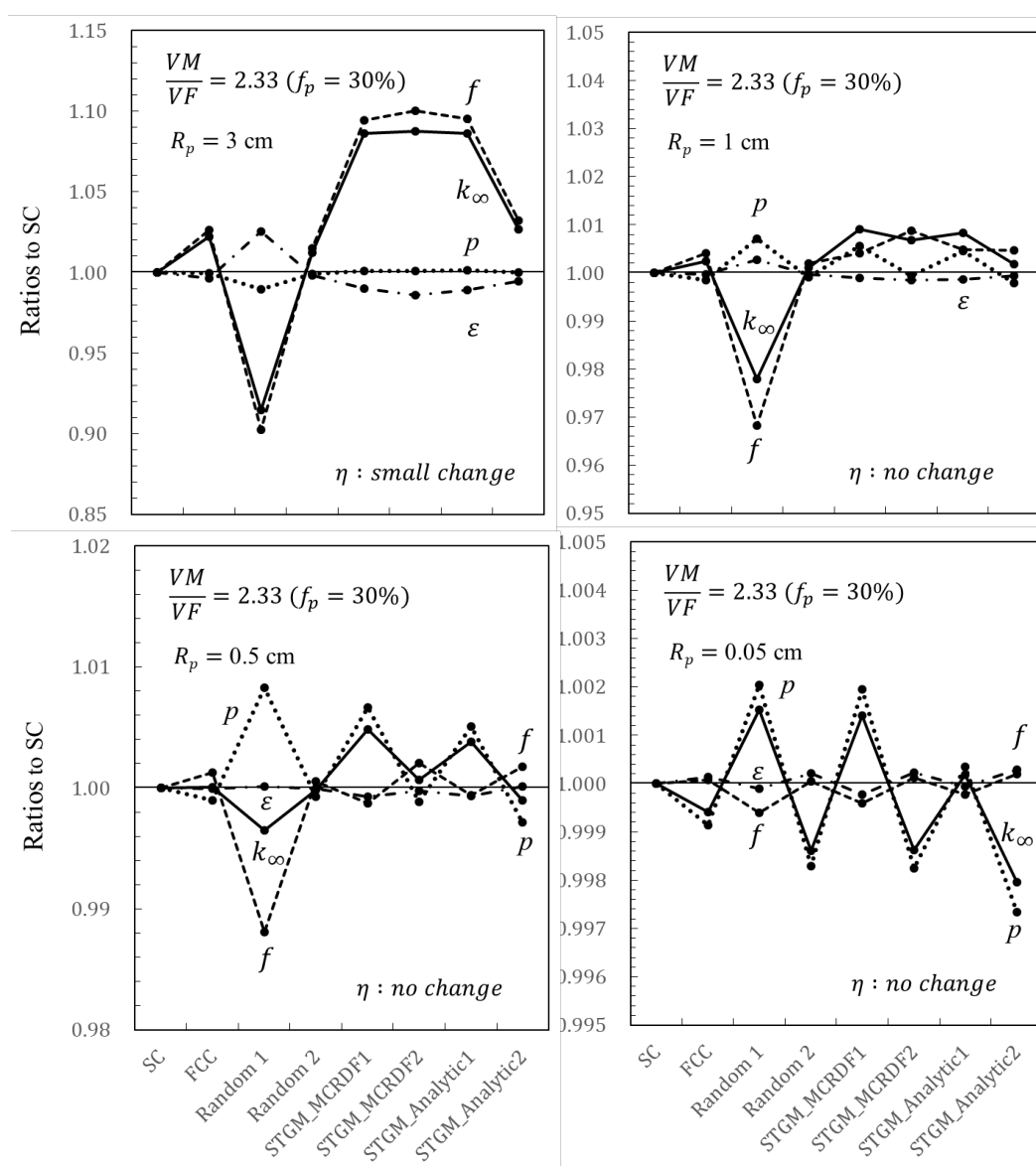


図 2.4 異なる幾何形状モデルによる無限増倍率と 4 因子の比較（充填率 30%）

充填率 6.5%と 63.3%の結果を図 2.5 と図 2.6 に示す。低い充填率の 6.5%では、30%の場合と比較し、 $R_p = 0.05$ cm で f の変化の大きさが p と同程度と比較的大きいが、よく似た結果となっている。

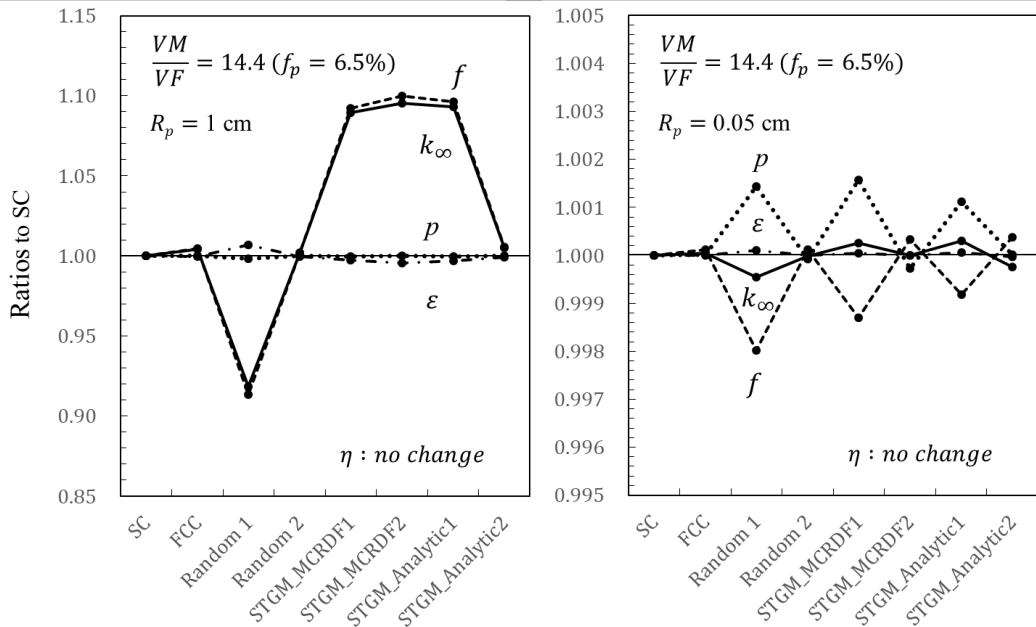


図 2.5 異なる幾何形状モデルによる無限増倍率と 4 因子の比較（充填率 6.5%）

一方、ランダム最密充填状態である充填率 63.3%では、高速核分裂因子 ϵ の変化の寄与が比較的大きくなっている。それにも関わらず、充填率が 6.5%と 30%の場合と同様に、確率的幾何形状モデルは、燃料球径が大きい場合に f を大きく過大評価（その結果、 k_∞ を過大評価）し、燃料球径が小さくなるとランダム配置 Random1 の結果を概ね再現している。

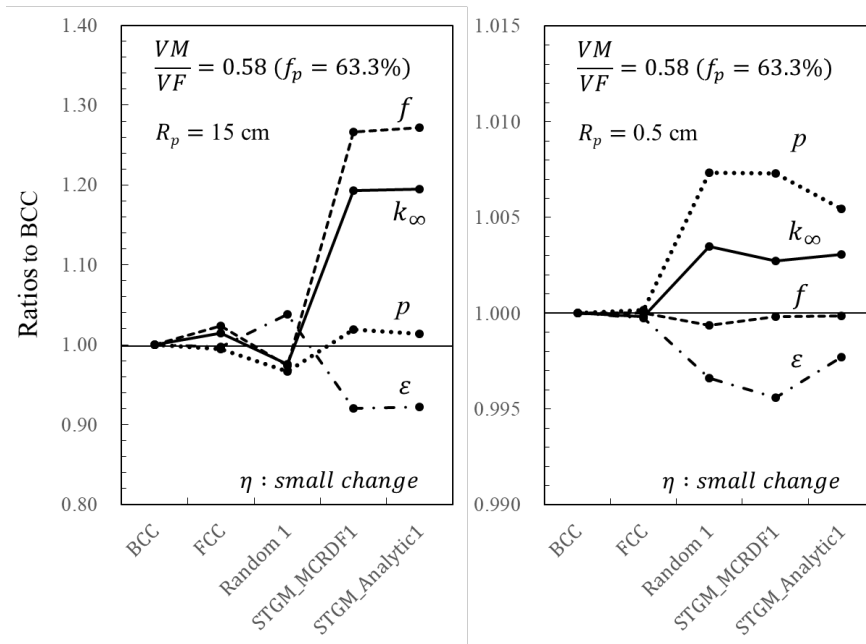


図 2.6 異なる幾何形状モデルによる無限増倍率と 4 因子の比較（充填率 63.3%）

以上の結果から、確率論的幾何形状モデルは、充填率に依らず、燃料球径が大きくなると k_{∞} を過大評価し、その原因が f の過大評価にあることが分かった。充填率 30%、 $R_p = 3$ cm の場合の熱群（2 群）の巨視的吸収断面積 Σ_{a2} と中性子束 ϕ_2 を f と共に表 2.4 に示す。ランダム配置 Random1 に着目すると、これに対応する確率論的幾何形状モデル STGM-MCRDF1、STGM-Analytic1 は、陽に燃料球を配置した Random1 と比較して、燃料領域（添え字 F ）では吸収断面積と中性子束の両者を過大評価し、減速材（軽水）領域（添え字 M ）では逆に両者を過小評価している。その結果、確率論的幾何形状モデルは f を大きく過大評価することになる。表 2.5 と表 2.6 の充填率 6.5%、 $R_p = 1$ cm、充填率 63.3%、 $R_p = 15$ cm でも同様の結果となっている。なお、断面積と中性子束の統計誤差は、それぞれ、0.01 %～0.07 %、0.03 %～0.08 %で、充填率が高いほど大きい。

表 2.4 熱群の巨視的吸収断面積と中性子束（充填率 30%、 $R_p = 3$ cm）

	SC	FCC	Random1	Random2	STGM-MCRDF1	STGM-MCRDF2	STGM-Analytic1	STGM-Analytic2
$\Sigma_{a2,F}^*$	0.3625	0.3638	0.3492	0.3628	0.3854	0.3830	0.3850	0.3650
$\Sigma_{a2,M}^*$	0.01627	0.01605	0.01689	0.01615	0.01522	0.01515	0.01522	0.01599
$\phi_{2,F}^{**}$	0.1312	0.1341	0.1216	0.1328	0.1351	0.1366	0.1354	0.1344
$\phi_{2,M}^{**}$	0.9518	0.8864	1.179	0.9141	0.7225	0.7076	0.7213	0.8719
f	0.7543	0.7741	0.6807	0.7655	0.8256	0.8300	0.8260	0.7788

* cm^{-1}

** 体積積分値（単位レサジー当たり）

表 2.5 熱群の巨視的吸収断面積と中性子束（充填率 6.5%、 $R_p = 1$ cm）

	SC	FCC	Random1	Random2	STGM-MCRDF1	STGM-MCRDF2	STGM-Analytic1	STGM-Analytic2
$\Sigma_{a2,F}^*$	0.5170	0.5174	0.5077	0.5172	0.5389	0.5393	0.5393	0.5174
$\Sigma_{a2,M}^*$	0.01743	0.01742	0.01759	0.01743	0.01720	0.01718	0.01719	0.01742
$\phi_{2,F}^{**}$	0.07640	0.07674	0.07095	0.07650	0.07997	0.08052	0.08022	0.07670
$\phi_{2,M}^{**}$	1.921	1.913	2.094	1.917	1.734	1.719	1.726	1.909
f	0.5411	0.5437	0.4943	0.5422	0.5910	0.5951	0.5931	0.5441

* cm^{-1}

** 体積積分値（単位レサジー当たり）

表 2.6 熱群の巨視的吸収断面積と中性子束
(充填率 63.3%、 $R_p = 15$ cm)

	BCC	FCC	Random1	STGM-MCRDF1	STGM-Analytic1
$\Sigma_{a2,F}^*$	0.2721	0.2682	0.2624	0.3092	0.3082
$\Sigma_{a2,M}^*$	0.01718	0.01711	0.01728	0.01552	0.01546
$\phi_{2,F}^{**}$	0.1170	0.1209	0.1142	0.1329	0.1333
$\phi_{2,M}^{**}$	1.020	0.9746	1.027	0.5933	0.5815
f	0.6449	0.6604	0.6282	0.8170	0.8204

* cm^{-1}

** 体積積分値（単位レサジー当たり）

ここで、燃料球径が大きい場合に、確率論的幾何形状モデル（STGM-MCRDF1、STGM-Analytic1）で、燃料球を陽に配置した Random1 と比較して、熱群の中性子束、巨視的吸収断面積が共に大きくなるメカニズムを考察する。表 2.4（充填率 30%、 $R_p = 3$ cm）を大小関係に注目して整理すると、以下の順序となる。

$$\Sigma_{a2,F} \text{ と } \phi_{2,F} : \quad \text{Random1} < \text{SC} < \text{FCC} < \text{STGM}$$

$$\Sigma_{a2,M} \text{ と } \phi_{2,M} : \quad \text{Random1} > \text{SC} > \text{FCC} > \text{STGM}$$

この場合、充填率で決まる平均球面間距離⁵（軽水領域の平均コード長と呼ぶ）は約 9.3 cm (1.5556 直径) であり、熱群中性子の軽水中の平均自由行程（約 0.33 cm）を考慮すると、大きな軽水領域が燃料球を取り巻いている。陽に燃料球を配置する 3 つの場合（Random1、SC、FCC）に注目し、Random1 では燃料球同士が接している場合がある（Random1 の最短球面間距離はゼロである。）ことを考慮すると、 $\Sigma_{a2,F}$ と $\phi_{2,F}$ に対する順序は、表 2.2 の最小球面間距離の順序となっていることが分かる。平均球面間距離は一定なので、最小球面間距離が小さいと言うことは、球面間距離の大きい軽水領域がある、すなわち軽水がより大きな塊で存在していることを意味している。これは、図 2.1 に示した MCRDF によるランダム配置の例からも読み取ることができる。より大きな塊で軽水が存在すると、そこで散乱した中性子はトラップされて散乱を繰り返すことになり、軽水領域の中性子束が増加するとともに、中性子エネルギー Spektral が軟化するために吸収断面積が大きくなる。逆に、燃料中では中性子束が減少する。燃料による吸収については、主に燃料球が疎らに分布する領域で起こっているなら軟らかい中性子エネルギー Spektral のために吸収断面積が大きくなるはずであるが、実際には小さくなっているため、中性子エネルギー Spektral の硬い燃料球が密集した領域での吸収が支配的であることが分かる。このように、3 つの配置（Random1、SC、FCC）は同じ充填率、すなわち同じ V_M/V_F であるが、局所的に軽水領域の実効的な大きさが異なることによって、燃料中、軽水中の吸収断面積

⁵ 平均球面間距離（マトリックス中の平均コード長）が充填率で決まることは、付録 B 表 B.1 に示した。

と中性子束が変化し、 f に差異が生じている。なお、ランダム配置では局所的な偏りにより軽水の少ない領域（ V_M/V_F が平均値より小さい領域）もあるが、 V_M/V_F が小さくなると f は大きくなるにも関わらず、Random1 では f が小さくなっている、その効果は小さいことが分かる。

それでは、何故、Random1 の配置から MCRDF によって求めた NND を用いた STGM-MCRDF1 の結果が、Random1 と大きく異なるのであろうか。ここで、図 2.1 の Random1 配置における中性子の振る舞いを考えてみる。燃料球が密集している軽水中で散乱した中性子は燃料球に入る確率が高く、燃料が疎らで軽水が大量にある領域では上述の通り中性子はこの領域にトラップされて燃料球に入り難くなる。これら 2 つの領域では燃料球から出た後あるいた軽水中での散乱後に燃料球に入射する点までの距離の分布（NND）は異なっている。一方、確率論的幾何形状モデルでは、中性子が今存在している領域の燃料球の粗密を考慮しないで、パスの始点によって異なる分布の平均である NND を用いて、飛行方向の最近接球の位置（次に入射する可能性のある燃料球までの距離）を決定している。そのために、中性子が軽水の塊にトラップされて軽水中での散乱が継続する効果を考慮することができず、Random1 はもちろんのこと、規則配列格子 SC や FCC と比較しても、大きな f を与える。NND 解析式を用いた STGM-Analytic1 による f の過大評価も同じ理由による。

表 2.5 も表 2.4 と全く同じであり、表 2.6 については、 $\Sigma_{a2,F}$ が BCC > FCC（SC を BCC と読み替えて）となっていることを除いて同じであるので、図 2.5 と図 2.6 の充填率における確率論的幾何形状モデルによる燃料球径が大きい場合の f の過大評価の原因も、同様に理解できる。

次に、ランダム最密充填状態から燃料球径を縮小して所定の充填率を実現した配置 Random2 の結果を考察する。ランダム最密充填状態ではほぼすべての燃料球がお互いに接しているため、Random2 は図 2.7 に示したように、Random1（図 2.1）と比較して燃料球配置の偏りは小さい。その結果、図 2.4 と 2.5、表 2.4 と 2.5 の示したように、Random2 の結果は、規則配列格子の結果に近い（SC と FCC の間）。確率論的幾何形状モデル STGM-MCRDF2 は、最小球面間距離が SC と FCC の間にあるにも関わらず、Random1 の場合と同じ理由で、 k_{∞} と f を過大評価している。すなわち、燃料球から漏れ出た中性子は最小球面間距離（充填率 30%、 $R_p = 3$ cm では約

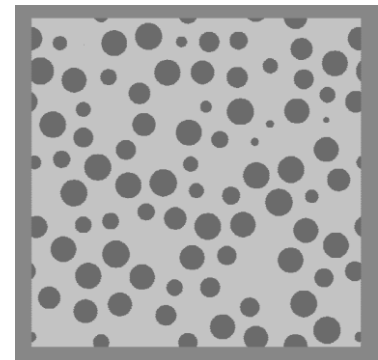


図 2.7 充填率 30%のランダム配置 Random2 の例

1.7 cm (= 0.28 直径)) 進む間に軽水と散乱しても、その後は、燃料球間（マトリックス中）を始点としたパスに対して計算した平均的な NND2 を用いて燃料球を配置するために、軽水が塊である効果を考慮することができない（図 2.8）。一方、STGM-Analytic2 は Random2 の結果をよく再現している。STGM-Analytic2 においては、燃料球を出た中性子が次の燃料球に入射するまでの距離の分布（NND 確率密度分布、図 2.8(2)の Analytic2）は MCRDF2 : NND1 と比較してそれほど大きな差異は見られないが、MVP 計算ではこの分布に基づいて燃料球を確率論的に配置するのではなくて、充填率 30 %の場合には半径 $R = (63.5/30)^{1/3} R_p \approx 1.28 R_p$ の球（STG 粒子：半径 R_p 内が UO_2 燃料、外は軽水）を、この球から中性子が出た時点で、充填率 63.5%の NND 解析式を用いて確率論的に配置する。すなわち、燃料球の外側に厚さ $0.28 R_p$ （ $R_p = 3$ cm

で約 0.85 cm) の軽水領域が陽にモデル化されている。これによって、STGM-Analytic2 では軽水が塊で存在する効果を取り入れられていると考えられる。

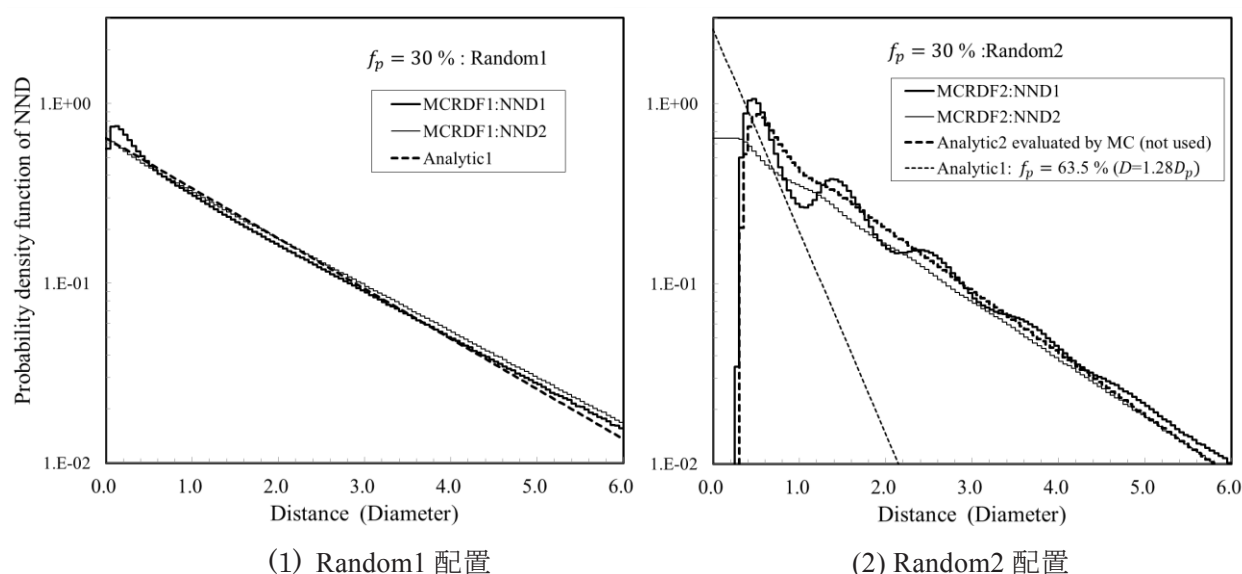


図 2.8 最近接球分布 (MCRDF-NND1、NND2、Analytic)

2.2 ボロン含有軽水マトリックス中に配置される UO_2 球形燃料

マトリックス中の吸収が大きくなった時の確率論的幾何形状モデルの適用性を評価するために、マトリックスが 1000 ppm 天然ボロン入り軽水の場合を検討する。表 2.7 にボロン入り軽水の組成を示す。 UO_2 燃料の組成と MVP 計算条件は第 2.1 節と同じである。

表 2.7 1000 ppm 天然ボロン含有軽水の原子数密度

物 質	温度 (K)	核 種	原子数密度 $(/(\text{barn} \cdot \text{cm}))$
ボロン含有軽水	300	O-16	3.335×10^{-2}
		H-1	6.670×10^{-2}
		B-10	1.107×10^{-5}
		B-11	4.454×10^{-5}

基準規則配列格子における無限増倍率 k_∞ と 4 因子を図 2.9 に示す。ボロン無の場合 (図 2.2) と比較すると、燃料球径が大きい場合にボロンの吸収により熱中性子利用率 f が大きく低下し、無限増倍率 k_∞ は充填率 6.5% ($R_p = 1 \text{ cm}$)、30% ($R_p = 3 \text{ cm}$)、63.3% ($R_p = 15 \text{ cm}$) で、それぞれ、約 44%、26%、22%小さくなる。ボロンの有無による共鳴吸収を逃れる確率 p の変化は 1.2%以下の減少である。なお、高速核分裂因子 ε はボロンによって大きくなり、その増加率は 2%弱～17.5% (充填率 63.3%、 $R_p = 15 \text{ cm}$) である。

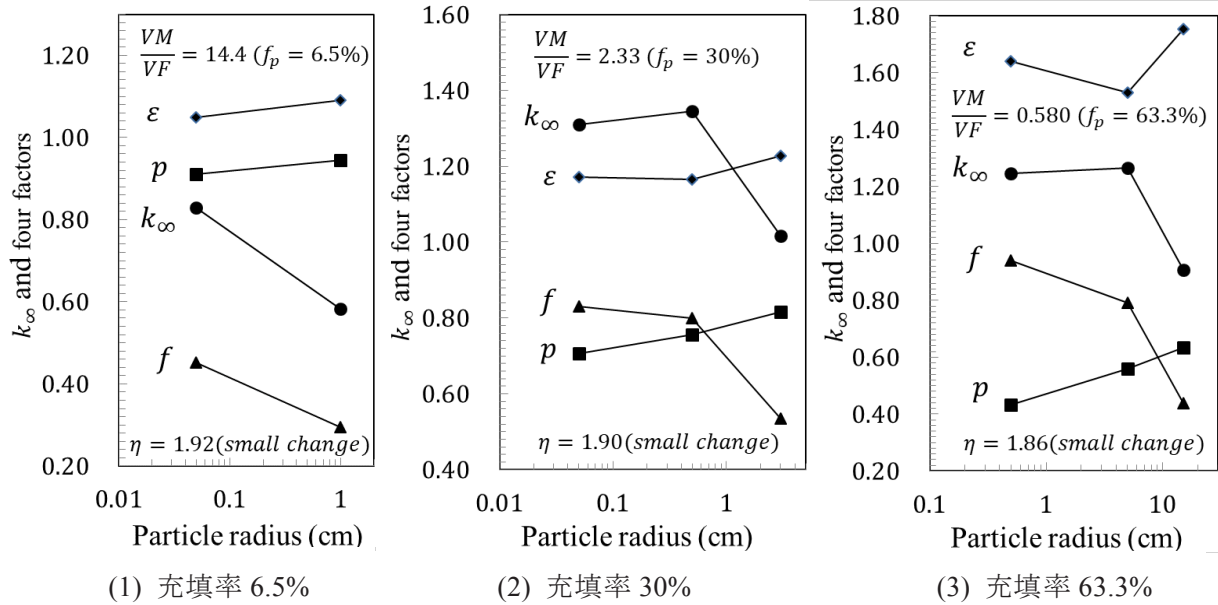
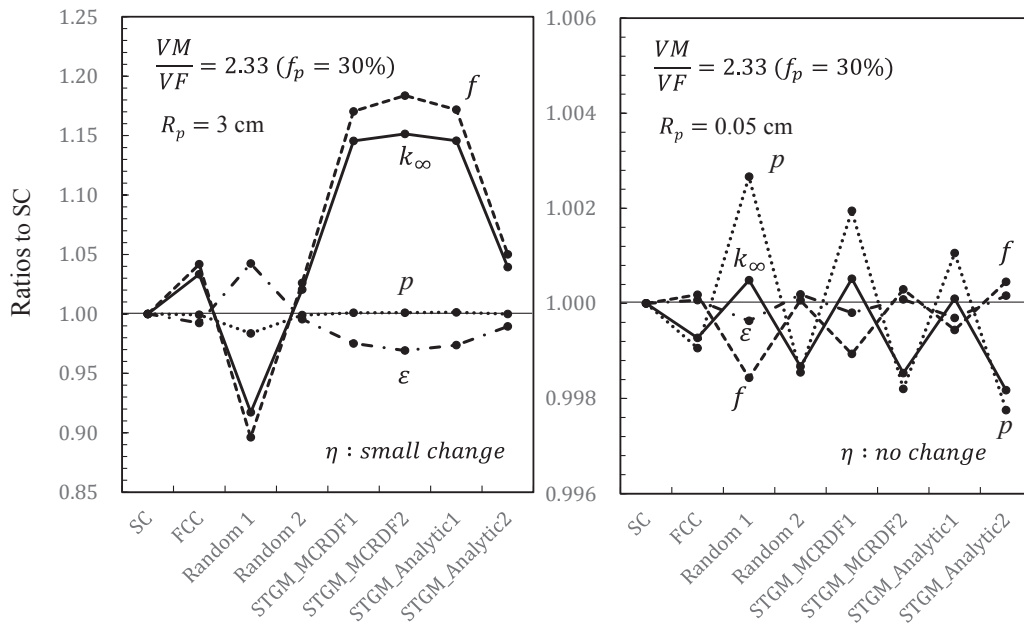


図 2.9 無限増倍率と 4 因子（基準規則配列格子、ボロン含有軽水マトリックス）

3 つの充填率における無限増倍率 k_{∞} と 4 因子の 8 つの幾何形状モデルによる差異を、図 2.10 ～図 2.12 に示す。これらの結果は、前節のボロンを含まない軽水マトリックスの場合（図 2.4 ～図 2.6）とよく似ている。ただし、燃料球半径 R_p が大きい場合の k_{∞} と f についての確率論的幾何形状モデル STGM-MCRDF1、STGM-Analytic1 による Random1 に対する過大評価と STGM-MCRDF2 による Random2 に対する過大評価の度合いが大きくなっている。また、 R_p が小さい場合は、 f の変化がボロン無の場合より大きく、確率論的幾何形状モデルの結果には若干の過大評価が見られるが、共鳴吸収を逃れる確率 p の過小評価とキャンセルして、 k_{∞} は 0.1% 以内で一致している。

図 2.10 異なる幾何形状モデルによる無限増倍率と 4 因子
(ボロン含有軽水中の UO_2 球形燃料、充填率 30%)

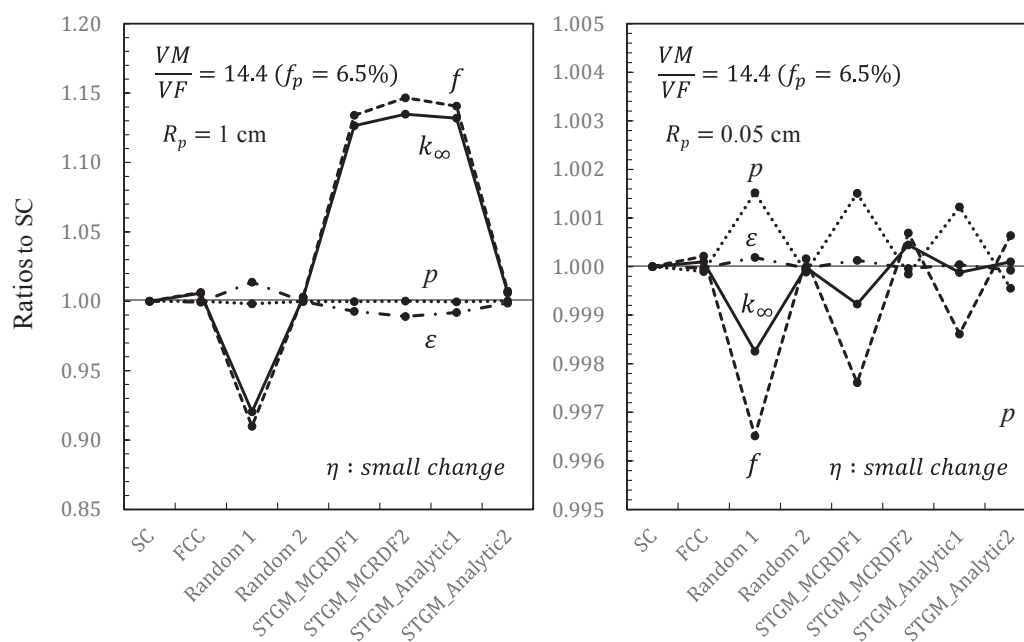


図 2.11 異なる幾何形状モデルによる無限増倍率と 4 因子
(ボロン含有軽水中の UO_2 球形燃料、充填率 6.5%)

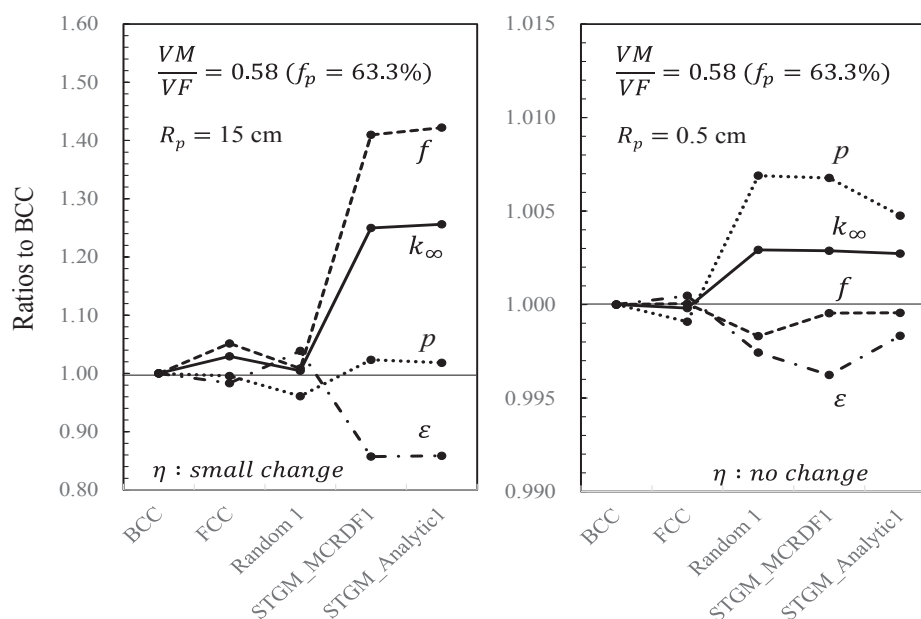


図 2.12 異なる幾何形状モデルによる無限増倍率と 4 因子
(ボロン含有軽水中の UO_2 球形燃料、充填率 63.3%)

表 2.8～表 2.10 に、各充填率の燃料球形が大きい場合の熱群の巨視的吸収断面積 Σ_{a2} と中性子束 ϕ_2 を熱中性子利用率 f とともに示した。ボロン無の結果（表 2.4～表 2.6）と比較すると、減速材（ボロン含有軽水）の吸収断面積 $\Sigma_{a2,M}$ が約 2.7 倍大きくなり（その変化は STGM が若

干大きい：STGM による f の過大評価が緩和される方向)、中性子エネルギースペクトルの吸収硬化により燃料の吸収断面積 $\Sigma_{a2,F}$ は小さくなる（変化は Random1 が STGM より若干大きい：STGM による f の過大評価が増加する方向）。また、中性子束は減速材領域、燃料領域ともに減少するが、前者の変化がより大きい（その変化は両領域とも STGM が小さい：STGM による f の過大評価に対して、 $\phi_{2,F}$ は増加する方向、 $\phi_{2,M}$ は緩和する方向）。その結果、STGM-MCRDF1 による Random1 に対する燃料領域の吸収断面積と中性子束の過大評価は大きくなり、減速材領域の過小評価は小さくなり、 f をより過大評価する。

表 2.8 熱群の巨視的吸収断面積と中性子束
(充填率 30%、 $R_p = 3$ cm、ボロン含有軽水マトリックス)

	SC	FCC	Random1	Random2	STGM-MCRDF1	STGM-MCRDF2	STGM-Analytic1	STGM-Analytic2
$\Sigma_{a2,F}^*$	0.3169	0.3202	0.2986	0.3186	0.3476	0.3460	0.3472	0.3218
$\Sigma_{a2,M}^*$	0.04366	0.04321	0.04471	0.04339	0.04133	0.04115	0.04132	0.04310
$\phi_{2,F}^{**}$	0.1058	0.1090	0.09911	0.1078	0.1131	0.1148	0.1134	1.0940
$\phi_{2,M}^{**}$	0.6688	0.6430	0.7188	0.6523	0.5692	0.5607	0.5685	0.6385
f	0.5344	0.5568	0.4789	0.5483	0.6255	0.6326	0.6262	0.5612

* cm^{-1}

** 体積積分値（単位レサジー当たり）

断面積と中性子束の統計誤差は、0.05%以下。 f は 0.09%以下

表 2.9 熱群の巨視的吸収断面積と中性子束
(充填率 6.5%、 $R_p = 1$ cm、ボロン含有軽水マトリックス)

	SC	FCC	Random1	Random2	STGM-MCRDF1	STGM-MCRDF2	STGM-Analytic1	STGM-Analytic2
$\Sigma_{a2,F}^*$	0.4580	0.4586	0.4449	0.4583	0.4833	0.4840	0.4836	0.4584
$\Sigma_{a2,M}^*$	0.04665	0.04663	0.04694	0.04664	0.04614	0.04610	0.04611	0.04663
$\phi_{2,F}^{**}$	0.04668	0.04693	0.04364	0.04682	0.05017	0.05069	0.05041	0.04700
$\phi_{2,M}^{**}$	1.098	1.096	1.130	1.098	1.048	1.044	1.046	1.096
f	0.2944	0.2963	0.2679	0.2953	0.3339	0.3376	0.3358	0.2965

* cm^{-1}

** 体積積分値（単位レサジー当たり）

断面積と中性子束の統計誤差は、それぞれ 0.04%、0.06%以下。 f は 0.08%以下

表 2.10 熱群の巨視的吸収断面積と中性子束
(充填率 63.3%、 $R_p = 15$ cm、ボロン含有軽水マトリックス)

	BCC	FCC	Random1	STGM-MCRDF1	STGM-Analytic1
$\Sigma_{a2,F}^*$	0.2212	0.2204	0.2135	0.2695	0.2691
$\Sigma_{a2,M}^*$	0.04567	0.04538	0.04567	0.04202	0.04186
$\phi_{2,F}^{**}$	0.09659	0.1015	0.09697	0.1144	0.1150
$\phi_{2,M}^{**}$	0.6001	0.5773	0.5729	0.4547	0.4475
f	0.4380	0.4605	0.4417	0.6174	0.6228

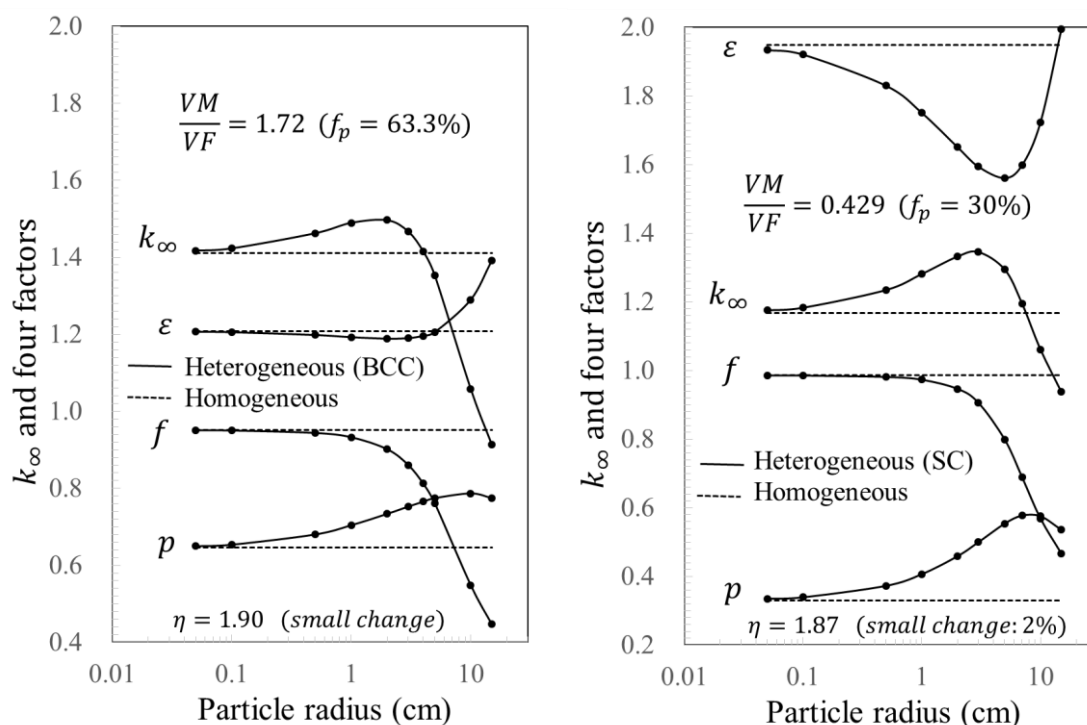
* cm^{-1}

** 体積分値 (単位レサジー当たり)

断面積と中性子束の統計誤差は、0.09%以下。 f は 0.15%以下

2.3 UO_2 燃料マトリックス中に配置される軽水球

ランダム充填で実現できる充填率には上限がある (65%程度)²⁾ ことから、燃料がこれ以上の充填率で配置された状態を確率論的幾何形状モデルで取り扱うために、燃料球と軽水マトリックスを逆転して燃料マトリックス中に軽水球がランダムに配置するモデルによる解析が想定される。そこで、STG 球が軽水でその充填率が 30%と 63.3%の場合の振る舞いを検討する。この時、減速材対燃料体積比 V_M/V_F はそれぞれ、0.429、1.72 となる。図 2.13 に、無限増倍率 k_∞ と 4 因子の軽水球径依存性を、均質媒質の結果と共に示す。STG 球が燃料である図 2.2 と比較

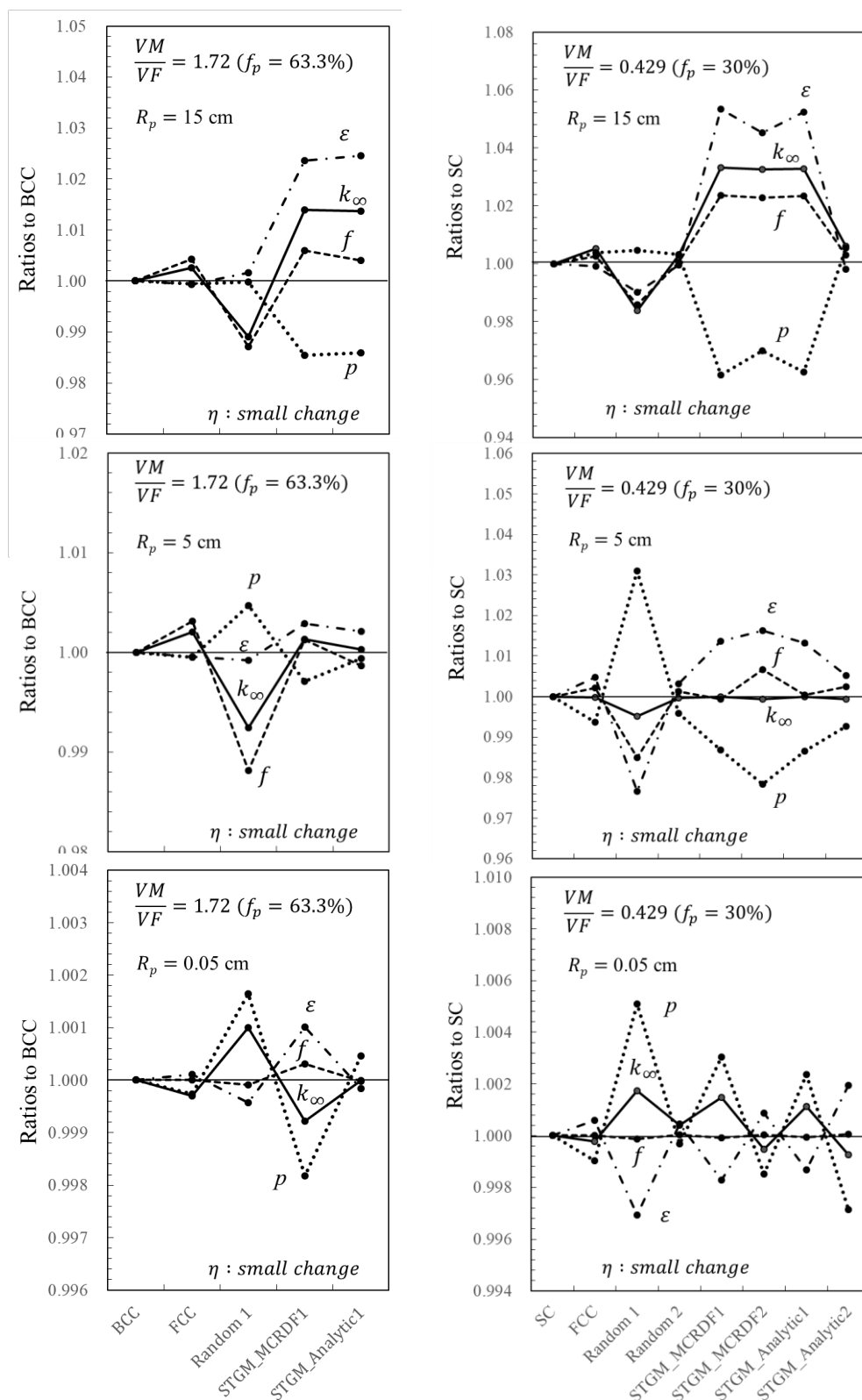


(1) 充填率 63.3% (軽水球)

(2) 充填率 30% (軽水球)

図 2.13 無限増倍率 k_∞ と 4 因子 (燃料マトリックス中の軽水球、基準規則配列格子)

すると、 V_M/V_F が近い場合にはそれほど大きくは異なっていない(図 2.2(2)と図 2.13(1)、図 2.2(3)と図 2.13(2))。ただし、STG 球径が大きい所の変化が大きいように見える。



(1) 充填率 63.3% (軽水球)

(2) 充填率 30% (軽水球)

図 2.14 異なる幾何形状モデルによる無限増倍率と 4 因子の比較 (軽水球)

異なる幾何形状モデル（充填率 63.3%で 5 モデル、30%で 8 モデル）による無限増倍率 k_{∞} と 4 因子を、基準配列格子を基準にして、図 2.14 に示す。 k_{∞} の統計誤差については、 $R_p = 15 \text{ cm}$ で 0.022 %～0.027 %、 $R_p = 5 \text{ cm}$ で 0.013%、 $R_p = 0.05 \text{ cm}$ ではランダム配置で～0.03%、他は 0.015%、各因子は、 $R_p = 0.05 \text{ cm}$ のランダム配置で約 0.2%、他は 0.1%程度以下であった。本図より、以下のことが分かる。

- ・STG 球が燃料の場合と比較して、STG 球径が大きい場合の幾何形状モデルの違いによる差異は小さいが、高速核分裂因子 ε の変化が大きい等、4 因子への影響は異なる。
- ・軽水球径が大きい場合（ $R_p = 15 \text{ cm}$ ）、確率論的幾何形状モデル（STGM-MCRDF1、STGM-Analytic1）は Random1 の k_{∞} を数%過大評価する。これは主に、高速核分裂因子 ε と熱中性子利用率 f の過大評価による。共鳴を逃れる確率 p は過小評価している。Random2 に対しては、STGM-MCRDF2 は Random1 の場合と同様に k_{∞} を過大評価しているが、STGM-Analytic2 は STG 球が燃料の場合と同様に k_{∞} と 4 因子を概ね再現している。
- ・軽水球径が小さくなると、充填率 63.3%（ $V_M/V_F = 1.72$ ）では、まず ε の変化が小さくなり、続いて f がほとんど変化しなくなる。結果として、 $R_p = 0.05 \text{ cm}$ において、確率論的幾何形状モデル（STGM-MCRDF1、STGM-Analytic1）は、 p の過小評価のために Random1 の k_{∞} を 0.1 %～0.2 %過小評価している。一方、充填率 30%（ $V_M/V_F = 0.429$ ）では、 f の変化が小さくなるとともに、 ε の過大評価と p の過小評価が打ち消しあって、 $R_p = 5 \text{ cm}$ で 0.5%、 $R_p = 0.05 \text{ cm}$ では 0.1%程度で一致している。なお、 $R_p = 0.05 \text{ cm}$ における 4 因子については統計誤差が大きいことに注意を要する。

軽水球径が大きい（ $R_p = 15 \text{ cm}$ ）場合について、表 2.11 と表 2.12 で、 f 、 p 、 ε とこれらに關係する巨視的断面積 Σ 、中性子束 ϕ をモデル間で比較する。まず、熱群（第 2 群）だけで決まる f に着目する。STG 球が燃料の場合には、燃料領域の巨視的吸収断面積 $\Sigma_{a2,F}$ と中性子束 $\phi_{2,F}$ はともに、Random1 < 規則配置 < STGM の順で STGM が最も大きく、軽水領域では逆に Random1 > 規則配置 > STGM の順で STGM が最小であったが、STG 球が軽水になると、

$$\Sigma_{a2,F} : \text{Random1} > \text{規則配置 (SC,BCC > FCC)} > \text{STGM}$$

$$\phi_{2,F} : \text{Random1} < \text{規則配置 (SC,BCC < FCC)} \leq \text{STGM}$$

$$\Sigma_{a2,M} : \text{変化は小さい}$$

$$\phi_{2,M} : \text{Random1} > \text{規則配置 (SC,BCC} \cong \text{FCC)} > \text{STGM}$$

となり、 $\Sigma_{a2,F}$ に対する順序が反転し、 $\Sigma_{a2,M}$ はほとんど変化しなくなっている。その結果、燃料領域の吸収は $\Sigma_{a2,F}$ と $\phi_{2,F}$ の変化が打ち消しあってほとんど変わらず、軽水領域では中性子束が減少し吸収量が減少することによって、STGM は Random1 と比較して f を過大評価している。

共鳴を逃れる確率 p は、

$$p = \frac{\text{熱群の吸収}}{\text{全吸収}} = \frac{(\Sigma_{a2,F}\phi_{2,F} + \Sigma_{a2,M}\phi_{2,M})\Delta U_2}{\text{全吸収}} \cong 1 - \Sigma_{a1,F}\phi_{1,F}\Delta U_1$$

ここで、 ΔU_1 と ΔU_2 はそれぞれ、高速群（第 1 群）と熱群（第 2 群）のレサジー幅（ $\Delta U_1 = \ln(2 \times 10^7/4.5) \cong 15.3$ 、 $\Delta U_2 = \ln(4.5/10^{-5}) \cong 13.0$ ）であり、全吸収がほぼ 1.0 であること（ $(n, 2n)$ 反応等の寄与で僅かに異なる。）、軽水領域での高速群の吸収は燃料領域と比べて小さいこと

を用いた。STGM は Random1 と比較して、燃料領域の $\Sigma_{a1,F}$ と $\phi_{1,F}$ の両方を過大評価しており、その結果、燃料中での高速群の吸収が多くなり p の過小評価となっている。なお、僅かではあるが、軽水領域の $\Sigma_{a1,M}$ と $\phi_{1,M}$ は共に過小評価であり、 p の過小評価を緩和している。

高速核分裂因子 ε は、

$$\varepsilon = \frac{\text{全核分裂中性子生成}}{\text{熱群の核分裂中性子生成}} = \frac{\nu\Sigma_{f1,F}\phi_{1,F}\Delta U_1 + \nu\Sigma_{f2,F}\phi_{2,F}\Delta U_2}{\nu\Sigma_{f2,F}\phi_{2,F}\Delta U_2} = 1 + \frac{\nu\Sigma_{f1,F}\phi_{1,F}\Delta U_1}{\nu\Sigma_{f2,F}\phi_{2,F}\Delta U_2}$$

STGM は Random1 と比較して、高速群では $\nu\Sigma_{f1,F}$ 、 $\phi_{1,F}$ 共に過大評価し、熱群では $\nu\Sigma_{f2,F}$ を過小評価、 $\phi_{2,F}$ を過大評価している。その結果、燃群の核分裂中性子生成量は $\nu\Sigma_{f2,F}$ と $\phi_{2,F}$ の変化がキャンセルしてほとんど変わらず、高速群の生成量が大きくなることによって、STGM は Random1 と比較して ε を過大評価することとなっている。

以上の結果から、軽水球径が大きい場合の STGM による共鳴を逃れる確率 p の過小評価と高速核分裂因子 ε の過大評価は、ともに、燃料領域における高速群の巨視的断面積と中性子束の過大評価に起因しており、熱中性子利用率 f の過大評価は軽水領域の熱群中性子束の過小評価に依っていることが分かった。なお、熱群の燃料領域での反応率は巨視的断面積の過少評価と中性子束の過大評価がキャンセルしてほとんど変わらない。

ここで、STGM が Random1 と比較して、軽水球径が大きい場合に高速群において燃料領域の中性子束と巨視的断面積を過大評価するメカニズムを考察する。中性子は主に軽水領域（STG

表 2.11 巨視的吸収断面積と中性子束

(充填率 63.3% ($V_M/V_F = 1.72$)、 $R_p = 15$ cm、STG 球：軽水)

	BCC	FCC	Random1	STGM-MCRDF1	STGM-Analytic1
$\Sigma_{a2,F}^*$	0.2986	0.2979	0.3043	0.2942	0.2955
$\Sigma_{a2,M}^*$	0.01783	0.01783	0.01784	0.01783	0.01783
$\phi_{2,F}^{**}$	0.08928	0.08985	0.08644	0.08985	0.08937
$\phi_{2,M}^{**}$	1.850	1.843	1.867	1.814	1.819
f	0.4470	0.4489	0.4412	0.4497	0.4489
$\Sigma_{a1,F}^*$	0.01411	0.01418	0.01358	0.01389	0.01378
$\Sigma_{a1,M}^*$	0.00024	0.00024	0.00024	0.00023	0.00023
$\phi_{1,F}^{**}$	1.029	1.026	1.069	1.099	1.107
$\phi_{1,M}^{**}$	0.9090	0.9099	0.9064	0.8774	0.8751
p	0.7750	0.7745	0.7748	0.7637	0.7640
$\nu\Sigma_{f1,F}^*$	0.01633	0.01639	0.01560	0.01641	0.01634
$\nu\Sigma_{f2,F}^*$	0.5650	0.5636	0.5761	0.5563	0.5588
ε	1.391	1.391	1.394	1.424	1.426

* cm^{-1}

** 体積積分値（単位レサジー当たり）

断面積と中性子束の統計誤差は、0.08%以下

表 2.12 巨視的吸収断面積と中性子束
(充填率 30% ($V_M/V_F = 0.429$)、 $R_p = 15$ cm、STG 球 : 軽水)

	SC	FCC	Random1	Random2	STGM- MCRDF1	STGM- MCRDF2	STGM- Analytic1	STGM- Analytic2
$\Sigma_{a2,F}^*$	0.2486	0.2459	0.2622	0.2466	0.2316	0.2284	0.2311	0.2450
$\Sigma_{a2,M}^*$	0.01781	0.01782	0.01782	0.01782	0.01781	0.01781	0.01781	0.01782
$\phi_{2,F}^{**}$	0.07749	0.07892	0.07277	0.07842	0.08197	0.08373	0.08221	0.07935
$\phi_{2,M}^{**}$	1.236	1.238	1.257	1.239	1.165	1.175	1.166	1.240
f	0.4668	0.4680	0.4601	0.4669	0.4778	0.4774	0.4777	0.4681
$\Sigma_{a1,F}^*$	0.01044	0.01047	0.01042	0.01047	0.01053	0.01070	0.01055	0.01046
$\Sigma_{a1,M}^*$	0.00023	0.00023	0.00023	0.00023	0.00022	0.00022	0.00022	0.00023
$\phi_{1,F}^{**}$	2.896	2.879	2.887	2.879	3.005	2.928	2.996	2.874
$\phi_{1,M}^{**}$	0.5785	0.5771	0.5933	0.5783	0.5245	0.5377	0.5263	0.5775
p	0.5361	0.5381	0.5385	0.5378	0.5154	0.5200	0.5161	0.5390
$\nu\Sigma_{f1,F}^*$	0.01054	0.01066	0.01030	0.01063	0.01104	0.01124	0.01106	0.01067
$\nu\Sigma_{f2,F}^*$	0.4664	0.4609	0.4930	0.4623	0.4327	0.4265	0.4318	0.4591
ε	1.993	1.992	1.975	1.993	2.100	2.084	2.098	1.990

* cm^{-1}

** 体積積分値 (単位レサジー当たり)

断面積と中性子束の統計誤差は、0.08%以下

球) 中で熱群へ減速され、燃料領域 (マトリックス領域) に入射して核分裂を起こす。燃料領域の平均コード長 ($R_p = 15$ cm の場合、充填率 63.3% で約 11.6 cm、充填率 30% で約 46.6 cm) は燃料中の高速群中性子平均自由行程 (約 2.6 cm) と比較して十分長く、核分裂源は軽水球との境界面近くに分布していると考えることができる。Random1 では、幾何形状が陽にモデル化されているために、この核分裂源分布 (境界近くに分布) がそのまま次世代中性子の追跡に使用される。一方、STGM では、次世代中性子の追跡において、マトリックス中の核分裂源については空間座標とそれがマトリックス領域であるとの情報しか利用することができない⁶。そして、上記の平均コード長を平均値として持つ⁷NND2 を用いて、近接する軽水球を配置する。そのため、核分裂源が軽水球との境界に近いことは考慮されず、燃料領域での散乱が継続する。その結果、STGM では Random1 と比較して、核分裂中性子が軽水領域に漏れ出る確率が低くなり、燃料中の MeV 領域の中性子束が高くなる。数 keV 以下では、軽水領域で減速して燃料領域に入射する中性子の割合が高くなるが、これらの中性子に対しても燃料領域での散乱後 (散

⁶ STG 球が燃料の場合には、燃料球内の核分裂源について、燃料球の STGM 領域内での配置と燃料球内での核分裂源空間位置の情報が次世代中性子の追跡で用いられる。

⁷ 上記平均コード長は NND1 の平均値であり、厳密には NND2 のものとは異なるが差異は小さい。

乱位置は境界に近いと考えられる。)に近接する軽水球を NND2 を用いて再配置するために軽水領域に漏れ出る確率は低くなり、燃料領域の中性子束は高くなる。軽水領域では反対に、全高速群エネルギー領域で中性子束は低くなる。巨視的断面積の過大評価については、中性子束の過大評価の大きい核分裂中性子エネルギー領域(中性子エネルギースペクトルは STGM の方が硬い)で、U-238 核分裂のために吸収断面積が大きいことによっている。なお、共鳴エネルギー領域では、STGM の方が、燃料領域の衝突数が多いために自己遮へい効果が大きく、巨視的断面積は小さく、他のエネルギー領域では STGM と Random1 の差異は小さい。

熱群では、高速群と同じ理由で、STGM は燃料領域の中性子束を過大評価し、軽水領域の中性子束を過小評価する(燃料領域の熱群中性子平均自由行程は約 1.5 cm)。巨視的断面積の過小評価については、STGM では、燃料領域での散乱の継続(衝突が散乱である確率: 約 0.6)で減速しにくく、最終的にそこで吸収されるために、燃料領域の中性子エネルギースペクトルが硬化することによると考えられる。

3. 有限体系：使用済み燃料直接処分の臨界安全性評価への適用

使用済み燃料直接処分では、燃料集合体を金属キャニスターに入れて永久的に保管することが想定されている。臨界安全の観点から、保管期間中に燃料集合体が破損し燃料片が散逸した場合の、臨界性評価が必要である。臨界性評価に際して、モンテカルロコード等の計算コードを利用するが、そのためには燃料片がある有限体系に散逸（分布）した体系をモデル化する必要がある。このモデル化には幾つか方法がある。想定されるモデル化手法としては、燃料片を有限体系内で均一にスミアする手法、燃料片を規則正しく並べる手法、燃料片をランダムに配置する手法が考えられる。さらに、MVP の確率論的幾何形状モデル（STGM）の利用も考えられ、その簡便さと使い勝手の良さから今後の利用拡大が想定される。

MVP の STGM は、高温ガス炉などで使用される被覆粒子燃料の不規則配列球状燃料の非均質効果を連続エネルギーモンテカルロ法輸送計算で精度良く取り扱うために開発された手法であり、高温工学試験研究炉（HTTR）の解析^{11)~13)}を通してその妥当性が検証されているが、他の体系では十分には検証されていない。ここでは、使用済み燃料集合体が保管期間中に破損し、燃料ペレットが軽水中に散逸した状況を対象として、他のモデル化手法と比較することによって、STGM による解析の特徴を明らかにする。

3.1 破損燃料と幾何形状モデル

燃料集合体が 1 体破損し、その燃料ペレットの約 1/3 が半径 40 cm の軽水球の内部に散逸している仮想的な状況を考える。円柱形のペレットは体積が等価な球（半径 0.5 cm）で近似し、その総数は 32,200 個として、全ての燃料球は完全に半径 40 cm の軽水球の内部に含まれるとした。この時、燃料ペレットの軽水球中の平均充填率は 6.29 % である。全ての燃料球が完全に半径 40 cm の軽水球に含まれている状況は、STG 球（今は燃料球）が STGM 領域（STGM によって幾何形状がモデル化されている領域、今は半径 40 cm の球の内側領域）の境界と交わって配置される場合のある MVP の STGM とは異なるが、有限領域（今は半径 40 cm の球内部）に含まれる燃料の総量を明確に定義するために採用した⁸⁾。

燃料として、4.9 wt% UO_2 新燃料と、燃焼度 45.2 GWd/t、クーリング期間 20 年の使用済み燃料を想定した。新燃料の組成と燃焼条件は OECD/NEA 国際ベンチマークの仕様²⁰⁾に従い、MVP-BURN²¹⁾と JENDL-4.0¹⁹⁾を用いた燃焼計算によって使用済み燃料の核種組成を決定した。使用済み燃料と新燃料の核種組成を表 3.1 に示す。表 3.2 には軽水の原子数密度を示した。なお、MVP-BURN による燃焼計算の詳細は参考文献 22)に与えられている。

⁸⁾ 第 2 章では燃料球を立方体内に陽に定義する Random1 と Random2 において、立方体表面の境界条件として周期境界を仮定することによって、燃料量が不明確になることを回避した。また、STGM では STGM 領域に含まれる燃料の総量は（STGM 領域の体積）×充填率で明確に定まる。

表 3.1 燃料の原子数密度 $(/(\text{barn}\cdot\text{cm}))$

核種	使用済み燃料	新燃料	核種	使用済み燃料	新燃料
U-234	5.688×10^{-6}	8.5649×10^{-6}	Cs-133	7.026×10^{-5}	-
U-235	1.867×10^{-4}	1.1221×10^{-3}	Cs-134	9.074×10^{-9}	-
U-236	1.534×10^{-4}	-	Cs-137	4.629×10^{-5}	-
U-238	2.081×10^{-2}	2.1495×10^{-2}	Ce-144	2.280×10^{-13}	-
Np-237	1.451×10^{-5}	-	Nd-143	4.228×10^{-5}	-
Pu-238	6.378×10^{-6}	-	Nd-145	3.891×10^{-5}	-
Pu-239	1.033×10^{-4}	-	Nd-148	2.107×10^{-5}	-
Pu-240	6.183×10^{-5}	-	Sm-147	1.477×10^{-5}	-
Pu-241	1.080×10^{-5}	-	Sm-149	9.950×10^{-8}	-
Pu-242	1.705×10^{-5}	-	Sm-150	1.550×10^{-5}	-
Am-241	1.855×10^{-5}	-	Sm-151	3.600×10^{-7}	-
Am-243	3.427×10^{-6}	-	Sm-152	5.414×10^{-6}	-
Cm-244	6.637×10^{-7}	-	Eu-153	6.131×10^{-6}	-
Sr-90	3.163×10^{-5}	-	Eu-154	2.334×10^{-7}	-
Mo-95	6.815×10^{-5}	-	Eu-155	2.293×10^{-8}	-
Tc-99	6.746×10^{-5}	-	Gd-155	4.044×10^{-7}	-
Ru-101	6.480×10^{-5}	-	Gd-156	5.387×10^{-6}	-
Rh-103	3.443×10^{-5}	-	Gd-157	3.522×10^{-9}	-
Ag-109	5.196×10^{-6}	-	Gd-158	8.608×10^{-7}	-
I-129	9.213×10^{-6}	-	O-16	4.525×10^{-2}	4.5252×10^{-2}
Xe-131	2.558×10^{-5}	-			

表 3.2 軽水の原子数密度

核種	原子数密度 $(/(\text{barn}\cdot\text{cm}))$
H-1	4.932×10^{-2}
O-16	2.466×10^{-2}

以下の 4 つの幾何形状モデルを比較する。

確率論的幾何形状モデル (STGM)

半径 40 cm の軽水球の内部を STGM 領域として、軽水マトリックス中に半径 0.5 cm の燃料球を充填率 6.29 % の最近接球分布 (NND) に従って配置する。ここでは、NND として、簡便で

あり多くのユーザが利用すると考えられる統計的一様分布に基づく NND 解析式を用いる。これは、第 2 章では STGM-Analytic1 と略称していた幾何形状モデルである。

ランダムモデル (Random)

半径 40 cm の軽水球内部に 32,200 個の燃料球がランダムに配置されている。燃料球の平均充填率は 6.29 % である。なお、ランダム配置は Microsoft-Excel を用いて決定した。

スミアモデル (Smeared)

半径 40 cm の球内を軽水と 32,200 個の燃料球が均質一様に混合した媒質が満たしている。充填率は 6.29 % に相当する。

格子モデル (Lattice)

3 次元の正方格子表現と反射境界条件を用いて、図 3.1 に示すように、軽水球の 1/8 領域に 4,025 個の燃料球を規則的に配置している。全ての燃料球が半径 40 cm の球内に含まれるように、格子ピッチは 2.0 cm とした。その結果、半径 40 cm の軽水球内の平均燃料球充填率は 6.29 % であるが、周辺部に軽水のみセルが存在するために格子セル内の充填率は 6.55 % となっている。

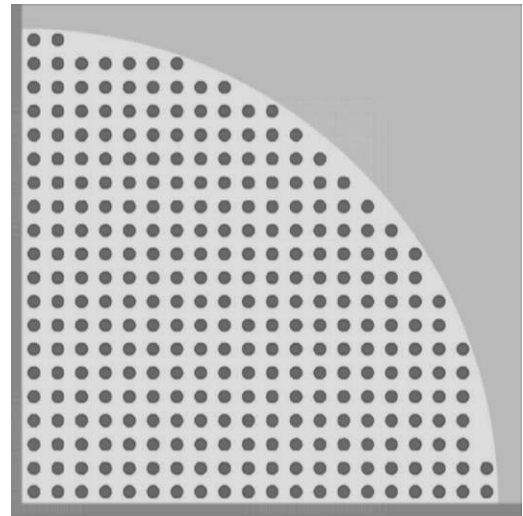


図 3.1 格子モデル (Lattice)

3.2 計算条件

MVP-II¹⁰⁾ と JENDL-4.0 を用いて、上記 4 つの幾何形状モデルによる計算を実施した。ランダムモデルでは、2,000 万ヒストリ (10 万ヒストリ×200 バッチ)、他のモデルでは 1,000 万ヒストリ (10 万ヒストリ×100 バッチ) の計算を行った。核分裂源が収束するまでの計算として、全てのモデルで 20 バッチの計算を行っている (上述のヒストリ数には含まれない)。

ランダムモデルでは、異なる 10 個のランダム配置を求めて、それぞれの配置で MVP 計算を行い、その結果から、次式によって実効増倍率と標準偏差を評価した。

$$\bar{k} = \frac{\sum_{i=1}^n k_i}{\sum_{i=1}^n 1},$$

$$\bar{\sigma} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n \frac{(k_i - \bar{k})^2}{\sigma_i^2}}{(n-1) \sum_{i=1}^n \frac{1}{\sigma_i^2}}},$$

ここで、 $n = 10$ である。

3.3 計算結果と議論

使用済み燃料と新燃料の場合について、4つの幾何形状モデルによる実効増倍率 k_{eff} を、それぞれ、図 3.2 と図 3.3 に示す。 k_{eff} の絶対値は使用済み燃料の場合には 1.0 をかなり下回っている。そして、スミアモデルの結果は、使用済み燃料の場合には最小で、新燃料では最大となっている。表 3.3 に、MVP 無限格子計算によって算出した無限増倍率 k_{∞} と 4 因子について、

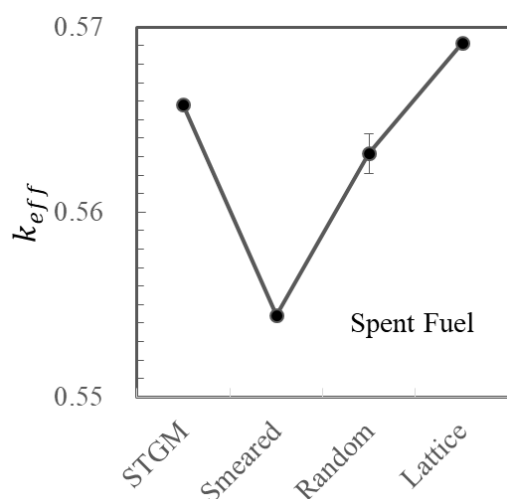


図 3.2 使用済み燃料の場合の実効増倍率

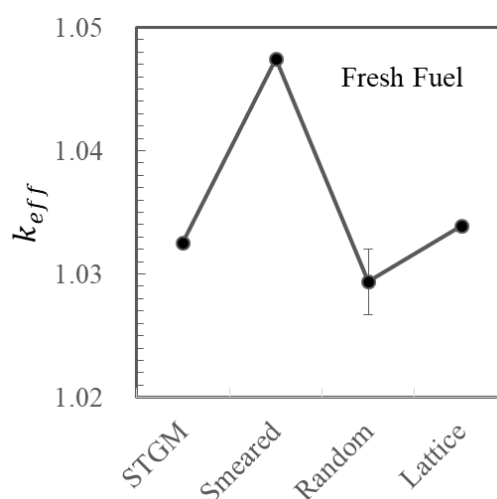


図 3.3 新燃料の場合の実効増倍率

表 3.3 無限増倍率と 4 因子

計算モデル	k_{∞}	ϵ	p	f	η
(1) 使用済み燃料					
格子モデル ($f_p = 6.55\%$)	0.738	1.047	0.933	0.519	1.456
格子モデル ($f_p = 6.29\%$)	0.727	1.046	0.935	0.509	1.457
スミアモデル ($f_p = 6.29\%$)	0.716	1.039	0.879	0.552	1.421
(2) 新燃料					
格子モデル ($f_p = 6.55\%$)	1.326	1.043	0.929	0.711	1.923
格子モデル ($f_p = 6.29\%$)	1.312	1.042	0.932	0.702	1.923
スミアモデル ($f_p = 6.29\%$)	1.336	1.038	0.875	0.765	1.923
(3) 使用済み燃料／新燃料					
格子モデル ($f_p = 6.55\%$)	0.556	1.004	1.004	0.729	0.757
格子モデル ($f_p = 6.29\%$)	0.554	1.004	1.004	0.725	0.758
スミアモデル ($f_p = 6.29\%$)	0.536	1.000	1.004	0.722	0.739

格子モデルとスミアモデルの比較を示す。本表では、格子モデルについては、格子セル内の充填率 f_p がスミアモデルに対応した 6.29 %と有限体系格子モデルの格子セルに対応した 6.55 %の場合の比較も示した。なお、4 因子の計算では重核 (U-234～Am-244) を燃料核種とし、高速群と熱群の境界を 4.5 eV とした。新燃料の場合には、スミアモデルの熱中性子利用率 f が格子モデルより大きく、その結果、スミアモデルの k_∞ が大きくなっている。ここで対象としている充填率では体系は大きく過減速となっており、 UO_2 燃料軽水減速体系においては最適減速からさらに減速が大きくなった場合、格子モデル (非均質モデル) の方がスミアモデル (均質モデル) と比較して、 f の減少率が大きく、共鳴を逃れる確率 p の増加率が小さいために、非均質効果が正から負に反転することが知られており²³⁾、今の結果はこれに対応している。一方、使用済み燃料の場合には、図 3.4 に示したように、1 eV 付近の Pu-240 の大きな吸収共鳴が熱群に含まれ (その吸収量はスミアモデルの場合、燃料核種による吸収の約 10 %)、その共鳴自己遮へい効果のため格子モデルにおける燃料核種 (特に Pu-240) による吸収が減少することによって、 f のスミアモデルからの減少割合が小さくなる (新燃料: -8.2 %、使用済み燃料: -7.8 %) とともに、再生率 η がスミアモデルより大きくなる (新燃料: ~0 %, 使用済み燃料: +2.5 %)。さらに、燃焼に伴い生成された重核や核分裂生成物核種の自己遮へい効果のために、 p も大きくなる。これらの効果によって、格子モデルによる k_∞ が大きくなっている。

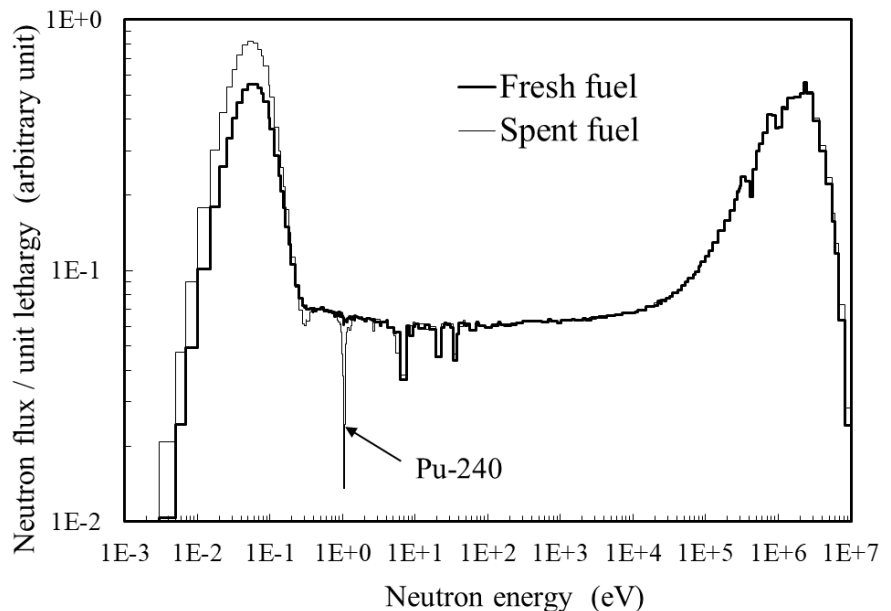


図 3.4 燃料中の中性子エネルギースペクトル (格子モデル)

一方、確率論的幾何形状モデル、ランダムモデル及び格子モデルの結果の大小関係は両燃料 (図 3.2、図 3.3) で同じであり、格子モデルが最も大きく、確率論的幾何形状モデル、ランダムモデルの順に小さい結果となっている。ただし、格子モデルでは、燃料球の平均充填率は保存しているものの、インポートランスの高い軽水球の中心領域で充填率が高なっていることに注意を要する。過減速状態では、充填率が高くなる (V_M/V_F が小さくなる。) と、表 3.3 に示すように k_∞ は大きくなる。充填率の k_∞ への効果として、 $k_\infty(f_p = 6.29\%)/k_\infty(f_p = 6.55\%) \approx 0.99$ を考慮すると、単純に格子モデルが大きな k_{eff} を与えるとは言えない。さらに、格子セルが $f_p = 6.29\%$ に対応した格子モデルでは、全ての燃料球を半径 40 cm の球内に配置することができず、解析モデル作成に困難を生じる。一方、確率論的幾何形状モデルの結果はランダムモデルの結果を過大評価しており、安全側の評価となっている。

以上の検討により、スミアモデルは、燃料球の充填率が低く過減速となっている場合には、

ランダムモデルと比較して、新燃料では過大評価となるが、使用済み燃料では過小評価となるので、使用に当たっては注意を要する。一方、確率論的幾何形状モデルは広い範囲で過大評価となり、安全側の評価となると期待できる。

4. まとめ

MVP/GMVP の確率論的幾何形状モデル (STGM) を軽水体系に適用した場合の特性を評価するために、連続エネルギーモンテカルロコード MVP を用いて、無限体系におけるパラメトリック・スタディと単純有限体系における使用済み燃料燃料直接処分 of 臨界安全解析を実施した。

無限体系におけるパラメトリック・スタディの結果、以下のことが分かった。

- STGM は UO_2 燃料球の充填率 (6.5%~63.3%) に依らず、燃料球径が大きくなると熱中性子利用率 f を過大評価し、その結果、無限増倍率 k_∞ を過大評価する。この結果は、使用する最近接球分布 (NND、モンテカルロ法 3 次元剛体球空間分布計算コード MCRDF による NND と統計的一様分布に基づく NND 解析式) には依存しない。この過大評価は、中性子パスの始点によって異なる分布の平均である NND を用いて燃料球を確率論的に配置するために個々の中性子の状況 (燃料球分布の粗密と軽水領域の大きさ) が考慮されず、軽水の塊中での散乱が継続する効果を取り入れることができないことに起因すると推定された。
- 軽水に天然ボロンが混入 (1,000 ppm) された場合は、ボロンが含まれない場合と同様の傾向を示したが、燃料球径が大きい時の STGM による k_∞ と f の過大評価の度合いはより大きい。
- UO_2 燃料マトリクス中に軽水球が配置された体系では、軽水球径が大きい場合の STGM による過大評価の度合いは比較的小さい (数%)。

単純有限体系における使用済み燃料燃料直接処分の臨界安全解析では、4 つの幾何形状モデル: STGM、陽に燃料球をランダムに配置したモデル (ランダムモデル)、燃料と軽水を均質に混合したモデル (スミアモデル) と格子モデルを比較した結果、以下のことが分かった。

- STGM は、 k_∞ を過大評価し、広い範囲で安全側の評価となることが期待できる。
- スミアモデルは、本研究のように燃料の充填率が低く過減速となっている場合には、新燃料ではランダムモデルと比較して過大評価となるが、使用済み燃料の場合には過小評価するので、使用に当たっては注意を要する。

参考文献

- 1) I. Murata, T. Mori and M. Nakagawa: “Continuous Energy Monte Carlo Calculations of Randomly Distributed Spherical Fuels in High-Temperature Gas-Cooled Reactors Based on a Statistical Geometry Model”, *Nucl. Sci. Eng.*, vol.123, no.1 (1996) pp.96-109.
- 2) 村田勲、森貴正、中川正幸 他: “確率的形状モデルを用いた連続エネルギーモンテカルロ法による不規則配列球状燃料体系の解析”, *JAERI-Research* 96-015 (1996) 44p.
- 3) 村田勲、森貴正、中川正幸 他: “モンテカルロ法を用いた充填模擬法による 3 次元剛体球空間分布計算コード MCRDF”, *JAERI-Data/Code* 96-016 (1996) 79p.
- 4) T.J. Donovan, T.M. Sutton and Y. Danon: “Implementation of Chord Length Sampling for Transport through Binary Statistical Mixtures”, *Proceedings of Nuclear Mathematical and Computational Science*, Gatlinburg, Tennessee, USA (2003).
- 5) W. Ji and W.R. Martin: “Application of Chord Length Sampling to VHTR Unit Cell Analysis”, *Proceedings of Int. Conf. on the Physics of Reactors “Nuclear Power: A Sustainable Resource”*, Casino-Kursaal Conference Center, Interlaken, Switzerland (2008).
- 6) C. Liang, W. Ji and F.B. Brown: “Chord length sampling method for analyzing stochastic distribution of fuel particles in continuous energy simulations”, *Ann. Nucl. Energy*, vol.53 (2013) pp.140-146.
- 7) C. Liang and W. Ji: “A novel extension of chord length sampling method for TRISO-type fueled reactor applications”, *Ann. Nucl. Energy*, vol.71 (2014) pp.440-450.
- 8) S. Liu, D. She, J. Liang et al.: “Development of random geometry capability in RMC code for stochastic media analysis”, *Ann. Nucl. Energy*, vol.85 (2015) pp.903-908.
- 9) J. Leppänen: “Serpent-a Continuous-energy Monte Carlo Reactor Physics Burnup Calculation Code, User’s Manual of Serpent”, *VTT Technical Research Centre of Finland* (2015).
- 10) Y. Nagaya, K. Okumura, T. Mori et al.: “MVP/GMVP II: General Purpose Monte Carlo Codes for Neutron and Photon Transport Calculations based on Continuous Energy and Multigroup Methods,” *JAERI* 1348 (2005) 388p.
- 11) T. Mori, K. Okumura, Y. Nagaya and H. Ando: “Monte Carlo Analysis of HTTR with the MVP Statistical Geometry Model”, *Trans. Am. Nucl. Soc.*, vol.83 (2000) pp.283-284.
- 12) N. Fujimoto, K. Yamashita, N. Nojiri, et al.: “Annular Core Experiments in HTTR’s Start-Up Core Physics Tests”, *Nucl. Sci. Eng.*, vol.150, no.3 (2005) pp.310-321.
- 13) M. Goto, N. Nojiri and S. Shimakawa: “Neutronics Calculations of HTTR with Several Nuclear Data Libraries”, *J. Nucl. Sci. Technol.*, vol.43, no.10 (2006) pp.1237-1244.
- 14) T. Yokoyama, T. Fujishiro and H. Ninokata: “Study on Particle and Absorber on Multiplication Factors of Debris Beds with MVP”, *Trans. Am. Nucl. Soc.*, vol.105 (2011) pp.535-536.
- 15) T. Koide, T. Endo, A. Yamamoto et al.: “Impact of Nearest Neighbor Distribution of Fuel Particle on Neutronics Characteristics in Statistical Geometry Model”, *Proceedings of Int. Conf. on Physics of Reactors (PHYSOR 2014)*, Kyoto, Japan (2014).

- 16) 高木直行：“研究活動⑦デブリ取出時の未臨界確保方策”，available from <http://www.lane.iir.titech.ac.jp/ared/Library/20160122-takagi.pdf> (accessed on Nov. 30, 2018).
- 17) T. Koide, T. Endo and A. Yamamoto: “Development of New Statistical Geometry Model using the Delta-tracking Method”, Proceedings of the Reactor Physics Asia (RPHA15), Jeju, Korea (2015).
- 18) Y. Nagaya, K. Okumura, T. Sakurai and T. Mori: “MVP/GMVP Version 3 : General Purpose Monte Carlo Codes for Neutron and Photon Transport Calculations Based on Continuous Energy and Multigroup Methods,” JAEA-Data/Code 2016-018 (2017) 421p.
- 19) K. Shibata, O. Iwamoto, T. Nakagawa et al.: “JENDL-4.0: A New Library for Nuclear Science and Engineering”, *J. Nucl. Sci. Technol.*, vol.48, no.1 (2011) pp.1-30.
- 20) K. Suyama, Y. Uchida, T. Ito et al.: “OECD/NEA Burnup Credit Criticality Benchmark Phase IIIC,” available on URL:<https://www.oecd-neo.org/science/wpncs/buc/specifications/> (accessed on Nov. 30, 2018).
- 21) K. Okumura, T. Mori, N. Nakagawa et al.: “Validation of a continuous-energy Monte Carlo burn-up code MVP-BURN and its application to analysis of post irradiation experiment”, *J. Nucl. Sci. Technol.*, vol.37, no.2 (2000) pp.128-138.
- 22) K. Kojima and K. Okumura: “Benchmark Calculation with MOSRA-SRAC for Burnup of a BWR Fuel Assembly”, Proceedings Int. Conf. on Physics of Reactors (PHYSOR 2014), Kyoto, Japan (2014).
- 23) JENDL 委員会リアクター積分テストワーキンググループ：“JENDL 開発のための軽水炉ベンチマークに関するデータ集の整備”，JAEA-Data/Code 2017-006 (2017) 152p, 付録 K.

付録 A MVP/GMVP の付属プログラム MCRDF の改良と使用法

A.1 改良点と機能の追加

モンテカルロ法を用いた充填模擬法による 3 次元剛体球空間分布計算コード MCRDF は、高温ガス炉などで使用される被覆粒子燃料の不規則配列球状燃料の非均質効果を連続エネルギーモンテカルロ法輸送計算で精度良く取り扱うために旧日本原子力研究所で開発された確率論的幾何形状モデルで必要となる最近接球分布（NND）を計算するために開発された。そして、MVP/GMVP 第 2 版への確率論的幾何形状モデルの導入に伴い、その付属プログラムとされた。本報告のために行った MCRDF の主な改良点と追加された機能は以下の通りである。

(1) 新たな有限体系内のランダム配置から無限体系の NND 計算法（完全周期境界条件の導入）

MCRDF は図 A.1（単純化のために 2 次元空間の場合を示す。）のように、1 辺 L の立方体の内部に中心を持つ半径 R の球を N 個配置（図中グレイの球）し、この立方体（基準立方体と呼ぶ）内の配置が立方体の外側でも周期的に無限に繰り返されている状況を考える（周期境界条件）。この時、球の充填率 f_p は、

$$f_p = \frac{\frac{4\pi}{3}R^3N}{L^3}$$

である。ただし、MCRDF は球の半径 R を 0.5 cm として、球の個数 N と充填率 f_p から立方体の 1 辺の長さ L を決めている。なお、重ならない球のランダム配置の求め方は参考文献に示されている。

MCRDF はこの球の配置に対して 3 種類の最近接球分布：

- NND1：球からマトリックス（球間物質）領域に出た飛行粒子に対する NND、
- NND2：マトリックス（球間物質）領域で散乱した飛行粒子に対する NND、
- NND3：確率論的幾何形状モデルで表現される領域にその境界から入った飛行粒子に対する NND

をモンテカルロ法によって計算する。モンテカルロ法に

よる計算では、多数のパスについて、①パスの始点と方向の一樣乱数を用いた決定、②そのパスが球に入射する点までの距離の計算を行い、その結果から球に入射するまでの距離の分布を求める。3 種類の NND はパスの始点が変わるだけなので、ここでは、NND1 を例に改良点を説明する。従来の MCRDF は、 n 番目のパスに対して、

- ① 基準立方体内の球から等確率で 1 つの球（図 A.2 中の黒丸）を、その球面上の 1 点を一様分布からサンプリングし、この点をパスの始点とする。パスの方向は、半径ベクトル（球の中心から球面上の点に向かうベクトル）とパスの方向のなす角の余弦 μ を確率分布

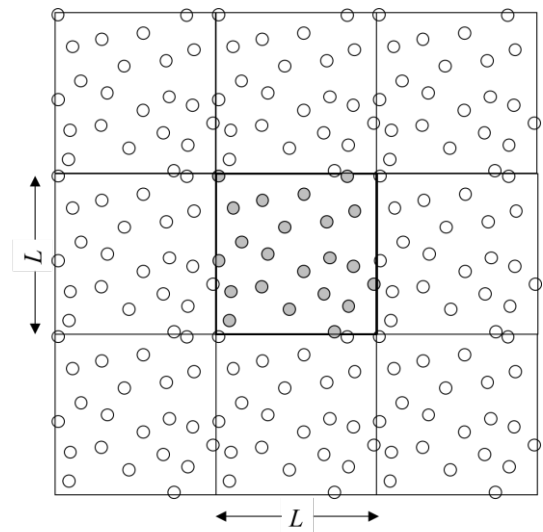


図 A.1 球の配置（2 次元の例）

$P(\mu)d\mu = 2\mu d\mu$ ($0 \leq \mu \leq 1$)から、方位角 φ を一様分布 ($0 \leq \varphi \leq 2\pi$) から決定する。すなわち、等方粒子束を仮定している。

- ② 図 A.2 に模式的に示すように、①で選んだ球を中心とする 1 辺($L - 2R$)の立方体（図中、太い破線；細い破線は 1 辺 L の立方体を示している。）を考え、①のパスがこの立方体内で最初に球に入射する点までの距離 l を計算する。図 A.2 の矢印のようなパス（立方体内で球に入射しない。）の場合には、立方体境界までの距離（矢印の長さ） l_1 を計算し、②'に進む。

- ②' 基準立方体内（ここでは境界からの距離が R 以下の領域（境界領域）は除く）のマトリックス領域内の 1 点（一様分布からサンプリング）を始点とする等方的なパスが基準立方体内（境界領域を除く）で球に入射する点までの距離 l を求める。入射しない場合は基準立方体（境界領域を除く）境界までの距離 l_{k+1} を計算し、球に入射するまで、②'を繰り返す。

を実行する。そして、②' を K 回繰り返すことによって球に入射した場合、球に入射する点までのパスの長さ r_n は次式で得られる（ $K = 0$ の場合を含む。）。

$$r_n = \sum_{k=1}^K l_k + l.$$

すなわち、MCRDF 旧版は NND の計算において、球がランダムに配置されており、かつパスがランダムにサンプリングされていることから、始点からある程度以上（ $\geq \sim L/2$ ）離れたパスは当初の始点と方向とは独立に再サンプリングしていた。一方、新版は、周期境界条件によって無限空間内に配置された球の分布を対象として、当初のパスに対して球に入射する点までの距離を計算する（この手順をここでは完全周期境界条件と呼ぶ）。具体的には、上述の②'において、図 A.3 に示すように、パス（矢印）とパスと球の交点を探す空間（太い破線の立方体）を、周期境界条件を考慮して基準立方体内に平行移動し、矢印の終点から計算を継続し、パスが球に入射するまで②'を繰り返す。

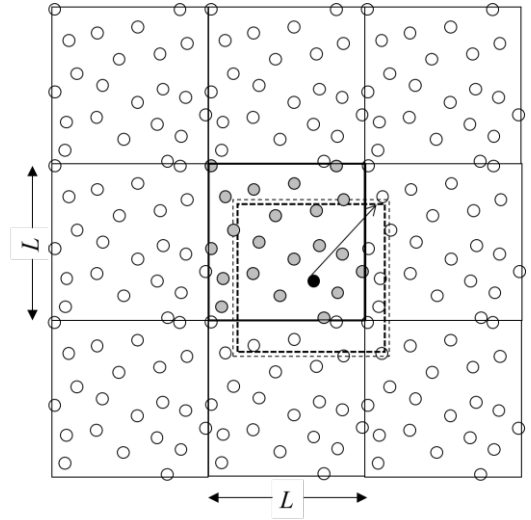


図 A.2 パスの追跡（2次元の例）

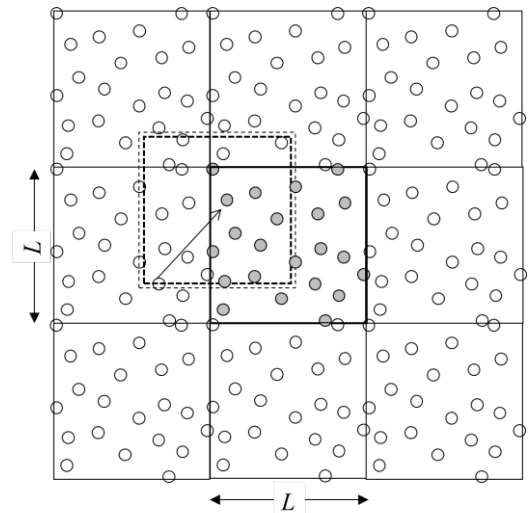


図 A.3 パスの追跡 2（2次元の例）

MCRDF は、あらかじめ距離ビン b_k ($b_0 (= 0.0) < \dots < b_k < \dots < b_{KMAX}$) を設定しており、上述の手順で計算した r_n を含むビン k

($b_{k-1} < r_n \leq b_k$ 、 $r_n = 0.0$ の時は $k = 1$) にカウントして、NND を計算する（詳細は次節参照）。図 A.4 に、充填率 30% のランダム配置及び単純立方格子配列（SC）に対して、新旧 MCRDF で求めた NND の確率密度（NND は MVP/GMVP においては積算確率を意味している。）の比較を示す。ランダム配置の場合に新旧版で差異は見られないが、規則配列である SC の場合には距離が 5 直径を越えたあたりから顕著な差異が見られる。

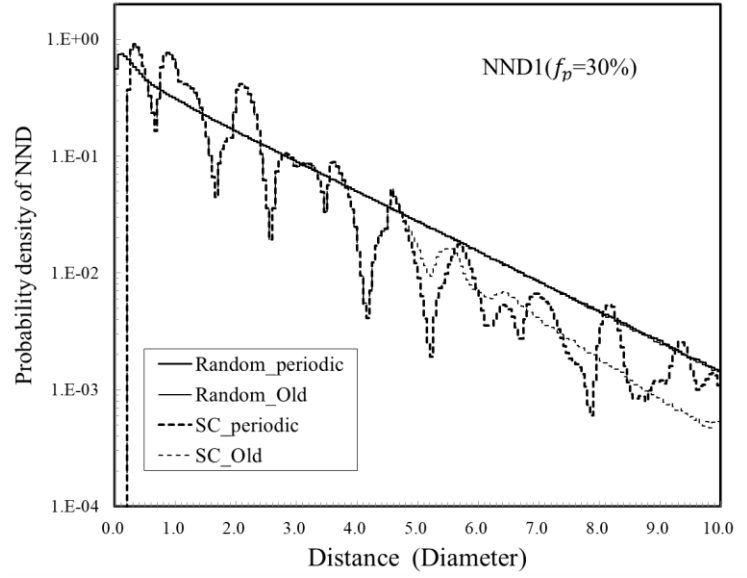


図 A.4 新旧 MCRDF による NND1 確率密度分布の比較（充填率 30% のランダム配置と単純立方格子配列（SC））

(2) 統計誤差の評価

MCRDF による NND 及びその確率密度に対して、モンテカルロ計算の標準的な方法で統計誤差を評価する機能を追加した。統計誤差としては、

- ① 配置が与えられたときの NND 確率計算（モンテカルロ法による数値積分）の統計誤差
 - ② モンテカルロ法によるランダム配置のバラつきに起因する統計誤差
- を考慮した。ただし、②を単独で評価する代わりに、①と②を合わせた誤差を評価する。

モンテカルロ法による NND 確率計算（数値積分）の統計誤差

確率計算のためのパスの総数を NMAX とし、 n 番目のパスは距離 r_n で球に入射するとする。この時、MCRDF は、任意のパスが k 番目の距離ビン ($b_{k-1} < r \leq b_k$) 内で球に入射する確率 $\bar{p}_k$ は次式（各パスからの寄与の平均）で評価している。

$$\bar{p}_k = \frac{1}{NMAX} \sum_{n=1}^{NMAX} p_{k,n}, \quad (A-1)$$

$$p_{k,n} = \begin{cases} 1 & \text{if } b_{k-1} < r_n \leq b_k \\ 0 & \text{if } r_n \leq b_{k-1} \text{ and } r_n > b_k \end{cases}$$

ただし、 $r_n = 0.0$ の時は、

$$p_{k,n} = \begin{cases} 1 & \text{for } k = 1 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (A-2)$$

従って、 $\bar{p}_k$ の分散 $\sigma^2(\bar{p}_k)$ は次式で評価することができる。

$$\sigma^2(\bar{p}_k) = \frac{1}{NMAX \cdot (NMAX - 1)} \sum_{n=1}^{NMAX} (p_{k,n} - \bar{p}_k)^2 \quad (A-3)$$

$$= \frac{1}{\text{NMAX} - 1} \left\{ \frac{1}{\text{NMAX}} \sum_{n=1}^{\text{NMAX}} (p_{k,n})^2 - \left(\frac{\sum_{n=1}^{\text{NMAX}} p_{k,n}}{\text{NMAX}} \right)^2 \right\}.$$

NND の積算確率 $\bar{P}_k$ ($r \leq b_k$ で球に入射する確率) は、次式で評価している。

$$\bar{P}_k = \sum_{i=1}^k \bar{p}_k = \frac{1}{\text{NMAX}} \sum_{n=1}^{\text{NMAX}} P_{k,n}, \quad (A-4)$$

$$P_{k,n} = \begin{cases} 1 & \text{if } r_n \leq b_k \\ 0 & \text{if } r_n > b_k \end{cases}.$$

従って、 $\bar{P}_k$ の分散 $\sigma^2(\bar{P}_k)$ は、 $\sigma^2(\bar{p}_k)$ と同様に(A-3)式で評価することができる。

MCRDF は $\bar{p}_k$ 及び $\bar{P}_k$ の統計誤差を%表示の相対標準偏差 (FSD) で出力している。

なお、NND の確率密度分布 $p(r)$ (距離 $r \sim r + dr$ で球に入射する確率が $p(r)dr$) は、

$$p(r) = \frac{\bar{p}_k}{\Delta b_k} \text{ for } b_{k-1} < r \leq b_k, \text{ where } \Delta b_k = b_k - b_{k-1} \quad (A-5)$$

とし、各距離ビン内は一様分布と考えている。従って、ビン内の積算確率は 1 次関数となる。

モンテカルロ法によるランダム配置と数値積分の統計誤差

ランダム配置と NND 数値積分のバラつきによる統計誤差は、(1)節で説明した計算を乱数を変えて複数回繰り返し、その結果のバラつきから同時に評価する。繰り返しの各計算をバッチと呼び、繰り返し数を NB、 ib 番目の繰り返しにおける k 番目の距離ビン内で球に入射する確率を $\bar{p}_k^{ib}$ とすると、NB バッチの繰り返しの結果から得られる確率の評価値 $\bar{p}_k^b$ は、

$$\bar{p}_k^b = \frac{1}{\text{NB}} \sum_{ib=1}^{\text{NB}} \bar{p}_k^{ib} = \frac{1}{\text{NB}} \sum_{ib=1}^{\text{NB}} \frac{x_k^{ib}}{\text{NMAX}} \quad (A-6)$$

となる。ここで、

$$x_k^{ib} = \sum_{n=1}^{\text{NMAX}} p_{k,n}^{ib}. \quad (A-7)$$

従って、 $\bar{p}_k^b$ の分散 $\sigma^2(\bar{p}_k^b)$ は次式で評価することができる。

$$\begin{aligned} \sigma^2(\bar{p}_k^b) &= \frac{1}{\text{NB} \cdot (\text{NB} - 1)} \sum_{ib=1}^{\text{NB}} (\bar{p}_k^{ib} - \bar{p}_k^b)^2 \\ &= \frac{1}{\text{NB} \cdot (\text{NB} - 1)} \left\{ \sum_{ib=1}^{\text{NB}} \left(\frac{x_k^{ib}}{\text{NMAX}} \right)^2 - \text{NB} \cdot \left(\sum_{ib=1}^{\text{NB}} \frac{x_k^{ib}}{\text{NB} \cdot \text{NMAX}} \right)^2 \right\} \\ &= \frac{1}{\text{NB} - 1} \cdot \frac{1}{\text{NMAX}^2} \left\{ \sum_{ib=1}^{\text{NB}} (x_k^{ib})^2 - \left(\frac{\sum_{ib=1}^{\text{NB}} x_k^{ib}}{\text{NB}} \right)^2 \right\}. \end{aligned} \quad (A-8)$$

NND の積算確率 $\bar{P}_k^b$ ($r \leq b_k$ で球に入射する確率) は、次式で評価している。

$$\bar{P}_k^b = \sum_{i=1}^k \bar{p}_i^b = \sum_{i=1}^k \frac{1}{\text{NB}} \sum_{ib=1}^{\text{NB}} \frac{x_i^{ib}}{\text{NMAX}} = \frac{1}{\text{NB}} \sum_{ib=1}^{\text{NB}} P_k^{ib}, \quad (A-9)$$

ここで、

$$P_k^{ib} = \frac{1}{\text{NMAX}} \sum_{i=1}^k x_i^{ib} = \frac{C_k^{ib}}{\text{NMAX}}. \quad (A-10)$$

従って、 $\bar{P}_k^b$ の分散 $\sigma^2(\bar{P}_k^b)$ は次式で評価することができる。

$$\begin{aligned}\bar{\sigma}^2(\bar{P}_k^b) &= \frac{1}{\text{NB} \cdot (\text{NB} - 1)} \sum_{ib=1}^{\text{NB}} (P_k^{ib} - \bar{P}_k^b)^2 \\ &= \frac{1}{\text{NB} \cdot (\text{NB} - 1)} \left\{ \sum_{ib=1}^{\text{NB}} \left(\frac{C_k^{ib}}{\text{NMAX}} \right)^2 - \text{NB} \cdot \left(\sum_{ib=1}^{\text{NB}} \frac{C_k^{ib}}{\text{NB} \cdot \text{NMAX}} \right)^2 \right\} \quad (\text{A-11}) \\ &= \frac{1}{\text{NB} - 1} \cdot \frac{1}{\text{NMAX}^2} \left\{ \frac{1}{\text{NB}} \sum_{ib=1}^{\text{NB}} (C_k^{ib})^2 - \left(\frac{\sum_{ib=1}^{\text{NB}} C_k^{ib}}{\text{NB}} \right)^2 \right\}.\end{aligned}$$

(3) モーメント $\bar{r}^n$ の計算機能

パスが球に入射するまでの距離 r の n 次モーメント $\bar{r}^n$:

$$\bar{r}^n = \langle r^n \rangle = \int_0^\infty r^n p(r) dr \quad (\text{A-12})$$

の計算機能を追加した ($n \leq 4$)。モンテカルロ法に起因する統計誤差については、前節と同様の方法で評価する。

(4) その他の修正

その他に以下の修正を行った。

ーパスの距離計算の倍精度化 (球のランダム配置計算は単精度)

ー等方単位ベクトルのサンプリング法を変更

ーNND 計算のパス数 NMAX、NND を計算する距離の最大値 (球の直径単位) NRMX、NND を計算する距離ビンの長さ (球直径の分割数で与える。) NGMX の入力データによる制御

A.2 入力データ

MCRDF を実行するための入力データを以下に示す。すべての入力データは自由形式で読み込まれる。

Line 1 NNR : 配置する剛体球の数 ($\leq 1,000$)

Line 2 ISKIP : 最初にスキップする乱数の数 (負の時はスキップしない。)

Line 3 IBOX : 計算オプション

0 : ランダム充填

1 : 面心立方格子 (FCC)

2 : 体心立方格子 (BCC)

3 : 単純立方格子 (SC)

Line 4 IREAD : 初期充填状態設定オプション (リスタート計算)

0 : イニシャルラン

1 : 充填状態をファイルより読み込む

-1 : 充填状態をファイルより読み込み、読み込んだ充填状態に対して最近接球分布 NND 等を計算

IREAD = ± 1 の時、NNR、PFC の入力データとファイルから読み込まれた値との整合性のチェックが行われる。IBOX $\neq 0$ (ランダム充填以外) の時は、この入力データは無視され、IREAD = 0とセットされる。

Line 5 PFC : 配置する剛体球の充填率 f_{p0}

IBOX $\neq 0$ (ランダム充填以外) の時はこの入力データは意味を持たず、充填率はそれぞれの立方格子の最密充填配置(剛体球同士が接する。)の値:FCC、BCC、SC でそれぞれ、 $\sqrt{2}\pi/6$ 、 $\sqrt{3}\pi/8$ 、 $\pi/6$ となり、PFC はこの値にセットされる。

Line 6 IADD : 重ならない球に対するアジャストメントオプション (使用されない。)

Line 7 CTME : 計算時間の上限 (分)

CTME=0 の時は、計算時間のチェックは行わない。

Line 8 RCF : 剛体球を充填後、充填率を調整するための因子

RCF > 0.0: 剛体球の半径を $r' = r(1 - \text{RCF})$ に縮小 (充填率は $f_p = f_{p0} \cdot (r'/r)^3$)

RCF < 0.0: 充填率 $f_p = |\text{RCF}|$ とする ($|\text{RCF}| \leq f_{p0}$ でなければならない。)

Line 9 IVIB : 球を振動させる周期 (球の充填がロックした場合に MCRDF が自動的に実施するために、この入力は無効)

Line 10 ICY : アジャストの回数 (通常、計算時間で制御するために大きな数値を入力)

Line 11 DDRTL : 平均重なり幅の収束判定値

重なり幅がこの値を下回った時、充填計算を終了する。 1×10^{-6} 程度でよい。

Line 12 DRTTL : 平均重なり幅の変化率の収束判定値

平均重なり幅の変化率がこの値を下回った時、振動ルーチンをコールする。 1×10^{-6} 程度でよい。

Line 13 LOPT(1) : 球入射角分布の計算 (0 / 1 = 計算しない / 計算する)

Line 14 LOPT(2) : NND1 の計算 (0 / ± 1 = 計算しない / 計算する)

オプション-1 は新たに導入された完全周期境界条件を用いて NND1 を計算する。

Line 15 LOPT(3) : NND2 の計算 (0 / $\pm 1 / 2$ = 計算しない / 計算する / 計算する)

初版ではオプション 2 (入力データ SIGT を用いてマトリックス内での衝突位置を決定) を推奨していたが、MVP 用にはオプション ± 1 を推奨する。オプション-1 は完全周期境界条件を用いて NND2 を計算する。

Line 16 LOPT(4) : NND3 の計算 (0 / 1, 2, 3, 4, ± 5 = 計算しない / 計算する)

通常はオプション ± 5 を選択 (他のオプションは推奨しない。)。オプション-5 は完全周期境界条件を用いて NND3 を計算する。

Line 17 LOPT(5) : 2 次元径方向分布の計算 (0 / 1 = 計算しない / 計算する)

Line 18 SIGT : マトリックス (球間物質) の巨視的全断面積 (cm^{-1} 、ただし、球直径 1cm)

Line 19~22 は新たに追加された入力データであり、入力データがない場合、または入力値 = 0 の場合には、省略値が用いられる。例えば、Line 19 のデータがあつて Line 20 以降がない場合には、NBATCH、NRMX、NGMX は省略値が採用される。

Line 19 NMAX : 確率分布の計算に用いるパス数 (省略値: 1,000,000)

Line 20 NBATCH : ランダム配置の数 (省略値: 1、NBATCH $\leq$ 100)

LOPT(2)= $\pm$ 1、LOPT(3)= $\pm$ 1, 2、LOPT(4)= $\pm$ 5 の時、有効。IBOX $\neq$ 0 (ランダム充填以外) では入力データに依らず省略値が用いられる。また、NBATCH > 1 のリスタート計算はできないことに注意を要する。

Line 21 NRMX : NND を計算する距離の最大値 (球の直径単位) (省略値: MCRDF が決定)
MCRDF は充填率 f_p の統計的一様分布の剛体球に入射する積算確率が $1 - 10^{-7}$ 以上 (そこまですに入射しない確率が 10^{-7} 以下) となるように NRMX の省略値を決定する。なお、IBOX $\neq$ 0 (ランダム充填以外) の時は、このように計算された NRMX の省略値を 5 倍する。

Line 22 NGMX : NND を計算する距離ビンの長さ (球直径の分割数で与える) (省略値: 20)
NND テーブルの長さ $KMAX = NRMX \times NGMX$ となる。 $NRMX \times NGMX > MTL$ (現在、 $MTL = 2,000$) となる場合には、NGMX の入力データに依らず、 $NGMX = MTL/NRMX$ とセットされる。その結果、 $NGMX = 0$ となった場合は、NND の計算は行わず、モーメントの計算のみ行う。

A.3 MCRDF を実行するためのスクリプト、入出力ファイルと入例データの例

MCRDF を実行するためのスクリプトを図 A.5 に示す。本図中に MCRDF 入出力ファイル (すべてテキストファイル) の内容がコメントで与えられている。

```
#!/bin/csh -f
setenv LANG C
# run MCRDF :
# -----
# Fortran logical unit usage (text files)
# 5      MAIN      READ      Standard input
# 6      many subroutines WRITE Standard output
# 1      MAIN      WRITE     Restart file
# 2      MAIN      READ      Restart file
# 3      NND/SUMARY WRITE     NND1 for plot (Excel)
# 4      CRCP2      WRITE     for plot (original version)
# 7      CRCP       WRITE     for plot (original version)
# 8      CRCP       WRITE     Angular distribution (original version).
# 9      CRCP       WRITE     for MCNP-CFP
# 10     XSEC       WRITE     X-SEC plot (original version)
# 12     NND/SUMARY WRITE     NND1 for MCNP-CFP
# 13     NND2/R/SUMARY WRITE   NND2 for plot (Excel)
# 14     NND2/R/SUMARY WRITE   NND2 for MCNP-CFP
# 15     NND3/R/SUMARY WRITE   NND3 for plot (Excel)
# 16     NND3/R/SUMARY WRITE   NND3 for MCNP-CFP
# 17     XSEC       WRITE     2-D Radial Distri. Func. (original version)
# 20     NNDMVP     WRITE     NNDs in NND-library form of MVP/GMVP
# 25     NNDMVP     WRITE     NNDs in MVP/GMVP input form
#      (NND123 is used for NND, NND3, NND3 in new periodic calculations)
# -----
# ... MVP_WORK_DIR:MVP working directory for each user ...
set MVP_WORK_DIR=$PWD
#
# ... executable load module of MCRDF
```

```

set EXEC=/home/xxxx/MVP-GMVP/mvp-xxxx/bin/LINUXGLIBC/mcrdf
#
# ... INP : input data for MCRDF ...
set INP=$MVP_WORK_DIR/PF30.inp
#
set CASENAME=`basename $INP .inp`
set MCRDFOUT=$MVP_WORK_DIR/$CASENAME
#
# ... restart files, input & output ...
set RESTIN=
set RESTOUT=$MCRDFOUT.ft01
#
# ... output file of result for MVP etc. ...
set GNND1=$MCRDFOUT.ft03
set GNND2=
set GNND3=
set NNDL=$MCRDFOUT.ft20
set NND=$MCRDFOUT.ft25
#
$EXEC /5rf:$INP /1f:$RESTOUT /2rf:$RESTIN /20f:$NNDL /25f:$NND ¥
/3f:$GNND1 /13f:$GNND2 /15f:$GNND3 ¥
/4f /7f /8f /9f /10f /12f /14f /16f /17f ¥
> $MCRDFOUT.ft06

```

図 A.5 MCRDF を実行するためのスクリプト

サンプル入力データを図 A.6 に示す。

```

1000    Number of particles
0       Number of skipped random numbers
0       Arrangement of particles; 0/1/2/3=Random/FCC/BCC/UCL
0       Restart calculation ( !=0, read from unit 2, -1:no adjustment
0.3     Packing fraction
3       Not-overlapped particle treatment option (normally 3)
0       CPU-time limit (minutes)
0.0     Reduction fraction of particle radius
500     Vibration cycle option (normally 1)
1000000 Number of cycles
1.E-6   DDR tolerance
1.E-6   Limit of DDR decreasing rate
1       LOPT(1); 1/0 = call CRCP2/no
-1      LOPT(2); 1/0 = NND1
-1      LOPT(3); 2/1/0 = NND2R/NND2/no
-5      LOPT(4); 5/4/3/2/1 = NND3R4/NND3R3/NND3R2/NND3R/NND3/no
0       LOPT(5); 1/0 = 2d-RDF cal./no
0.3916 SIGT
1000000 Number of tracks for integration ( default=200000 )
30      Number of particle arrangements ( default=1 )
0       NND table length (particle diameters, automatically set if 0)
0       Number of diameter divisions for NND table ( default=20 )

```

図 A.6 MCRDF の入力データの例 (充填率 30%のランダム配置)

参考文献：

村田勲，森貴正，中川正幸 他：“モンテカルロ法を用いた充填模擬法による 3 次元剛体球空間分布計算コード MCRDF”，JAERI-Data/Code 96-016 (1996) 79p.

付録 B 統計的一様分布に基づく最近接球分布解析式

B.1 統計的一様分布に基づく最近接球分布関数の導出

統計的一様分布に基づく最近接球分布関数 $P(r)$ （積算確率）の解析的式を導出する。半径 r の球内に最近接球を見つける確率（NND） $P(r)$ （積算確率）は、無数の球が統計的に一様に空間内に分布している場合には、明らかに以下の関係を満たす。

$$dP(r) = \Sigma(1 - P(r))dr \quad (\text{B-1})$$

ここで、 Σ は比例定数である（下で決定）。(B-1)式の両辺を $1 - P(r)$ で割って、積分すると、

$$-\ln(1 - P(r)) = \Sigma r + C \quad (C: \text{積分定数}). \quad (\text{B-2})$$

ゆえに、

$$P(r) = 1 - C' \exp(-\Sigma r) \quad (C' = \exp(-C)). \quad (\text{B-3})$$

$r = 0$ で $P(r) = 0$ （積算確率）であるから、 $C' = 1$ であり、

$$P(r) = 1 - \exp(-\Sigma r). \quad (\text{B-4})$$

従って、NND 確率密度関数 $p(r)$ は、

$$p(r) = \frac{dP(r)}{dr} = \Sigma \exp(-\Sigma r) \quad (\text{B-5})$$

となる。(B-4)式、(B-5)式はそれぞれ、中性子輸送問題における距離 r までに原子核と衝突する確率、距離 $r \sim r + dr$ で原子核と衝突する確率と同じ形をしている（この時、 Σ は巨視的中性子全断面積）。従って、

$$D = \frac{1}{\Sigma} \quad (\text{B-6})$$

は中性子の平均自由行程に対応する量、すなわち、マトリックス（球間物質）内の点からスタートしたパスが最初の球に入射するまでの距離の平均値である。

今、無数の球（半径 R_0 ）が重なることなくランダムに配置された無限に広い空間を考える。この空間内に等方的な無数のパスを考えると、各パスは、マトリックス及び球を何回も通過する。そして、パスの長さの平均に対して次式の関係が成立する。

$$\frac{\text{球内のパスの長さの総和の平均}}{\text{マトリックス内のパスの長さの総和の平均}} = \frac{1 \text{ つの球内のパスの長さの平均 } L_0}{\text{球間のパスの長さの平均 } D_0} \quad (\text{B-7})$$

(B-7)式の L_0 と D_0 を用いると、空間内の球の充填率 f_p は次式で表される。

$$f_p = \frac{L_0}{D_0 + L_0}. \quad (\text{B-8})$$

D_0 はパスが球を出てから次の球に入射するまでの平均距離であるから、平均自由行程 D と考えることができる。また、無数のパスは等方的としているので、 L_0 は球の平均弦長 $4R_0/3$ である。従って、

$$D = \frac{4R_0(1 - f_p)}{3f_p}, \quad \Sigma = \frac{3}{4R_0} \frac{f_p}{(1 - f_p)}. \quad (\text{B-9})$$

距離の単位として球の直径を用いると、

$$D = \frac{2}{3} \frac{(1-f_p)}{f_p}, \quad \Sigma = \frac{3}{2} \frac{f_p}{(1-f_p)} \quad (\text{距離の単位：球直径}). \quad (\text{B-10})$$

(B-10)式と(B-6)式から、(B-4)式の最近接球分布関数 $P(r)$ は次式となり、

$$P(r) = 1 - \exp\left(-\frac{3}{2} \frac{f_p}{(1-f_p)} r\right) \quad (r: \text{球直径単位}), \quad (\text{B-11})$$

(B-5)式の NND 確率密度関数 $p(r)$ は次式となる。

$$p(r) = \frac{dP(r)}{dr} = \frac{3}{2} \frac{f_p}{(1-f_p)} \exp\left(-\frac{3}{2} \frac{f_p}{(1-f_p)} r\right) \quad (r: \text{球直径単位}). \quad (\text{B-12})$$

表 B.1 に、球を出たパスが次の球に入射するまでの平均距離 D について、統計的一様分布による解析式の値と MCRDF の結果(NND1)の比較を示す。比較した2つの充填率($f_p = 0.3$ 、 0.065)において、2つのランダム配置と3つの規則配置の MCRDF の結果は統計誤差内ではほぼ一致しており、それらの結果は統計的一様分布の結果と一致している。これらの結果は、球を出たパスが次の球に入射するまでの平均距離は、最近接球分布関数 $P(r)$ 及び NND 確率密度関数 $p(r)$ の r 依存性には依らず、空間内の球の充填率 f_p のみで決定されることを示している（ただし、厳密な証明は行っていない）。なお、本文では、球を出たパスが次の球に入射するまでの平均距離 D を平均球面間距離（マトリックス中の平均コード長）と呼んでいる。

表 B.1 球を出たパスが次の球に入射するまでの平均距離（球直径単位）

充填率 f_p	統計的一様分布 ((B-10)式)	MCRDF (NND1) の結果*				
		ランダム 1	ランダム 2	面心立法格子	体心立法格子	単純立方格子
0.3	1.55556	1.5558	1.5557	1.5554	1.5555	1.5555
0.065	9.58974	9.5901	9.5871	9.5829**	9.5840**	9.5838**

* モンテカルロ計算条件：ランダム配置（ 30×100 万パス）、規則配置（ 1×1 億パス）；結果の統計誤差は 0.02%以下

ランダム 1：充填率 f_p でランダム配置

ランダム 2：ランダム最密充填で配置後、充填率が f_p となるように球を縮小（球直径を減少）

**距離 5,000 直径までに球に入射しないパスが約 100 あり、若干の過小評価の可能性がある。

パスが球に入射するまでの距離 r の n 次モーメント $\overline{r^n}$ ($\overline{r^1} = D$) は、統計的一様分布を仮定した場合には次式となる。

$$\overline{r^n} = \int_0^\infty r^n p(r) dr = \int_0^\infty r^n \Sigma \exp(-\Sigma r) dr = \frac{n!}{\Sigma^n}. \quad (\text{B-13})$$

表 B.2 に、(B-13)式と MCRDF の結果 ($n = 1, 4$) の比較を示す。なお、分散 σ^2 は、

$$\sigma^2 = \int_0^\infty (r - \bar{r})^2 p(r) dr = \overline{r^2} - \bar{r}^2 = \frac{2}{\Sigma^2} - \frac{1}{\Sigma^2} = \frac{1}{\Sigma^2}. \quad (\text{B-14})$$

であり、相対標準偏差 $\sigma/\bar{r}$ は次式のように 1.0 となる。

$$\frac{\sigma}{\bar{r}} = \frac{1/\Sigma}{1/\Sigma} = 1. \quad (\text{B-15})$$

表 B.2 パスが球に入射するまでの距離 r の n 次モーメント $\overline{r^n}$ (球直径単位)

	充填率 $f_p = 0.3$			充填率 $f_p = 0.065$		
	統計的一様分布 (B-13)式)	MCRDF (NND1) の結果*		統計的一様分布 (B-13)式)	MCRDF (NND1) の結果*	
		ランダム 1	ランダム 2		ランダム 1	ランダム 2
$\overline{r^1}$	1.55556	1.5558	1.5557	9.58974	9.5901	9.5871
$\overline{r^2}$	4.83951	5.1557	4.2124	183.926	187.46	169.34
$\overline{r^3}$	22.5844	25.997	17.073	5291.42	5506.1	4479.7
$\overline{r^4}$	140.525	174.96	92.434	202973.	218230.	158490.

* モンテカルロ計算条件：30×100 万パス：結果の統計誤差は 0.6%以下（高次モーメントほど大）

ランダム 1：充填率 f_p でランダム配置

ランダム 2：ランダム最密充填で配置後、充填率が f_p となるように球を縮小（球直径を減少）

表 B.2 （その 2）

	充填率 $f_p = 0.633$	
	統計的一様分布 (B-13)式)	MCRDF (NND1) の結果*
		ランダム 1
$\overline{r^1}$	0.38652	0.38878
$\overline{r^2}$	0.29879	0.29437
$\overline{r^3}$	0.34647	0.33438
$\overline{r^4}$	0.53567	0.52620

* モンテカルロ計算条件：30×100 万パス：結果の統計誤差は 0.3%以下

ランダム 1：充填率 f_p でランダム配置

B.2 媒質中の平均トラック長

確率論的幾何形状モデルで表現された無限空間内の中性子の輸送現象を考える。表 B.1 の結果から、球に入射するまでの直線距離の平均値は NND 確率密度関数の形状には依存せず空間内の球の充填率 f_p のみで決定されと考えられるので、ここでは統計的一様分布に基づく解析的式 (B-5) 式： $p(r) = \Sigma \exp(-\Sigma r)$ を用いて議論を進める。なお、距離の単位は通常の cm とする。すなわち、 Σ は(B-9)式で与えられる。

マトリックス（球間物質）内の中性子が距離 $r \sim r + dr$ で媒質中の原子核と衝突する確率密度関数 $p_M(r)$ は、マトリックスの巨視的全断面積 $\Sigma_{M,t}$ を用いて次式で表される。

$$p_M(r) = \Sigma_{M,t} \exp(-\Sigma_{M,t} r). \quad (\text{B-16})$$

距離 r_0 まで衝突しない（ $r \geq r_0$ で衝突する）確率 $P_M(r \geq r_0)$ は、

$$P_M(r \geq r_0) = \int_{r_0}^{\infty} p_M(r) dr = \exp(-\Sigma_{M,t} r_0) \quad (\text{B-17})$$

であり、距離 r_0 まで球に入射しない ($r \geq r_0$ で入射する) 確率 $P(r \geq r_0)$ は、

$$P(r \geq r_0) = \int_{r_0}^{\infty} p(r) dr = \exp(-\Sigma r_0) \quad (\text{B-18})$$

となる。これらを用いると、マトリックス中で1度も衝突することなく球に入射する確率は、

$$\int_0^{\infty} p(r_0) P_M(r \geq r_0) dr_0 = \frac{\Sigma}{\Sigma + \Sigma_{M,t}} \quad (\text{B-19})$$

であり、そのトラック長の期待値は、

$$\int_0^{\infty} r_0 p(r_0) P_M(r \geq r_0) dr_0 = \frac{\Sigma}{(\Sigma + \Sigma_{M,t})^2} \cdot \quad (\text{B-20})$$

一方、球に入射する前にマトリックス中で衝突する確率は、

$$\int_0^{\infty} p_M(r_0) P(r \geq r_0) dr_0 = \frac{\Sigma_{M,t}}{\Sigma + \Sigma_{M,t}} \quad (\text{B-21})$$

であり、衝突するまでのトラック長の期待値は、

$$\int_0^{\infty} r_0 p_M(r_0) P(r \geq r_0) dr_0 = \frac{\Sigma_{M,t}}{(\Sigma + \Sigma_{M,t})^2} \cdot \quad (\text{B-22})$$

これから、マトリックスによる吸収はないと仮定して、球に入射するまでのマトリックス中のトラック長の総和の平均値（期待値）を求める。マトリックス中で1度衝突した後に球に入射した時の総トラック長の期待値は、

$$\begin{aligned} & \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} (r_0 + r_1) p_M(r_0) P(r \geq r_0) p(r_1) P_M(r \geq r_1) dr_0 dr_1 \\ &= \frac{\Sigma_{M,t}}{(\Sigma + \Sigma_{M,t})^2} \frac{\Sigma}{(\Sigma + \Sigma_{M,t})} + \frac{\Sigma_{M,t}}{(\Sigma + \Sigma_{M,t})} \frac{\Sigma}{(\Sigma + \Sigma_{M,t})^2} \\ &= 2 \frac{\Sigma}{(\Sigma + \Sigma_{M,t})^2} \frac{\Sigma_{M,t}}{(\Sigma + \Sigma_{M,t})} \cdot \end{aligned} \quad (\text{B-23})$$

同様に、マトリックス中で n 回衝突した後に球に入射した時の総トラック長の期待値は、

$$\begin{aligned} & \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} \cdots \int_0^{\infty} (r_0 + r_1 + \cdots + r_n) \times \\ & \quad p_M(r_0) P(r \geq r_0) p_M(r_1) P(r \geq r_1) \cdots p(r_n) P_M(r \geq r_n) dr_0 dr_1 \cdots dr_n \\ &= n \frac{\Sigma_{M,t}}{(\Sigma + \Sigma_{M,t})^2} \left(\frac{\Sigma_{M,t}}{\Sigma + \Sigma_{M,t}} \right)^{n-1} \frac{\Sigma}{(\Sigma + \Sigma_{M,t})} + \left(\frac{\Sigma_{M,t}}{\Sigma + \Sigma_{M,t}} \right)^n \frac{\Sigma}{(\Sigma + \Sigma_{M,t})^2} \\ &= (n+1) \frac{\Sigma}{(\Sigma + \Sigma_{M,t})^2} \left(\frac{\Sigma_{M,t}}{\Sigma + \Sigma_{M,t}} \right)^n \end{aligned} \quad (\text{B-24})$$

となり、この式は(B-20)式 ($n=0$)、(B-23)式 ($n=1$) を含んでいる。

従って、球に入射するまでの総トラック長の期待値は、

$$\sum_{n=0}^{\infty} (n+1) \frac{\Sigma}{(\Sigma + \Sigma_{M,t})^2} \left(\frac{\Sigma_{M,t}}{\Sigma + \Sigma_{M,t}} \right)^n = \sum_{n=1}^{\infty} n \frac{\Sigma}{(\Sigma + \Sigma_{M,t})^2} \left(\frac{\Sigma_{M,t}}{\Sigma + \Sigma_{M,t}} \right)^{n-1}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{\Sigma}{(\Sigma + \Sigma_{M,t})^2} \sum_{n=1}^{\infty} n \left(\frac{\Sigma_{M,t}}{\Sigma + \Sigma_{M,t}} \right)^{n-1} \\
&= \frac{\Sigma}{(\Sigma + \Sigma_{M,t})^2} \left\{ \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{\Sigma_{M,t}}{\Sigma + \Sigma_{M,t}} \right)^{n-1} + \sum_{n=2}^{\infty} \left(\frac{\Sigma_{M,t}}{\Sigma + \Sigma_{M,t}} \right)^{n-1} + \sum_{n=3}^{\infty} + \dots \right\} \\
&= \frac{\Sigma}{(\Sigma + \Sigma_{M,t})^2} \left\{ \frac{1}{1 - \frac{\Sigma_{M,t}}{\Sigma + \Sigma_{M,t}}} + \frac{\frac{\Sigma_{M,t}}{\Sigma + \Sigma_{M,t}}}{1 - \frac{\Sigma_{M,t}}{\Sigma + \Sigma_{M,t}}} + \frac{\left(\frac{\Sigma_{M,t}}{\Sigma + \Sigma_{M,t}} \right)^2}{1 - \frac{\Sigma_{M,t}}{\Sigma + \Sigma_{M,t}}} + \dots \right\} \quad (\text{B-25}) \\
&= \frac{\Sigma}{(\Sigma + \Sigma_{M,t})^2} \frac{1}{1 - \frac{\Sigma_{M,t}}{\Sigma + \Sigma_{M,t}}} \left\{ 1 + \frac{\Sigma_{M,t}}{\Sigma + \Sigma_{M,t}} + \left(\frac{\Sigma_{M,t}}{\Sigma + \Sigma_{M,t}} \right)^2 + \dots \right\} \\
&= \frac{\Sigma}{(\Sigma + \Sigma_{M,t})^2} \frac{1}{1 - \frac{\Sigma_{M,t}}{\Sigma + \Sigma_{M,t}}} \frac{1}{1 - \frac{\Sigma_{M,t}}{\Sigma + \Sigma_{M,t}}} = \frac{\Sigma}{(\Sigma + \Sigma_{M,t})^2} \left(\frac{\Sigma + \Sigma_{M,t}}{\Sigma} \right)^2 \\
&= \frac{1}{\Sigma} \quad (= D)
\end{aligned}$$

となる。すなわち、吸収がない場合には、マトリックスの全断面積には依存せず、マトリックスが真空中で衝突がない場合の球に入射するまでのパス長の期待値 D に一致する。

球内で衝突があるが吸収はない場合の総トラック長の期待値についても、解析的な証明はないものの、モンテカルロ計算によって球の平均弦長 $L_0 = 4R_0/3$ となることを確認している。なお、マトリックスと球内が同じ媒質で満たされ中性子源が一様に分布している場合を考えると、2つの領域の中性子束は同じで、2つの領域の総トラック長の期待値（中性子束×体積のモンテカルロ計算におけるトラック長評価法による評価値）の比は充填率 f_p で決まる体積比となり、(B-8)式から上述の結果が得られる。

次に、マトリックス中で吸収がある場合を考える。マトリックスの散乱確率 $P_s = \Sigma_{M,s}/\Sigma_{M,t}$ を導入すると、(B-24) 式の右辺には P_s^n が掛かる。すなわち、

$$\begin{aligned}
&\int_0^\infty \int_0^\infty \dots \int_0^\infty (r_0 + r_1 + \dots + r_n) \times \\
&\quad p_M(r_0)P(r \geq r_0)p_M(r_1)P(r \geq r_1) \dots p(r_n)P_M(r \geq r_n) P_s^n dr_0 dr_1 \dots dr_n \quad (\text{B-26}) \\
&= (n+1) \frac{\Sigma}{(\Sigma + \Sigma_{M,t})^2} \left(\frac{\Sigma_{M,t}}{\Sigma + \Sigma_{M,t}} P_s \right)^n.
\end{aligned}$$

従って、吸収がある場合に球に入射するまでのマトリックス中の総トラック長の期待値 $D_{in} |(\Sigma_{M,a} \neq 0)$ は、

$$D_{in} |(\Sigma_{M,a} \neq 0) = \frac{\Sigma}{\{\Sigma + \Sigma_{M,t}(1 - P_s)\}^2} = \frac{\Sigma}{\{\Sigma + \Sigma_{M,a}\}^2} \quad (\text{B-27})$$

となる。当然ではあるが、吸収がない場合 ($P_s = 1.0$, $\Sigma_{M,a} = 0.0$) には、(B-27)式は(B-25)式と一致する。

吸収がない場合はすべての中性子は最終的には球に入射するが、吸収がある場合にはマトリ

ックス中の衝突で吸収されて球に入射しない中性子が存在する。これらの中性子について、吸収されるまでの総トラック長の期待値 $D_a |(\Sigma_{M,a} \neq 0)$ を同様に求めと、次式が得られる。

$$D_a |(\Sigma_{M,a} \neq 0) = \frac{\Sigma_{M,t}(1 - P_s)}{\{\Sigma + \Sigma_{M,t}(1 - P_s)\}^2} = \frac{\Sigma_{M,a}}{\{\Sigma + \Sigma_{M,a}\}^2}. \quad (\text{B-28})$$

従って、球に入射するかマトリックス中で吸収されるまでの総トラック長の期待値は、

$$D_{in} |(\Sigma_{M,a} \neq 0) + D_a |(\Sigma_{M,a} \neq 0) = \frac{\Sigma}{\{\Sigma + \Sigma_{M,a}\}^2} + \frac{\Sigma_{M,a}}{\{\Sigma + \Sigma_{M,a}\}^2} = \frac{1}{\Sigma + \Sigma_{M,a}} \quad (\text{B-29})$$

となり、マトリックスの全断面積には依存しない。

【参考】 球の平均弦長と球内の点（一様分布）からの等方パスの平均パス長

空間的に一様で等方的に分布するパスを考える。中性子の輸送現象からの連想で、パスの角度分布を $\phi(\Omega)$ とすると、微小面 dS （単位法線ベクトルを $\mathbf{n}$ とする。）を $d\Omega$ の方向に横切るパス数は $|\mathbf{n} \cdot \Omega| \phi(\Omega) d\Omega dS$ となる。パスは等方的： $\phi(\Omega) = n_0/(4\pi)$ (n_0 はパス数) なので、その角度分布 $p(\Omega)$ は、

$$p(\Omega) d\Omega = \frac{|\mathbf{n} \cdot \Omega| \frac{n_0}{4\pi} d\Omega}{\int_{4\pi} |\mathbf{n} \cdot \Omega| \frac{n_0}{4\pi} d\Omega} = \frac{|\mathbf{n} \cdot \Omega|}{2\pi} d\Omega = \frac{|\cos \theta|}{2\pi} d\Omega \quad (\text{B-30})$$

であり、余弦分布となる。今、半径 R_0 の球表面を内向きに通過するパスを考えると、その角度分布は次式となる。

$$p(\Omega) d\Omega = \frac{\cos \theta}{\pi} d\Omega = 2\mu d\mu = p(\mu) d\mu, \quad (\mathbf{n} \cdot \Omega \geq 0, 0 \leq \mu \leq 1), \quad (\text{B-31})$$

ここで、 $\mathbf{n}$ は球表面の点から球の中心に向かう単位ベクトルである。従って、平均弦長 L_0 は次式となる（図 B.1 参照）。

$$L_0 = \int_{\mathbf{n} \cdot \Omega \geq 0} l p(\Omega) d\Omega = \int_0^1 2R_0 \cos \theta p(\mu) d\mu = 4R_0 \int_0^1 \mu^2 d\mu = \frac{4}{3} R_0. \quad (\text{B-32})$$

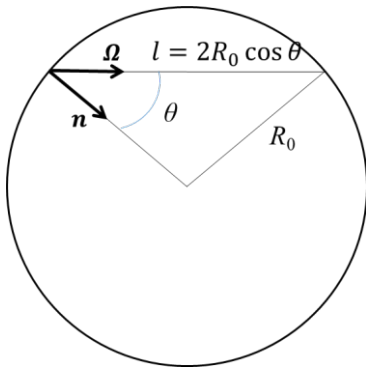


図 B.1 球への入射

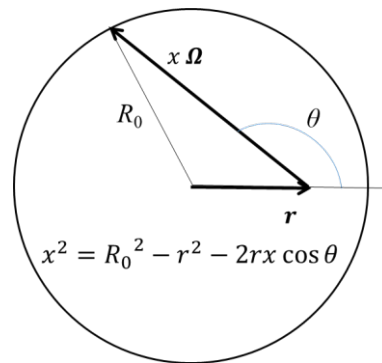


図 B.2 球内の点からのパス

次に、球内の点（球内一様分布）から等方的にスタートしたパスに対する球内の平均パス長を求める。まず、図 B.2 に示した位置ベクトル $\mathbf{r}$ で示される点からスタートしたパスの球内平

均パス長 $\bar{x}(r)$ を求める。図中 Ω 方向のパス長は $x(r, \theta) = -r \cos \theta + \sqrt{R_0^2 - r^2(1 - \cos^2 \theta)}$ であり、パスは等方的なので $p(\theta)d\theta = p(\mu)d\mu = (1/2)d\mu$ である。従って、その平均値 $\bar{x}(r)$ は、

$$\begin{aligned}\bar{x}(r) &= \int_0^\pi x(r, \theta) p(\theta) d\theta = \int_{-1}^1 \frac{1}{2} \left(-r \cos \theta + \sqrt{R_0^2 - r^2(1 - \cos^2 \theta)} \right) d\mu \\ &= \int_{-1}^1 \frac{1}{2} \left(-r\mu + \sqrt{r^2\mu^2 + R_0^2 - r^2} \right) d\mu = \int_{-1}^1 \frac{1}{2} \sqrt{r^2\mu^2 + R_0^2 - r^2} d\mu.\end{aligned}$$

$r \neq 0, R_0$ の時、

$$\bar{x}(r) = \frac{r}{2} \int_{-1}^1 \sqrt{\mu^2 + \left(\frac{R_0}{r}\right)^2 - 1} d\mu = \frac{R_0}{2} + \frac{1}{2} \left(\left(\frac{R_0}{r}\right)^2 - 1 \right) r \ln \frac{1 + \frac{R_0}{r}}{\sqrt{\left(\frac{R_0}{r}\right)^2 - 1}}, \quad (\text{B-33})$$

$r = 0$ の時、

$$\bar{x}(r) = \int_{-1}^1 \frac{1}{2} \sqrt{R_0^2} d\mu = R_0, \quad (\text{B-34})$$

$r = R_0$ の時、

$$\bar{x}(r) = \int_{-1}^1 \frac{1}{2} \sqrt{R_0^2 \mu^2} d\mu = \frac{R_0}{2}. \quad (\text{B-35})$$

なお、(B-33)式の極限 ($r \rightarrow 0$ 、 $r \rightarrow R_0$) は、それぞれ(B-34)式、(B-35)式に一致する。

パスの始点は球内に一様に分布しているので、 r の分布は $p(r)dr = (3r^2/R_0^3)dr$ ($0 \leq r \leq R_0$) である。この分布と(B-33)式を用いると、球内の点（球内一様分布）から等方的にスタートしたパスの球内平均パス長 $\bar{l}$ は、

$$\bar{l} = \int_0^{R_0} \bar{x}(r) p(r) dr = \int_0^{R_0} \left\{ \frac{1}{2} R_0 + \frac{1}{2} \left(\left(\frac{R_0}{r}\right)^2 - 1 \right) r \ln \frac{1 + \frac{R_0}{r}}{\sqrt{\left(\frac{R_0}{r}\right)^2 - 1}} \right\} \frac{3r^2}{R_0^3} dr. \quad (\text{B-36})$$

$X = \frac{r}{R_0}$ と置いて整理すると、

$$\begin{aligned}\bar{l} &= \frac{3R_0}{2} \int_0^1 \left\{ X^2 + \frac{1}{2} (X - X^3) (\ln(1 + X) - \ln(1 - X)) \right\} dX \\ &= \frac{3R_0}{2} \int_0^1 \left\{ X^2 + \frac{1}{2} (X \ln(1 + X) - X \ln(1 - X) - X^3 \ln(1 + X) + X^3 \ln(1 - X)) \right\} dX \\ &= \frac{3R_0}{2} \left\{ \int_0^1 X^2 dx + \frac{1}{2} \left(\int_{-1}^1 X \ln(1 + X) dX - \int_{-1}^1 X^3 \ln(1 + X) dX \right) \right\} \\ &= \frac{3R_0}{2} \left\{ \frac{1}{3} + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{2}{3} \right) \right\} = \frac{3}{4} R_0.\end{aligned} \quad (\text{B-37})$$

(B-37)式の計算では、積分公式：

$$\int x^n \ln x dx = \frac{x^{n+1}}{n+1} \left(\ln x - \frac{1}{n+1} \right) \quad (\text{B-38})$$

と、 $\lim_{x \rightarrow 0} x \ln x = 0$ の関係を使用した。

付録 C MVP/GMVP による微小体系の取り扱いについて

MVP/GMVP は、空間領域の境界に到達した飛行粒子が次に入るゾーンを決定する時に、数値誤差による粒子追跡の失敗（Lost particle の発生）を避けるために、飛行方向に DEPS（入力データ、省略値は 10^{-5} cm）進んだ点を考え、この点の属するゾーンに入射するとしている。そのために、対象とする体系が極端に小さくなると幾何形状モデルの曖昧さが増大する。これを避けるには、長さの単位を変更して体系を定義する数値を大きくすればよい。例えば、長さの単位を cm から μm に変更すれば、体系を定義する数値は 10,000 倍となり、相対的な数値誤差の大きさは $1/10,000$ となる。ただし、入力データ作成に当たっては、媒質の巨視的反応断面積が [長さ] の逆数単位（通常、 $[\text{cm}^{-1}]$ ）で与えられていることに注意を要する。通常、微視的断面積は $[\text{barn} = 10^{-24} \text{ cm}^2]$ 単位で与えられており、MVP/GMVP は与えられた微視的断面積 σ [barn] とその原子数密度 N $[\text{barn}^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}]$ から巨視的断面積 Σ $[\text{cm}^{-1}]$ を計算しているので、長さの単位を変更すると、巨視的断面積、すなわち原子数密度の単位も変更される。例えば、幾何形状モデルを与える数値を 10,000 倍した場合には、原子数密度として $1/10,000$ 倍した値を与えなければならない。入力データ例を図 C.1 に示す。

```
* Changeable parameters
* RP: Radius of fuel particle (cm)
* PF: Packing fraction
* FL: Factor to change length unit (10000. for cm -->  $\mu\text{m}$ )

*** Geometry
% PI = 3.14159265
% PF = 0.300 /* Packing fraction
% RP = 0.0005 /* Radius of UO2 particle (cm)
% VP = 4*PI/3*RP**3 /* Particle volume (cm3)
% PTCH = (VP/PF)**(1/3) /* Lattice pitch (cm)

% FL = 10000. /* Factor for length unit
% RPP = RP*FL, PCH = PTCH*FL /* Modified radius and pitch
% FD = 1/FL /* Factor for atomic number densities

$XSEC
% MFUEL = 1, MWATR = 2
% CTEMP = 300. /* Temperature (K)
& IDMAT(<MFUEL>) /* Fuel 4.9wt% UO2
TEMPMT(<CTEMP>)
UO2340J40(<8.564E-6*FD>)
UO2350J40(<1.122E-3*FD>)
UO2380J40(<2.150E-2*FD>)
O00160J40(<4.525E-2*FD>)
& IDMAT(<MWATR>) /* Water
:

$END XSEC

$GEOM
***** BODY DATA *****
RPP( 10 <-PCH/2> <PCH/2> <-PCH/2> <PCH/2> <-PCH/2> <PCH/2>) /* cell
SPH( 20 0. 0. 0. <RPP> ) /* UO2 particle
END
:
$END GEOM
:
```

図 C.1 MVP/GMVP 入力データ例（微小体系の取り扱い）

付録 D MVP による 4 因子の計算

MVP による 4 因子（高速核分裂因子 ε 、共鳴を逃れる確率 p 、熱中性子利用率 f 、再生率 η ）は、無限体系における固有値計算を行い、反応率タリーを高速群（ $ET < E \leq ETOP$ ）と熱群（ $EBOT \leq E \leq ET$ ）の 2 群で取り、その結果から以下の式によって計算する。

$$\varepsilon = \frac{\int_{V_F} \int_{EBOT}^{ETOP} \nu \Sigma_f(\mathbf{r}, E) \phi(\mathbf{r}, E) dE d\mathbf{r}}{\int_{V_F} \int_{EBOT}^{ET} \nu \Sigma_f(\mathbf{r}, E) \phi(\mathbf{r}, E) dE d\mathbf{r}} \quad (D-1)$$

$$p = \frac{\int_V \int_{EBOT}^{ET} \Sigma_a(\mathbf{r}, E) \phi(\mathbf{r}, E) dE d\mathbf{r}}{\int_V \int_{EBOT}^{ETOP} \Sigma_a(\mathbf{r}, E) \phi(\mathbf{r}, E) dE d\mathbf{r}} = \frac{\int_V \int_{EBOT}^{ET} (\Sigma_c(\mathbf{r}, E) + \Sigma_f(\mathbf{r}, E)) \phi(\mathbf{r}, E) dE d\mathbf{r}}{\int_V \int_{EBOT}^{ETOP} (\Sigma_c(\mathbf{r}, E) + \Sigma_f(\mathbf{r}, E)) \phi(\mathbf{r}, E) dE d\mathbf{r}} \quad (D-2)$$

$$f = \frac{\int_{V_F} \int_{EBOT}^{ET} \Sigma_a(\mathbf{r}, E) \phi(\mathbf{r}, E) dE d\mathbf{r}}{\int_V \int_{EBOT}^{ET} \Sigma_a(\mathbf{r}, E) \phi(\mathbf{r}, E) dE d\mathbf{r}} = \frac{\int_{V_F} \int_{EBOT}^{ET} (\Sigma_c(\mathbf{r}, E) + \Sigma_f(\mathbf{r}, E)) \phi(\mathbf{r}, E) dE d\mathbf{r}}{\int_V \int_{EBOT}^{ET} (\Sigma_c(\mathbf{r}, E) + \Sigma_f(\mathbf{r}, E)) \phi(\mathbf{r}, E) dE d\mathbf{r}} \quad (D-3)$$

$$\eta = \frac{\int_{V_F} \int_{EBOT}^{ET} \nu \Sigma_f(\mathbf{r}, E) \phi(\mathbf{r}, E) dE d\mathbf{r}}{\int_{V_F} \int_{EBOT}^{ET} \Sigma_a(\mathbf{r}, E) \phi(\mathbf{r}, E) dE d\mathbf{r}} = \frac{\int_{V_F} \int_{EBOT}^{ET} \nu \Sigma_f(\mathbf{r}, E) \phi(\mathbf{r}, E) dE d\mathbf{r}}{\int_{V_F} \int_{EBOT}^{ET} (\Sigma_c(\mathbf{r}, E) + \Sigma_f(\mathbf{r}, E)) \phi(\mathbf{r}, E) dE d\mathbf{r}} \quad (D-4)$$

ここで、 $EBOT$ 、 $ETOP$ 、 ET は計算するエネルギー領域の上限、下限、熱群の上限であり、 V と V_F は全空間領域と燃料領域を示している。第 2 章の計算では、 $EBOT = 10^{-5}$ eV、 $ETOP = 2 \times 10^7$ eV、 $ET = 4.5$ eV とした。また、均質体系では燃料中の酸素と軽水中の酸素を区別していないことを考慮して、均質体系の熱中性子利用率 f が非均質体系における燃料球径 $\rightarrow 0$ の極限と一致するように、(D-3) 式の分子と (D-4) 式の分母の吸収断面積はウランのみのものとした。なお、熱群における燃料中の酸素による吸収は酸化ウランによる吸収の 0.001% 程度であり、本報告の結果は上式によるものと考えてよい。

MVP 計算の統計誤差の評価では、過小評価とならないように、各因子の分母、分子の 2 つの反応率の評価値は -1 の相関係数を持つと仮定した。また、2 つの反応率（捕獲反応率と核分裂反応率）の和である吸収反応率の誤差評価では 2 つの反応率の相関係数を +1 とした。

付録 E MCRDF のランダム配置から MVP/GMVP 入力データ作成

MCRDF の結果（出力ファイル（UNIT 1）：立方体中の球のランダム配置）から、MVP/GMVP の幾何形状入力データ作成プログラムを作成した。本プログラムの入力データは以下の 2 つである。

- (1) FNAME : MCRDF の出力ファイル名（UNIT 1）（80 文字以内）
- (2) PFCR : 実現する充填率 ((1)の与える分布の充填率 PFC（配置する剛体球の充填率 f_{p0} ）であり、剛体球直径を縮小して充填率 PFCR の配置を実現する。従って、 $PFCR \leq PFC$ でなければならない。小数点を含めて 10 文字以内）PFCR = 0.0 の時は、充填率 PFC の配置となる。

出力ファイルは、NBATCH 個のランダム配置毎に、ファイル名：FNAME_#.txt（#：ランダム配置の番号を示す 2 桁の整数（1 の時は 01 となる））で作成される。作成された出力の例を図 D.1 に示す。球の半径は、パラメータ行 “% R = 1.” で 1.0 となっているので、必要に応じて変更する必要がある。また、MCRDF で実現された配置は立方体内に 1,000 個余りの球が配置されており、そのままでは、マトリックス（立方体中で球を除いた領域）中の中性子が次に入射する可能性のある球の数が膨大となり、モンテカルロ計算のコストが大きくなる。そのために、本プログラムは立方体内を各方向を NXYZ 個（全体で $NXYZ^3$ 個）の空間に分割することによって、コストの低減を図っている。なお、現バージョンでは $NXYZ=6$ に固定されている。また、立方体の外部境界には周期境界条件を用いている。

```
***** from MCRDF results *****
$GEOMETRY
* from MCRDF, IBATCH = 1  PF = 0.633--> 0.300
% R = 1.
% AA = 2.407996D+01*R
% DA = 4.013327D+00*R
% NXYZ = 6
***** BODY DATA *****
RPP(10000 <-AA/2> <AA/2> <-AA/2> <AA/2> <-AA/2> <AA/2>)
:
END
***** ZONE DATA *****
OUTER : : -4000 :-10000
:
FUEL : FUEL : <MFUEL> :
OR 10216 360 OR 10216 411 OR 10216 501 OR 10216 653
OR 10216 695 OR 10216 762 OR 10216 1208 OR 10216 1257
OR 10216 977 OR 10216 198 OR 10216 979 OR 10216 1196
OR 10216 1230
$END GEOMETRY
***** End of Geometry data from MCRDF *****
```

図 D.1 MCRDF の結果から作成した MVP/GMVP の幾何形状入力データ例

以下に、プログラムの内容を示す。

C Randomly placed particles by MCRDF ---> MVP geometry data

```

parameter ( NXYZ = 6 )
C.... NXYX should be less than or equal to 8(cubic root of NPP)...
parameter ( NXYZ3 = NXYZ*NXYZ*NXYZ )
implicit real*8(D)
real*8 XXX(2000), YYY(2000), ZZZ(2000)
real*8 X(2000), Y(2000), Z(2000)
real*8 PF, RAR, AAR, RA, AA, RATIO
integer IP(2000), IXB(2000), IYB(2000), IZB(2000), IWK(2000)
integer IPP(2000,NXYZ3), NPP(NXYZ3)
character*80 FNAME, LX, LY, LZ
character*100 FNAME0
character*10 TITLE
character*4 OR

C
FNAME = ''
FNAME0 = ''

C
RA = 1.0d0
PFCR = 0.0

C
read(5,*) FNAME

C
TITLE(1:10)=''
read(5,'(A)') TITLE
if ( TITLE(1:10).ne.' ' ) then
  IFS = 0
  IFE = 10
  do I = 1, 10
    if( IFS.eq.0 .and. FNAME(I:I).ne.' ' ) then
      IFS = I
    end if
    if ( IFE.eq.10 .and. FNAME(I:I).eq.' ' ) then
      IFE = I - 1
    end if
  end do
  read(TITLE(IFS:IFE),*) PFCR
end if
write(6,*) ' PFCR=', PFCR

C
IFS = 0
IFE = 80
do I = 1, 80
  if( IFS.eq.0 .and. FNAME(I:I).ne.' ' ) then
    IFS = I
  end if
  if ( IFE.eq.80 .and. FNAME(I:I).eq.' ' ) then
    IFE = I - 1
  end if
end do
FNAME0(IFS:IFE) = FNAME(IFS:IFE)
open( 1, form='FORMATTED', status='OLD',
&      file=FNAME(IFS:IFE),
&      iostat =IOS )

C
100 continue
C ===== Read particles arrangement by MCRDF (unit 1) =====
C
read(1,'(A10,I4)',end=999) TITLE, IBATCH

C
write(FNAME0(IFE+1:IFE+7),'(A1,I2,A4)') ' ', IBATCH, '.txt'
if( FNAME0(IFE+2:IFE+2).eq.' ' ) FNAME0(IFE+2:IFE+2) = '0'
IU = 10 + IBATCH
open( IU, form='FORMATTED', status='UNKNOWN',
&      file=FNAME0(IFS:IFE+7),
&      iostat =IOS )

read(1,'(I6)') NNR
read(1,'(4I12)') IX, IRNSU, IRNSM, IRNSL

```



```

read(1, '(1PE14.6)') PFC
read(1, '(1PE14.6)') RAR
read(1, '(1PE14.6)') AAR
C
  if( PFCR.gt.0.0 ) then
    if( PFCR.gt.PFC ) then
      write(6,*) ' XXX PFCR>PFC, STOP XXX'
      stop
    end if
    RAR = RAR * (PFCR/PFC)**(1./3.)
  end if
C
  RATIO = RA / RAR
  AA = AAR * RATIO
  DA = AA / NXYZ
  NADD = 0
  do I = 1, NXYZ3
    NPP(I) = 0
  end do
C
  do I = 1, NNR
    read(1, '(1P3E14.6)') XXX(I), YYY(I), ZZZ(I)
    X(I) = XXX(I) * RATIO
    Y(I) = YYY(I) * RATIO
    Z(I) = ZZZ(I) * RATIO
    IX = (X(I)+AA/2.d0) / DA
    IY = (Y(I)+AA/2.d0) / DA
    IZ = (Z(I)+AA/2.d0) / DA
    if( IX.lt.NXYZ) IX = IX + 1
    if( IY.lt.NXYZ) IY = IY + 1
    if( IZ.lt.NXYZ) IZ = IZ + 1
    IP(I) = IX + ( (IY-1) + (IZ-1)*NXYZ ) * NXYZ
    if ( IP(I).le.0 .or. IP(I).gt.NXYZ3 ) then
      write(6,*) ' Error stop! IP(I) out of range. IP=', IP(I)
    end if
    NPP(IP(I)) = NPP(IP(I)) + 1
    IPP(NPP(IP(I)), IP(I)) = I
  end do
C
  IXB(I) = -9
  IYB(I) = -9
  IZB(I) = -9
  do J = 0, NXYZ
    if( abs(X(I)+AA/2.d0-DA*J).lt.RA ) IXB(I) = J + 1
    if( abs(Y(I)+AA/2.d0-DA*J).lt.RA ) IYB(I) = J + 1
    if( abs(Z(I)+AA/2.d0-DA*J).lt.RA ) IZB(I) = J + 1
  end do
C
C .... Add particles for periodic bundary condition
JX = 0
if ( IXB(I).eq.1 .or. IXB(I).eq.NXYZ+1 ) then
  NADD = NADD + 1
  JX = NNR + NADD
  if ( IXB(I).eq.1 ) then
    X(NNR+NADD) = X(I) + AA
    IXN = NXYZ
    IXB(NNR+NADD) = NXYZ + 1
  else if ( IXB(I).eq.NXYZ+1 ) then
    X(NNR+NADD) = X(I) - AA
    IXN = 1
    IXB(NNR+NADD) = 1
  end if
  Y(NNR+NADD) = Y(I)
  Z(NNR+NADD) = Z(I)
  IP(NNR+NADD) = IXN + ( (IY-1) + (IZ-1)*NXYZ ) * NXYZ
  NPP(IP(NNR+NADD)) = NPP(IP(NNR+NADD)) + 1
  IPP(NPP(IP(NNR+NADD)), IP(NNR+NADD)) = NNR+NADD
  IYB(NNR+NADD) = IYB(I)
  IZB(NNR+NADD) = IZB(I)

```

```

end if
JY = 0
if ( IYB(I).eq.1 .or. IYB(I).eq.NXYZ+1 ) then
  NADD = NADD + 1
  JY = NNR + NADD
  if ( IYB(I).eq.1 ) then
    Y(NNR+NADD) = Y(I) + AA
    IYN = NXYZ
    IYB(NNR+NADD) = NXYZ + 1
  else if ( IYB(I).eq.NXYZ+1 ) then
    Y(NNR+NADD) = Y(I) - AA
    IYN = 1
    IYB(NNR+NADD) = 1
  end if
  X(NNR+NADD) = X(I)
  Z(NNR+NADD) = Z(I)
  IP(NNR+NADD) = IX + ( (IYN-1) + (IZ-1)*NXYZ ) * NXYZ
  NPP(IP(NNR+NADD)) = NPP(IP(NNR+NADD)) + 1
  IPP(NPP(IP(NNR+NADD)), IP(NNR+NADD)) = NNR+NADD
  IXB(NNR+NADD) = IXB(I)
  IZB(NNR+NADD) = IZB(I)
  if ( JX.ne.0 ) then
    NADD = NADD + 1
    X(NNR+NADD) = X(JX)
    Y(NNR+NADD) = Y(JY)
    Z(NNR+NADD) = Z(I)
    IP(NNR+NADD) = IXN + ( (IYN-1) + (IZ-1)*NXYZ ) * NXYZ
    NPP(IP(NNR+NADD)) = NPP(IP(NNR+NADD)) + 1
    IPP(NPP(IP(NNR+NADD)), IP(NNR+NADD)) = NNR+NADD
    IXB(NNR+NADD) = IXB(JX)
    IYB(NNR+NADD) = IYB(JY)
    IZB(NNR+NADD) = IZB(I)
  end if
end if
JZ = 0
if ( IZB(I).eq.1 .or. IZB(I).eq.NXYZ+1 ) then
  NADD = NADD + 1
  JZ = NNR + NADD
  if ( IZB(I).eq.1 ) then
    Z(NNR+NADD) = Z(I) + AA
    IZN = NXYZ
    IZB(NNR+NADD) = NXYZ + 1
  else if ( IZB(I).eq.NXYZ+1 ) then
    Z(NNR+NADD) = Z(I) - AA
    IZN = 1
    IZB(NNR+NADD) = 1
  end if
  X(NNR+NADD) = X(I)
  Y(NNR+NADD) = Y(I)
  IP(NNR+NADD) = IX + ( (IY-1) + (IZN-1)*NXYZ ) * NXYZ
  NPP(IP(NNR+NADD)) = NPP(IP(NNR+NADD)) + 1
  IPP(NPP(IP(NNR+NADD)), IP(NNR+NADD)) = NNR+NADD
  IXB(NNR+NADD) = IXB(I)
  IYB(NNR+NADD) = IYB(I)
  if ( JX.ne.0 ) then
    NADD = NADD + 1
    X(NNR+NADD) = X(JX)
    Y(NNR+NADD) = Y(I)
    Z(NNR+NADD) = Z(JZ)
    IP(NNR+NADD) = IXN + ( (IY-1) + (IZN-1)*NXYZ ) * NXYZ
    NPP(IP(NNR+NADD)) = NPP(IP(NNR+NADD)) + 1
    IPP(NPP(IP(NNR+NADD)), IP(NNR+NADD)) = NNR+NADD
    IXB(NNR+NADD) = IXB(JX)
    IYB(NNR+NADD) = IYB(I)
    IZB(NNR+NADD) = IZB(JZ)
  end if
  if ( JY.ne.0 ) then
    NADD = NADD + 1

```

```

      X(NNR+NADD) = X(I)
      Y(NNR+NADD) = Y(JY)
      Z(NNR+NADD) = Z(JZ)
      IP(NNR+NADD) = IX + ( (IYN-1) + (IZN-1)*NXYZ ) * NXYZ
      NPP(IP(NNR+NADD)) = NPP(IP(NNR+NADD)) + 1
      IPP(NPP(IP(NNR+NADD)), IP(NNR+NADD)) = NNR+NADD
      IXB(NNR+NADD) = IXB(I)
      IYB(NNR+NADD) = IYB(JY)
      IZB(NNR+NADD) = IZB(JZ)
    end if
    if ( JX*JY.ne.0 ) then
      NADD = NADD + 1
      X(NNR+NADD) = X(JX)
      Y(NNR+NADD) = Y(JY)
      Z(NNR+NADD) = Z(JZ)
      IP(NNR+NADD) = IXN + ( (IYN-1) + (IZN-1)*NXYZ ) * NXYZ
      NPP(IP(NNR+NADD)) = NPP(IP(NNR+NADD)) + 1
      IPP(NPP(IP(NNR+NADD)), IP(NNR+NADD)) = NNR+NADD
      IXB(NNR+NADD) = IXB(JX)
      IYB(NNR+NADD) = IYB(JY)
      IZB(NNR+NADD) = IZB(JZ)
    end if
  end if
end do
C
C ===== Add particles crossing boundaries to NPP and IPP =====
C
  do I = 1, NXYZ3
    IWK(I) = NPP(I)
    IZ = ifix( real(I-1) / real(NXYZ*NXYZ) ) + 1
    IXY= I - (IZ-1)*NXYZ*NXYZ
    IY = ifix( real(IXY-1) / real(NXYZ) ) + 1
    IX = IXY - (IY-1)*NXYZ
    CM write(6,'(A,5I4)') '##### IR, IX, IY, IZ, NPP=', I, IX, IY, IZ,
    CM & NPP(I)
    do J = 1, NNR+NADD
      JZ = ifix( real(IP(J)-1) / real(NXYZ*NXYZ) ) + 1
      JXY= IP(J) - (JZ-1)*NXYZ*NXYZ
      JY = ifix( real(JXY-1) / real(NXYZ) ) + 1
      JX = JXY - (JY-1)*NXYZ
      CM if ( I.eq.1 )
      CM & write(6,'(A,8I4)') ' ', J, JX, JY, JZ, IP=' ', J, JX, JY, JZ
      CM & ' ', IP(J), IXB(J), IYB(J), IZB(J)
      if ( JX.eq.IX-1.and.JY.eq.IY-1.and.JZ.eq.IZ-1.and.
1      IXB(J).eq.IX .and.IYB(J).eq.IY .and.IZB(J).eq.IZ ) then
        IWK(I) = IWK(I) + 1
        IPP(IWK(I), I) = J
      end if
      if ( JX.eq.IX .and.JY.eq.IY-1.and.JZ.eq.IZ-1.and.
2      IYB(J).eq.IY .and.IZB(J).eq.IZ ) then
        IWK(I) = IWK(I) + 1
        IPP(IWK(I), I) = J
      end if
      if ( JX.eq.IX+1.and.JY.eq.IY-1.and.JZ.eq.IZ-1.and.
3      IXB(J).eq.IX+1.and.IYB(J).eq.IY .and.IZB(J).eq.IZ ) then
        IWK(I) = IWK(I) + 1
        IPP(IWK(I), I) = J
      end if
      if ( JX.eq.IX-1.and.JY.eq.IY .and.JZ.eq.IZ-1.and.
4      IXB(J).eq.IX .and. IZB(J).eq.IZ ) then
        IWK(I) = IWK(I) + 1
        IPP(IWK(I), I) = J
      end if
      if ( JX.eq.IX .and.JY.eq.IY .and.JZ.eq.IZ-1.and.
5      IZB(J).eq.IZ ) then
        IWK(I) = IWK(I) + 1
        IPP(IWK(I), I) = J
      end if
    end if
  end do

```

```

6      if ( JX. eq. IX+1. and. JY. eq. IY . and. JZ. eq. IZ-1. and.
        IXB(J). eq. IX+1. and. IZB(J). eq. IZ ) then
            IWK(I) = IWK(I) + 1
            IPP(IWK(I), I) = J
        end if
7      if ( JX. eq. IX-1. and. JY. eq. IY+1. and. JZ. eq. IZ-1. and.
        IXB(J). eq. IX . and. IYB(J). eq. IY+1. and. IZB(J). eq. IZ ) then
            IWK(I) = IWK(I) + 1
            IPP(IWK(I), I) = J
        end if
8      if ( JX. eq. IX . and. JY. eq. IY+1. and. JZ. eq. IZ-1. and.
        IYB(J). eq. IY+1. and. IZB(J). eq. IZ ) then
            IWK(I) = IWK(I) + 1
            IPP(IWK(I), I) = J
        end if
9      if ( JX. eq. IX+1. and. JY. eq. IY+1. and. JZ. eq. IZ-1. and.
        IXB(J). eq. IX+1. and. IYB(J). eq. IY+1. and. IZB(J). eq. IZ ) then
            IWK(I) = IWK(I) + 1
            IPP(IWK(I), I) = J
        end if
&      if ( JX. eq. IX-1. and. JY. eq. IY-1. and. JZ. eq. IZ . and.
        IXB(J). eq. IX . and. IYB(J). eq. IY ) then
            IWK(I) = IWK(I) + 1
            IPP(IWK(I), I) = J
        end if
1      if ( JX. eq. IX . and. JY. eq. IY-1. and. JZ. eq. IZ . and.
        IYB(J). eq. IY ) then
            IWK(I) = IWK(I) + 1
            IPP(IWK(I), I) = J
        end if
2      if ( JX. eq. IX+1. and. JY. eq. IY-1. and. JZ. eq. IZ . and.
        IXB(J). eq. IX+1. and. IYB(J). eq. IY ) then
            IWK(I) = IWK(I) + 1
            IPP(IWK(I), I) = J
        end if
3      if ( JX. eq. IX-1. and. JY. eq. IY . and. JZ. eq. IZ . and.
        IXB(J). eq. IX ) then
            IWK(I) = IWK(I) + 1
            IPP(IWK(I), I) = J
        end if
4      if ( JX. eq. IX+1. and. JY. eq. IY . and. JZ. eq. IZ . and.
        IXB(J). eq. IX+1 ) then
            IWK(I) = IWK(I) + 1
            IPP(IWK(I), I) = J
        end if
6      if ( JX. eq. IX-1. and. JY. eq. IY+1. and. JZ. eq. IZ . and.
        IXB(J). eq. IX . and. IYB(J). eq. IY+1 ) then
            IWK(I) = IWK(I) + 1
            IPP(IWK(I), I) = J
        end if
7      if ( JX. eq. IX . and. JY. eq. IY+1. and. JZ. eq. IZ . and.
        IYB(J). eq. IY+1 ) then
            IWK(I) = IWK(I) + 1
            IPP(IWK(I), I) = J
        end if
8      if ( JX. eq. IX+1. and. JY. eq. IY+1. and. JZ. eq. IZ . and.
        IXB(J). eq. IX+1. and. IYB(J). eq. IY+1 ) then
            IWK(I) = IWK(I) + 1
            IPP(IWK(I), I) = J
        end if
9      if ( JX. eq. IX-1. and. JY. eq. IY-1. and. JZ. eq. IZ+1. and.
        IXB(J). eq. IX . and. IYB(J). eq. IY . and. IZB(J). eq. IZ+1) then
            IWK(I) = IWK(I) + 1
            IPP(IWK(I), I) = J
        end if
&      if ( JX. eq. IX . and. JY. eq. IY-1. and. JZ. eq. IZ+1. and.
        IYB(J). eq. IY . and. IZB(J). eq. IZ+1) then
            IWK(I) = IWK(I) + 1

```

```

        IPP(IWK(I), I) = J
    end if
    if ( JX.eq. IX+1. and. JY.eq. IY-1. and. JZ.eq. IZ+1. and.
1      IXB(J).eq. IX+1. and. IYB(J).eq. IY . and. IZB(J).eq. IZ+1) then
        IWK(I) = IWK(I) + 1
        IPP(IWK(I), I) = J
    end if
    if ( JX.eq. IX-1. and. JY.eq. IY . and. JZ.eq. IZ+1. and.
2      IXB(J).eq. IX . and. IZB(J).eq. IZ+1) then
        IWK(I) = IWK(I) + 1
        IPP(IWK(I), I) = J
    end if
    if ( JX.eq. IX . and. JY.eq. IY . and. JZ.eq. IZ+1. and.
3      IZB(J).eq. IZ+1) then
        IWK(I) = IWK(I) + 1
        IPP(IWK(I), I) = J
    end if
    if ( JX.eq. IX+1. and. JY.eq. IY . and. JZ.eq. IZ+1. and.
4      IXB(J).eq. IX+1. and. IZB(J).eq. IZ+1) then
        IWK(I) = IWK(I) + 1
        IPP(IWK(I), I) = J
    end if
    if ( JX.eq. IX-1. and. JY.eq. IY+1. and. JZ.eq. IZ+1. and.
5      IXB(J).eq. IX . and. IYB(J).eq. IY+1. and. IZB(J).eq. IZ+1) then
        IWK(I) = IWK(I) + 1
        IPP(IWK(I), I) = J
    end if
    if ( JX.eq. IX . and. JY.eq. IY+1. and. JZ.eq. IZ+1. and.
6      IYB(J).eq. IY+1. and. IZB(J).eq. IZ+1) then
        IWK(I) = IWK(I) + 1
        IPP(IWK(I), I) = J
    end if
    if ( JX.eq. IX+1. and. JY.eq. IY+1. and. JZ.eq. IZ+1. and.
7      IXB(J).eq. IX+1. and. IYB(J).eq. IY+1. and. IZB(J).eq. IZ+1) then
        IWK(I) = IWK(I) + 1
        IPP(IWK(I), I) = J
    end if
end do
NPP(I) = IWK(I)
end do
Check
C write(6, '(2(2X, 5I5))') (I, IP(I), IXB(I), IYB(I), IZB(I), I=1, NNR+NADD)
C
C ===== Output of MVP geometry data =====
C
    write(IU, '(A)') '***** from MCRDF results *****'
    write(IU, '(A)') '$GEOMETRY'
    if ( PFCR.eq.0.0 )
& write(IU, '(A22, I2, A6, F6.3)') '* from MCRDF, IBATCH =', IBATCH,
& ' PF =', PFC
    if ( PFCR.gt.0.0 )
& write(IU, '(A22, I2, A6, F6.3, A3, F6.3)') '* from MCRDF, IBATCH =',
& IBATCH, ' PF =', PFC, '-->', PFCR
    write(IU, '(A)') '% R = 1.'
    write(IU, '(A7, 1pD13.6, A)') '% AA =', AA, '*R'
    write(IU, '(A7, 1pD13.6, A)') '% DA =', DA, '*R'
    write(IU, '(A9, I3)') '% NXYZ =', NXYZ
C
C ..... BODY DATA .....
    write(IU, '(A)') '***** BODY DATA *****'
    IB = 10000
    write(IU, '(A5, I5, 3A16)') ' RPP(', IB, ' <-AA/2> <AA/2> ',
& ' <-AA/2> <AA/2> ', ' <-AA/2> <AA/2>)'
    do IZ = 1, NXYZ
        LZ(1:27) = ' <-AA/2+DA* > <-AA/2+DA* >)'
        write(LZ(12:12), '(I1)') IZ-1
        write(LZ(25:25), '(I1)') IZ
        if( IZ.eq. NXYZ ) LZ(15:27) = ' < AA/2 >)'
    end do

```

```

do IY = 1, NXYZ
  LY(1:27) = ' <-AA/2+DA* > <-AA/2+DA* > '
  write(LY(12:12), '(I1)') IY-1
  write(LY(25:25), '(I1)') IY
  if( IY.eq.NXYZ ) LY(15:27) = ' < AA/2 > '
  do IX = 1, NXYZ
    IB = IB + 1
    LX(1:27) = ' <-AA/2+DA* > <-AA/2+DA* > '
    write(LX(12:12), '(I1)') IX-1
    write(LX(25:25), '(I1)') IX
    if( IX.eq.NXYZ ) LX(15:27) = ' < AA/2 > '
    write(IU, '(A5, I5, A27)') RPP(' ', IB, LX(1:27))
    write(IU, '(10X, 2A27)') LY(1:27), LZ(1:27)
  end do
end do
end do
C
do I = 1, NNR+NADD
  IB = I
  write(IU, '(A5, I5, 3(A2, 1pD13.6, A3), A5)') ' SPH(' ', IB, ' < ',
& X(I), '*R>', ' < ', Y(I), '*R>', ' < ', Z(I), '*R>', ' <R>')
  end do
  write(IU, '(A3)') 'END'
C
C ..... ZONE Definition
write(IU, '(A)') '***** ZONE DATA *****'
IB = 10000
write(IU, '(A, I6)') ' OUTER : : -4000 : ', -IB
C
LX(1:28) = ' MATRIX : MATRIX : <MMATR> :'
LY(1:28) = ' FUEL : FUEL : <MFUEL> :'
LZ(1:5) = ''
OR(1:4) = ' OR '
do IR = 1, NXYZ3
  IB = 10000 + IR
  write(IU, '(A, I6)') LX(1:28), IB
  if ( NPP(IR).gt.0 ) then
    JS = 1
200    continue
    JE = MIN( NPP(IR), JS+9 )
    write(IU, '(A, 10I6)') LZ(1:5), (-IPP(J, IR), J=JS, JE)
    JS = JE + 1
    if ( JS.le.NPP(IR) ) go to 200
  end if
  if ( NPP(IR).gt.0 ) then
    write(IU, '(A)') LY(1:28)
    JS = 1
210    continue
    JE = MIN( NPP(IR), JS+3 )
    write(IU, '(A, 4(A4, 2I6)')
& LZ(1:5), (OR, IB, IPP(J, IR), J=JS, JE)
    JS = JE + 1
    if ( JS.le.NPP(IR) ) go to 210
  end if
end do
C
write(IU, '(A)') '$END GEOMETRY'
write(IU, '(A)') '***** End of Geometry data from MCRDF *****'
C
close(IU)
go to 100
999 continue
C
close(1)
C
stop
end

```

This is a blank page.

国際単位系（SI）

表 1. SI 基本単位

基本量	SI 基本単位	
	名称	記号
長さ	メートル	m
質量	キログラム	kg
時間	秒	s
電流	アンペア	A
熱力学温度	ケルビン	K
物質량	モル	mol
光度	カンデラ	cd

表 2. 基本単位を用いて表されるSI組立単位の例

組立量	SI 組立単位	
	名称	記号
面積	平方メートル	m ²
体積	立方メートル	m ³
速度	メートル毎秒	m/s
加速度	メートル毎秒毎秒	m/s ²
波数	毎メートル	m ⁻¹
密度, 質量密度	キログラム毎立方メートル	kg/m ³
面積密度	キログラム毎平方メートル	kg/m ²
比体積	立方メートル毎キログラム	m ³ /kg
電流密度	アンペア毎平方メートル	A/m ²
磁界の強さ	アンペア毎メートル	A/m
量濃度 ^(a) , 濃度	モル毎立方メートル	mol/m ³
質量濃度	キログラム毎立方メートル	kg/m ³
輝度	カンデラ毎平方メートル	cd/m ²
屈折率 ^(b)	(数字の) 1	1
比透磁率 ^(b)	(数字の) 1	1

(a) 量濃度 (amount concentration) は臨床化学の分野では物質濃度 (substance concentration) ともよばれる。
(b) これらは無次元量あるいは次元 1 をもつ量であるが、そのことを表す単位記号である数字の 1 は通常は表記しない。

表 3. 固有の名称と記号で表されるSI組立単位

組立量	SI 組立単位			
	名称	記号	他のSI単位による表し方	SI基本単位による表し方
平面角	ラジアン ^(b)	rad	1 ^(b)	m/m
立体角	ステラジアン ^(b)	sr ^(c)	1 ^(b)	m ² /m ²
周波数	ヘルツ ^(d)	Hz		s ⁻¹
力	ニュートン	N		m kg s ⁻²
圧力, 応力	パスカル	Pa	N/m ²	m ⁻¹ kg s ⁻²
エネルギー, 仕事, 熱量	ジュール	J	N m	m ² kg s ⁻²
仕事率, 工率, 放射束	ワット	W	J/s	m ² kg s ⁻³
電荷, 電気量	クーロン	C		s A
電位差 (電圧), 起電力	ボルト	V	W/A	m ² kg s ⁻³ A ⁻¹
静電容量	ファラド	F	C/V	m ⁻² kg ⁻¹ s ⁴ A ²
電気抵抗	オーム	Ω	V/A	m ² kg s ⁻³ A ⁻²
コンダクタンス	ジーメンズ	S	A/V	m ⁻² kg ⁻¹ s ³ A ²
磁束	ウェーバ	Wb	Vs	m ² kg s ⁻² A ⁻¹
磁束密度	テスラ	T	Wb/m ²	kg s ⁻² A ⁻¹
インダクタンス	ヘンリー	H	Wb/A	m ² kg s ⁻² A ⁻²
セルシウス温度	セルシウス度 ^(e)	°C		K
光束度	ルーメン	lm	cd sr ^(c)	cd
照射度	ルクス	lx	lm/m ²	m ⁻² cd
放射性核種の放射能 ^(f)	ベクレル ^(d)	Bq		s ⁻¹
吸収線量, 比エネルギー分与, カーマ	グレイ	Gy	J/kg	m ² s ⁻²
線量当量, 周辺線量当量, 方向性線量当量, 個人線量当量	シーベルト ^(g)	Sv	J/kg	m ² s ⁻²
酸素活性化	カタール	kat		s ⁻¹ mol

(a) SI接頭語は固有の名称と記号を持つ組立単位と組み合わせても使用できる。しかし接頭語を付した単位はもはやコヒーレントではない。
(b) ラジアンとステラジアンは数字の 1 に対する単位の特別な名称で、量についての情報をつたえるために使われる。実際には、使用する時には記号rad及びsrが用いられるが、習慣として組立単位としての記号である数字の 1 は明示されない。
(c) 測光学ではステラジアンという名称と記号srを単位の表し方の中に、そのまま維持している。
(d) ヘルツは周期現象についてののみ、ベクレルは放射性核種の統計的過程についてののみ使用される。
(e) セルシウス度はケルビンの特別な名称で、セルシウス温度を表すために使用される。セルシウス度とケルビンの単位の大きさは同一である。したがって、温度差や温度間隔を表す数値はどちらの単位で表しても同じである。
(f) 放射性核種の放射能 (activity referred to a radionuclide) は、しばしば誤った用語で"radioactivity"と記される。
(g) 単位シーベルト (PV, 2002, 70, 205) についてはCIPM勧告2 (CI-2002) を参照。

表 4. 単位の中に固有の名称と記号を含むSI組立単位の例

組立量	SI 組立単位		
	名称	記号	SI 基本単位による表し方
粘着力のモーメント	パスカル秒	Pa s	m ⁻¹ kg s ⁻¹
表面張力	ニュートンメートル	N m	m ² kg s ⁻²
角速度	ニュートン毎メートル	N/m	kg s ⁻²
角加速度	ラジアン毎秒	rad/s	m m ⁻¹ s ⁻¹ =s ⁻¹
角速度	ラジアン毎秒毎秒	rad/s ²	m m ⁻¹ s ⁻² =s ⁻²
熱流密度, 放射照度	ワット毎平方メートル	W/m ²	kg s ⁻³
熱容量, エントロピー	ジュール毎ケルビン	J/K	m ² kg s ⁻² K ⁻¹
比熱容量, 比エントロピー	ジュール毎キログラム毎ケルビン	J/(kg K)	m ² s ⁻² K ⁻¹
比エネルギー	ジュール毎キログラム	J/kg	m ² s ⁻²
熱伝導率	ワット毎メートル毎ケルビン	W/(m K)	m kg s ⁻³ K ⁻¹
体積エネルギー	ジュール毎立方メートル	J/m ³	m ⁻¹ kg s ⁻²
電界の強さ	ボルト毎メートル	V/m	m kg s ⁻³ A ⁻¹
電荷密度	クーロン毎立方メートル	C/m ³	m ⁻³ s A
電表面電荷	クーロン毎平方メートル	C/m ²	m ⁻² s A
電束密度, 電気変位	クーロン毎平方メートル	C/m ²	m ⁻² s A
誘電率	ファラド毎メートル	F/m	m ³ kg ⁻¹ s ⁴ A ²
透磁率	ヘンリー毎メートル	H/m	m kg s ⁻² A ⁻²
モルエネルギー	ジュール毎モル	J/mol	m ² kg s ⁻² mol ⁻¹
モルエントロピー, モル熱容量	ジュール毎モル毎ケルビン	J/(mol K)	m ² kg s ⁻² K ⁻¹ mol ⁻¹
照射線量 (X線及びγ線)	クーロン毎キログラム	C/kg	kg ⁻¹ s A
吸収線量率	グレイ毎秒	Gy/s	m ² s ⁻³
放射線強度	ワット毎ステラジアン	W/sr	m ⁴ m ⁻² kg s ⁻³ =m ² kg s ⁻³
放射輝度	ワット毎平方メートル毎ステラジアン	W/(m ² sr)	m ² m ⁻² kg s ⁻³ =kg s ⁻³
酵素活性濃度	カタール毎立方メートル	kat/m ³	m ⁻³ s ⁻¹ mol

表 5. SI 接頭語

乗数	名称	記号	乗数	名称	記号
10 ²⁴	ヨタ	Y	10 ⁻¹	デシ	d
10 ²¹	ゼタ	Z	10 ⁻²	センチ	c
10 ¹⁸	エクサ	E	10 ⁻³	ミリ	m
10 ¹⁵	ペタ	P	10 ⁻⁶	マイクロ	μ
10 ¹²	テラ	T	10 ⁻⁹	ナノ	n
10 ⁹	ギガ	G	10 ⁻¹²	ピコ	p
10 ⁶	メガ	M	10 ⁻¹⁵	フェムト	f
10 ³	キロ	k	10 ⁻¹⁸	アト	a
10 ²	ヘクト	h	10 ⁻²¹	ゼプト	z
10 ¹	デカ	da	10 ⁻²⁴	ヨクト	y

表 6. SIに属さないが、SIと併用される単位

名称	記号	SI 単位による値
分	min	1 min=60 s
時	h	1 h=60 min=3600 s
日	d	1 d=24 h=86 400 s
度	°	1°=(π/180) rad
分	′	1′=(1/60)°=(π/10 800) rad
秒	″	1″=(1/60)′=(π/648 000) rad
ヘクタール	ha	1 ha=1 hm ² =10 ⁴ m ²
リットル	L, l	1 L=1 l=1 dm ³ =10 ³ cm ³ =10 ⁻³ m ³
トン	t	1 t=10 ³ kg

表 7. SIに属さないが、SIと併用される単位で、SI単位で表される数値が実験的に得られるもの

名称	記号	SI 単位で表される数値
電子ボルト	eV	1 eV=1.602 176 53(14)×10 ⁻¹⁹ J
ダルトン	Da	1 Da=1.660 538 86(28)×10 ⁻²⁷ kg
統一原子質量単位	u	1 u=1 Da
天文単位	ua	1 ua=1.495 978 706 91(6)×10 ¹¹ m

表 8. SIに属さないが、SIと併用されるその他の単位

名称	記号	SI 単位で表される数値
バール	bar	1 bar=0.1 MPa=100 kPa=10 ⁵ Pa
水銀柱ミリメートル	mmHg	1 mmHg=133.322 Pa
オングストローム	Å	1 Å=0.1 nm=100 pm=10 ⁻¹⁰ m
海里	M	1 M=1852 m
バイン	b	1 b=100 fm ² =(10 ¹² cm) ² =10 ⁻²⁸ m ²
ノット	kn	1 kn=(1852/3600) m/s
ネーパ	Np	SI単位との数値的な関係は、 対数量の定義に依存。
ベレル	B	
デシベール	dB	

表 9. 固有の名称をもつCGS組立単位

名称	記号	SI 単位で表される数値
エル	erg	1 erg=10 ⁻⁷ J
ダイン	dyn	1 dyn=10 ⁻⁵ N
ポアズ	P	1 P=1 dyn s cm ⁻² =0.1 Pa s
ストークス	St	1 St=1 cm ² s ⁻¹ =10 ⁻⁴ m ² s ⁻¹
スチルブ	sb	1 sb=1 cd cm ⁻² =10 ⁴ cd m ⁻²
フオト	ph	1 ph=1 cd sr cm ⁻² =10 ⁴ lx
ガリ	Gal	1 Gal=1 cm s ⁻² =10 ⁻² ms ⁻²
マクスウェル	Mx	1 Mx=1 G cm ² =10 ⁻⁸ Wb
ガウス	G	1 G=1 Mx cm ⁻² =10 ⁻⁴ T
エルステッド ^(a)	Oe	1 Oe ≡ (10 ³ /4 π) A m ⁻¹

(a) 3 元系のCGS単位系とSIでは直接比較できないため、等号「 ≡ 」は対応関係を示すものである。

表 10. SIに属さないその他の単位の例

名称	記号	SI 単位で表される数値
キュリー	Ci	1 Ci=3.7×10 ¹⁰ Bq
レントゲン	R	1 R = 2.58×10 ⁻⁴ C/kg
ラド	rad	1 rad=1 cGy=10 ⁻² Gy
レム	rem	1 rem=1 cSv=10 ⁻² Sv
ガンマ	γ	1 γ=1 nT=10 ⁻⁹ T
フェルミ	f	1 フェルミ=1 fm=10 ⁻¹⁵ m
メートル系カラット		1 メートル系カラット=0.2 g = 2×10 ⁻⁴ kg
トル	Torr	1 Torr = (101 325/760) Pa
標準大気圧	atm	1 atm = 101 325 Pa
カロリ	cal	1 cal=4.1858 J (「15℃」カロリ), 4.1868 J (「IT」カロリ), 4.184 J (「熱化学」カロリ)
ミクロン	μ	1 μ =1 μm=10 ⁻⁶ m

