

JAERI-Data/Code

96-016



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

1996年3月

村田 熊<sup>\*</sup>・森 貴正・中川正幸・白井浩史<sup>\*\*</sup>

日本原子力研究所  
Japan Atomic Energy Research Institute

本レポートは、日本原子力研究所が不定期に公刊している研究報告書です。

入手の問合せは、日本原子力研究所技術情報部情報資料課（〒319-11 茨城県那珂郡東海村）あて、お申し越しください。なお、このほかに財団法人原子力弘済会資料センター（〒319-11 茨城県那珂郡東海村日本原子力研究所内）で複写による実費頒布をおこなっております。

This report is issued irregularly.

Inquiries about availability of the reports should be addressed to Information Division, Department of Technical Information, Japan Atomic Energy Research Institute, Tokaimura, Naka-gun, Ibaraki-ken 319-11, Japan.

© Japan Atomic Energy Research Institute, 1996

編集兼発行 日本原子力研究所

印 刷 (株)原子力資料サービス

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

日本原子力研究所東海研究所原子炉工学部

村田 勲\*・森 貴正・中川 正幸

白井 浩史\*\*

(1996年2月26日受理)

HTGRで用いられている燃料体は、通常、燃料要素としてUO<sub>2</sub>の燃料核をセラミックで被覆した球状燃料体を用いている。従って、この原子炉の設計では、多数の球状燃料体が不規則に配列している体系を取り扱うことになるため、現状では、衝突確率法等の近似を用いて作成した実効断面積を用いるなどして核設計を実施している。

本報は、このような球状燃料体を多数含む体系を正確に取り扱うことができるモンテカルロ法に基づく計算に必要な、不規則に配列した球の空間分布を計算するコードについて、そのモデル、計算法、検証及び使用方法等をまとめたものである。

このコードにより、多数の球が不規則に配列した体系はもちろん面心立方格子、体心立方格子等の規則配列体系について、体系の統計量、すなわち径方向分布関数(Radial distribution function)、最近接粒子分布(Nearest neighbor distribution)、2次元径方向分布関数(2-dimensional radial distribution function)、球入射角度分布、隣接球分布等を評価することができる。

---

東海研究所：〒319-11 茨城県那珂郡東海村白方白根2-4

\* 大阪大学

\*\* アンプテクノロジージャパン株式会社

Packing Simulation Code to Calculate Distribution Function of Hard Spheres  
by Monte Carlo Method : MCRDF

Isao MURATA\*, Takamasa MORI, Masayuki NAKAGAWA  
and Hiroshi SHIRAI\*\*

Department of Reactor Engineering  
Tokai Research Establishment  
Japan Atomic Energy Research Institute  
Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken

(Received February 26, 1996)

High Temperature Gas-cooled Reactors (HTGRs) employ spherical fuels named coated fuel particles (CFPs) consisting of a microsphere of low enriched UO<sub>2</sub> with coating layers in order to prevent FP release. There exist many spherical fuels distributed randomly in the cores. Therefore, the nuclear design of HTGRs is generally performed on the basis of the multigroup approximation using a diffusion code, S<sub>N</sub> transport code or group-wise Monte Carlo code. This report summarizes a Monte Carlo hard sphere packing simulation code to simulate the packing of equal hard spheres and evaluate the necessary probability distribution of them, which is used for the application of the new Monte Carlo calculation method developed to treat randomly distributed spherical fuels with the continuous energy Monte Carlo method. By using this code, obtained are the various statistical values, namely Radial Distribution Function (RDF), Nearest Neighbor Distribution (NND), 2-dimensional RDF and so on, for random packing as well as ordered close packing of FCC and BCC.

Keywords: Spherical Fuel, Packing Simulation, Random Distribution, Radial Distribution Function, Nearest Neighbor Distribution, Random Close Packing, Ordered Close Packing, Monte Carlo Method, HTGR, Coated Fuel Particle

---

\* Osaka University

\*\* AMP Technology Japan Ltd.

## 目 次

1.はじめに .....	1
2.剛体球充填模擬法 .....	2
3.各種統計量の計算 .....	5
3.1 RCP 状態の充填率 .....	5
3.2 径方向分布関数 (Radial distribution function (RDF)) .....	5
3.3 二次元径方向分布関数 (2-dimensional RDF) .....	6
3.4 隣接球分布関数 (Nearest neighbor distribution (NND)) .....	7
3.5 入射角度分布 .....	8
3.6 隣接球分布 .....	8
4. MCRDF の検証 .....	21
4.1 合金のX線回折結果との比較 .....	21
4.2 燃料コンパクト断面写真との比較 .....	21
4.2.1 断面写真の比較 .....	21
4.2.2 断面写真から作成した二次元 RDF の比較 .....	22
5. 統計的一様分布に対する NND .....	52
5.1 解析的表式 .....	52
5.2 MCRDF による結果との比較 .....	53
6. 入力データとジョブ制御文 .....	55
6.1 入力データ .....	55
6.2 ジョブ制御文 .....	56
7.まとめ .....	61
謝 辞 .....	61
参考文献 .....	62
付録A MCRDF の計算の流れとサブルーチンの概要 .....	63

## Contents

1. Introduction .....	1
2. Hard Sphere Packing Simulation Method .....	2
3. Calculation of Statistical Distribution .....	5
3.1 Packing Fraction of Random Close Packing .....	5
3.2 Radial Distribution Function (RDF) .....	5
3.3 Two Dimensional RDF .....	6
3.4 Nearest Neighbor Distribution (NND) .....	7
3.5 Angular Distribution of Particles Entering Spheres .....	8
3.6 Distribution of Faces with N Edges .....	8
4. Validation of MCRDF .....	21
4.1 Comparison of X-ray Diffraction Experiment .....	21
4.2 Comparison of Cross Section Photograph of Fuel Compact Containing Spherical Fuels .....	21
4.2.1 Comparison of Cross Section Photograph .....	21
4.2.2 Comparison of Two Dimensional RDF .....	22
5. NND with Statistical Uniform Distribution of Spheres .....	52
5.1 Analytical Expression .....	52
5.2 Comparison with Simulation Calculations by MCRDF .....	53
6. Input Data and Job Control Statements .....	55
6.1 Input Data .....	55
6.2 Job Control Statements .....	56
7. Summary .....	61
Acknowledgement .....	61
References .....	62
Appendix A Algorithm and Subroutines of MCRDF .....	63

## 1. はじめに

HTGRで用いられている燃料体は、高温の出口冷却材温度を目指しているため、通常、燃料として $\text{UO}_2$ の燃料核をセラミックで被覆した球状燃料体を用いる。この原子炉を対象とした核設計は、多数の球状燃料体が不規則に配列している体系を取り扱う必要があるため、衝突確率法等を用いて作成した均質化断面積を用いるなどの方法を用いてきた<sup>(1)</sup>。しかし、これらの手法では、どうしてもスペクトル計算や形状モデルに近似が入ることが避けられないのが現状である。

最近、このような球状燃料体を多数含む体系を正確に取り扱うための手法が提案された<sup>(2)</sup>。この手法は、モンテカルロ法を用いるものであり、球状燃料体の幾何形状を確率的に取り扱うことにより、全ての球状燃料体の位置が分かっていなくとも、飛行粒子の軌跡上に次々に球状燃料体の設置位置を確率的にサンプリングし、設置していくことにより、正確な計算を可能にしようというものである。

この手法では、球状燃料体をサンプリングするときに必要になる、球状燃料体の空間分布を予め用意しておく必要がある。この分布（最近接球分布<sup>(2)</sup>（Nearest Neighbor Distribution (NND)））は、(1)Percus-Yevick方程式<sup>(3)</sup>による近似的手法、(2)一様に球が分布しているとの仮定による解析的手法<sup>(2)</sup>、また、(3)合金などの物性研究に用いられる充填模擬法<sup>(4, 5)</sup>によりそれぞれ求めることができる。(1)及び(2)の方法では、解析的なかたちでNNDを表現することができる。一方、(3)の充填模擬法は、元々合金の物性を調べるために開発されたものである。合金の原子配列は、容器に剛体球を注いでできたランダムな状態に大変近いことが知られており<sup>(5)</sup>、この状態を模擬することができる。多数の球状燃料体を含む燃料コンパクトを取り扱う場合には、できるだけ高い充填率の球状燃料体の充填状態をつくる必要がある。この状態は、Random Close Packing (RCP)<sup>(6)</sup>状態として知られており、RCPを狙った模擬計算コードも多数知られている<sup>(4, 5, 7~9)</sup>。本研究では、RCPに近い高い充填状態を比較的短時間で達成できるコードの開発を行い、実験値等と比較することによってその妥当性を検証した。

本報では、上記3つの方法によって求めたNNDの比較結果、充填模擬法により求められた多数の球状燃料体が不規則に配置する系のNND等の統計量を評価する計算手法、開発したコードの妥当性の検証結果並びにそのコードの特徴及び使用方法について述べる。まず、2章では球状燃料体の充填を模擬する方法と計算コードについて具体的に述べる。3章には、そのコードを用いて評価できる種々の統計量について述べる。4章では、開発したコードの検証について、5章では、本研究で考察した上記(2)の解析的手法について、そして6章では、コードの入力データ等についてそれぞれ述べる。

## 2. 剛体球充填模擬法

本研究で開発したコード(MCRDF)の基本的な考え方そのものは、極めて簡単である。ある充填率の充填状態を模擬する場合、その充填率から決まる所定の数の球がある大きさの箱にランダムに詰めていく。球は、中心点と半径により定義される。球の充填は、周期境界条件を用いて行う。すなわち箱の境界にきた場合には、その隣に同じ箱があるがごとく扱う。初めの充填後、いくつかの球は重なることとなる。この重なりは、設置位置修正法(例えば文献(5))を用いて取り除くこととなる。基本は、着目している球に重なっている球の、重なっている部分のベクトルの合成分だけ着目球を動かすことである。これを次々に繰り返すことにより、重なり幅を減らしていくことができる。しかし、実際に高い充填率の充填状態を得るためにには、このほか様々な工夫をする必要があることが知られている。

この方法の他、例えばBennett<sup>(7)</sup>は数学的に蒸気吸着法に類似すると考えられる剛体球の新しいパッキングの方法を提案している。まず球の集まった種クラスタを考え、追加球を1つ1つクラスタ内で3つの球と接触しているクラスタの表面の特定の場所に設置する。しかし、この方法では、充填後の設置位置修正を実施していないためパッキングが非均質となってしまう欠点がある<sup>(8)</sup>。最近、剛体球の均質で等方なパッキングを実現するために様々な数値模擬が実施されている。例えば、境界条件を取り除いた設置位置修正を行うもの<sup>(8)</sup>、内側の直径と外側の直径を持つ二重構造の仮想的な球を仮定し、複雑なアルゴリズムにより重なりを取り除くもの<sup>(4)</sup>などにより実施されている。

本研究では、燃料コンパクト内の球状燃料体を模擬するために、できるだけ短時間でできるだけRCP状態に近い高い充填率で充填模擬することを目的に、さらに、パッキングを均質にして等方的に行うことを目指したコード開発を行った。

新しく開発したコードMCRDFは球の充填模擬を実施し、種々の統計量を計算するプログラムである。基本的な充填手法の考え方は、上記した通常のものと変わらないが、高い充填率を短時間で実現するために、重なりを取り除く手法に工夫を凝らした。

粒子の重なりを取り除く最も簡単な、そして確実と考えられるアジャスト法は既に述べたように「着目している粒子と重なっている粒子との位置ベクトルの差の平均値ベクトルだけ、着目粒子を動かす」ことである。具体的には以下の式で計算されたベクトル分だけ着目球を移動させることとなる。

$$\vec{v} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \vec{d}_i$$

ここで、nは重なり合っている粒子の数。 $\vec{d}_i$ は粒子同士の重なりベクトル。

この方法では、充填率が~60%程度までは、比較的短時間で充填することができる。しかし、それ以上充填率を上げることは困難であり、アジャストによる粒子位置の変化が、周期的に反復されるようになり、収束しない、いわゆるロック状態になってしまふ。そこで、ロック状態にならないようにして、さらに充填率を上げるために、アジャストにランダム性を取り入れる

こととした。本コードでは、粒子位置及びアジャストベクトルに対し、ランダム性を取り入れた。前者は、粒子の絶対位置をそのまわりの粒子の位置に全く関係なく、ランダムに動かすことを意味している。後者は、アジャストベクトルに対し、その方向と絶対量にランダム性をもたらせることを意味している。低充填率（～60%）では、位置のランダム性はほとんど効果がないことが分かったのに対し、ベクトルのランダム性は大きな効果があることが分かった。ランダム性の大きさは、Table 2.1に示すようにベクトルの5%が良いことが分かった。

しかし、高充填率（～63%）になると、この手法でもロックするようになる。理由は、部分的にはほぼ最適の配置となっているが、全体的には片寄りがある配置となっているためと考えられた。解決策として、大きな重なりは確実に取り除きながら全体に影響を及ぼし、一方では、部分的な最適化を達成できるようなアジャスト方法が必要であると考えられ、ベクトルランダム合成法を開発した。ベクトルランダム合成法によるアジャストは次のベクトルにより実施する。

$$\vec{V} = C \vec{e}$$

ここで、Cは移動させる絶対量を表している。 $\vec{e}$ とCは次のように表せる。

$$\vec{e} = \sum_{i=1}^n \vec{d}_i / \left| \sum_{i=1}^n \vec{d}_i \right|,$$

$$C = 0.5 \cdot \max \left( \left| \vec{d}_1 \right|, \left| \vec{d}_2 \right|, \dots, \left| \vec{d}_n \right| \right) \cdot \eta$$

ここで、nは重なり球の数、 $\vec{d}_i$ は球間の重なりベクトル、 $\eta$ は経験的に決定されたランダム因子であり、Table 2.1に示すとおり5% ( $\eta = 0.95$  or  $1.05$ ) が良い。

$\vec{d}_i$ は次式で表される。

$$\vec{d}_i = \{ 2 \vec{r}_o - \vec{r}_i - \vec{r}_j \} \cdot \frac{\vec{r}_i - \vec{r}_j}{\left| \vec{r}_i - \vec{r}_j \right|}$$

ここで、 $\vec{r}_o$ は注目球の位置ベクトル、 $\vec{r}_i$ は重なり球の位置ベクトル、 $r_o$ は球の半径である。

本手法では、最も大きな重なり幅の半分は確実に移動させるため、一見、全く収束しないよう見えるが、重なり幅が大きい（初期のアジャスト）うちは、全体をアジャストする効果を持ち、その後、重なり幅が小さくなると、部分的な重なりの除去に寄与することとなる。MCRDFでは、これに加え、低充填率では、効きの悪かった粒子位置をランダムに動かす方法も取り入れることとした。これは、充填率が特に高くなる (>63%) と威力を發揮する。

上記のアジャストプロセスを繰り返すことにより、球の重なりは徐々に減少していくが設置位置修正法による充填では一般的に完全に重なりを取り除くことはできない。このため、通常重なり幅の最大値がある許容値以下になったとき、全ての球の半径を若干減少させることにより、完全に重なりのない状態の充填を実現している。MCRDFを用い、球500個の系で、ほぼRCF状態である充填率0.635の状態を達成するためには、日本原子力研究所大型計算機FACOM VP-2600を用いて約10分の計算が必要である。

MCRDFのアルゴリズムとサブルーチンの概要を付録Aに示す。

Table 2.1 Randomness and convergence rate of adjuster vectors

ランダム率	計算結果	収束度合*
2.5%	収束せず	$1.401 \times 10^{-3}$
5.0%	収束	$1.000 \times 10^{-3}$
10.0%	CPU time over	$1.063 \times 10^{-3}$
33.3%	CPU time over	$1.032 \times 10^{-3}$

\* : サイクル当たりの平均重なり割合

### 3. 各種統計量の計算

MCRDFは、ある充填率に対する充填状態を作成後、種々の統計量を計算する機能を有している。本章では、MCRDFで計算可能な種々の統計量について解説する。

#### 3.1 RCP状態の充填率

通常の計算では、充填率は入力データである。MCRDFは入力された充填率に対応する所定の数の球を充填する。しかし、いくらでも高い充填状態が達成されるわけではない。重なりをうまく取り除いても、63.5%を越える充填状態を得ることは大変難しい。充填模擬コードが達成できる最高充填率はそのコードの能力をみる上で重要であり、また、RCPの充填率がいくつであるのかは、この分野の研究者にとって大きな関心事となっている。

MCRDFによる模擬充填計算で達成される充填率は、ほぼRCP充填率の上限に達したと考えられるが、実際には、その上限値は世界的にもまだ確認されていない。1958年に3次元の球の充填は、 $18^{0.5} (\cos^{-1}(1/3) - \pi/3) = 0.7797$ を超えないことが証明されている<sup>(10)</sup>。通常は、面心立方格子の充填率  $\pi/18^{0.5}$  を超えないと信じられている。ランダムパッキングでは、その上限値 ( $\eta_{RCP}$ ) は、Table 3.1に示すように、さまざまな予想がなされている。球のランダムな充填実験<sup>(12)</sup>も実施されており、それによると  $\eta_{RCP} = 0.6366$  であり、1976年までは、ほぼ上限値と考えられていた。本手法では、Fig. 3.1に示すように  $\eta_{RCP} = 0.6386$  と予想されている。1976年以降  $0.6366$  を上回る結果がでてくるようになり、現在は  $0.64 \pm 0.02$ <sup>(6)</sup> が最も確からしい範囲であると考えられている。しかし、 $0.6366$  を超える結果は、計算コード上様々な工夫を施しており、もはやランダムでない可能性も否定できないと思われる。本手法では、約10分の計算で  $\eta_{RCP} = 0.635$  を達成しており、十分に等方な充填状態を実現していると考えられる。

#### 3.2 径方向分布関数 (Radial Distribution Function(RDF))

RDFは、参照球の中心から距離  $r$  離れた球殻内の単位体積あたりの球の中心の平均数の径方向分布として定義される。RDFの定義は、次の通りである (Fig. 3.3参照)。

$$RDF(r) = \frac{r \sim r + dr \text{ に含まれる球の数 } N}{4 \pi r^2 dr} \quad [\text{個数密度 } (n/cm^3)] \quad (3.1)$$

また、この式は必要に応じて、以下のように変換して使用する。

$$RDF_p(r) = \frac{N \cdot V_o}{4 \pi r^2 dr} \quad [\text{充填率}] \quad (3.2)$$

ここで、 $V_o$  は球の体積である。さらに、この式は、次式のように変形される。

$$RDF_r(r) = \frac{N \cdot V_o}{4 \pi r^2 dr \cdot f_p} \quad [\text{相対充填率}] \quad (3.3)$$

ここで、 $f_p$  は充填率を示す。

RDFは、レイトレース計算を行う必要はなく、CFPの中心位置が分かっていれば簡単に

求めることができる。Fig. 3.2はMCRDFで計算した充填率0.635のRDFを他の模擬計算結果と比較したものである。図から以下のことがわかる。RDFのピーク位置については、他の模擬計算の結果と良く一致している。我々の結果は球体追加法によるBennettの模擬計算結果と第1ピークと第2ピークの絶対値の若干の相違を除いて良く一致している。この相違は彼の方法では位置修正を実施していないために起こったと考えられる。また、RDFの第1ピークと第2ピークのピーク高さが、計算値間で微妙に異なっているが、この原因は、それぞれ充填率が若干異なるため及び充填方法が異なるためである。第1ピーク位置はFig. 3.4に示すように1.73直径位置であり、第2ピークは2直径位置である。1直径位置に形成される最も大きい第0ピークは着目粒子に隣接する粒子によるものである。第1'としてのピークが、5つの球により構成される正六面体の最長対角長さ位置、1.63直径( $=2\sqrt{6}/3$ )にピークができると予想され、実際隣接球分布(3.6節参照)計算の結果(Fig. 3.5参照)からも十分起こり得ると考えられるが、MCRDFによる計算の結果Fig. 3.5の計算ケースにおける4個の粒子が互いに接する確率は全て2%以下であり小さく、また正六面体形状になったものは全く無かった。以上の結果から、この状態は極めて希にしか起こらないことが確認できた。また、本計算では1.80~1.85直径に第1ピークから分離したピークが確認できるが構造と結び付けることはできなかった。

なお、実験結果との比較については、5.3節に述べた。

### 3.3 二次元径方向分布関数 (2-dimensional RDF)

球を含む体系の断面に現れる球の断面が2次元的にどのように分布しているかを表す量を2次元径方向分布関数(2-dimensional Radial Distribution Function(2d-RDF))と定義する。この量はMCRDFの計算結果を実験結果と比較するために新たに定義した量であるが、次のように、ある着目球から断面上距離 $r$ 離れた断面に垂直な高さ $2r$ 。( $r_0$ は球の半径)の円柱殻にその中心が含まれる球の数で表される(Fig. 3.6参照)。

$$2d-RDF(r) = \frac{r \sim r + dr \text{ に含まれる球の数 } N}{2\pi r dr} \quad [\text{個数密度 } (n/cm^3)] \quad (3.4)$$

この式は、必要に応じて、以下のように変換して使用する。

$$2d-RDF_p(r) = \frac{N \cdot V_0}{2\pi r \cdot dr} \quad [\text{充填率}] \quad (3.5)$$

ここで、 $V_0$ は粒子の体積を表す。また、

$$2d-RDF_r(r) = \frac{N \cdot V_0}{2\pi r \cdot dr \cdot f_p} \quad [\text{相対充填率}] \quad (3.6)$$

の様にも表される。ここで、 $f_p$ は充填率を表す。

2d-RDFの例Fig. 3.7に示す。図で破線はMCRDFにより求めたの30%充填状態の2d-RDFである。最大のピークは1直径に見られるが、接触している球が最も多いことを示している。実線はMCRDFにより1度RCF状態に充填した後、半径を減少させて30%の充填率としたも

のである。この場合、当然接触している粒子はないため、ピークは前者の場合より遠くに見られることとなる。この場所は、簡単に次式で与えられる。

$$\text{ピーク位置 (直径単位)} = (f' / f)^{1/3} \quad (3.7)$$

ここで、 $f'$ 、 $f$  はそれぞれ半径減少前後の充填率である。

この方法により得られた充填状態が燃料コンパクト内の球状燃料体の充填状態を良く再現することが分かっている。なお、実際のコンパクト断面との比較については、5.2節に示した。

### 3.4 隣接球分布関数 ( Nearest Neighbor Distribution(NND) )

モンテカルロコードにより球状燃料体を多数含む体系を計算する場合に最も重要なのが、最近接粒子分布 (Nearest Neighbor Distribution(NND)) である。この分布は、ある場所から距離  $r$  までに初めて他の球に入射する確率として定義される。従って、当然無限に離れた場所において 1 になる。この積算確率からサンプリングすることにより、球状燃料体がランダムに存在する領域に粒子が入射してきた場合の、球状燃料体の位置を知ることができる。NND 分布は次式で定義される (Fig. 3.8 参照)。

$$NND(r) = 1 - \frac{S}{4 \pi r^2} \quad (3.8)$$

ここで、 $S$  は中心から、球に邪魔されることなく見ることができる半径  $r$  の球面の面積。

NND 分布は、モンテカルロコードにより球状燃料体のサンプリングに使用する場合、その使用する場所により、以下の 3 種類の分布が必要になる<sup>(2)</sup>。①飛行粒子が球から出た時、②球が存在する領域内でかつ球外で飛行粒子が散乱したとき、そして、③球が存在する領域に入射してきた時。MCRDF ではこの 3 種類の NND の分布を計算することができる。計算例を Fig. 3.9 に示す。図で NND 1 ~ 3 が上記の①~③の場合の分布に相当する。図では、2 直径までの分布となっているが、実際には、充填率 30% 程度の場合で 15 直径程度で NND は 1 になるため、サンプリングに使用するためには、15 直径程度までのデータが必要になる。MCRDF による充填は計算時間とメモリ容量の関係上、1000 個の粒子を扱うのが精一杯となる。これは高々数直径の NND が評価できる数である。MCRDF は、体系からはみ出た粒子をもう一度体系内に戻すアルゴリズムとし、NND の確率が 1 になるまで計算できるように工夫されている。

NND 1 ~ 3 の計算方法の違いは、飛行粒子のスタート位置のみである。まとめて以下に示す。

NND 1 : 球の表面から余弦分布 (3.5 節参照) でスタート (オプション 1)

NND 2 : 球の表面から余弦分布でスタートした粒子が、球間に存在する物質と衝突した位置からスタート (オプション 2)

NND 3 : 球が存在する箱の表面からスタート (オプション 5)

(分布には、境界面と干渉している球も考慮しているため、実質的には、球間の任意の位置からのスタートによる NND と同じになる。)

なお、NNDについては、このほかにも以下の数種類の計算が可能である（詳細は付録A参照）。NND 2のオプション1として、充填立方体内部の球が占める領域以外の任意の場所からスタートした場合のNNDの計算、NND 3では充填立方体表面から法線ベクトル方向にスタートする場合の計算（オプション1）、スタート位置を充填立方体内とした場合の計算（オプション2～4）がそれぞれ可能である。NND 3のオプション2～4の相違については、付録Aで説明する。

### 3.5 入射角度分布

NND分布同様、モンテカルロコードにより実際に球状燃料体を含む体系の計算を実施する場合に必要となる分布が球状燃料体への粒子の入射角度分布である。入射角度分布は、NNDを計算する場合に同時にレイトレース法により求められる。全くランダムに球に入射する場合、理論的にはその分布は余弦分布になることが知られている。MC RDFによる充填率63.5%時の計算結果をFig. 3.10に示す。図から、スタート場所から1.5直径程度までは若干コサイン分布からずれることがわかる。しかし、Fig. 3.11に示すとおり、充填率が低い場合、もしくは、燃料コンパクトを模擬する場合のように、いったん高い充填率に充填してから、球の半径を減少させるかたちで充填率を低くした場合には、このような相違は生じない。

### 3.6 隣接球分布

ある着目球に対して、隣接している球の個数を考えるとき、その度数分布を隣接球分布という。この分布は、通常物性物理で合金の融点などを議論する場合に重要である。MC RDFでは、球の直径の1%より近づいた球を隣接球と定義している。ほぼRCP状態の充填率に対する計算例をFig. 3.5に示した。異なる充填率に対してほぼ同じ結果が得られている。ある球に着目した場合そのまわりに隣接している粒子は5～6個の場合が最も多いことが分かった。分布の傾向としては、充填率が上がると隣接個数は減少していくように見える。しかし、さらに高い充填率では、5個のピークが鋭くなるという結果が報告されている<sup>(5)</sup>。

Table 3.1 Particle packing fraction  $\eta_{\text{RCP}}$  in RCP state

$\eta_{\text{RCP}}$	年度	Reference	文献番号
0.62-0.64	1966	Haughey and Beveridge	(11)
0.6366±0.0005	1969	Scott and Kilgour	(12)
0.6366±0.0004	1970	Finney	(13)
0.62	1972	Bennett	(7)
0.64	1972	LeFevre	(14)
0.610-0.647	1974	Gotoh and Finney	(15)
0.637±0.002	1976	Woodcock	(16)
0.6436, 0.6537	1976	Gordon	(17)
0.665	1976	Finney	(8)
0.654	1981	Woodcock and Angell	(18)
0.6366	1981	Jodrey and Tory	(9)
0.638-0.647	1982	Aguilera-Navarro	(19)
0.64±0.02	1983	Berryman	(6)
0.642-0.649	1985	Jodrey and Tory	(4)
0.637, 0.645	1987	Clarke and Wiley	(5)

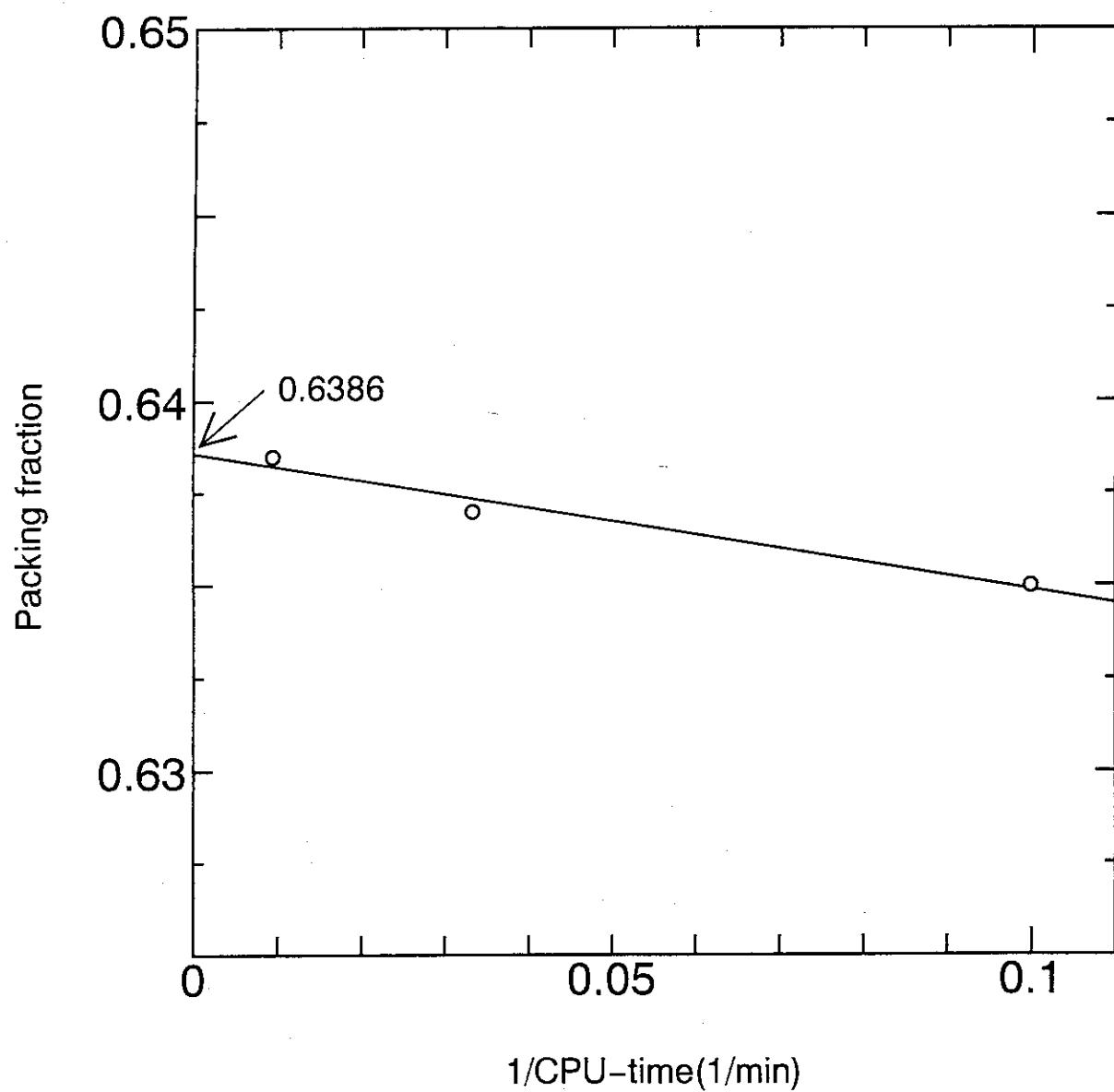


Fig. 3.1 Estimated maximum packing fraction of RCP

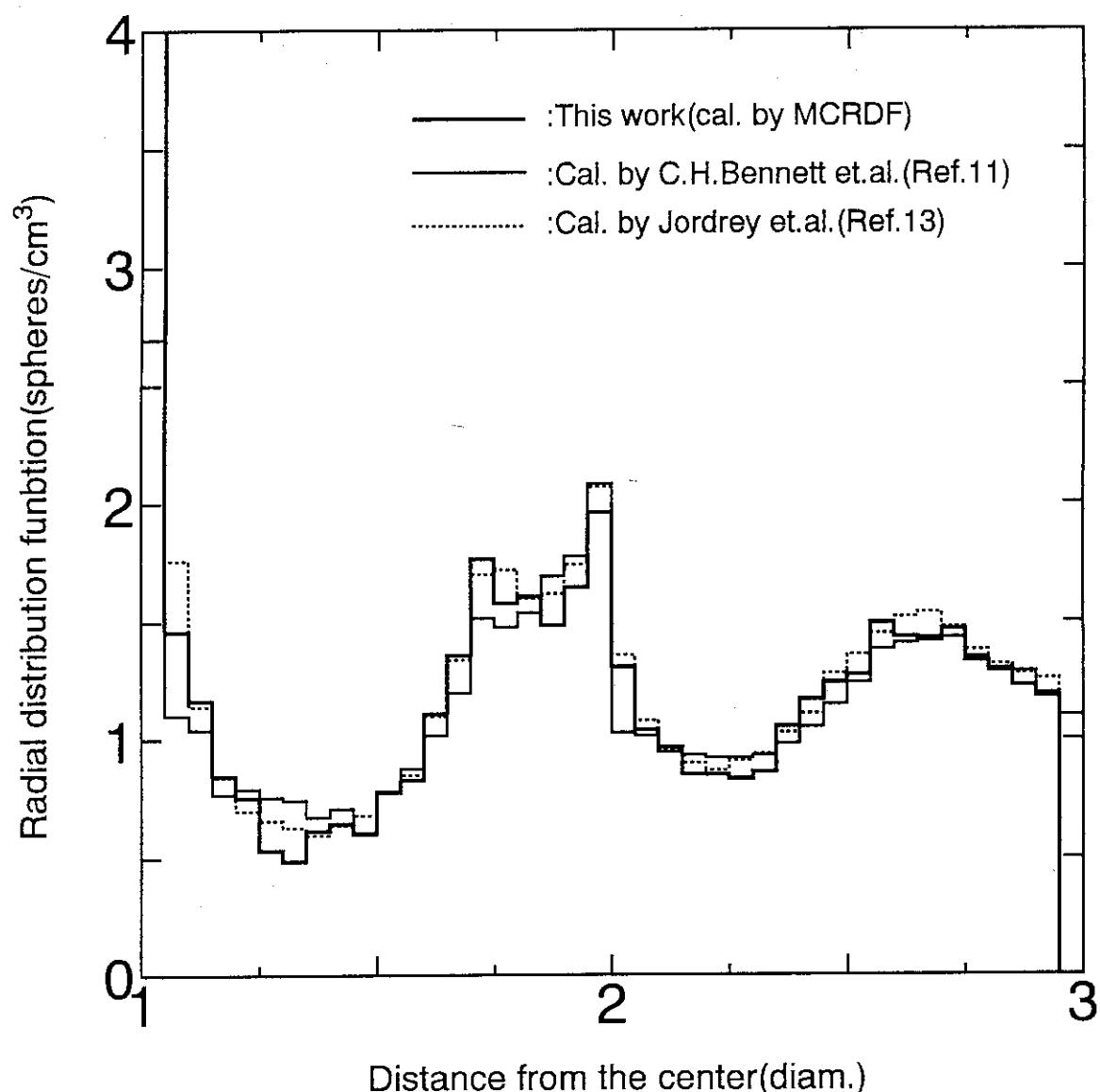
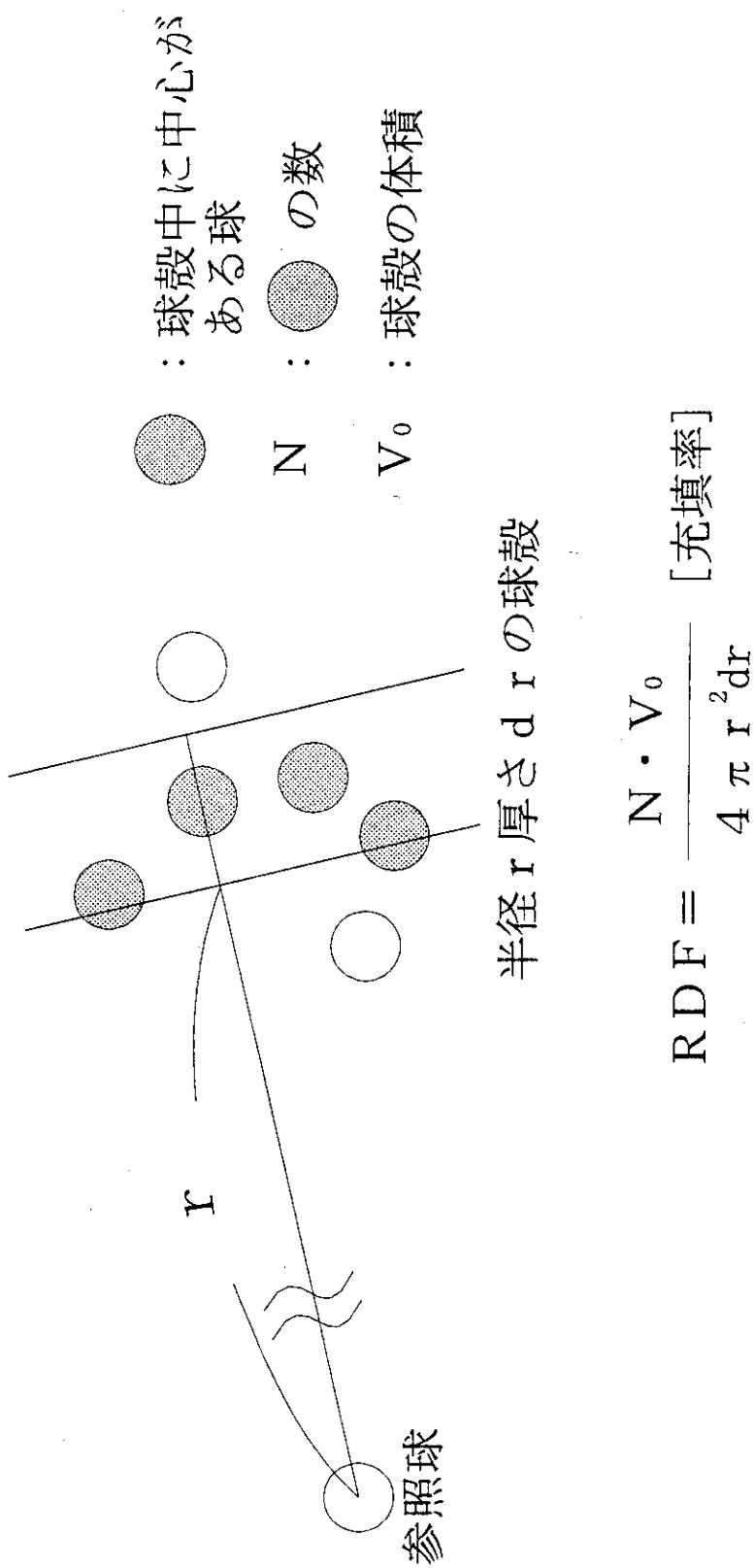
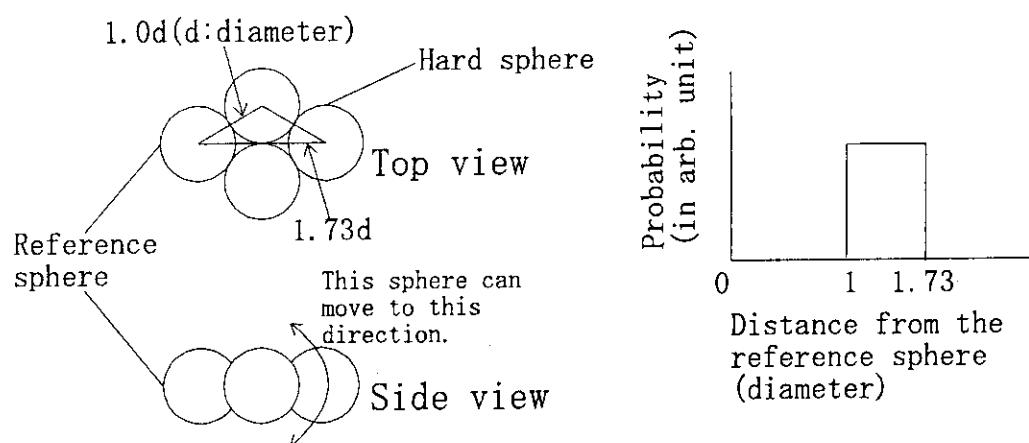


Fig. 3.2 Comparison of radial distribution functions  
(packing is nearly RCP)



$$RDF = \frac{N \cdot V_0}{4 \pi r^2 dr} \quad [\text{充填率}]$$

Fig. 3.3 Geometry model to obtain radial distribution function



(a) First peak

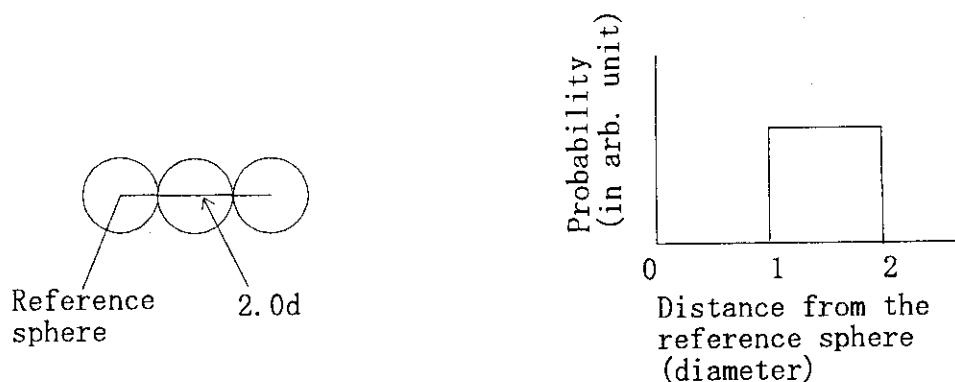


Fig. 3.4 Peak positions in RDF

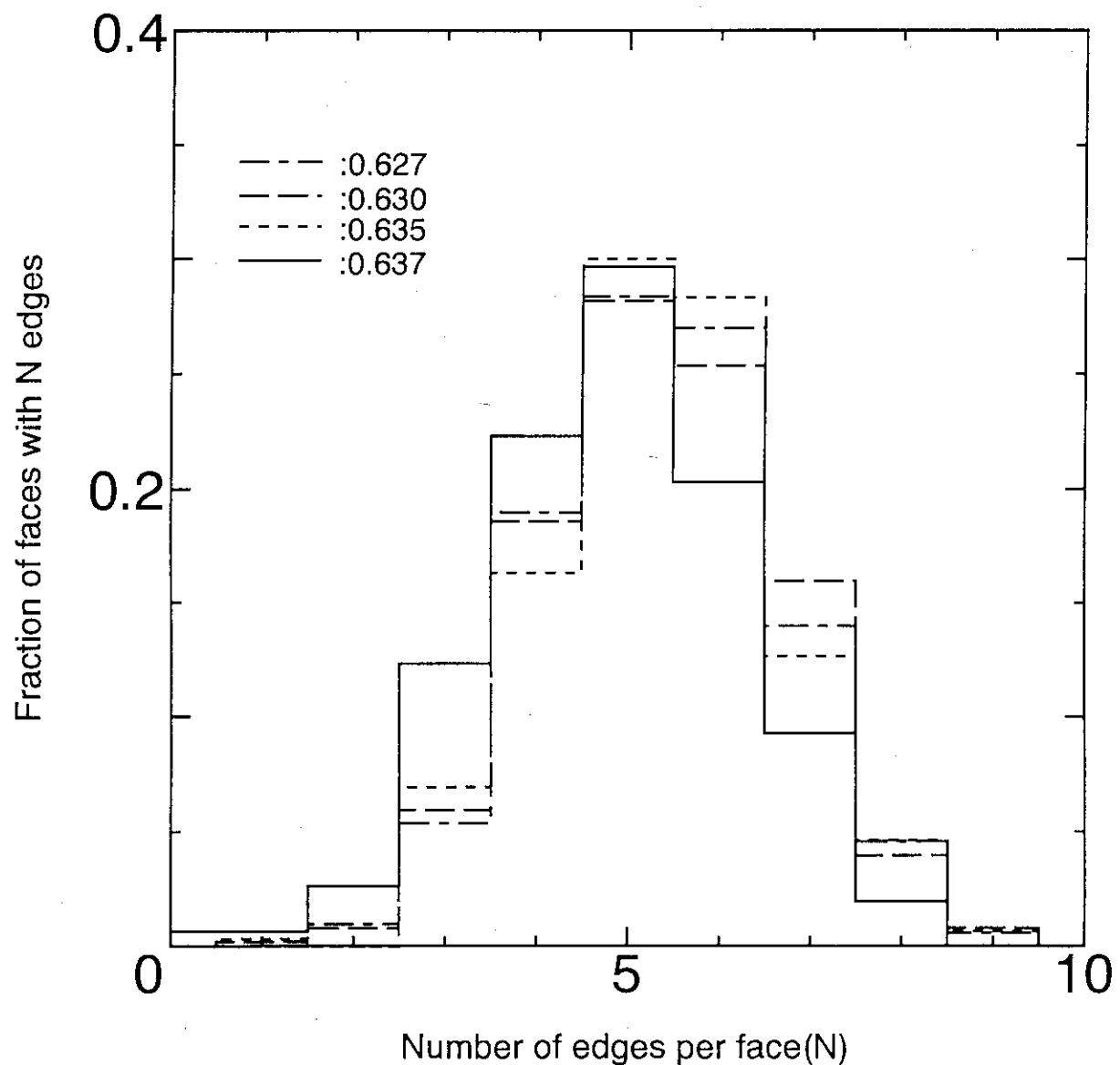


Fig. 3.5 Distribution of faces with  $N$  edges

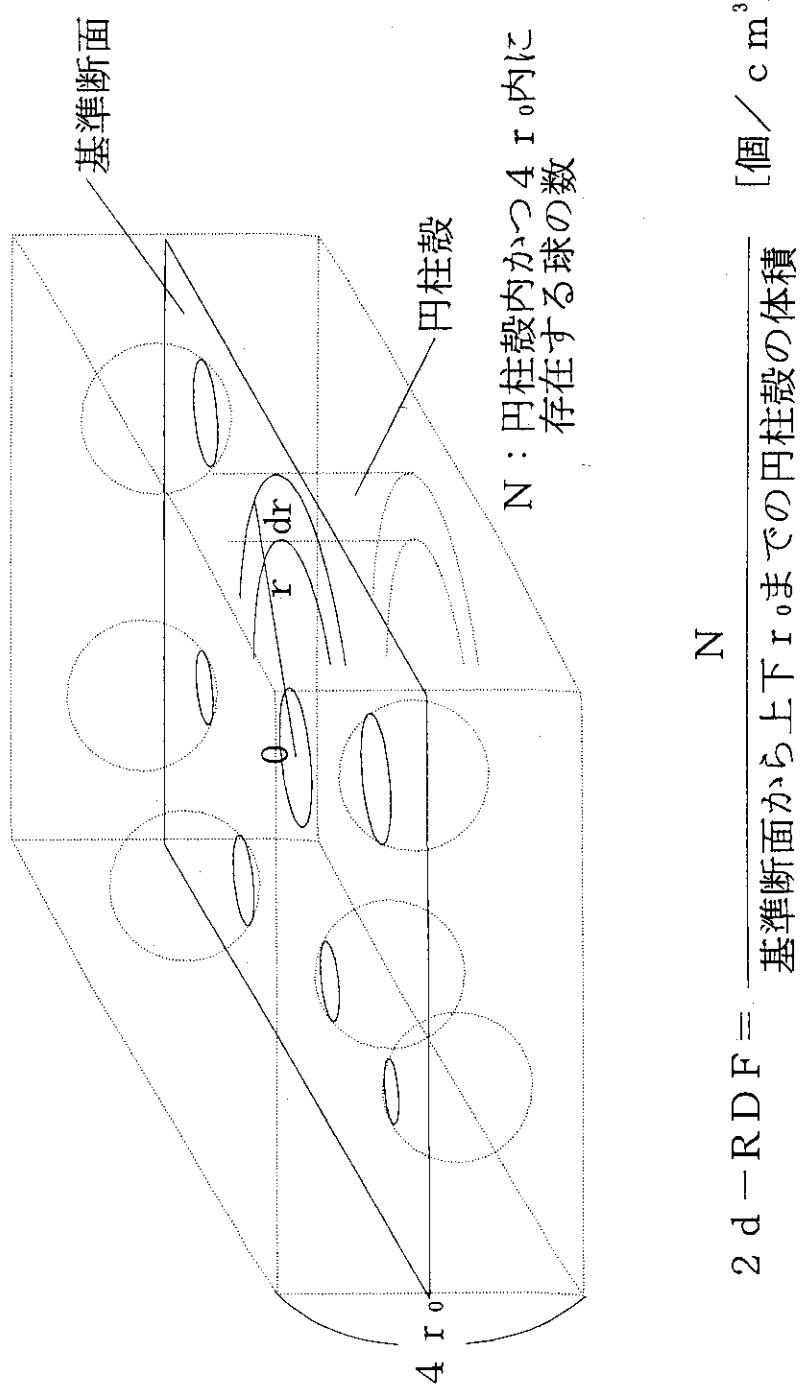


Fig. 3.6 Two dimensional radial distribution function

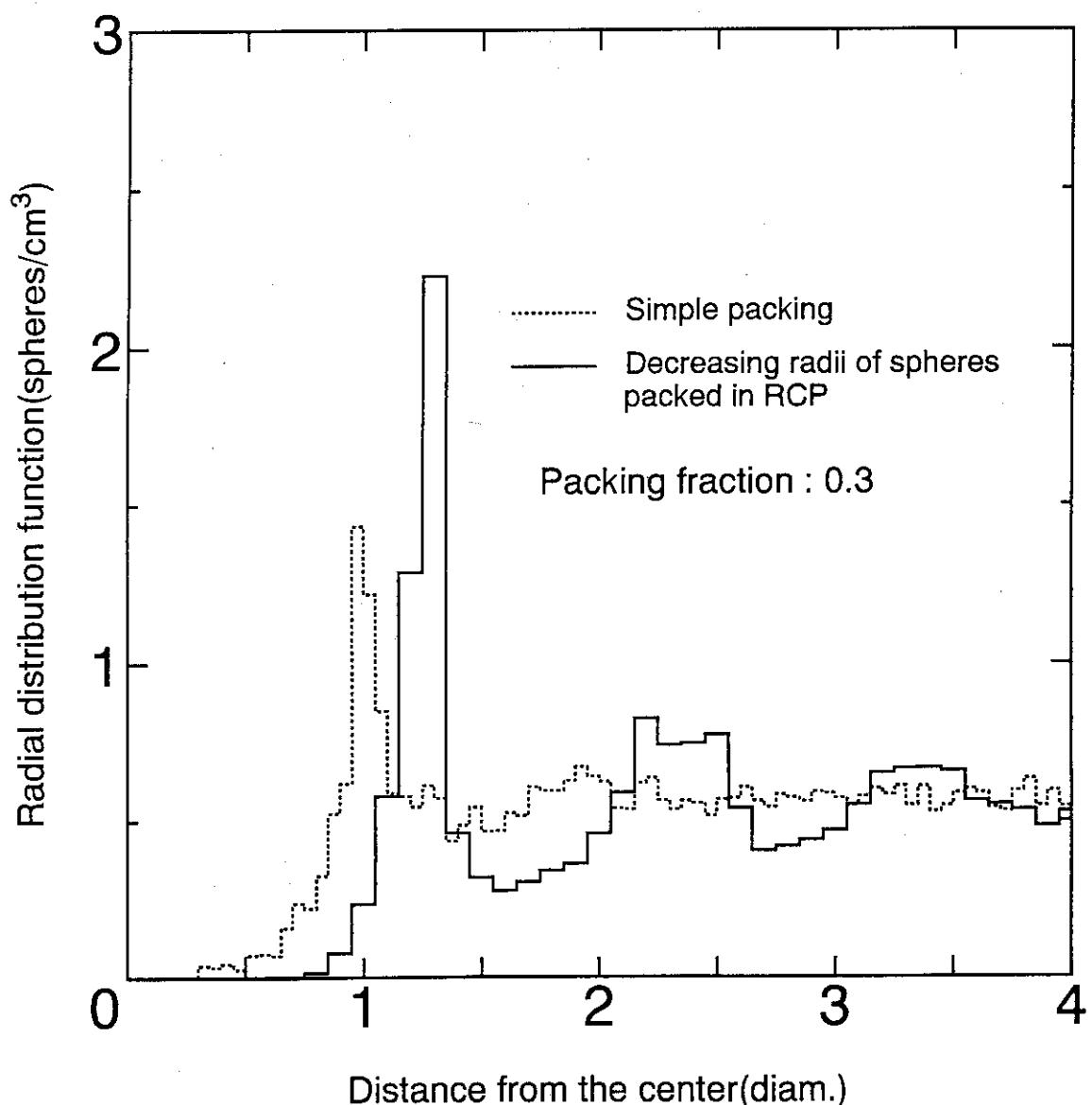
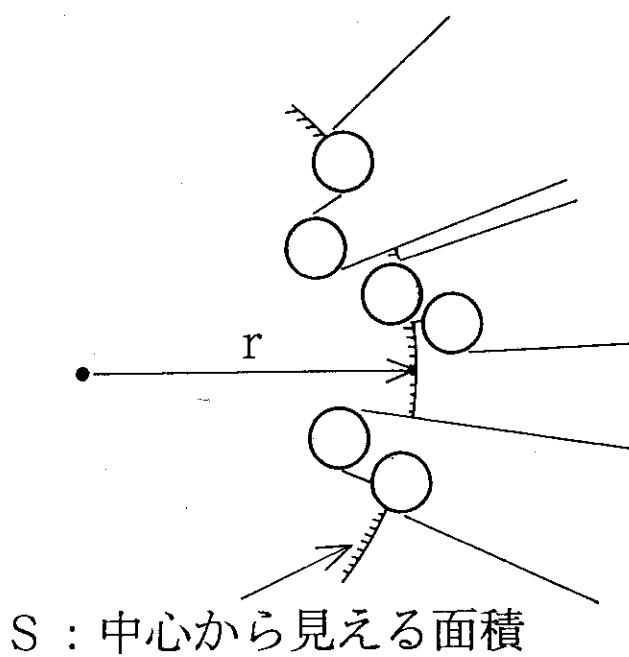


Fig. 3.7 Radial distribution function in cross section



$$NN\bar{D} = 1 - \frac{S}{4 \pi r^2}$$

Fig. 3.8 Geometry model of nearest neighbor distribution

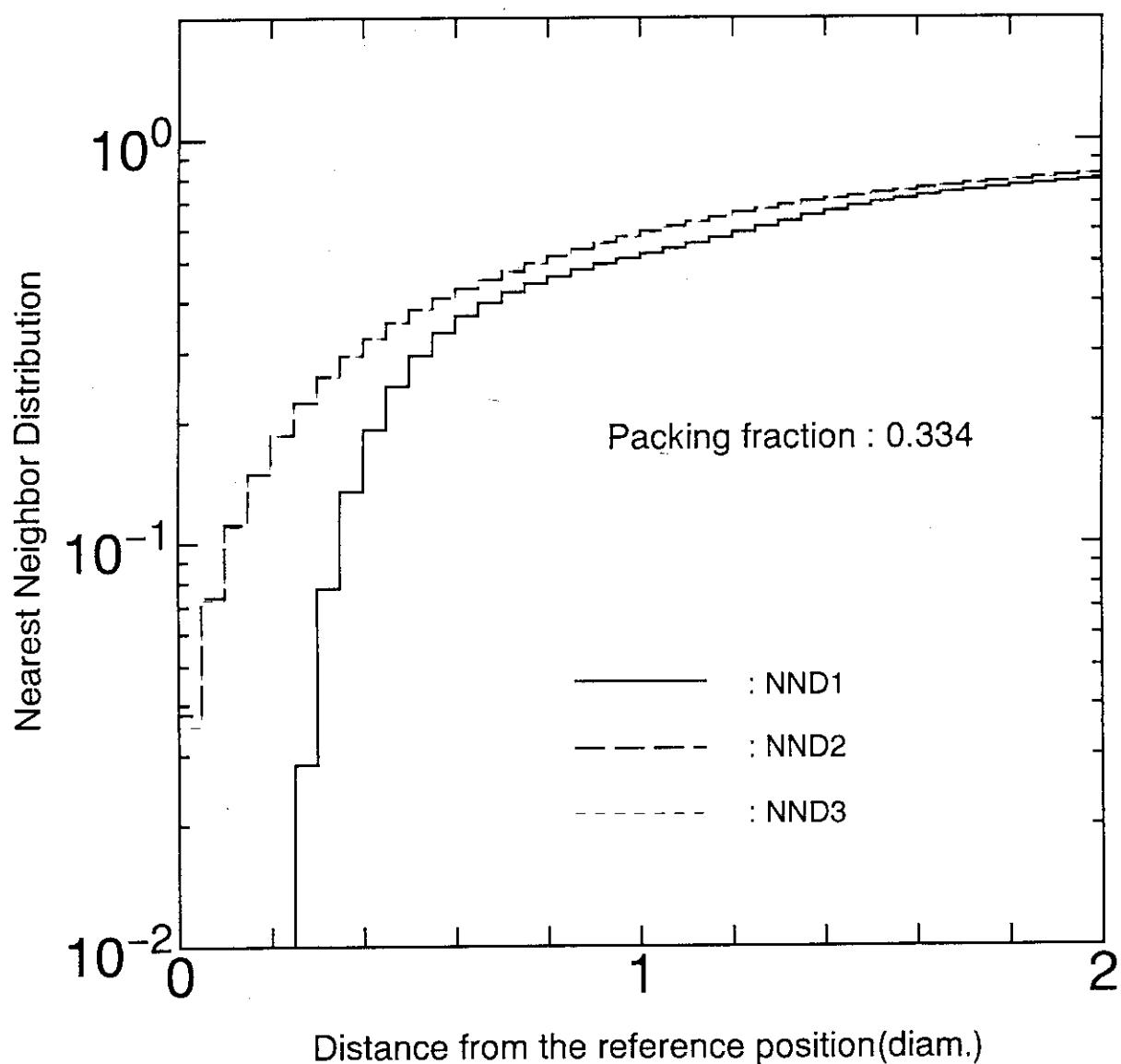


Fig. 3.9 NNDs necessary for VHTRC core calculation by MCNP-CFP

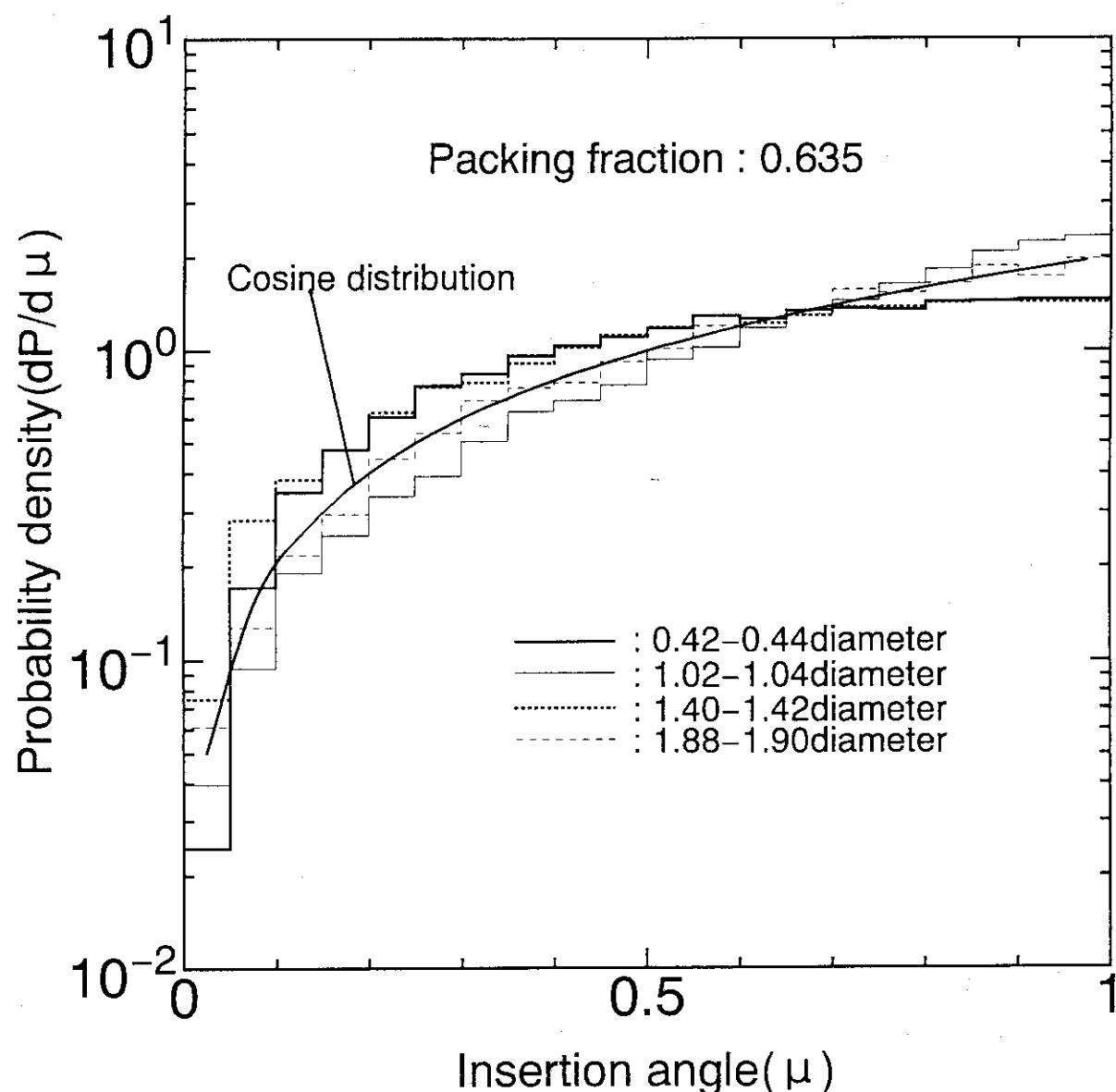


Fig. 3.10 Inserting angle distribution into CFP

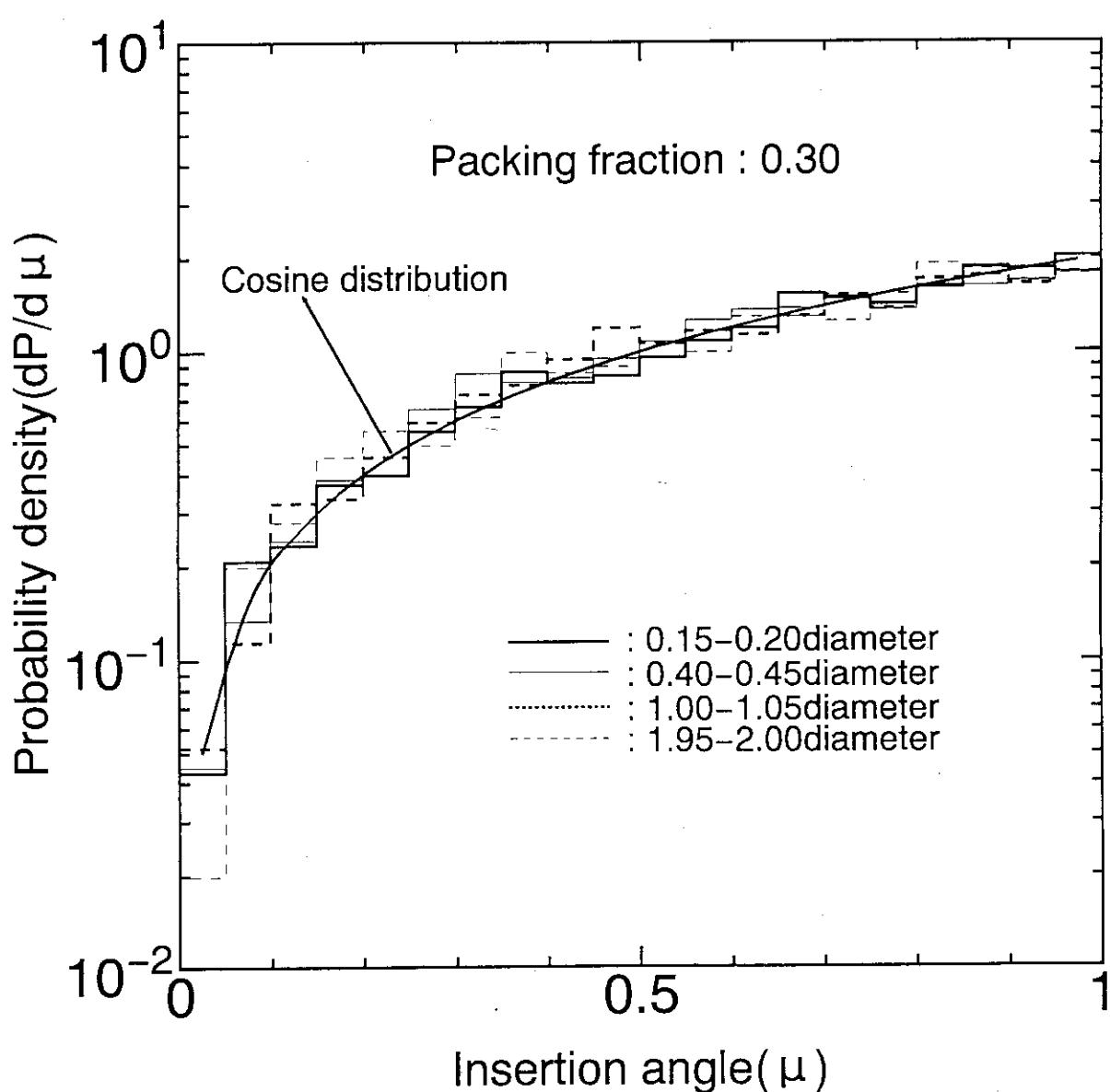


Fig. 3.11 Inserting angle distribution into CFP

## 4. MCRDF の検証

MCRDF コードにより作成した充填状態及び各分布は、以下に示す実験値との比較により妥当性を確認した。

- (1) Ni-P 合金の X 線回折結果から作成した RDF
- (2) 照射試験用燃料コンパクトの断面写真から作成した二次元 RDF

### 4.1 合金の X 線回折結果との比較

物性物理の分野では、非晶質の合金の原子構造は入れ物に剛体球を詰めた状態に近いことが知られている。合金の原子構造を調べる手段の 1 つに X 線回折法があるが、これにより得られた干渉関数から RDF を得ることができる。Fig. 4.1 に実験的に得られた Ni-P 合金の RDF<sup>(20)</sup> を MCRDF による結果と比較した。RDF のピーク位置については実験結果と模擬計算は大変良い一致を得た。RDF の第 1 ピークと第 2 ピーク値は実験結果と MCRDF 計算結果は傾向が逆になっているが、Fig. 3.2 に示すとおり、Bennett<sup>(7)</sup> や Jordrey<sup>(9)</sup> の計算結果も MCRDF と同じ傾向を示している。第 1 ピークと第 2 ピークの絶対値の大小は RCP に近いような大変高い充填率の場合、充填率により微妙に変化することが知られている<sup>(8)</sup>。図の分布の内、計算結果は全てほぼ RCP 状態であるのに対し、合金の X 線回折による結果は若干低い充填率に相当する<sup>(20)</sup> ことが原因として考えられる。以上から、MCRDF により評価された RDF は十分実際の充填状態を再現していることが分かった。

### 4.2 燃料コンパクト断面写真との比較

#### 4.2.1 断面写真の比較

Fig. 4.2 には日本原子力研究所の照射設備 OGL-1 の照射テストで使用されている高温ガス炉用燃料コンパクトの断面写真<sup>(21)</sup> を 2 ケースの計算結果と比較した。MCRDF による計算結果は、(a) 単純に充填率 30% で充填した状態から得られたものと、(b) 一度 RCP 状態に充填した後、球の半径を減少させることにより作成した充填状態（充填率 30%）に対して求められたものである。後者の計算は、以下に示すとおり OGL-1 で使用されている燃料コンパクトの製造工程を考慮した作成手順と同じとなっている。この燃料コンパクトは（HTGR の一般的な燃料要素であるが）次のような手順で作られている。まず、CFP を炭素でオーバーコートする。その CFP を容器に注ぎ、圧縮成型する。最後に、焼結されてできあがる<sup>(23)</sup>。この状況を以下のような手順で再現した。

##### 1) RCP 計算

（圧縮前の容器中に充填されたオーバーコート CFP の模擬）

##### 2) 容器内の CFP 充填率の半径を減らすことによる調整

（圧縮成型後の焼結の模擬）

このとき、手順 1) と 2) の充填球の半径と充填率を  $d_1, f'$  及び  $d_2, f$  とすると、両者の関係

は次式で表せる。

$$d_1 = d_0 \cdot (f' / f)^{1/3}$$

このときのピーク位置は  $d_1/d_0$  となることから、できるだけ高充填率に充填してから半径を減らし CFP 間がより広がるようにする方が、より図のピーク位置を実験に近づけることができる事が分かる。

ケース(a)は単純な充填であるため、MC RDF のアルゴリズム上どうしても重なりを取り除いた後の粒子は他の粒子と接触することになる。従って、多くの粒子が接触しているのが分かる。一方、ケース(b)の場合には、一度充填してから、球そのものを小さくしているため、球間に必ず隙間ができるようになる。図より、定量的ではないが、ケースBの方がより実際の断面を再現していると判断できる。

#### 4.2.2 断面写真から作成した二次元RDFの比較

OG L-1 で使用されている燃料コンパクトの金相写真から 2d-RDF を作成し MC RDF の計算結果と比較した。

##### (1) 燃料コンパクト断面写真による 2d-RDF の評価

OG L-1 照射試験用燃料コンパクトの断面写真<sup>(21)</sup> から粒子間距離を読みとり、その結果から 2 次元の径方向分布関数 (2d-RDF) を作成した。粒子間距離の測定方法及び集計結果を示す。

###### 1) 対象燃料コンパクト

測定の対象とした燃料コンパクトは日本原子力研究所大洗研究所にある材料試験炉 (JMR) における第 4 次及び第 5 次の OG L-1 照射試料用燃料コンパクトである。測定対象となつた燃料コンパクトの外径等の諸データを Table 4.1 に示す。

###### 2) 測定方法

###### a) 断面写真の処理

OG L-1 照射用コンパクトの写真是、水平断面 (ドーナツ状の写真) を使用した。これらの写真的実寸は約 5 ~ 10 cm 角程度であり、粒子間距離を直読するには小さすぎるので複写機により拡大した。

水平断面の写真是 1/4 領域毎に 4 枚の拡大コピーを作成して張り合わせることによって距離測定用の原図を作成した。

###### b) 縮尺の決定

作成された拡大写真的縮尺をコンパクトの外径の実測値と写真的外径の測定値から決定した。写真的外径は複写機による拡大時の変形及び測定誤差を考慮して角度 45 度おきに 4 点測定し、その平均値を拡大写真的外径とした (Fig. 4.3 参照)。

###### c) 中心粒子の決定

粒子間距離の測定の基準となる粒子 (以下、中心粒子と呼ぶ) を定めた。粒子間距離のサ

ンプリングは、被覆燃料粒子の外径を  $d$  とした場合、中心粒子の中心から半径  $3d$  の円の範囲で実施する。拡大写真上のサンプリング用の円の半径は被覆燃料粒子の直径の実測値と b) で定めた縮尺とから決定する。

中心粒子は、サンプリングの円が互いに重ならないという条件で、Fig. 4.4に示すようにコンパクトの水平断面 1 枚あたり 8 個（約45度おきに）選択することができる。

コンパクトの断面に写されている被覆燃料粒子はさまざまな断面で切られているため、その直径は一様ではない。8 個の中心粒子の直径は同じ大きさのものだけに片寄らないようにできるだけランダムに定めた。

#### d)周辺粒子の決定

中心粒子との距離を測定する粒子（以下、周辺粒子と呼ぶ）を選定した。c) で定めたサンプリングの円内にある粒子は全て選んだ。また、サンプリングの円に少しでもかかっていれば、その中心がサンプリングの円の外側にある場合でもその粒子を選定した。選定した粒子には番号をついた（Fig. 4.5 参照）。

#### e)中心粒子及び周辺粒子の中心位置の決定

中心粒子及び周辺粒子の中心を決定した。可能な限り粒子の中心を正確に定めるため、Fig. 4.6 に示すように、同心円の描かれた透明ビニールシートを用いて粒子の中心と考えられる場所に針で穴をあけ、そこをその円の中心とした。

#### f)粒子間距離の測定

各サンプリング円毎に、中心粒子と周辺粒子の距離を測定した。Fig. 4.7 に示すように距離の測定は両粒子の中心に開けられた針の穴の距離を対象とした。測定は最少目盛り 0.4mm の定規を用いて、最少単位 0.2mm まで読みとることにより行った。粒子の直径は 0.92mm なので測定誤差としては約 1/4 直径程度となる。

### 3)集計結果

#### a)実験値の集計

粒子間距離の測定結果を度数分布表にまとめた。度数分布は被覆燃料粒子の直径の 1/10 を単位として、直径の 4 倍の距離を最大とした度数分布表にまとめた。

#### b)測定結果

本測定では、OG L-1 の照射試料の断面写真 18 枚を用いて総数 2949 点の粒子間距離分布を測定した。測定用の写真、集計値及び 2 d-RDF を以下の表及び図に示す。

測定に用いた写真 : Fig. 4.8 ~ Fig. 4.25

全コンパクトの測定値集計結果 : Table 4.2

2 d-RDF : Fig. 4.26

#### (2)実験と計算の比較

Fig. 4.26 に、一度 RCP 状態に充填してから半径を減少させることによって作成した 2d-RDF を実験と比較した結果を示す。実験誤差を考えると測定値と計算値は第一ピーク及び第二

ピーク共にほぼ一致していることがわかる。比較の結果、絶対値は異なるがピークの位置はほぼ一致し、MCRDFにより特殊な製造工程を持つ燃料コンパクトについてもその充填状態を再現できることが分かった。

Table 4.1 Specification of sampled fuel compacts

照射試験	サンプル番号	ID	コンパクト 外径(mm)	充填率 (vol%)
第5次 OGL-1	113	A-3	790PC-38	24.00
	114	A-10	790PC-31	24.01
	115	A-15	790PC-26	24.02
	116	B-3	790PC-58	24.01
	117	B-10	790PC-51	23.99
	118	B-15	790PC-46	24.00
	119	C-3	790PC-18	24.01
	120	C-10	790PC-11	24.01
	121	C-15	790PC-6	24.03
第4次 OGL-1	132	A-3	780PC-53	23.98
	133	A-10	780PC-27	23.97
	134	A-15	780PC-13	24.02
	135	B-3	780PC-58	23.98
	136	B-10	780PC-41	23.97
	137	B-15	780PC-20	24.02
	138	C-3	780PC-48	23.97
	139	C-10	780PC-32	24.01
	140	C-5	780PC-6	24.02

Table 4.2 Summary of measured fuel particles in all compacts

径方向群構造 群	直徑長さ	サンプル番号																		合計	
		113	114	115	116	117	118	119	120	121	132	133	134	135	136	137	138	139	140		
1	0.1																			0	
2	0.2																			0	
3	0.3																			0	
4	0.4																			0	
5	0.5																			2	
6	0.6																			1	
7	0.7																			7	
8	0.8																			9	
9	0.9																			16	
10	1	4	2	2	2	1	1	3	2	1	2	2	0	2	1	1	3	1	1	31	
11	1.1	0	3	1	2	4	4	1	1	2	3	1	3	2	2	2	5	3	1	2	38
12	1.2	7	0	5	6	6	2	3	4	5	2	2	1	3	4	5	7	2	6	81	
13	1.3	5	4	3	7	5	6	5	7	3	4	3	4	1	4	5	7	6	9	121	
14	1.4	7	9	7	6	7	7	5	4	8	6	9	8	3	8	7	5	10	12	118	
15	1.5	8	7	4	4	5	5	6	4	7	5	5	4	7	13	7	5	10	12	113	
16	1.6	5	4	6	8	7	11	10	9	5	6	5	3	6	7	9	4	4	4	107	
17	1.7	1	4	5	4	6	4	8	7	4	10	8	6	7	3	7	9	8	6	67	
18	1.8	6	1	2	6	7	8	3	3	4	7	4	2	1	2	4	4	3	0	62	
19	1.9	3	4	3	3	6	7	3	3	4	2	2	0	1	6	3	4	4	4	62	
20	2	8	4	1	2	3	2	2	9	1	3	4	7	6	4	6	4	3	8	77	
21	2.1	10	6	3	8	6	5	6	2	5	3	3	5	8	4	2	2	3	3	85	
22	2.2	3	3	3	3	6	3	7	1	8	4	6	3	3	3	1	10	3	3	73	
23	2.3	7	4	5	8	11	9	6	8	9	4	3	9	10	12	4	5	7	5	126	
24	2.4	9	8	8	9	5	10	10	3	1	1	7	4	4	5	5	14	5	10	13	147
25	2.5	5	3	9	10	11	9	1	10	11	11	11	4	5	5	5	14	5	10	12	141
26	2.6	9	3	6	9	7	13	9	7	4	7	9	4	8	11	7	9	7	5	156	
27	2.7	8	12	10	10	10	8	6	11	15	8	10	8	9	6	6	6	9	5	181	
28	2.8	10	7	13	9	8	7	10	8	14	11	14	13	10	9	11	11	8	8	143	
29	2.9	8	6	5	12	6	7	8	6	4	4	9	7	9	15	9	6	12	10	148	
30	3	10	4	9	14	12	14	5	10	6	8	8	5	6	7	8	4	8	10	148	
31	3.1	7	9	4	4	10	8	11	12	4	14	10	6	5	7	11	12	5	11	150	
32	3.2	8	8	7	14	12	10	14	12	13	10	9	6	11	9	7	13	14	9	186	
33	3.3	12	2	7	5	11	8	8	5	9	5	5	8	9	6	7	8	10	7	132	
34	3.4	7	1	8	3	3	15	9	9	12	4	9	8	9	1	11	7	6	4	126	
35	3.5	11	1	2	1	1	6	7	7	4	1	6	1	2	2	1	3	2	35		
36	3.6	4					4	6	6	6									17		
37	3.7	1					3	3	5	4	1								5		
38	3.8						1	1	3										0		
39	3.9																		0		
40	4																		0		
合 計		183	120	140	172	178	195	176	181	178	157	157	138	162	155	165	166	159	167	2949	

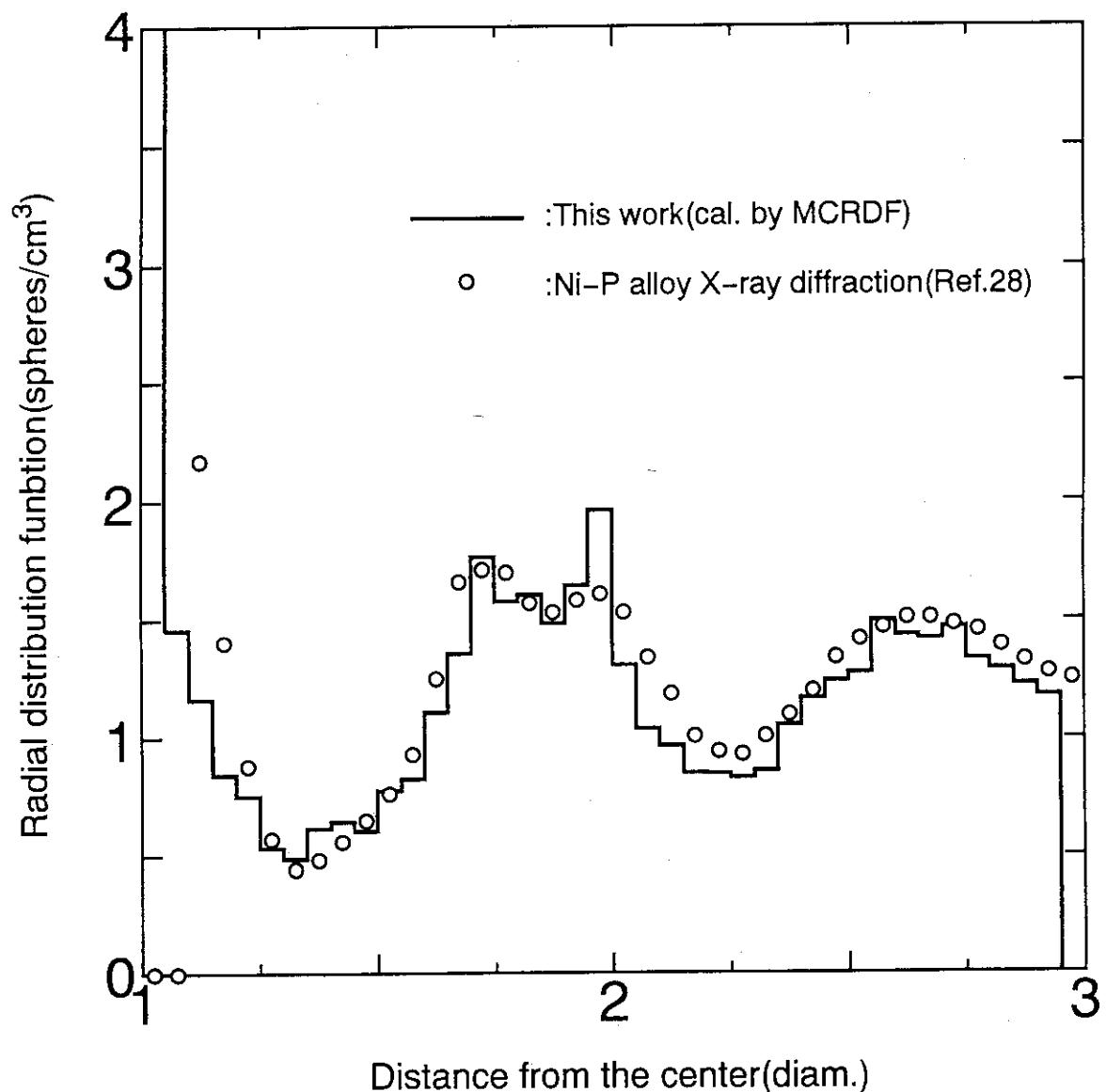


Fig. 4.1 Comparison of radial distribution functions  
(packing is nearly RCP)

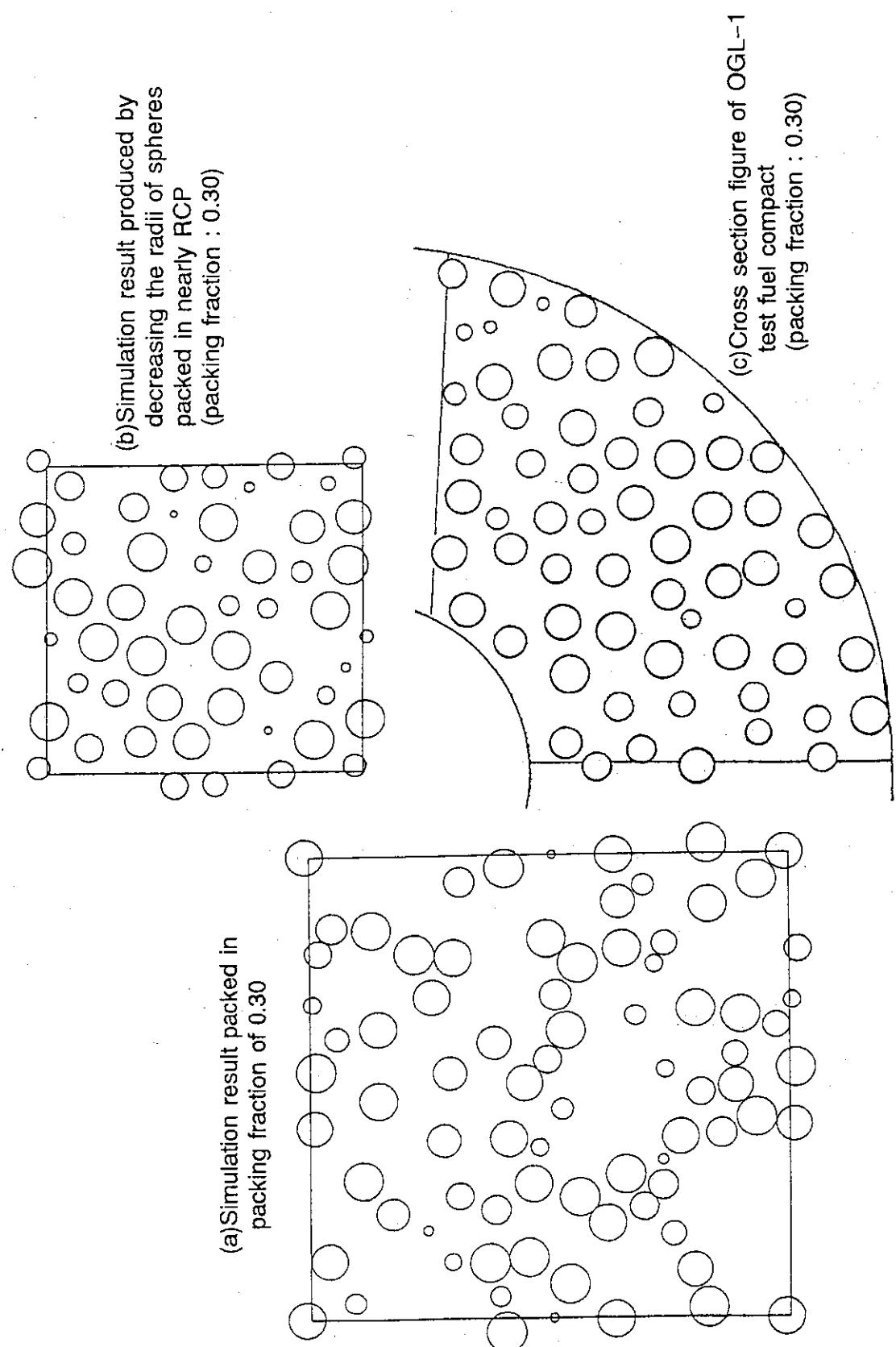
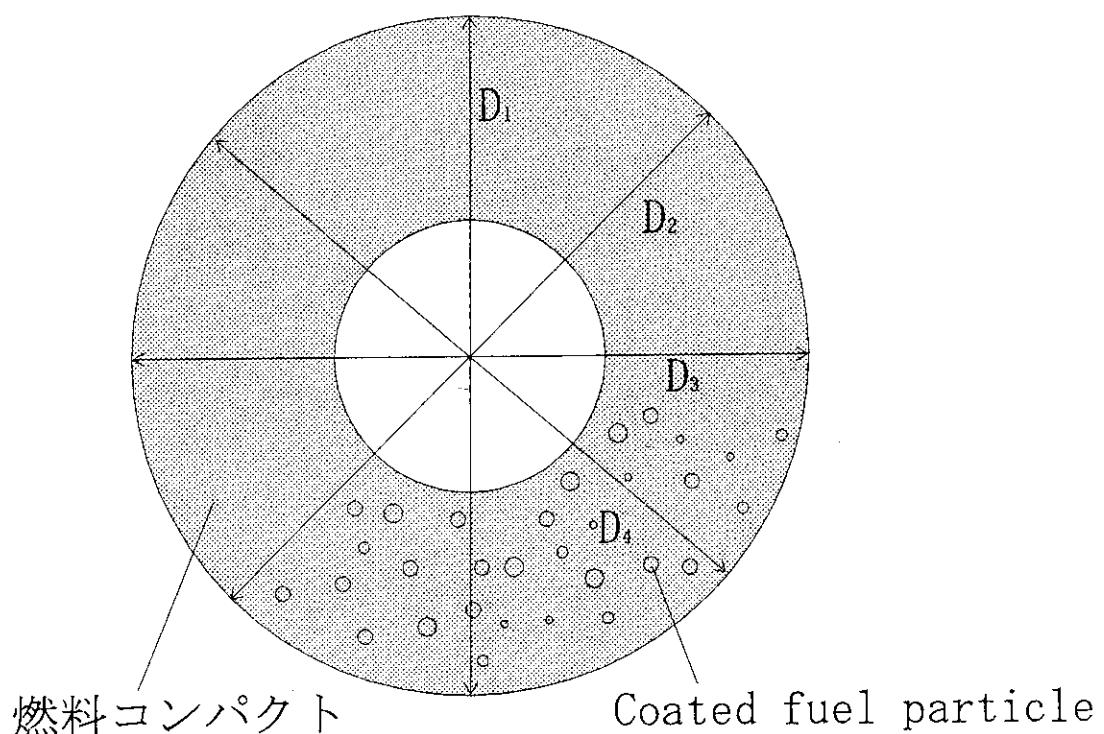


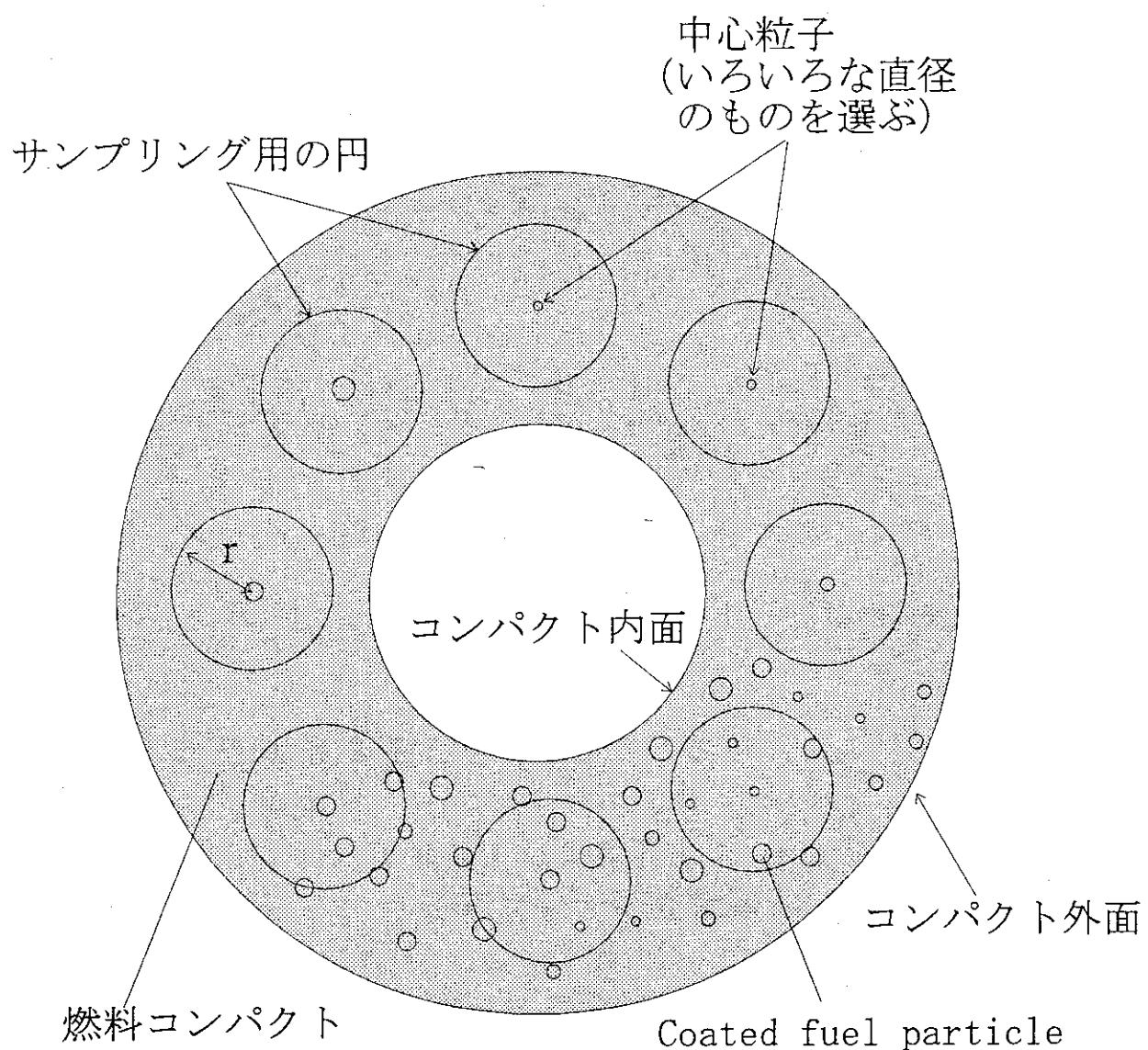
Fig. 4.2 Comparison of packings of spherical fuels between OGL-1 test fuel compact for irradiation and its simulation calculations by MCRDF



$$D = (D_1 + D_2 + D_3 + D_4) / 4$$

D : コンパクトの直径の写真上の測定値

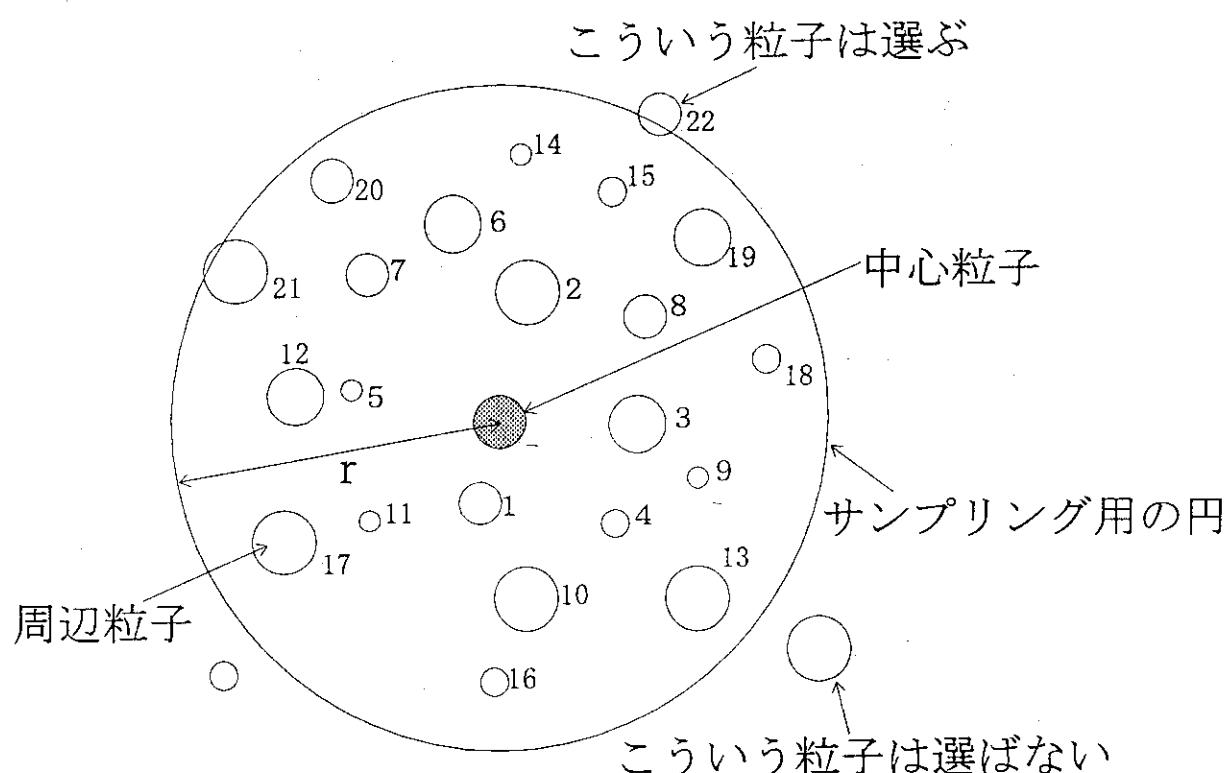
Fig. 4.3 Measurement method of radius of compact from cross section photograph



$$r = 3 d$$

(d : 被覆燃料粒子の外径)

Fig. 4.4 Central particle in each sampling region



$$r = 3 d$$

( $d$  : 被覆燃料粒子の外径)

Fig. 4.5 Selection and numbering for particles in a sampling region

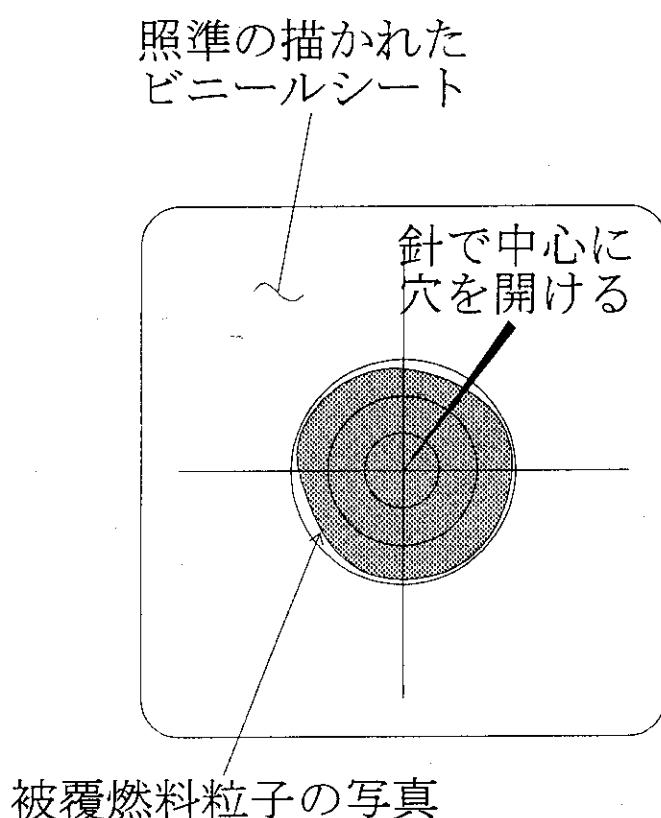


Fig. 4.6 Center of coated fuel particle

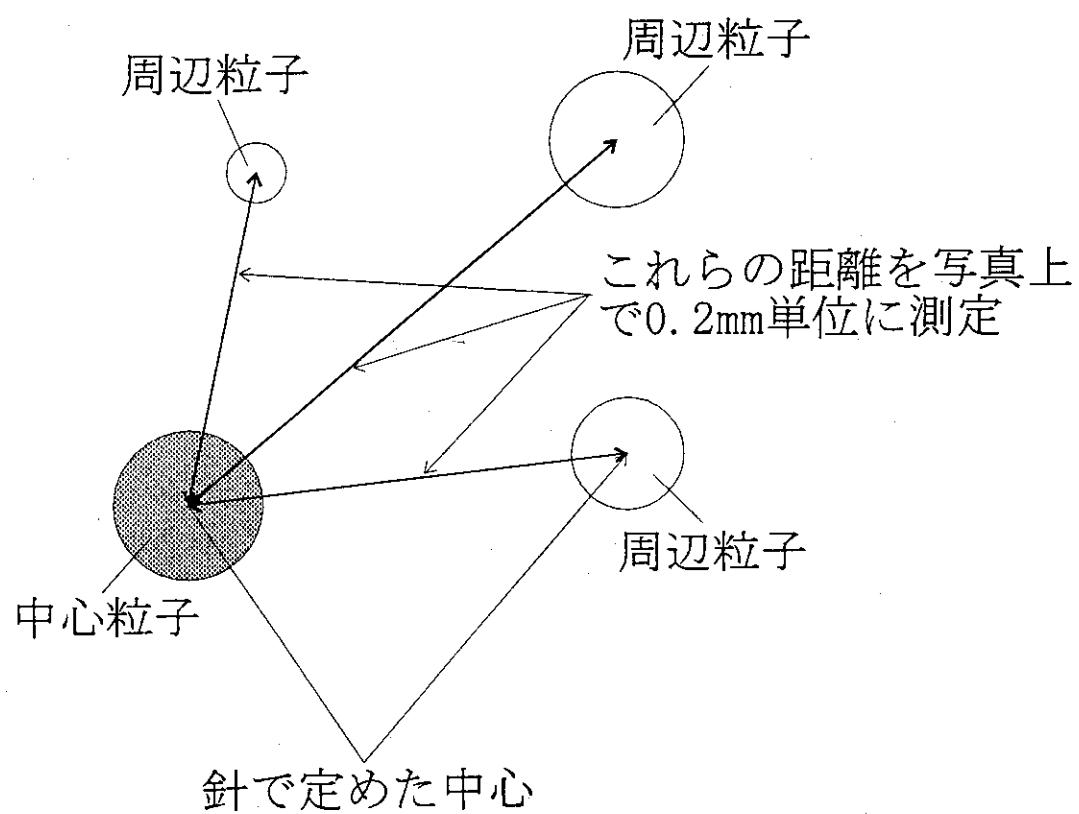


Fig. 4.7 Method to measure distance between particles

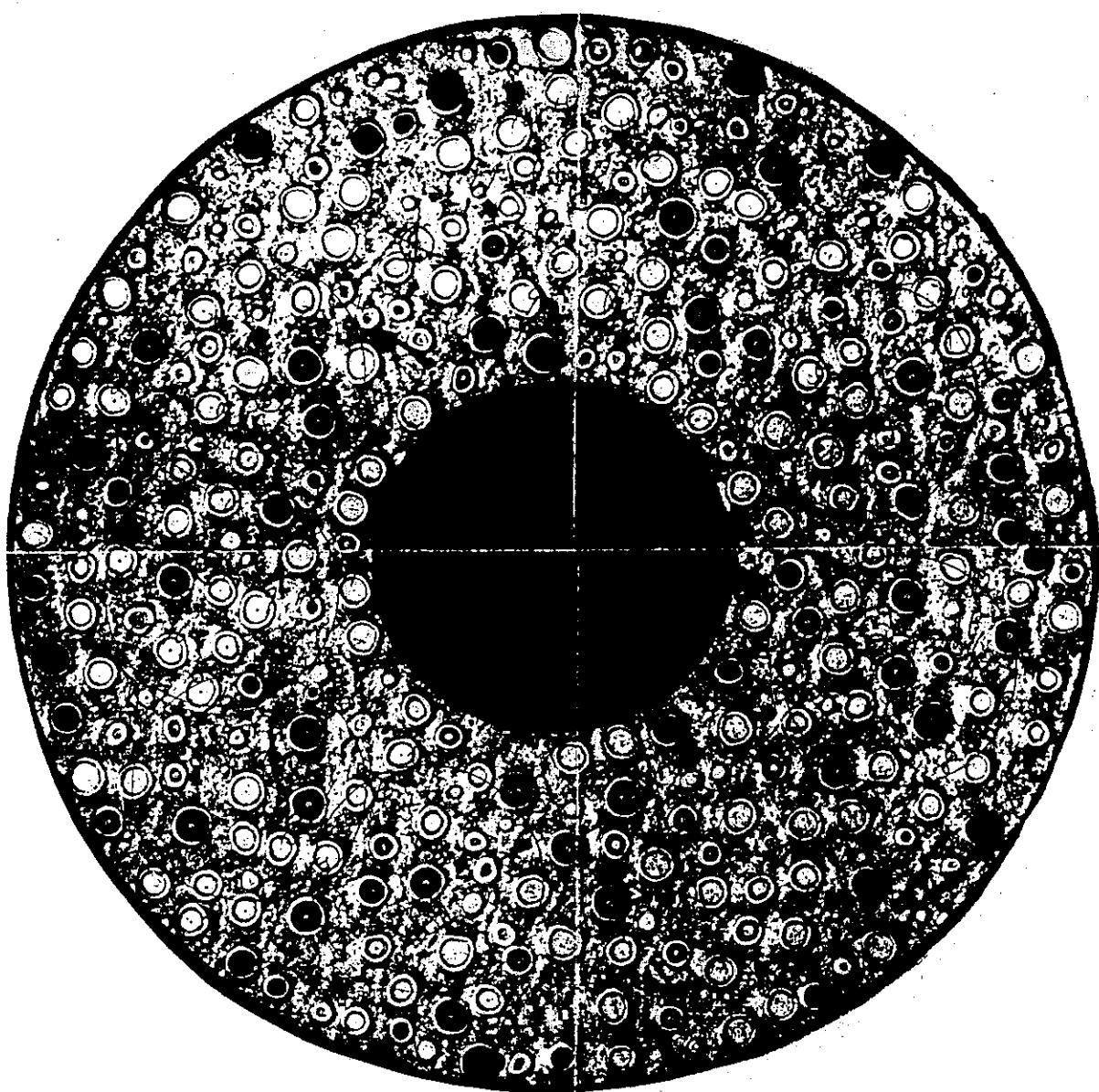


Fig. 4.8 Photograph used for distance measurement between CFPs  
(Sample No. 113 in Table 4.1)

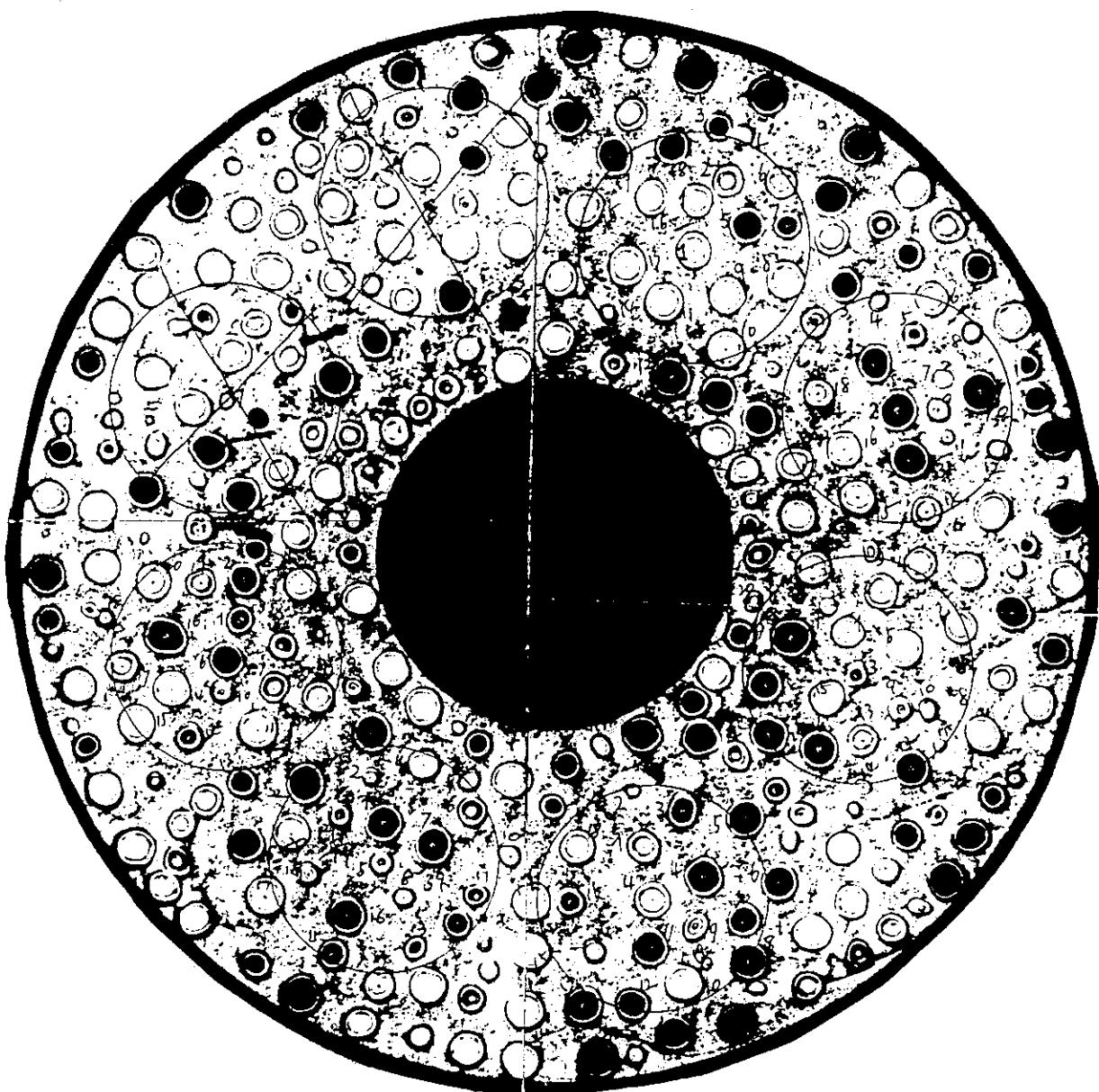


Fig. 4.9 Photograph used for distance measurement between CFPs  
(Sample No. 114 in Table 4.1)

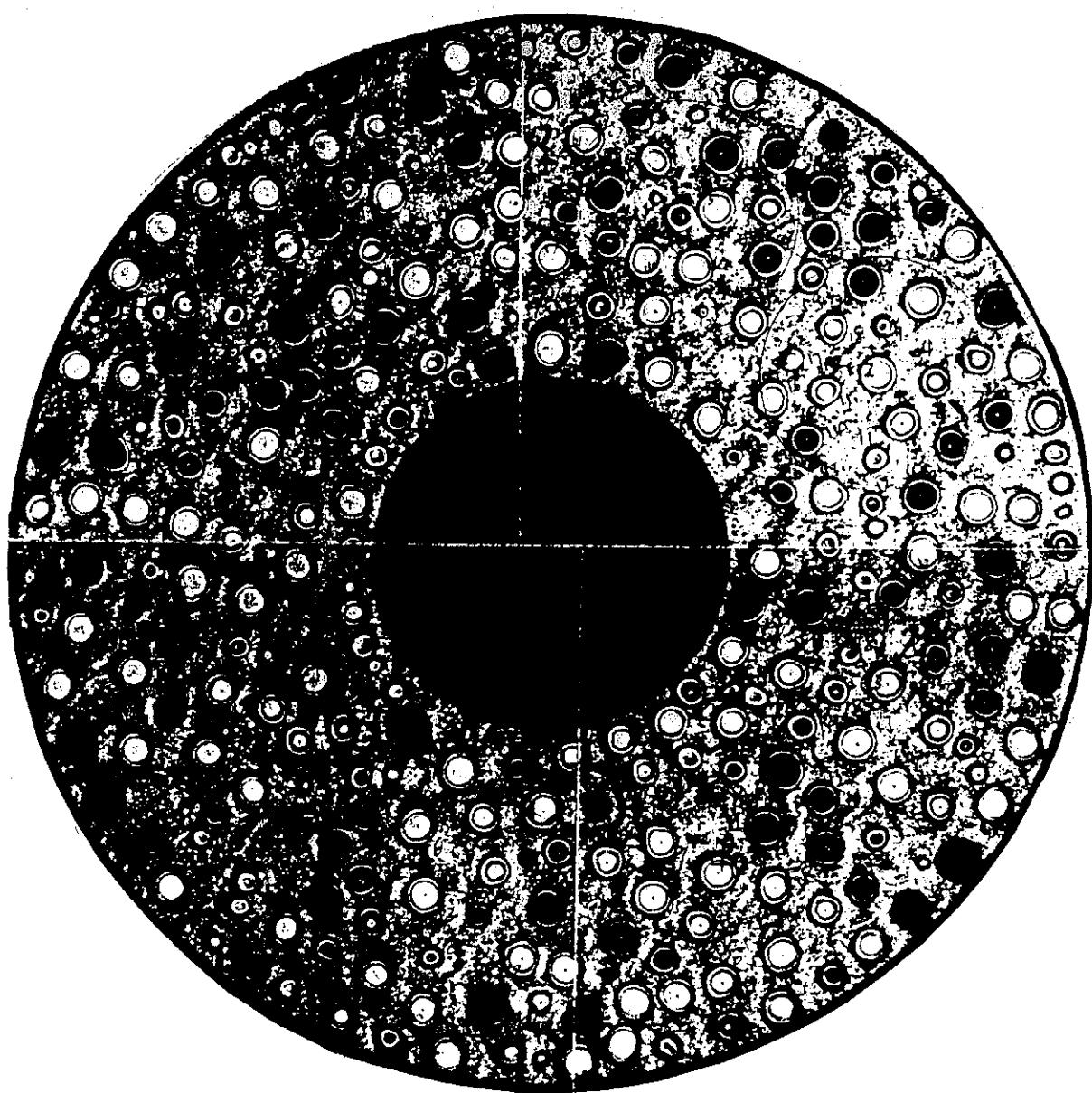


Fig. 4.10 Photograph used for distance measurement between CFPs  
(Sample No. 115 in Table 4.1)

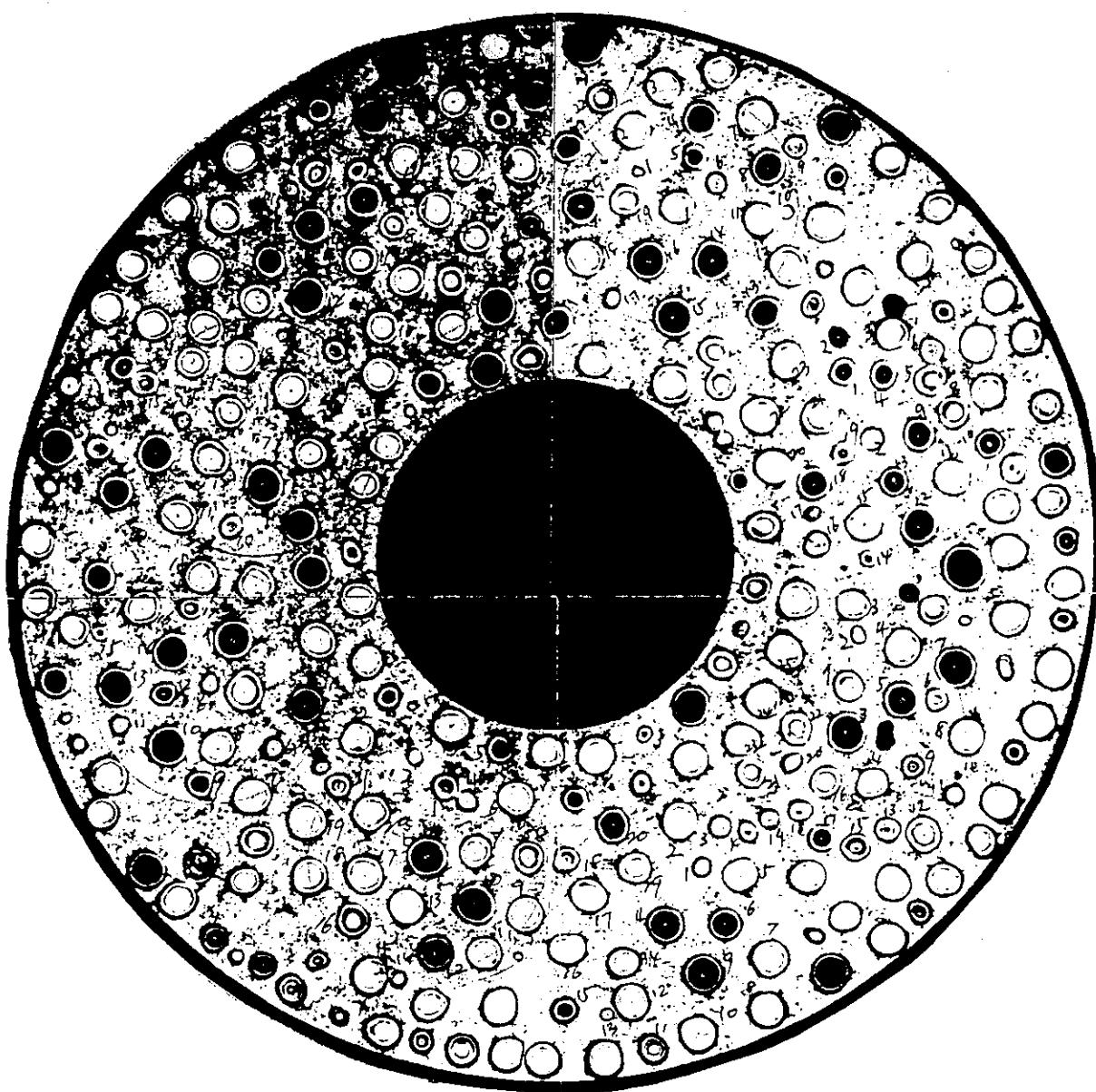


Fig. 4.11 Photograph used for distance measurement between CFPs  
(Sample No. 116 in Table 4.1)

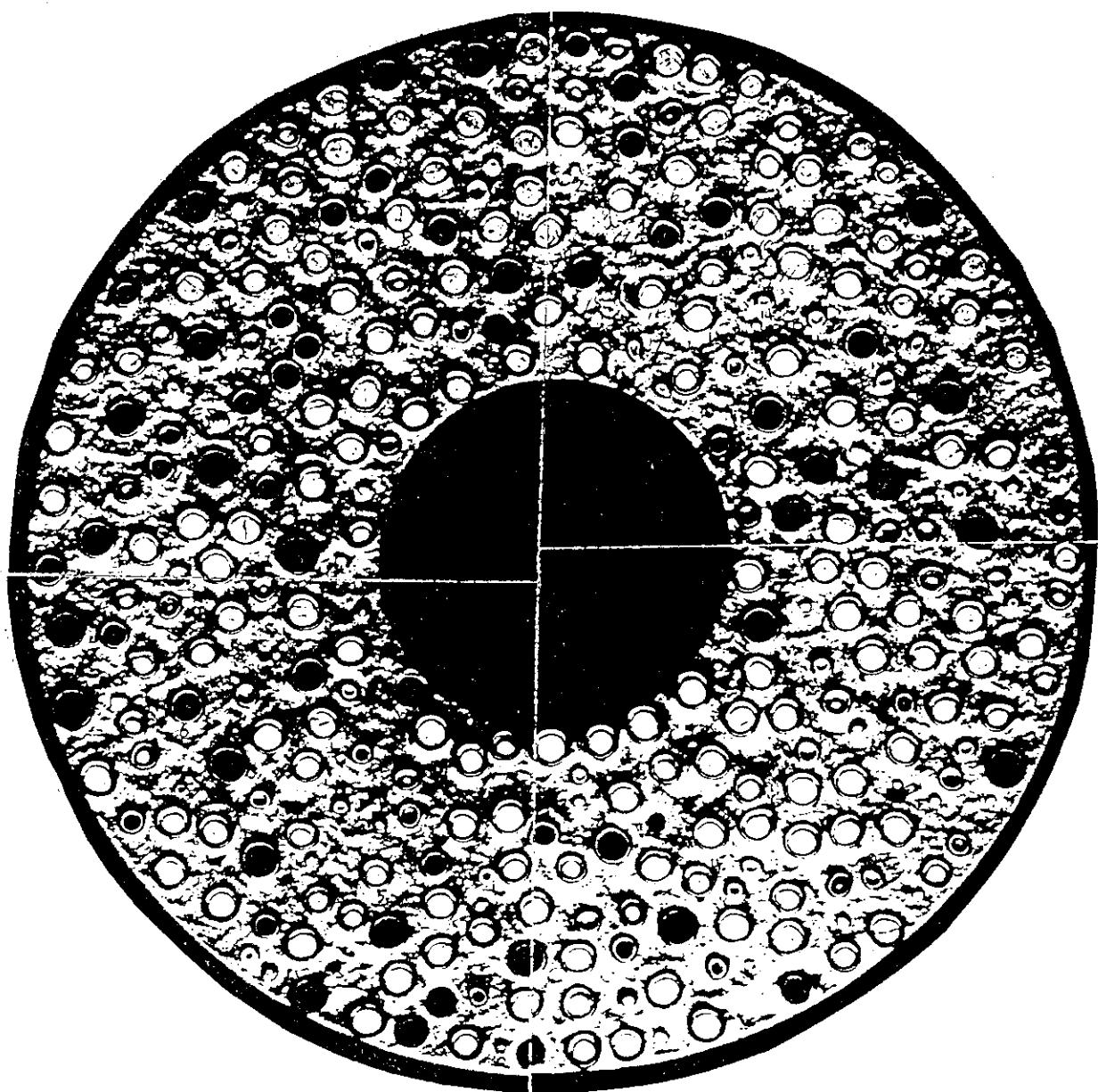


Fig. 4.12 Photograph used for distance measurement between CFPs  
(Sample No. 117 in Table 4.1)

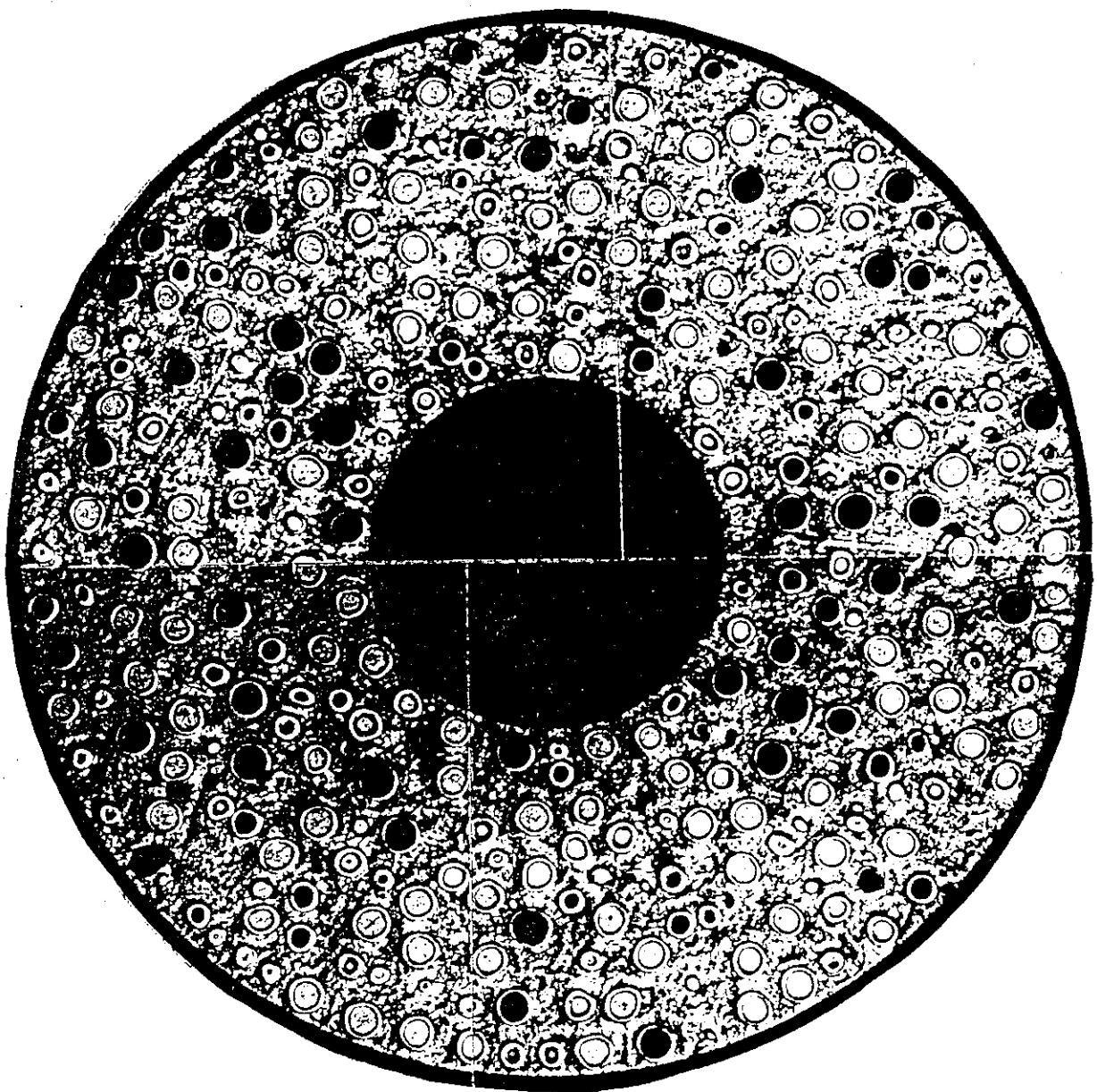


Fig. 4.13 Photograph used for distance measurement between CFPs  
(Sample No. 118 in Table 4.1)

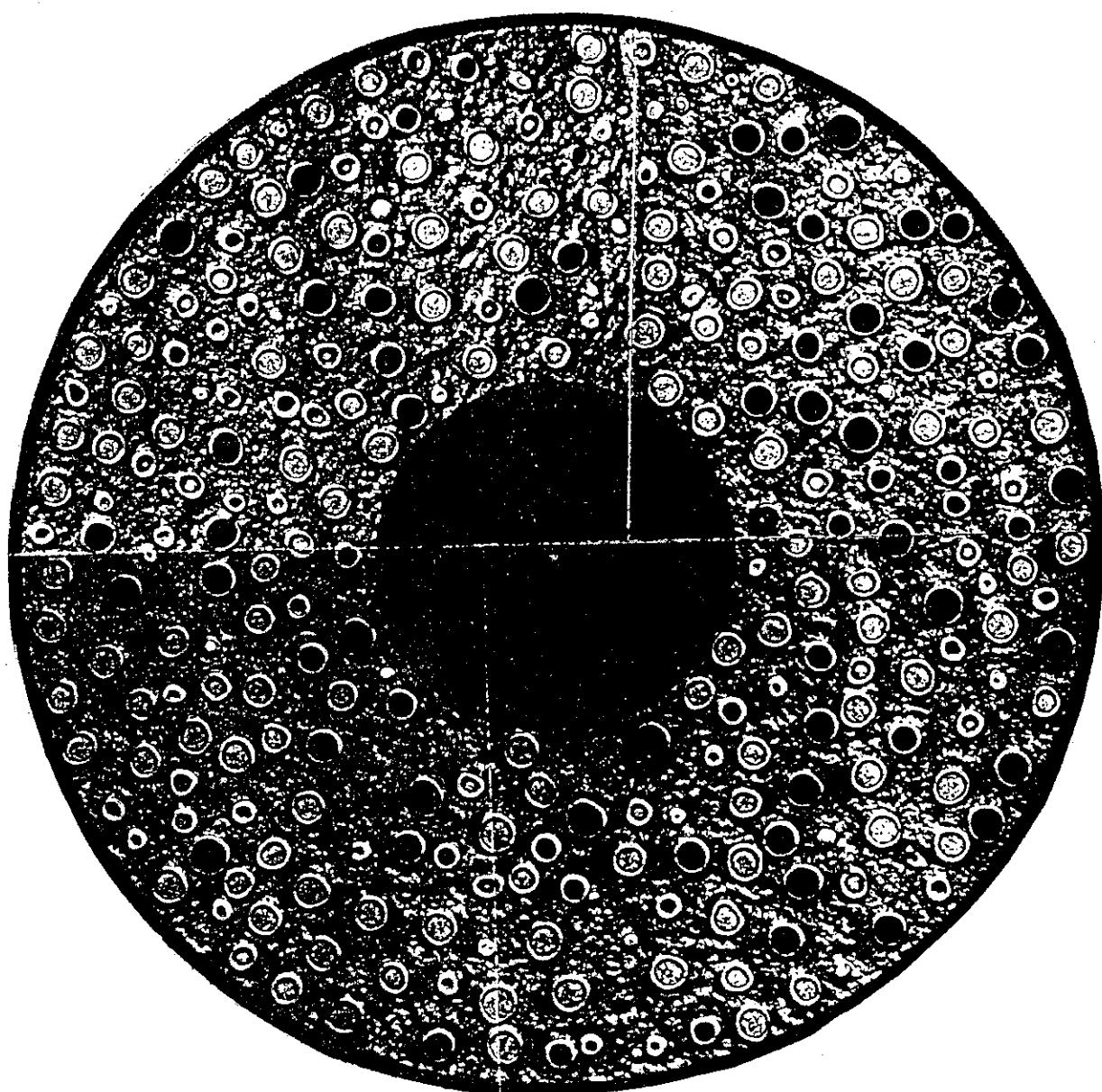


Fig. 4.14 Photograph used for distance measurement between CFPs  
(Sample No. 119 in Table 4.1)

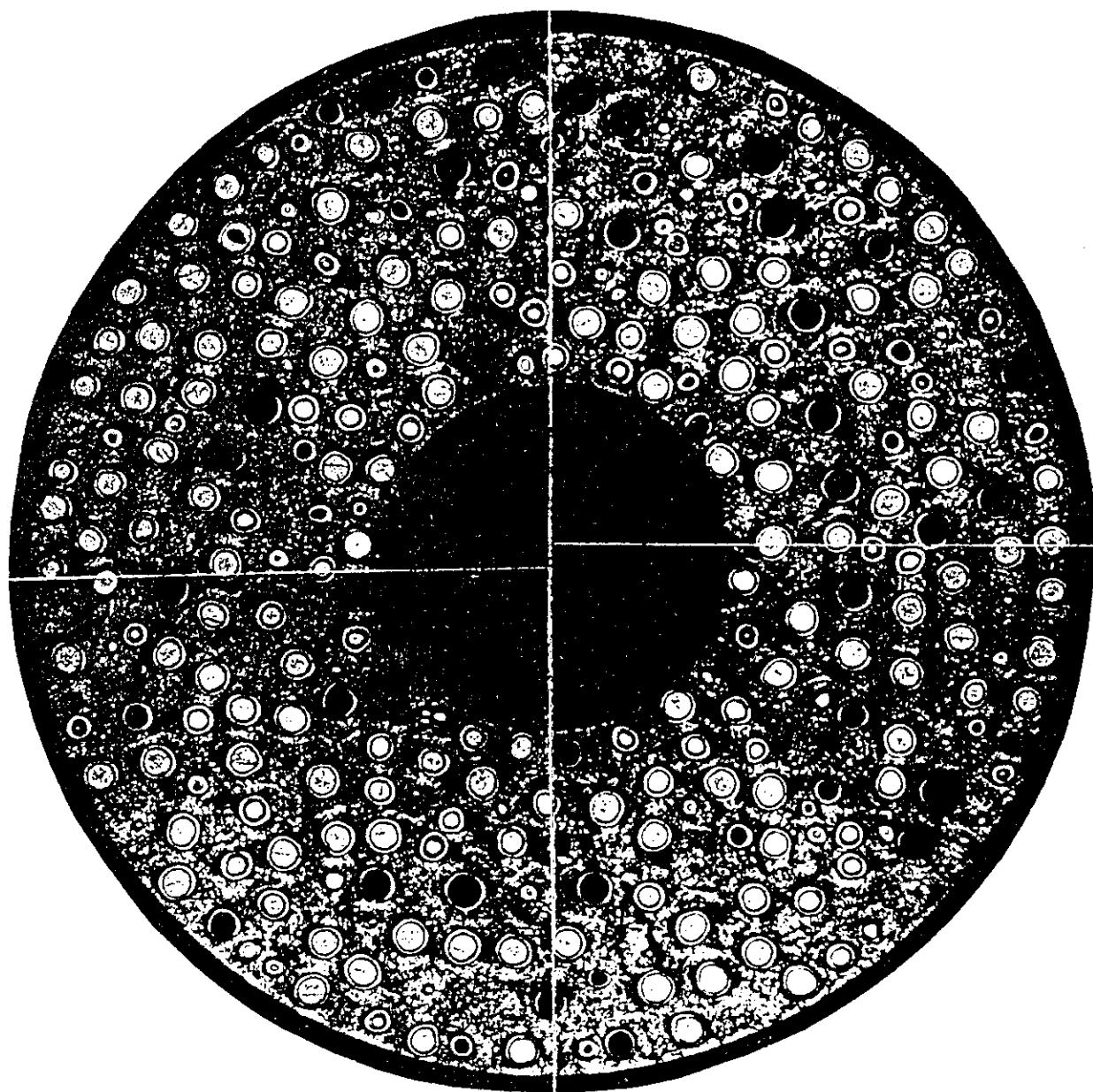


Fig. 4.15 Photograph used for distance measurement between CFPs  
(Sample No. 120 in Table 4.1)

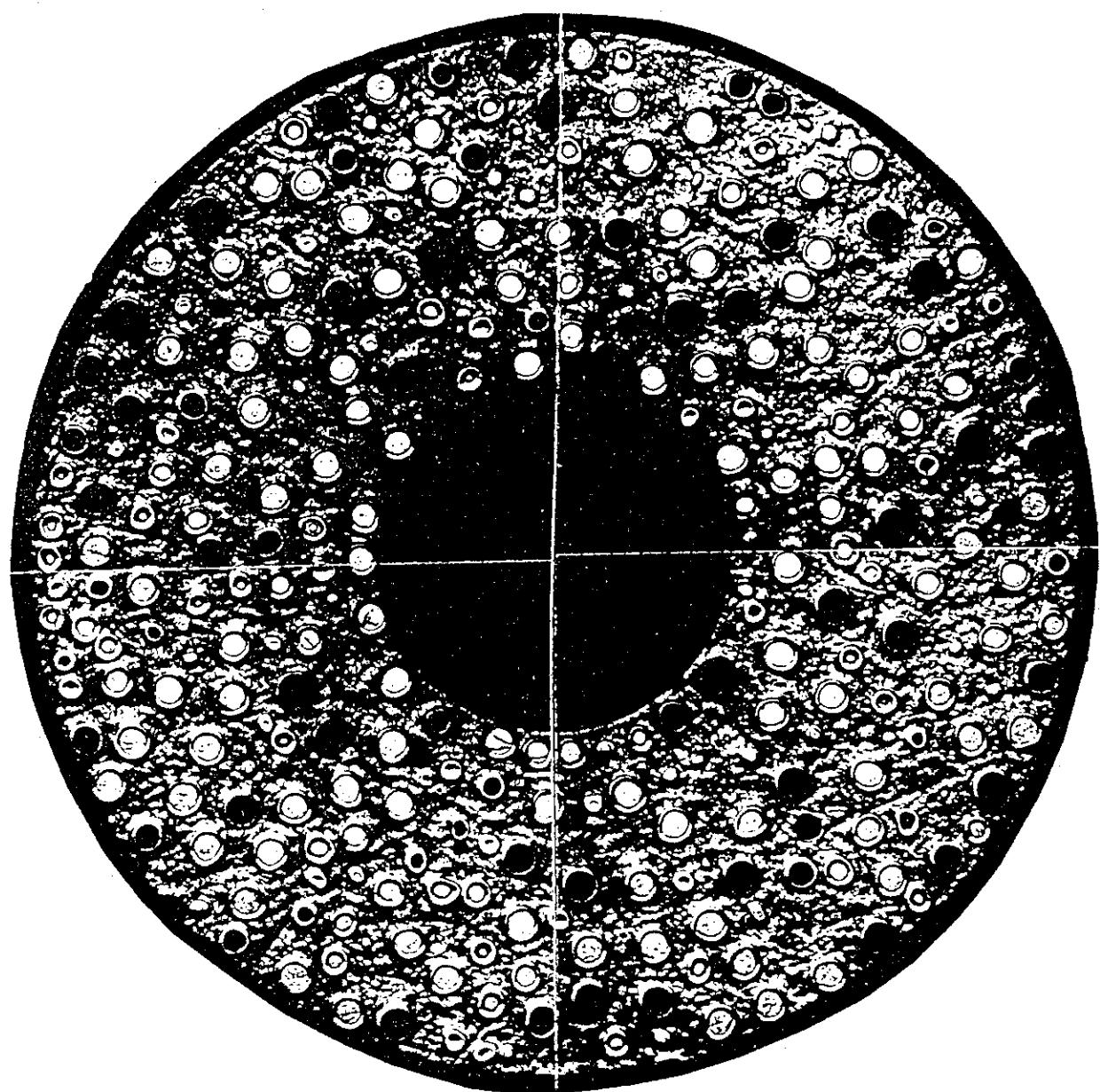


Fig. 4.16 Photograph used for distance measurement between CFPs  
(Sample No. 121 in Table 4.1)

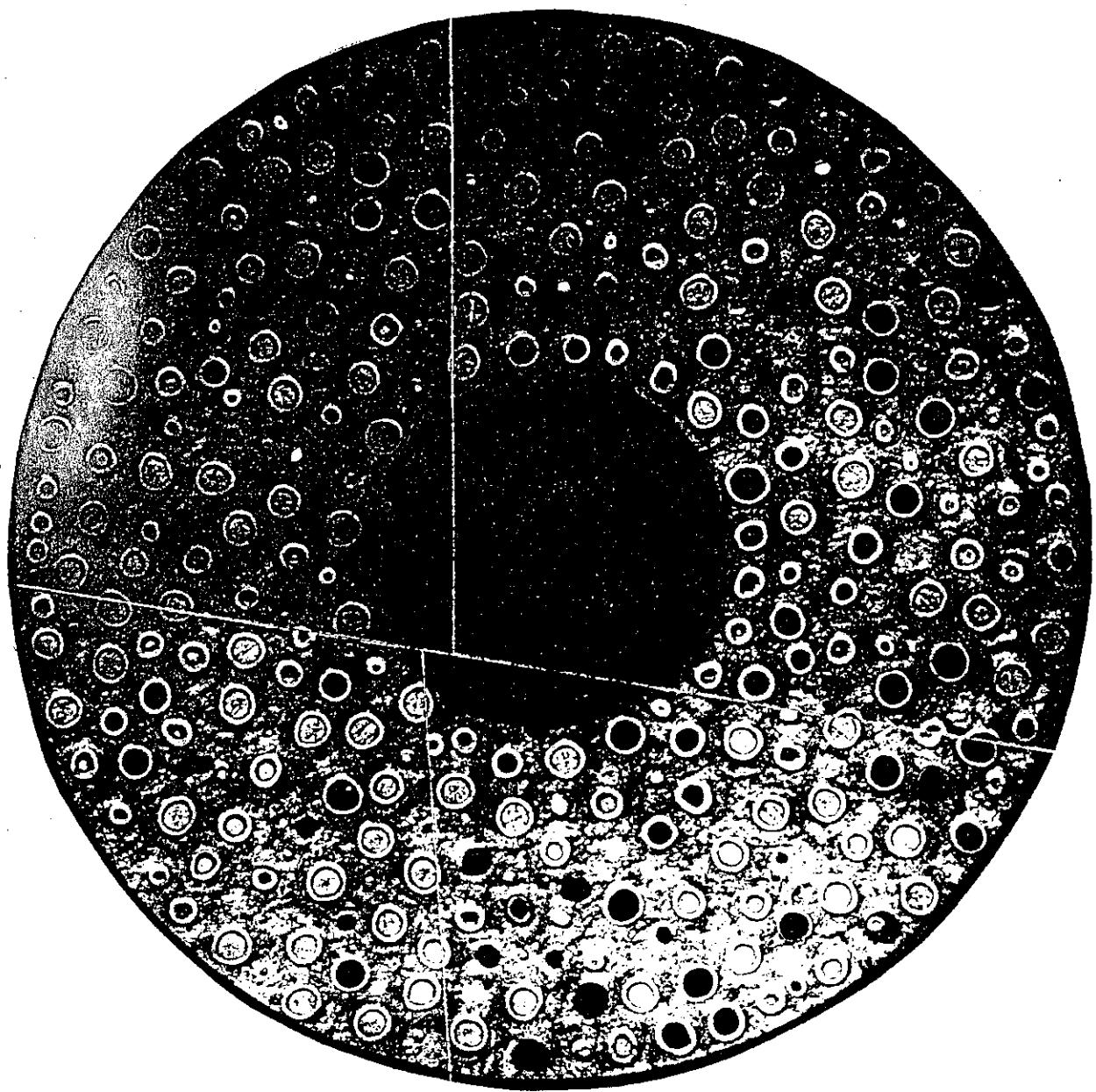


Fig. 4.17 Photograph used for distance measurement between CFPs  
(Sample No. 132 in Table 4.1)

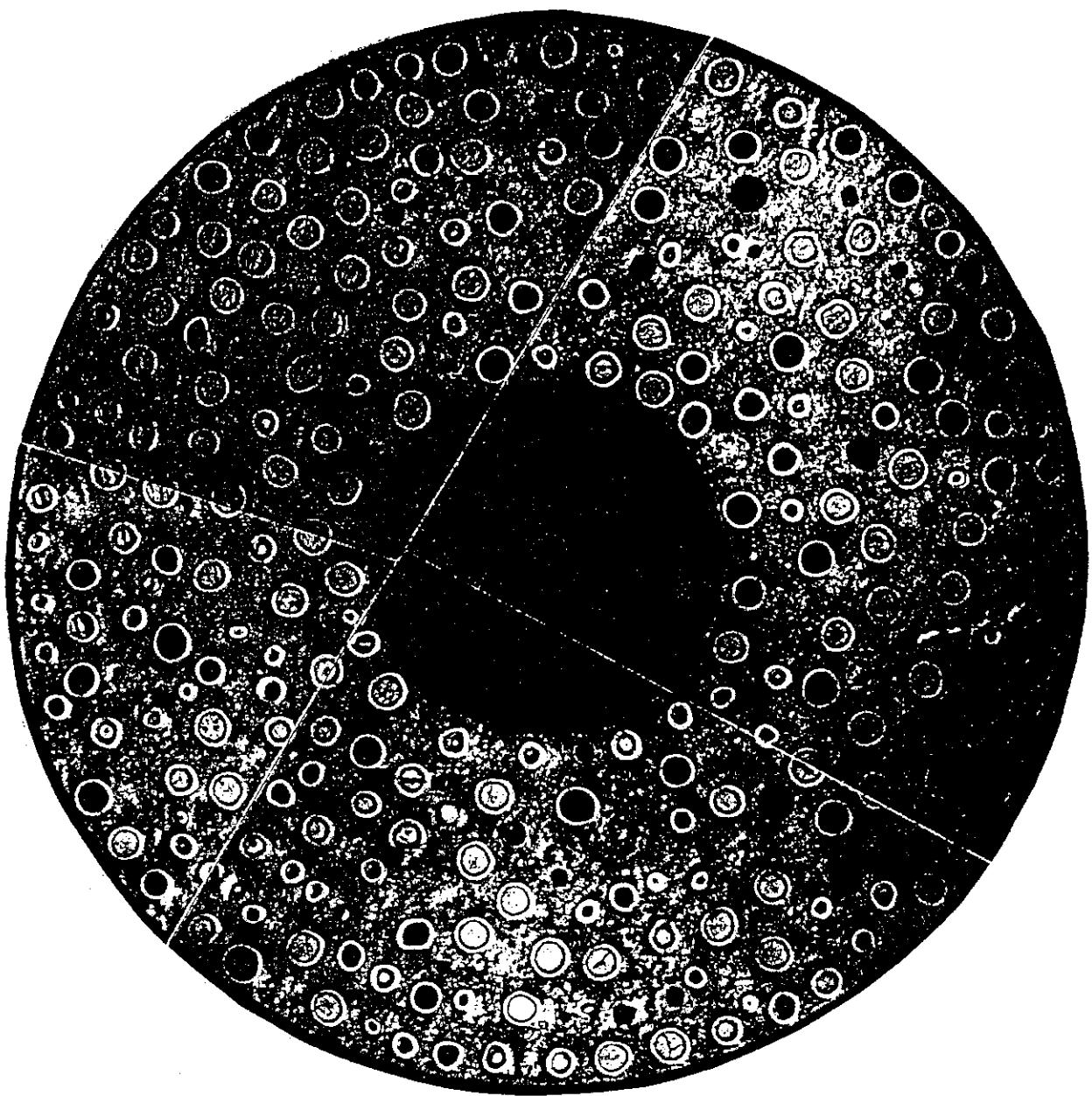


Fig. 4.18 Photograph used for distance measurement between CFPs  
(Sample No. 133 in Table 4.1)

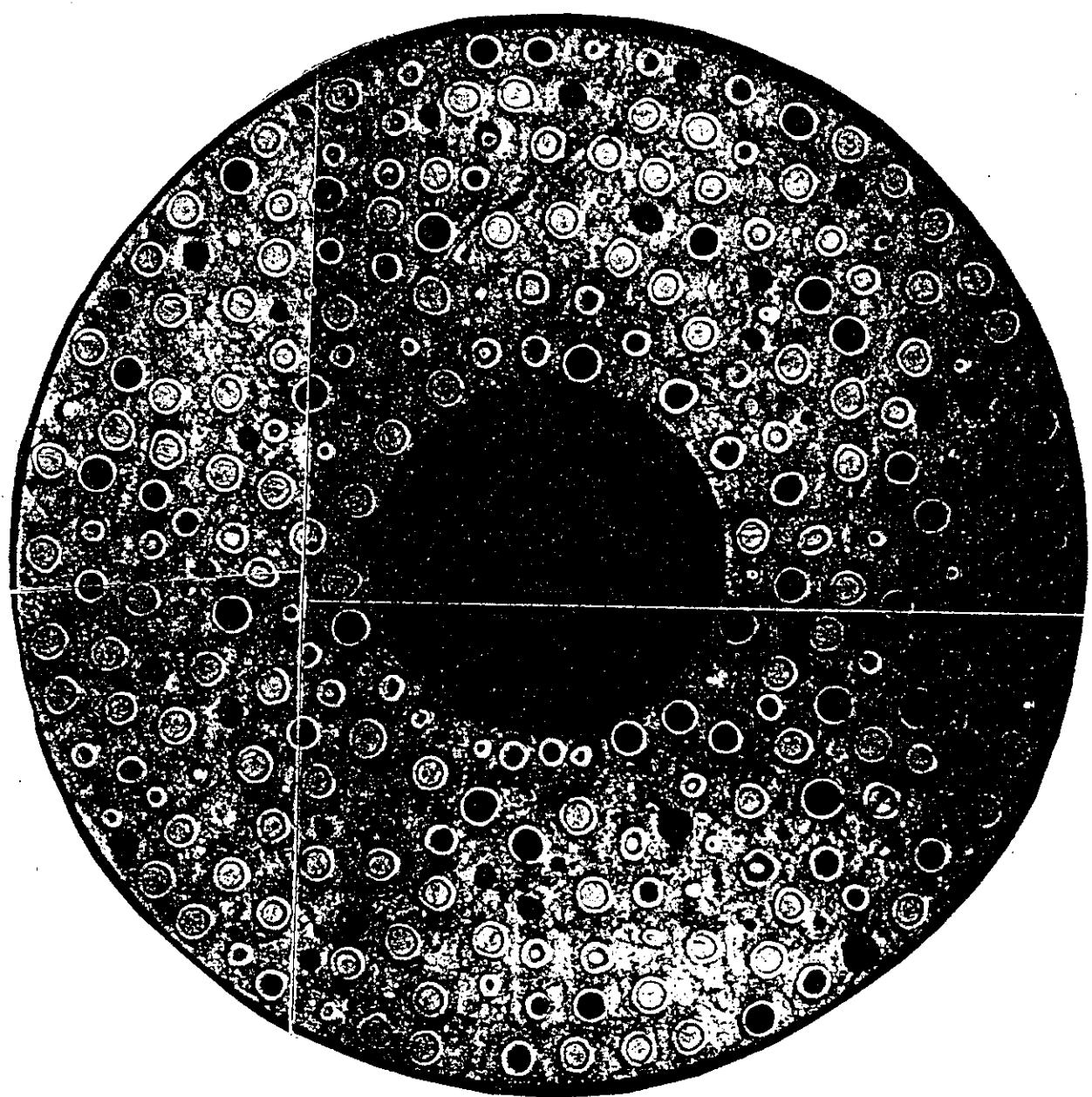


Fig. 4.19 Photograph used for distance measurement between CFPs  
(Sample No. 134 in Table 4.1)

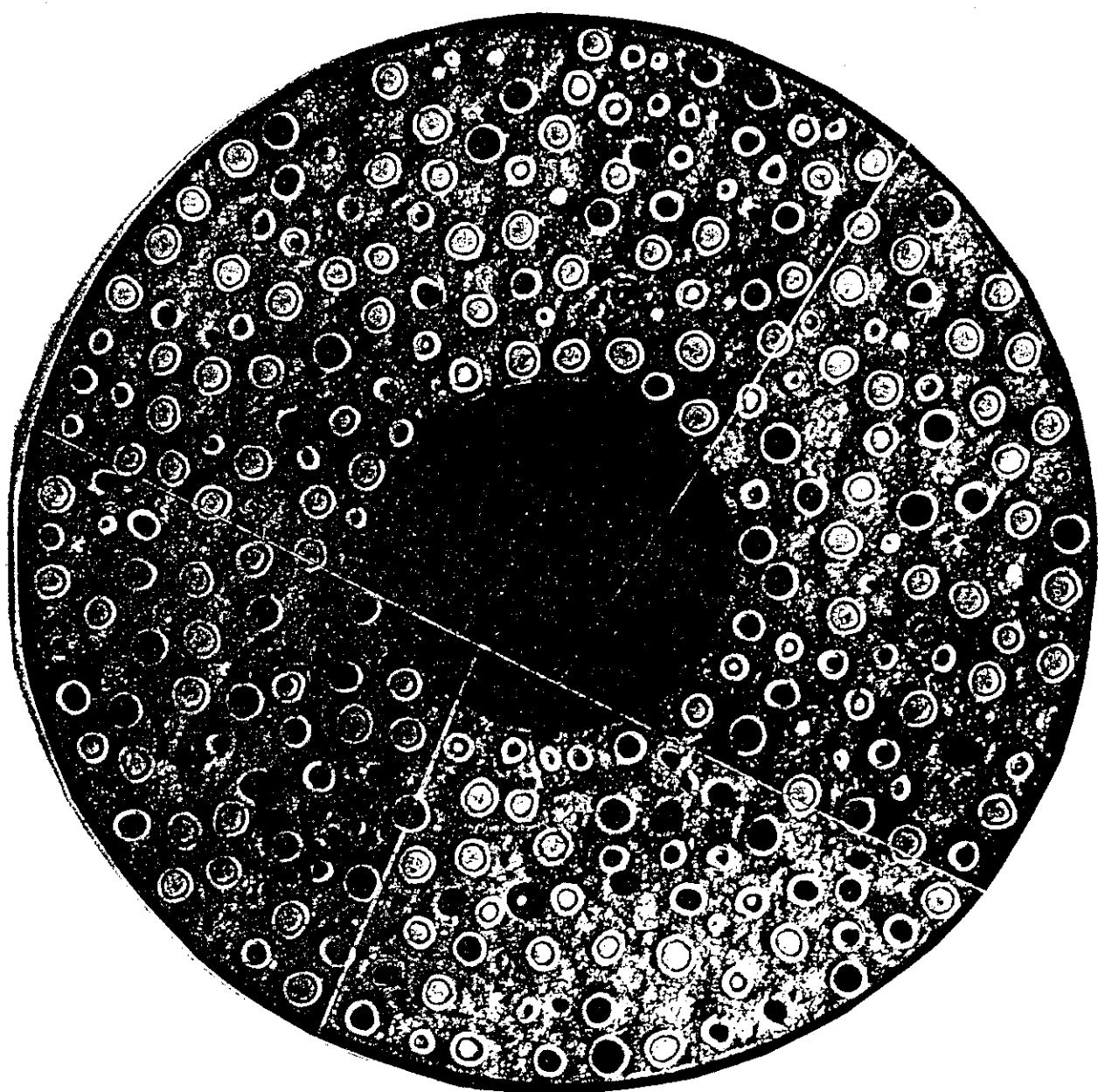


Fig. 4.20 Photograph used for distance measurement between CFPs  
(Sample No. 135 in Table 4.1)

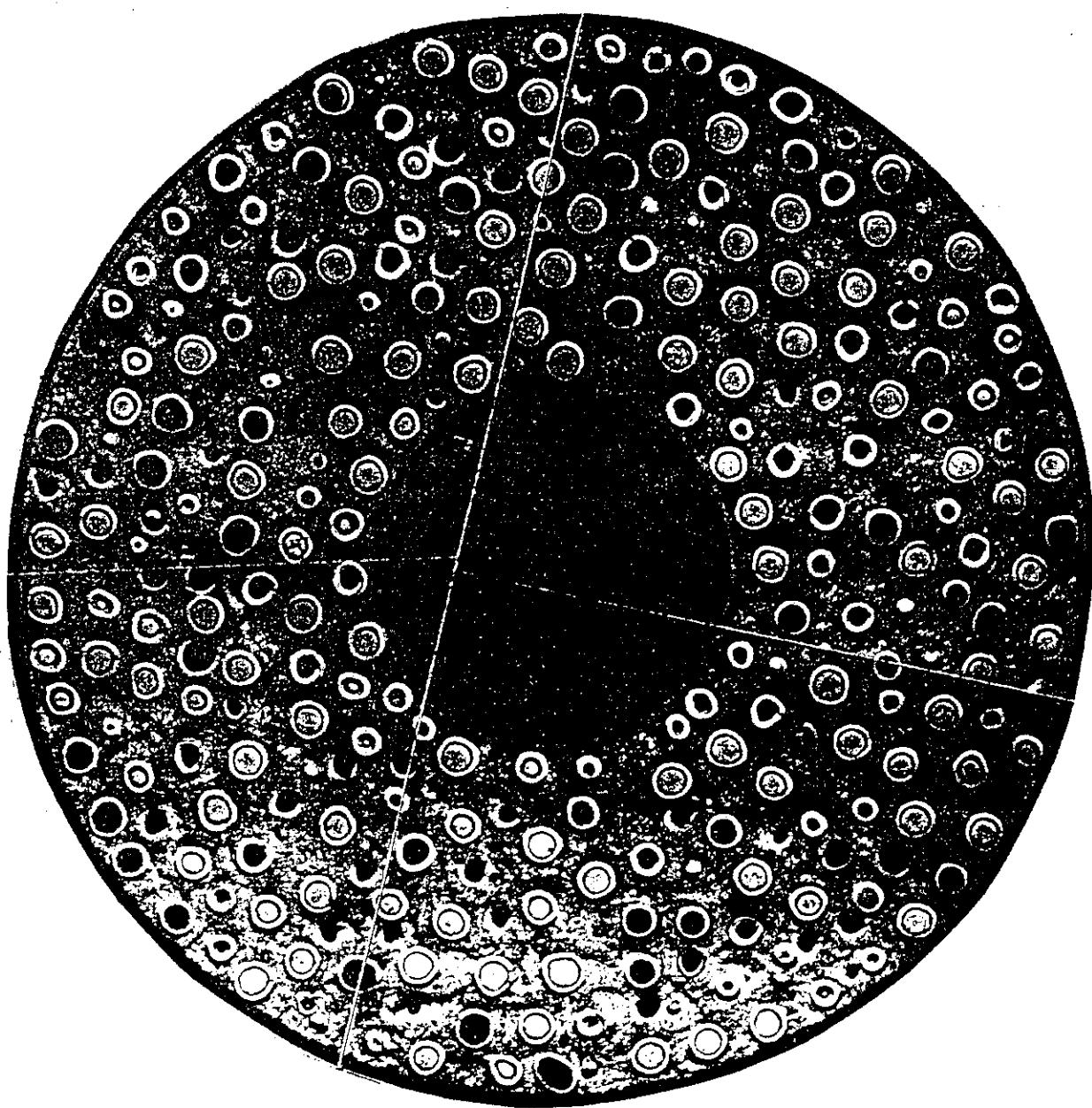


Fig. 4.21 Photograph used for distance measurement between CFPs  
(Sample No. 136 in Table 4.1)

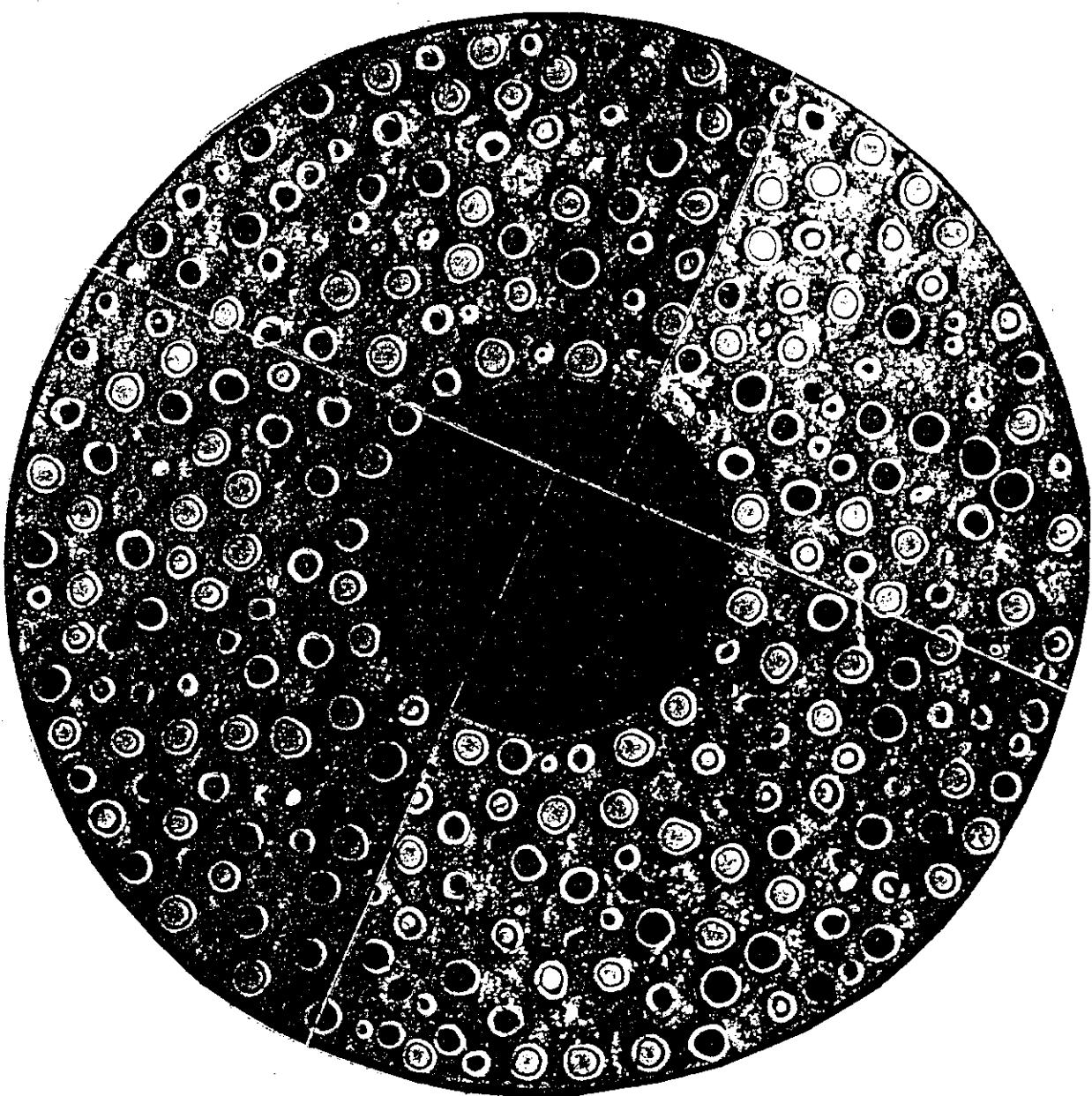


Fig. 4.22 Photograph used for distance measurement between CFPs  
(Sample No. 137 in Table 4.1)

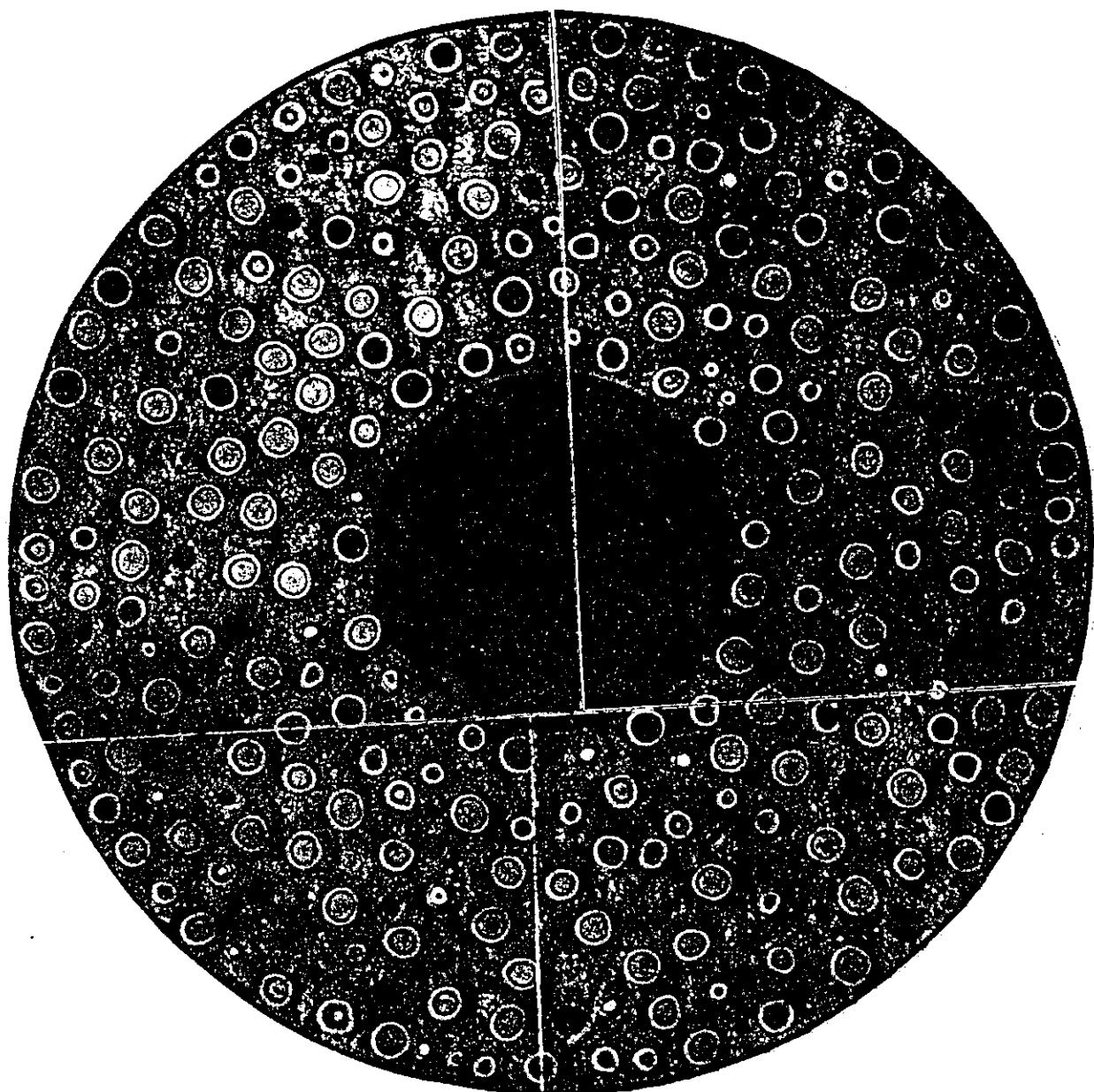


Fig. 4.23 Photograph used for distance measurement between CFPs  
(Sample No. 138 in Table 4.1)

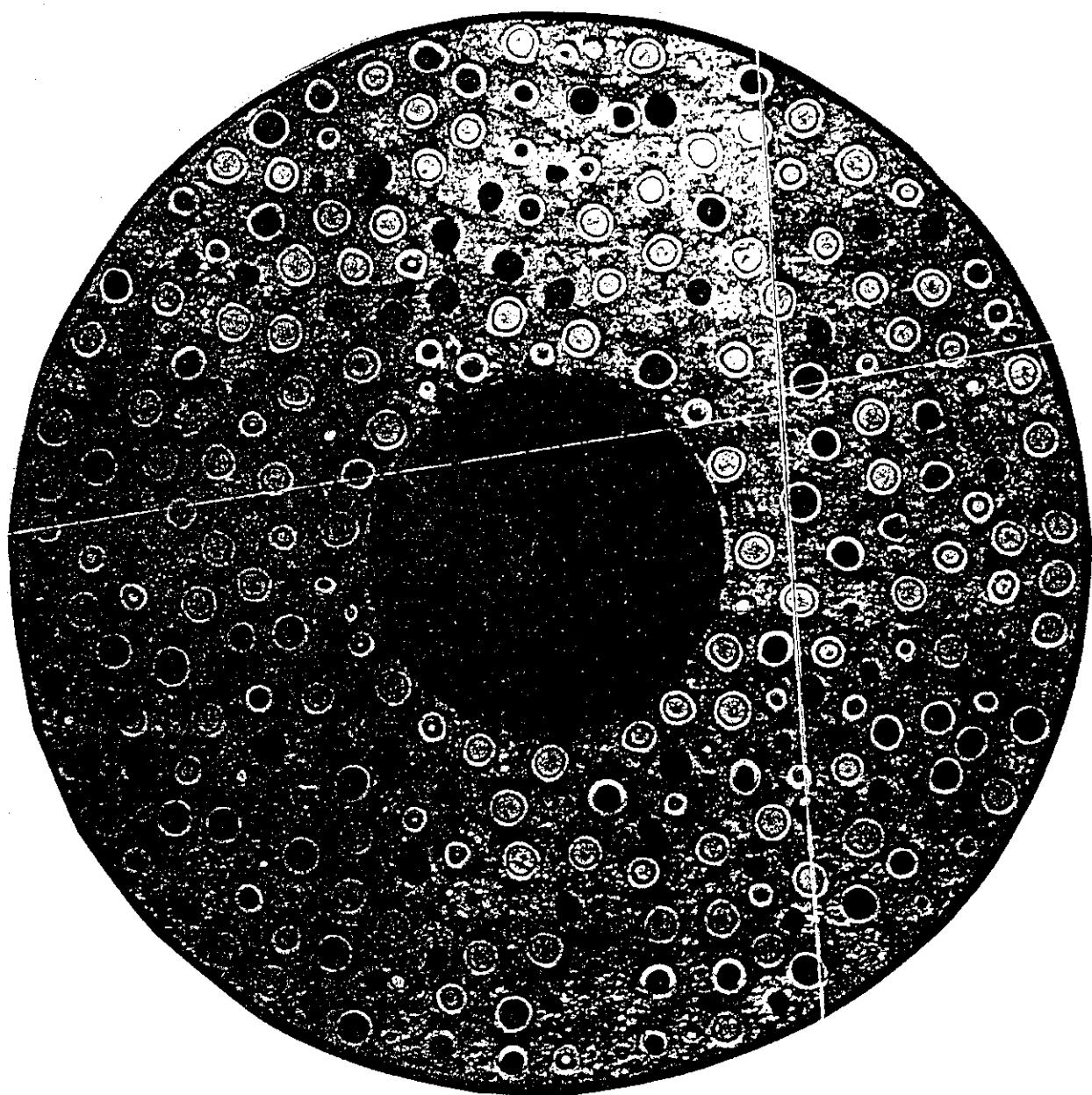


Fig. 4.24 Photograph used for distance measurement between CFPs  
(Sample No. 139 in Table 4.1)

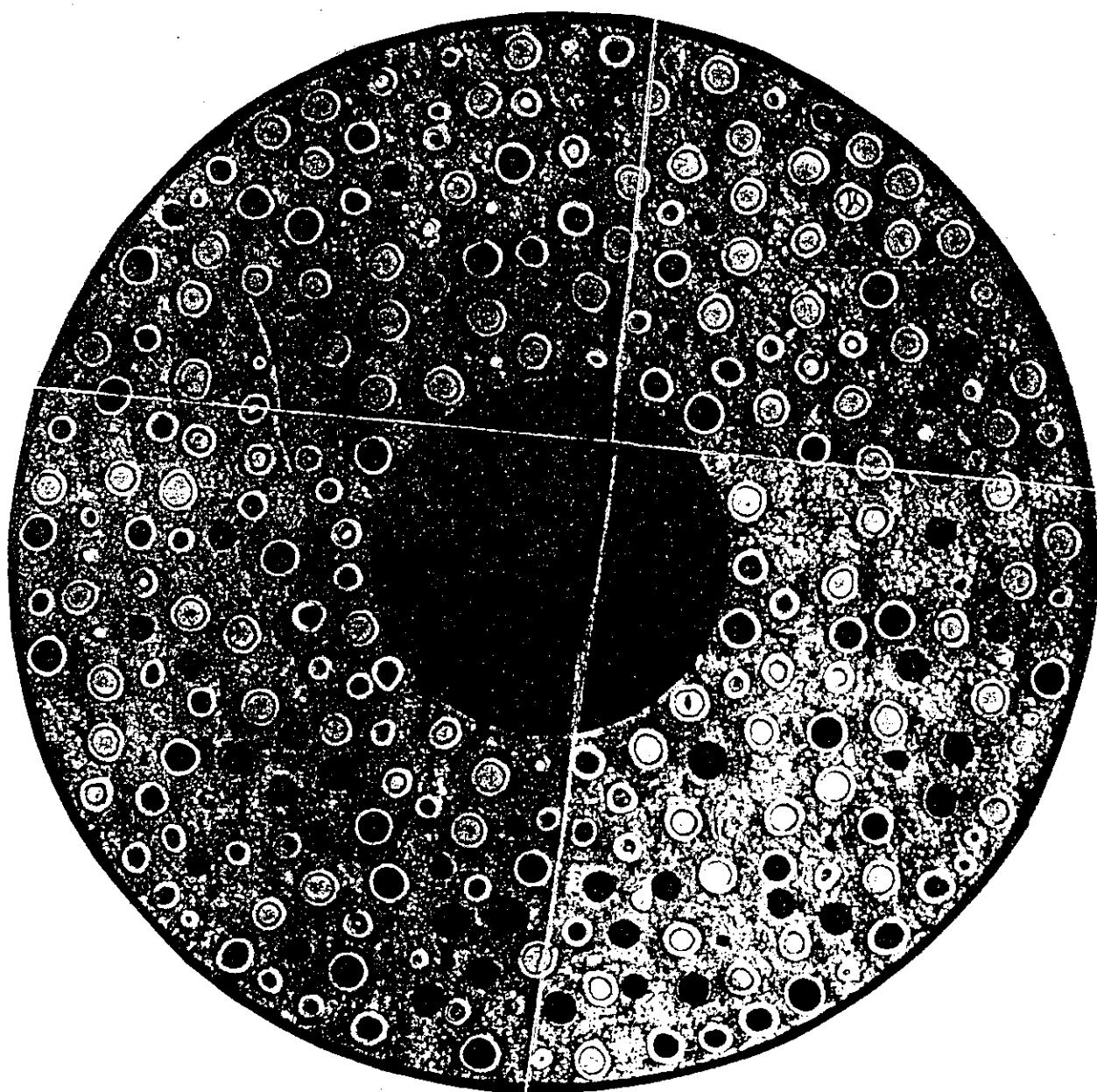


Fig. 4.25 Photograph used for distance measurement between CFPs  
(Sample No. 140 in Table 4.1)

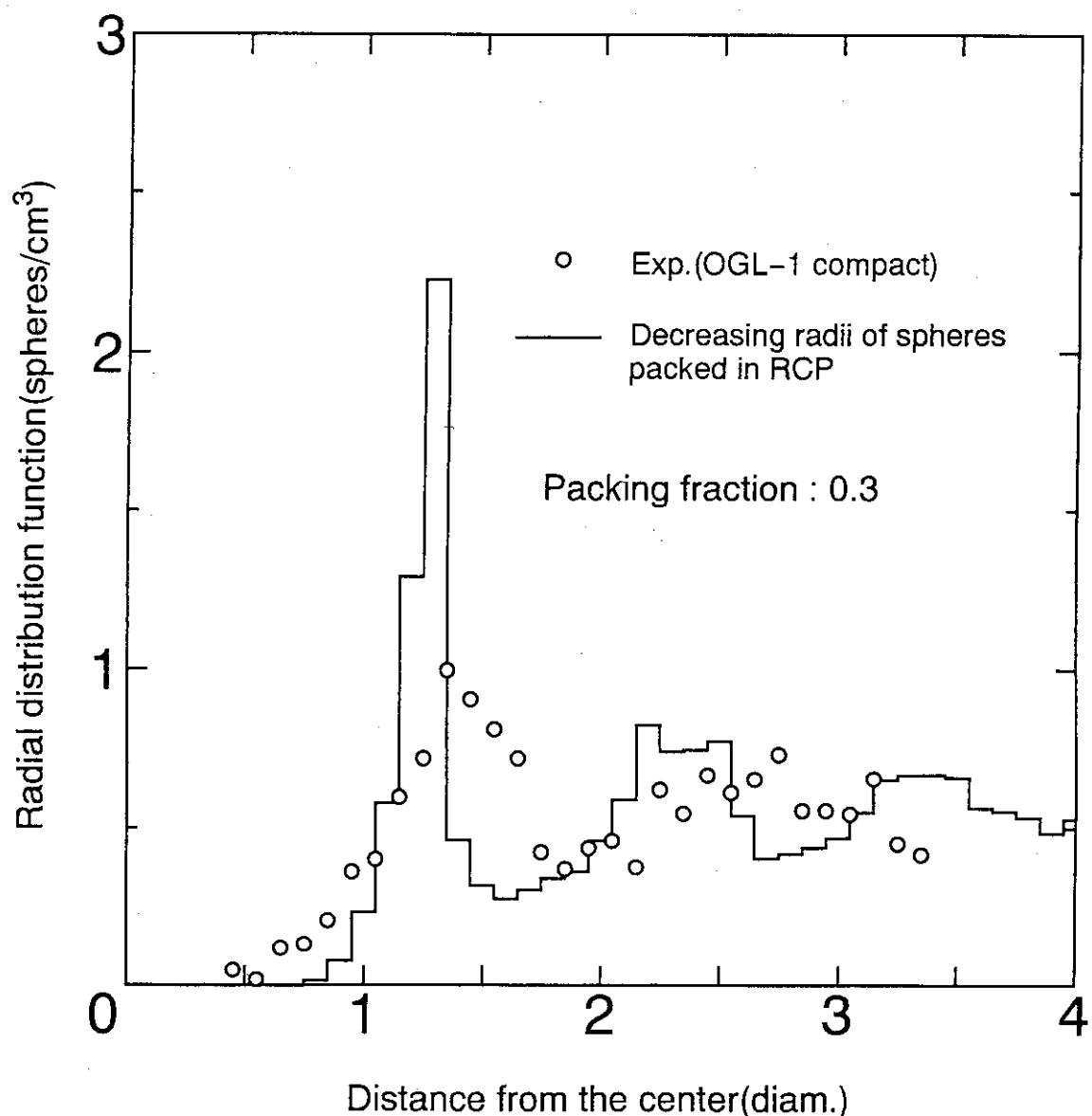


Fig. 4.26 Radial distribution function in cross section

## 5. 統計的一様分布に対する NND

NNDは球が統計的に一様に分布しているという仮定の下で解析的に求めることができる。1章にも記載したとおり、原子炉に使用する球状燃料体をモンテカルロ法によりサンプリングする場合にもっとも良くそれらの空間分布を再現する方法はMCRDFによる模擬充填計算による場合であることが分かっている<sup>(2)</sup>。これは、注目している球の近傍では、球が統計的に一様であるとする仮定では、実際に現れる分布の複雑な構造が再現できないためである。ここでは、解析的方法による計算とMCRDFによる分布を比較し、解析的方法による計算でNND分布をおおよそ近似できることを示す。また、輸送計算上重要な注目球近傍の分布ではMCRDFによる評価が必要であることを示す。

### 5.1 解析的表式

半径  $r$  の球内に最近接球を見つける確率 (NND) は球状燃料が統計的に一様に空間に分布しているとの仮定で以下のように解析的に導くことができる。

中心から距離  $r$  離れた場所におけるNNDは明らかに次の比例関係を満たす。

$$d\text{NND}(r) \propto (1 - \text{NND}(r)) dr \quad (5.1)$$

式(5.1)はこの問題が物理的に中性子の物質透過問題に似ていることを意味している。すなわち、物質の原子と中性子の相互作用は、この問題では輸送する仮想的な粒子の球状燃料体による吸収に等価である。従って、比例定数が変数  $r$  を含まないと仮定すると簡単に次の式を導くことができる。

$$\text{NND}(r) = 1 + C \cdot \exp(-\Sigma \cdot r) \quad (5.2)$$

ここで、 $\Sigma$  は(5.1)式における比例定数であり、境界条件として、 $\text{NND} = 0$  ( $r = 0$ ) を採用すると、

$$\text{NND}(r) = 1 - \exp(-\Sigma \cdot r) \quad (5.3)$$

(5.3)式から、 $\Sigma$  は中性子輸送問題における巨視的断面積に相当する物理量であると考えられ、形式的に平均自由行程に対応する量  $D$  は次のように表せる。

$$D = 1 / \Sigma \quad (5.4)$$

問題は、この平均自由行程に対応する量  $D$  がどのような物理量であるかである。

今、等しい半径  $r_0$  を持つランダムに充填された中空の球を含む系における仮想的な粒子の運動を考えた時、球を透過する仮想的な粒子の平均距離は球の平均コード長、 $L$ 、すなわち  $4r_0/3$  となる。さらに、球間（燃料コンパクトのマトリックス領域）の平均距離  $D_0$  を導入すると、次の式が得られる。

$$\frac{L}{L+D} = f_p \quad (5.5)$$

ここで、 $f_p$ は充填率である。 $D$ は仮想的な粒子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 $D$ そのものである。これを $D$ と書くこととし、距離の単位として球の直径を用いると、

$$D = 2/3 \cdot (1/f_p - 1) \quad (5.6)$$

となる。(5.3)式から、次の式を得ることができる。

$$NND(r) = 1 - \exp\left(-\frac{3}{2} \cdot \frac{f_p}{1-f_p} \cdot r\right) \quad (5.7)$$

(5.7)式を微分すると、

$$\frac{d NND(r)}{d r} = \frac{3}{2} \cdot \frac{f_p}{1-f_p} \exp\left(-\frac{3}{2} \cdot \frac{f_p}{1-f_p} \cdot r\right) \quad (5.8)$$

## 5.2 MCRDFによる結果との比較

(5.8)式で計算したNNDの確率密度をMCRDFコードによる評価結果と比較してFig. 5.1に示す。充填率0.5と0.6に対する結果から、注目している球状燃料に大変近い場所を除いて単純充填状態に対してはMCRDFの結果を解析的方法による計算結果は良く再現している。しかし、RCF状態に充填された球の半径を減少させて得られたNNDはMCRDFの結果と一致しない。この理由は注目している球状燃料体の近くには多くの粒子は存在せず、統計的に一様であるとの仮定は無理があるためである。MCNP-CFPによるHTGR炉心の計算では、注目している球状燃料の近くのNNDが大変重要になる。なぜなら、多くの飛行粒子は球状燃料体から出た後再び近くの球状燃料体に入射する確率が高いためである。以上のことから、単純充填系に対しては近似的NND評価法として応用することはできると考えられるが、コンパクトタイプの燃料の解析時のように一度高充填状態に充填後半径を減少させる方法で得られるNNDを使用する必要がある場合には、(5.7)式により計算されたNNDは近似として使用することも難しいと考えられる。

以上の比較から、理論計算はNND分布の近似解を与えるが、やはり輸送計算上重要な球近傍の分布をつくるためにはMCRDFによる評価が必要であることが分かった。

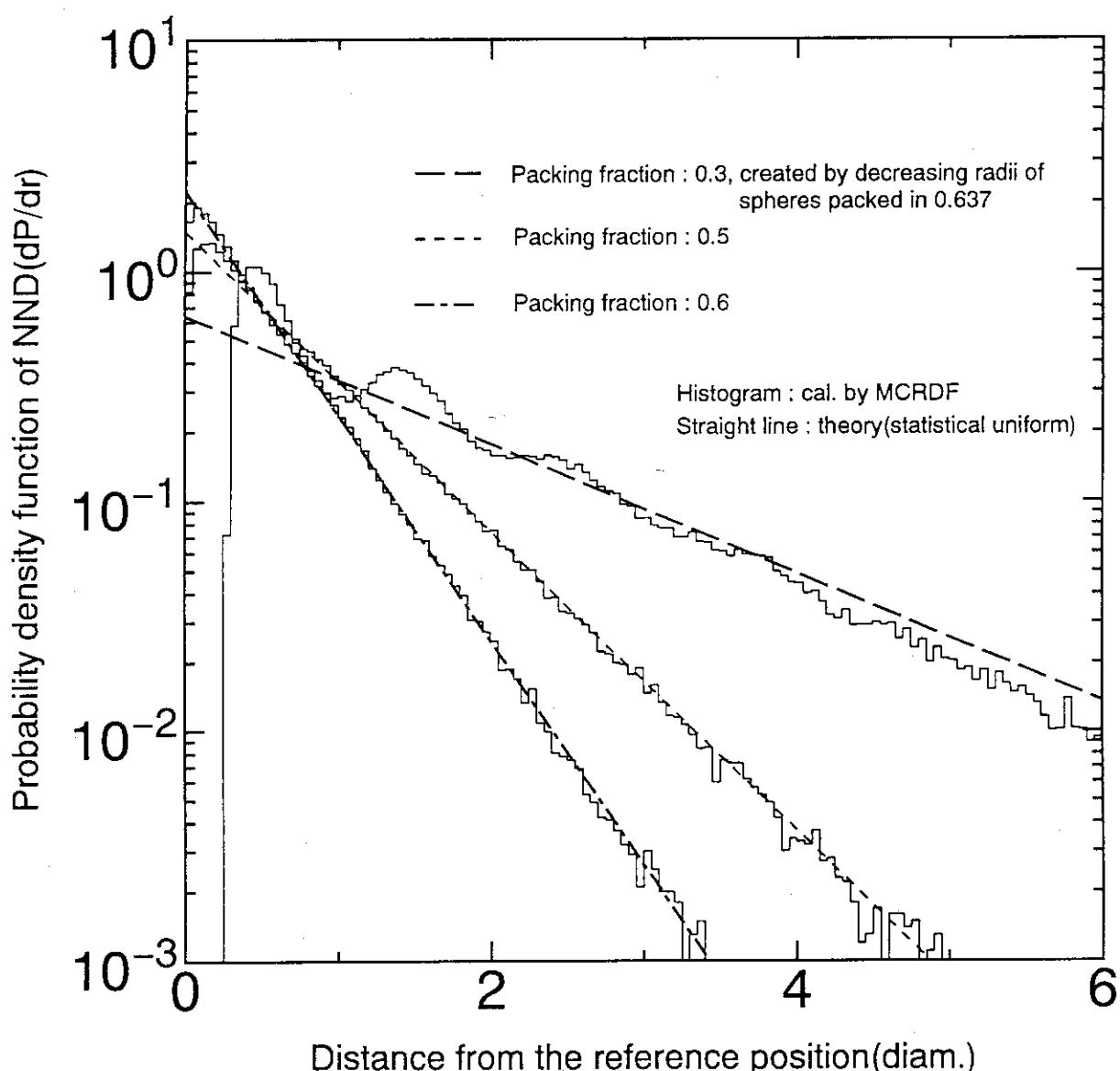


Fig. 5.1 Comparison of probability density of NND between MCRDF calculation and theoretical method

## 6. 入力データとジョブ制御文

### 6.1 入力データ

MCRDFの入力データは全てWRITE(5, \*)で読み込むため、フォーマットはフリーフォーマットで良い。データは、1行に1つだけ書き込むようになっている。高い充填率の計算を行う場合には計算時間がかかる可能性があるため、MCRDFはリスタート機能を有している。従って、それに伴う入出力ファイルが必要となる。また、各種の統計量の保存のためのファイルが必要となる。以下に、入力データについて説明する。

#### I 充填模擬計算関係入力データ

入力順	入力カード名	フォーマット	説明
1	NNR	整数型	充填粒子の数（上限は1000、負の時300に設定）
2	SKIP	整数型	乱数のスキップ回数（負の時無視）
3	IBOX	整数型	計算オプション 0 : ランダム充填 1 : 面心立方格子 2 : 体心立方格子 3 : 単純立方格子 1 ~ 3 の時、アジャストは行わない。従って、RCF以外の充填模擬計算関係入力データは必要ない。
4	IREAD	整数型	初期充填状態設定オプション 1 : 充填状態はファイルから読み込む -1 : 充填状態はファイルから読み込み、アジャスト無しで統計量計算ルーチンをコール ≠±1 : コードがランダムに設定 但し、±1 の時 NNR、PFC は無効、
5	PFC	実数型	充填率 (初期球半径は0.5となっているため、NNRとPFCから充填する立方体の1辺を計算)
6	IADD	整数型	重ならない球に対するアジャストオプション (1 ~ 3) 実際には、重ならない球はほとんどないため、この機能は使われていない。
7	CTME	実数型	計算時間の上限 (分)
8	RCF	実数型	充填後充填率を調整するための因子。 球の半径の減少率を正の絶対値で入力する。

9	I V I B	整数型	球を振動させる周期（サイクル） 球の充填がロックした場合に有効なオプション。但し、現バージョンでは振動は自動的に実施されるため、この入力は無視されている。
10	I C Y	整数型	アジャストの回数。 C P U時間で主に制御されているため、通常はできるだけ大きな数値を入れておけばよい。
11	D D R T L	実数型	平均重なり幅の収束判定値。平均重なり幅がこの値を下回ったとき充填計算を終了する。 $1 \times 10^{-6}$ 程度でよい。
12	D R T T L	実数型	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とき、振動ルーチンをコールする。 $1 \times 10^{-6}$ 程度でよい。

## II 統計量計算関係入力データ

入力順	入力カード名	フォーマット	説明
	LOPT (1) ~ LOPT (5)		統計量計算オプションフラグ
13	LOPT (1)	整数型	球入射角度分布 (1 : ON, 0 : OFF)
14	LOPT (2)	整数型	NND 1 レイトレース位置：球表面 (1 : ON, 0 : OFF)
15	LOPT (3)	整数型	NND 2 レイトレース位置：充填立方体内、計算方法が2種類用意されているが、通常はオプション2を選択する。 (1, 2 : ON, 0 : OFF)
16	LOPT (4)	整数型	NND 3 レイトレース位置：充填立方体表面、計算方法が5種類用意されているが、通常はオプション5を選択する。 (1 ~ 5 : ON, 0 : OFF)
17	LOPT (5)	整数型	2d-RDF (1 : ON, 0 : OFF)
18	SIGT	実数型	球間の物質の全断面積 ( $\text{cm}^{-1}$ )。ただし、MCRDFでは、模擬充填されている球の直径を1 cmに固定しているため、球間物質のマクロ断面積に実際の球状燃料体の直径をかけることで補正する必要がある。

## 6.2 ジョブ制御文

日本原子力研究所の大型計算機FACOM-VP2600で計算するためのジョブ制御文をFig. 6.1に示す。入出力のためのファイルは次の通りである。

基番	サブルーチン I/O	説明とフォーマット
1	MCRDF WRITE	リスタートのための充填状態保存ファイル（書き込み用）

			(I6) 球の個数
			(I12) 亂数発生のためのインデックス
			(E11.4) 充填率
			(E11.4) 球の半径
			(E11.4) 充填する立方体の一辺
			(3E12.5) 球の座標 (NNR個)
2	MCRDF	READ	リスタートのための充填状態保存ファイル (読み込み用) フォーマットは基盤1のファイルと同じ
3	NND	WRITE	NND 1 分布プロットデータ保存用ファイル (1P2E12.5) NND 分布のX, Yデータ
4	CRCP2	WRITE	球の中心スタートのNND分布プロットデータ保存用ファイル 3.4節に説明した球が充填されている立方体からはみだした粒子の処理をしない作成方法を用いている。 (1P2E12.5) NND 分布のX, Yデータ
5	MCRDF	READ	MCRDF 入力ファイル
6	-	WRITE	MCRDF 出力ファイル
7	CRCP	WRITE	球の表面スタートのNND分布プロットデータ保存用ファイル (基本的にNND 1と同じ)。但し、3.4節に説明した球が充填されている立方体からはみだした粒子の処理をしない作成方法を用いている。 (1P2E12.5) NND 分布のX, Yデータ
8	CRCP	WRITE	球の表面スタートの球入射角度分布ファイル (1P6E10.3) 角度分布のX, Y*5データ 角度Xは0~1(rad)まで20群、Yは1直径を20分割。 従って、1直径分のデータは80行となる。データは計算できる距離まで出力される。
9	CRCP	WRITE	球の表面スタートのNND分布。モンテカルロコード用データ出力ファイル (1PE12.5) NNDデータ (1直径を20分割)
10	XSEC	WRITE	球が充填されている立方体の断面に現れる様々な大きさの円の位置と半径情報の出力ファイル (1PE12.5) 立方体の一辺の長さ (I4) 見える円の個数 (1P3E12.5) 円の位置X, Yと半径 (見える円の個数分)
11	-	-	未使用
12	NND	WRITE	NND 1 分布。モンテカルロコード用データ出力ファイル

(I5,F10.4) 群数、メッシュ幅  
(1PE12.5) NNDデータ (1直径を20分割)

13 NND2 WRITE NND 2分布プロットデータ保存用ファイル  
(1P2E12.5) NND分布のX,Yデータ

14 NND2 WRITE NND 2分布。モンテカルロコード用データ出力ファイル  
(I5,F10.4) 群数、メッシュ幅  
(1PE12.5) NNDデータ (1直径を20分割)

15 NND3 WRITE NND 2分布プロットデータ保存用ファイル  
(1P2E12.5) NND分布のX,Yデータ

16 NND3 WRITE NND 2分布。モンテカルロコード用データ出力ファイル  
(I5,2F10.4) 群数、メッシュ幅、充填率 (但し、充填率の出力は  
NND3R4のみ)  
(1PE12.5) NNDデータ (1直径を20分割)

17 XSEC WRITE 2d-RDFプロット用データ  
(1P2E12.5) 2d-RDFのX,Yデータ

```

//JCLG JOB
// EXEC JCLG
//SYSIN DD DATA,DLM='++'
// JUSER 63064506,IS.MURATA,0842.01
    T.7 C.8 W.4 I.5 E.2
    OOPTP NOTIFY=J4506,PASSWORD= ,CLASS=2
/**EXEC FORTEX,SO='J4506.MCRDF.PS',Q='FORT77',
/** A='NOS,NOPRINT,AE'
// EXEC FORTEX,SO='J4506.J7671.MCRDF',Q='FORT77',
// A='NOS,ELM(*),NOPRINT,AE'
// EXEC LKEDEX
// EXEC GO
/* OUTPUT FILE LIST
/*      NO     SUB     I/O
/*      FT01   MCRDF   WRITE   RESTART FILE
/*      FT02   MCRDF   READ    RESTART FILE
/*      FT03   NND     WRITE   PLOT
/*      FT04   CRCP2   WRITE
/*      FT05   MCRDF   READ    INPUT DATA
/*      FT06   ALL SUB  WRITE   GENERAL WRITE
/*      FT07   CRCP    WRITE   PLOT
/*      FT08   CRCP    WRITE   ANG. DIST.
/*      FT09   CRCP    WRITE   FOR MCNP-CFP
/*      FT10   XSEC    WRITE   X-SEC FIGURE
/*      FT11   -        WRITE   -
/*      FT12   NND     WRITE   FOR MCNP-CFP
/*      FT13   NND2/R  WRITE   PLOT
/*      FT14   NND2/R  WRITE   FOR MCNP-CFP
/*      FT15   NND3/R  WRITE   PLOT
/*      FT16   NND3/R  WRITE   FOR MCNP-CFP
/*      FT17   XSEC    WRITE   2D-RDF(N
/*FT01F001 DD DSN=J4506.F637.P1000.DATA,UNIT=TSSWK2,
/*          DISP=(NEW,CATLG,CATLG),SPACE=(TRK,(1,1)),
/*          DCB=(RECFM=FB,LRECL=80,BLKSIZE=3200)
/*FT07F001 DD DSN=J4506.CRCPA.PLOT.DATA,UNIT=TDS,
/*          DISP=(NEW,CATLG,CATLG),SPACE=(TRK,(1,1)),
/*          DCB=(RECFM=FB,LRECL=80,BLKSIZE=3200)
/*FT08F001 DD DSN=J4506.CRCPA.ANG.DATA,UNIT=TDS,
/*          DISP=(NEW,CATLG,CATLG),SPACE=(TRK,(1,1)),
/*          DCB=(RECFM=FB,LRECL=80,BLKSIZE=3200)
/*FT09F001 DD DSN=J4506.CRCPA.CFP.DATA,UNIT=TDS,
/*          DISP=(NEW,CATLG,CATLG),SPACE=(TRK,(1,1)),
/*          DCB=(RECFM=FB,LRECL=80,BLKSIZE=3200)
/*FT03F001 DD DSN=J4506.NND1.FCCF30.PLOT.DATA,UNIT=TDS,
/*          DISP=(NEW,CATLG,CATLG),SPACE=(TRK,(1,1)),
/*          DCB=(RECFM=FB,LRECL=80,BLKSIZE=3200)
/*FT12F001 DD DSN=J4506.NND1.FCCF30.CFP.DATA,UNIT=TDS,
/*          DISP=(NEW,CATLG,CATLG),SPACE=(TRK,(1,1)),
/*          DCB=(RECFM=FB,LRECL=80,BLKSIZE=3200)
/*FT13F001 DD DSN=J4506.NND2.FCCF30.PLOT.DATA,UNIT=TDS,
/*          DISP=(NEW,CATLG,CATLG),SPACE=(TRK,(1,1)),
/*          DCB=(RECFM=FB,LRECL=80,BLKSIZE=3200)
/*FT14F001 DD DSN=J4506.NND2.FCCF30.CFP.DATA,UNIT=TDS,
/*          DISP=(NEW,CATLG,CATLG),SPACE=(TRK,(1,1)),
/*          DCB=(RECFM=FB,LRECL=80,BLKSIZE=3200)

```

Fig. 6.1 Job control statements of MCRDF (1/2)

```

/*FT15F001 DD DSN=J4506.NND3.FCCF30.PLOT.DATA,UNIT=TDS,
/*          DISP=(NEW,CATLG,CATLG),SPACE=(TRK,(1,1)),
/*          DCB=(RECFM=FB,LRECL=80,BLKSIZE=3200)
/*FT16F001 DD DSN=J4506.NND3.FCCF30.CFP.DATA,UNIT=TDS,
/*          DISP=(NEW,CATLG,CATLG),SPACE=(TRK,(1,1)),
/*          DCB=(RECFM=FB,LRECL=80,BLKSIZE=3200)
//FT10F001 DD DSN=J4506.XSEC.PF334.DATA,UNIT=TDS,
//          DISP=(NEW,CATLG,CATLG),SPACE=(TRK,(1,1)),
//          DCB=(RECFM=FB,LRECL=80,BLKSIZE=3200)
//FT17F001 DD DSN=J4506.RDF2D.PF334.DATA,UNIT=TDS,
//          DISP=(NEW,CATLG,CATLG),SPACE=(TRK,(1,1)),
//          DCB=(RECFM=FB,LRECL=80,BLKSIZE=3200)
/*FT01F001 DD DUMMY
/*FT02F001 DD DUMMY
//FT02F001 DD DSN=J4506.F637.P1000.DATA,DISP=SHR
/*FT10F001 DD DUMMY
//SYSIN DD *
 1000      NUMBER OF PARTICLES
 0          DUMMY CALL NUMBER TO BE SKIPPED(TRDF OPTION IF -1)
 0          0:RANDOM, 1:FCC, 2:BCC, 3:UCL, 4:HCP
 -1         1:READ FROM FT02 (IF -1, ADJUSTMENT IS NOT DONE.)
 0.637     PACKING FRACTION
 3          NOT-OVERLAPPED PARTICLE TREATMENT OPTION(NORMALLY 3)
 110.       CPU-TIME
 0.19362878 RAR REDUCTION FRACTION(POSITIVE) DUE TO BINDER
 500        VIB. OPTION CYCLE(NORMALLY 1)
 10000000  NO. OF CYCLE
 1.E-6      DDR TOLERANCE
 1.E-6      LIMIT OF DDR DECREASING RATE          PLOT CFP
 0          LOPT(1): CRCP2 OPTION ( 1:ON,0:OFF) FT04
 0          LOPT(2): NND   OPTION ( 1:ON,0:OFF) FT03 FT12 NORMALLY 1
 0          LOPT(3): NND2  OPTION (1-2:ON,0:OFF) FT13 FT14 NORMALLY 2
 0          LOPT(4): NND3  OPTION (1-5:ON,0:OFF) FT15 FT16 NORMALLY 5
 1          LOPT(5): XSEC  OPTION ( 1:ON,0:OFF) FT10
 0.3916    TOTAL MACRO CROSS SECTION ON MATRIX MATERIAL(FOR NND2R)
//* RADIAL COLISION PROBABILITY OUTPUT FOR MCNP.CFP
//*T09F001 DD DSN=J4506.F62F30.ACOS.DATA,UNIT=TDS,
//*          DISP=(NEW,CATLG,CATLG),SPACE=(TRK,(1,1)),
//*          DCB=(RECFM=FB,LRECL=20,BLKSIZE=2000)
++
//
```

Fig. 6.2 Job control statements of MCRDF (2/2)

## 7. ま　と　め

多数の不規則分布をする球状燃料体を含む体系は、従来正確な取り扱いが困難であり近似的に取り扱われていた。これを正確に取り扱うために、必要となる不規則配列球の空間確率分布を計算する方法を考案し、新たにMCRDFコードを開発した。本手法の特徴は解析的分布関数を用いないで、充填模擬法により、ランダムに分布する粒子に対しRCPに近い高い充填状態を達成した後、実際の製造工程を模擬して実充填率を再現したことと、その状態における各種確率分布関数を決定した点にある。この確率分布を用いてモンテカルロ法により球の位置等がサンプリングできる。

このコードにより、1000個の粒子を約10分程度で、ほぼRandom close packing状態に充填できる。また、本コードにより、多数の球が不規則に配列した体系はもちろん面心立方格子、体心立方格子等の規則配列体系について、体系の統計量、すなわち径方向分布関数(Radial distribution function)、最近接粒子分布(Nearest neighbor distribution)、2次元径方向分布関数(two dimensional radial distribution function)、球入射角度分布、隣接球分布等を評価することができた。

本コードにより計算した結果と、X線回折写真より求めた径方向分布関数及び実際の球状燃料体を含む燃料コンパクトの金相写真から作成した2次元径方向分布関数との比較により、本コードの妥当性を確認した。この結果、上記の諸分布関数は燃料コンパクト中の被覆燃料粒子の状態をよく再現していることが明らかとなった。

## 謝　　辞

本報をまとめるに当たり、御指導いただいた高温工学試験研究炉開発部長田中利幸氏、原子炉工学部次長土橋敬一郎氏、高温工学試験研究炉開発部HTTR原子炉開発室長塩沢周策氏並びに高温工学試験研究炉開発部HTTR原子炉開発室長代理新藤隆一氏に深く感謝いたします。

## 7. ま　と　め

多数の不規則分布をする球状燃料体を含む体系は、従来正確な取り扱いが困難であり近似的に取り扱われていた。これを正確に取り扱うために、必要となる不規則配列球の空間確率分布を計算する方法を考案し、新たにMCRDFコードを開発した。本手法の特徴は解析的分布関数を用いないで、充填模擬法により、ランダムに分布する粒子に対しRCPに近い高い充填状態を達成した後、実際の製造工程を模擬して実充填率を再現したことと、その状態における各種確率分布関数を決定した点にある。この確率分布を用いてモンテカルロ法により球の位置等がサンプリングできる。

このコードにより、1000個の粒子を約10分程度で、ほぼRandom close packing状態に充填できる。また、本コードにより、多数の球が不規則に配列した体系はもちろん面心立方格子、体心立方格子等の規則配列体系について、体系の統計量、すなわち径方向分布関数(Radial distribution function)、最近接粒子分布(Nearest neighbor distribution)、2次元径方向分布関数(two dimensional radial distribution function)、球入射角度分布、隣接球分布等を評価することができた。

本コードにより計算した結果と、X線回折写真より求めた径方向分布関数及び実際の球状燃料体を含む燃料コンパクトの金相写真から作成した2次元径方向分布関数との比較により、本コードの妥当性を確認した。この結果、上記の諸分布関数は燃料コンパクト中の被覆燃料粒子の状態をよく再現していることが明らかとなった。

## 謝　　辞

本報をまとめるに当たり、御指導いただいた高温工学試験研究炉開発部長田中利幸氏、原子炉工学部次長土橋敬一郎氏、高温工学試験研究炉開発部HTTR原子炉開発室長塩沢周策氏並びに高温工学試験研究炉開発部HTTR原子炉開発室長代理新藤隆一氏に深く感謝いたします。

## 参 考 文 献

- (1) Saito S., et al.: "Design of High Temperature Engineering Test Reactor (HTTR)", JAERI-1332(1994).
- (2) Murata I., Mori T., and Nakagawa M.: "MCNP-CFP: Three-dimensional Continuous Energy Monte Carlo Code for Randomly Distributed Spherical Fuels Based on Statistical Geometry Model," to be published in JAERI-Data/Code(1996). See also, Murata I., Mori T., and Nakagawa M.: "Continuous Energy Monte Carlo Calculations of Randomly Distributed Spherical Fuels in HTGRs Based on Statistical Geometry Model," to be published in Nucl. Sci. Eng. (1996).
- (3) Percus J.K. and Yevick G.J.: Phys. Rev., 110, 1(1957).
- (4) Jodrey W.S. and Tory E.M.: Phys. Rev., A, 32(4), 2347(1985).
- (5) Clarke A.S. and Wiley J.D.: Phys. Rev. B, 35(14), 7350(1987).
- (6) Berryman J.G.: Phys. Rev. A, 27(2), 1053(1983).
- (7) Bennett C.H.: J. Appl. Phys., 43(6), 2727(1972).
- (8) Finney J.L.: Mat. Sci. Eng., 23, 199(1976).
- (9) W.S. Jodrey and E.M. Tory: Powder Technol., 30, 111(1981).
- (10) Nautre, 239, 488(1972).
- (11) Haughey D.P. and Beveridge G.S.: Chem. Eng. Sci., 21, 905(1966).
- (12) Scott G.D. and Kilgour D.M.: Br. J. Appl. Phys., 2, 863(1969).
- (13) Finney J.L.: Proc. R. Soc. London, Ser. A 319, 479(1970).
- (14) LeFevre J.: Nature(London), Phys. Sci., 235, 20(1972).
- (15) Gotoh K. and Finney J.L.: Nature(London), 252, 202(1974).
- (16) Woodcock L.V., J. Chem. Soc.: Faraday Trans. II, 72, 1667(1976).
- (17) Gordon J.M., Gibbs J.H. and Fleming P.D.: J. Chem. Phys., 65, 2771(1976).
- (18) Woodcock L.V. and Angell C.A.: Phys. Rev. Lett., 47, 1129(1981).
- (19) Anguilera-Navarro V.C., Fortes M., deLlano M., and Plastino A.: J. Chem. Phys. 76, 749(1982).
- (20) Cargill III G.S.: J. Appl. Phys., 41, 2248(1970).
- (21) Fukuda K.: Private communication.
- (22) Fukuda K., et al. : "Irradiation experiments of 3rd, 4th and 5th fuel assemblies by an in-pile gas loop, OGL-1," JAERI-M 86-092(1986).
- (23) Fukuda K., et al. : "Research and Development of HTGR Fuels," JAERI-M 89-007(1989).

## 付録 A M C R D F の計算の流れとサブルーチンの概要

M C R D F の計算の流れをFig. A. 1に示す。なお、図はM C R D F の主要部分を記載したものであり各サブルーチンのアルゴリズムは省略した。それぞれのサブルーチンのアルゴリズムについては、(2)のサブルーチン概要に簡単に述べている。

次に、各サブルーチンの概要と主要変数について説明する。

## (1) コモン変数

## 1) パラメータ文

PIE=3. 141592

MPX=1000 (粒子の最大取り扱い数)

NRY=1000 (粒子間の相関量を取り扱う場合の最大数)

NAVE=10 (DDRの変化率を計算する場合のサイクル数)

ISORT=1 (quick sortを用いるかどうかを示すフラグ、1の時ON)

## 2) コモン変数

/INPDT/PFC, AAR, IBOX

PFC : 充填率

AAR : 球を充填する立方体の一辺

IBOX : 充填パラメータ (0;ランダム充填、1;FCC、2;BCC、3;UCL)

/MAINCM/XXX(MPX), YYY(MPX), ZZZ(MPX), RDF(MPX), RCP(3, MPX), RCP2(3, MPX), SIGT,

XNW(MPX), YNW(MPX), ZNW(MPX), RAR, NNR

XXX(MPX), YYY(MPX), ZZZ(MPX) : 球の座標

RDF(MPX) : Radial Distribution Function

RCP(3, MPX) : CRCP, NND, NND2, NND2R, NND3, NND3R, NND3R2, NND3R3及びNND3R4用  
NNDデータ

RCP2(3, MPX) : CRCP2用NNDデータ

SIGT : NND2用全断面積データ ( $\text{cm}^{-1}$ )

XNW(MPX), YNW(MPX), ZNW(MPX) : ADJST用球の座標

RAR : 球の半径

NNR : 球の個数

/RANCM/IX, NRN

IX : 初期乱数

NRN : 亂数コール回数

/OVLCM/ANL, DDR, CCC, RMI, RMA, NNP(100, MPX), NP(MPX), MMP(100, MPX), MP, NOL, IAD,

NOM, ICE

ANL : 1個当たりの平均重なり球数

DDR : 平均重なり幅  
 CCC : 現バージョンでは使用していない  
 RMI : 最小重なり幅（重なっているもの内）  
 RMA : 最大重なり幅  
 NNP(100, MPX) : それぞれの球の重なっている球の番号  
 NP(MPX) : それぞれの球の重なっている球の数  
 MMP(100, MPX) : 現バージョンでは使用していない  
 MP : 現バージョンでは使用していない  
 NOL : 重なりを持つ球の数  
 IAD : アジャストオプション（現バージョンでは使用していない）  
 NOM : 最大重なり幅を持つ球の番号  
 ICE : 現バージョンでは使用していない

/TRNCM/XTR(27), YTR(27), ZTR(27)

XTR(27), YTR(27), ZTR(27) : 座標変換マトリックス

/CRC/DIS(MPX), P(3), IDIS(NRY, MPX), ISIS(NRY, MPX), IDD(NRY), ISS(MPX)

DIS(MPX) : ある注目球の他の球までの距離  
 P(3) : NND 計算時の粒子スタートから球入射までの距離  
       通常、1；中心間距離、2；球表面と中心間距離、  
       3；球表面間距離

IDIS(NRY, MPX) : 各球に近いものから並べた場合の球番号  
 ISIS(NRY, MPX) : 各球に近いものから並べた場合の各球のISSインデックス  
 IDD(NRY) : ある球に対して近いものから並べた場合の球番号  
 ISS(MPX) : ある注目球に対して他の球までの距離を計算するとき、最も近  
いものを示すインデックス

/CRDFCM/NNFC(MPX), NFACE(20, MPX), NFTT(20), NF3(4, 1000)

NNFC(MPX) : それぞれの球が持つ最近接球の数  
 NFACE(20, MPX) : それぞれの球が持つ最近接球の球番号  
 NFTT(20) : 最近接球分布  
 NF3(4, 1000) : 4つの球が互いに接触する場合の球番号

最後にコモン変数が使用されているサブルーチン一覧をTable A.1に示す。

## (2) サブルーチン概要

## 1) ADJST

主要機能 : 重なった球の重なりを取り除く

Called : MCRDF

主要変数 : U, V, W ; 移動ベクトル

C ; 移動幅の絶対値

DR ; 重なり幅

サブルーチン詳細：球の重なりをランダムベクトル合成法により取り除いていく。ランダムベクトル合成法については、2章に詳しく述べた。なお、ADJSTの後半のプログラムは本バージョンでは使用していない。

## 2) BCC

主要機能 : BCC状態に球を充填する

Called : MCRDF

主要変数 : NAN ; 単位セル当たりに含まれる球の数 (=2)

NN ; 単位セルの積み上げ数 (=7)

NLA ; 単位セルの総数

A ; 単位セルの一辺の長さ

AX, AY, AZ ; 単位セル中心から第1象限に存在する球の中心からの方向ベクトル

サブルーチン詳細：単位セル中心から第1象限に存在する球の中心からの方向ベクトルを用いて、BCC状態に球を充填する。

## 3) BLKDT

主要機能 : 座標変換マトリックスの初期設定

Called : -

## 4) CKXYZ

主要機能 : 充填立方体をはみ出した球の処理

Called : ADJST, MCRDF, VIB

主要変数 : X, Y, Z ; 球の座標

サブルーチン詳細：ADJST等の球を移動させるルーチンで、球の中心座標が充填立方体の外にはみ出した場合、周期境界条件に従って、反対位置に球の座標を移す。

## 5) CRCP

主要機能 : はみ出し処理を用いない表面スタートのNNNDの計算

Called : MCRDF

主要変数 : CCN ; 角度分布用配列。0 ~ 1 (rad) を20群に分割

NDEB ; このヒストリ以前についてはデバッグ文を出力する。

NCO ; 体系内で衝突しなかった粒子の数。

NRMX ; 体系からのはみ出し処理をしないときの、体系内で最大にとれる分布の直径換算値。

NGMX ; 1 直径の分割群数。

NMAX ; ヒストリ数。

IP ; スタートする球の番号。

XX, YY, ZZ ; スタートする球の表面の座標。

U, V, W ; スタートする方向。

X2, Y2, Z2 ; 入射するかどうかをチェックする球（対象としている球）の座標。

X, Y, Z ; スタートする粒子がつくる飛行軌跡である直線上の球の中心から最短である座標。

T ; (XX, YY, ZZ) と (X, Y, Z) の距離。

D ; スタートする粒子がつくる飛行軌跡である直線と球の中心との最短距離

XP, YP, ZP ; スタートする粒子がつくる飛行軌跡である直線が初めて対象としている球と交わる座標。

U1, V1, W1 ; (XP, YP, ZP) から対象としている球の中心への方向ベクトル。

CSN ; (U, V, W) と (U1, V1, W1) がつくる角度。

サブルーチン詳細：球の表面からスタートした粒子が初めて他の球に入射する、距離に対する確率分布をモンテカルロ法により計算する。但し、体系をはみ出した時、周期境界条件によりスタートした場所に戻る場合があるため、計算できる分布の上限値が存在することになる。この方法では、高々数直径分の NND しか得ることができない。

#### 6) CRCP2

主要機能 : はみ出し処理を用いない中心スタートの NND の計算

Called : MCRDF

主要変数 : 基本的に CRCP 同じである。

サブルーチン詳細：球の中心からスタートした粒子が初めて他の球に入射する、球の中心からの距離に対する確率分布をモンテカルロ法により計算する。但し、体系をはみ出した時、周期境界条件によりスタートした場所に戻る場合があるため、計算できる分布の上限値が存在することになる。この方法でも CRCP 同様、高々数直径分の NND しか得ことができない。

#### 7) CRDF

主要機能 : R D F の計算

Called : MCRDF

主要変数 : FTL ; 2つの球が接触しているかどうかを判断する因子。直径×FTLより  
2つの球が近づいたとき両者は接触していると判断する。  
CRCPの主要変数も参照。

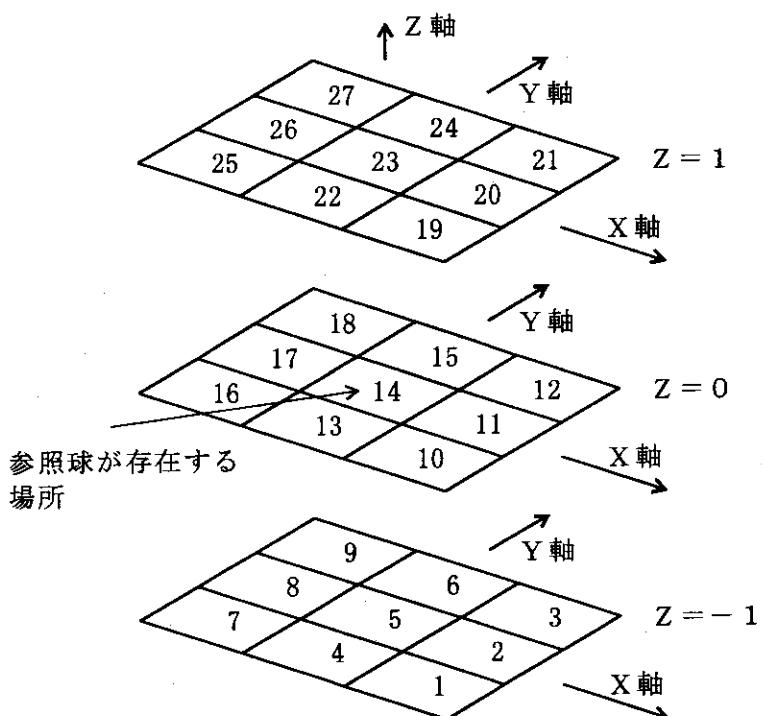
サブルーチン詳細：それぞれの粒子（参照粒子）からの他の粒子までの距離を全て計算し、  
参照粒子からの距離に対する他の粒子の存在確率分布を計算する。

## 8) DIST

主要機能 : 2粒子間の最短距離の計算

Called : ADJST, CRCP, CRDF, MCRDF, NND, NND2, NND2R, NND3, NND3R, NND3R2, NND3R3,  
NND3R4, OVLP, OVLP2, XSEC

主要変数 : II ; 2球の最短距離を計算するときに、参照球が存在する充填立方体に  
対し、相手の球が立方体に隣接するどの立方体に存在するかを示す  
インデックス。インデックスの意味は次の通り。



IS : IIを計算するためのインデックス。

DL : 座標軸毎の最短距離

P1 : 参照球座標

P2 : 相手球座標

サブルーチン詳細：球間の距離を計算する。但し、周期境界条件による充填を考慮して、参  
照球が存在する充填立方体を含む27の立方体に相手球があるとしたとき  
にどの位置に存在する場合が最も球間の距離が近いかを計算する。

9) DIST2

主要機能 : 球間の距離の計算

Called : NND3

主要変数 : -

サブルーチン詳細 : 与えられた座標に対する単純な球間の距離の計算。

10) DRATE

主要機能 : DDRのサイクルに対する変化率の計算

Called : MCRDF

主要変数 : DDROLD ; 過去10サイクルのDDR

サブルーチン詳細 : 10サイクルに1回DDRの変化率を与える。

11) FCC

主要機能 : FCC状態に球を充填する

Called : MCRDF

主要変数 : NAN ; 単位セル当たりに含まれる球の数 (=4)

NN ; 単位セルの積み上げ数 (=5)

NLA ; 単位セルの総数

A ; 単位セルの一辺の長さ

AX, AY, AZ ; 単位セル中心から第1象限に存在する球の中心からの方向ベクトル

サブルーチン詳細 : 単位セル中心から第1象限に存在する球の中心からの方向ベクトルを用いて、FCC状態に球を充填する。

12) MCRDF

主要機能 : メインルーチン

Called : -

主要変数 : 省略

サブルーチン詳細 : -

13) NND

主要機能 : はみ出し処理を用いた球表面スタートのNNDの計算

Called : MCRDF

主要変数 : CCN ; 角度分布用配列。0 ~ 1 (rad) を20群に分割

NDEB ; このヒストリ以前についてはデバッグ文を出力する。

NC ; DDDTを超える位置で初めて球に入射する粒子の数

DDDT ; 分布の最大長 (=30直径)

NRMX ; 体系内で最大にとれる分布の直径換算値。

NGMX ; 1直径の分割群数。

NMAX ; ヒストリ数。

ILV ; 充填立方体からはみ出した回数 + 1

IP ; スタートする球の番号。

XX, YY, ZZ ; スタートする球の表面の座標。

U, V, W ; スタートする方向。

DDDD ; 粒子のスタート位置から飛行方向充填立方体境界までの距離

XB, YB, ZB ; 粒子の飛行方向充填立方体境界交差座標

X2, Y2, Z2 ; 入射するかどうかをチェックする球（対象としている球）の  
中心座標。

X, Y, Z ; スタートする粒子がつくる飛行軌跡である直線上の球の中心か  
ら最短である座標。

T ; (XX, YY, ZZ) と (X, Y, Z) の距離。

D ; スタートする粒子がつくる飛行軌跡である直線と球の中心との最短  
距離

DDD ; 積算飛行距離

IDSS ; はみ出た粒子の再スタート位置から各球を近いものから並べた場  
合の球番号列

ISSS ; はみ出た粒子の再スタート位置から各球を近いものから並べた場  
合の各球のISSインデックス

NCO ; 各レベルでの輸送終了粒子数。

XP, YP, ZP ; スタートする粒子がつくる飛行軌跡である直線が初めて対象  
としている球と交わる座標。

U1, V1, W1 ; (XP, YP, ZP) から対象としている球の中心への方向ベクトル。

CSN ; (U, V, W) と (U1, V1, W1) がつくる角度。

サブルーチン詳細：球の表面からスタートした粒子が初めて他の球に入射する、距離に対する確率分布をモンテカルロ法により計算する。体系をはみ出した粒子は、充填立方体内の任意の場所から再スタートする。従って、分布は原理的に必要な距離離れた場所まで作成することができる。元バージョンでは、30直径分の分布を作成できるように設定されているが、実際には、充填率30に対して高々15直径で NND = 1 に収束する。

#### 14) NND2

主要機能 : はみ出し処理を用いた充填立方体内部（マトリックス）スタートの NND の計算

Called : MCRDF

主要変数 : CCN ; 角度分布用配列。0 ~ 1 (rad) を 20 群に分割

NDEB ; このヒストリ以前についてはデバッグ文を出力する。

NC ; DDDTを超える位置で初めて球に入射する粒子の数

DDDT ; 分布の最大長 (=30直径)

NRMX ; 体系内で最大にとれる分布の直径換算値。

NGMX ; 1 直径の分割群数。

NMAX ; ヒストリ数。

ILV ; 充填立方体からはみ出した回数 + 1

DDD ; 積算飛行距離

XX, YY, ZZ ; スタートする充填立方体内の座標。

IDSS ; はみ出た粒子の再スタート位置（初めのスタート位置も含む）から各球を近いものから並べた場合の球番号列

ISSS ; はみ出た粒子の再スタート位置（初めのスタート位置も含む）から各球を近いものから並べた場合の各球のISSインデックス

U, V, W ; スタートする方向。

DDDD ; 粒子のスタート位置から飛行方向充填立方体境界までの距離

XB, YB, ZB ; 粒子の飛行方向充填立方体境界交差座標

X2, Y2, Z2 ; 入射するかどうかをチェックする球（対象としている球）の中心座標。

X, Y, Z ; スタートする粒子がつくる飛行軌跡である直線上の球の中心から最短である座標。

T ; (XX, YY, ZZ) と (X, Y, Z) の距離。

D ; スタートする粒子がつくる飛行軌跡である直線と球の中心との最短距離

NCO ; 各レベルでの輸送終了粒子数。

XP, YP, ZP ; スタートする粒子がつくる飛行軌跡である直線が初めて対象としている球と交わる座標。

U1, V1, W1 ; (XP, YP, ZP) から対象としている球の中心への方向ベクトル。

CSN ; (U, V, W) と (U1, V1, W1) がつくる角度。

**ナーチル詳細** : 充填立方体の内部の球が占める領域以外の任意の位置からスタートした粒子が初めて他の球に入射する、距離に対する確率分布をモンテカルロ法により計算する。体系をはみ出した粒子は、充填立方体内の任意の場所から再スタートする。従って、分布は原理的に必要な距離離れた場所まで作成することができる。

## 15) NND2R

**主要機能** : 全断面積とはみ出し処理を用いた充填立方体内部（マトリックス）スタ

## 一トのNNDFの計算

Called : MCRDF

主要変数 : CCN ; 角度分布用配列。0 ~ 1 (rad)を20群に分割  
 NDEB ; このヒストリ以前についてはデバッグ文を出力する。  
 NC ; DDDTを超える位置で初めて球に入射する粒子の数  
 DDDT ; 分布の最大長 (=30直径)  
 NRMX ; 体系内で最大にとれる分布の直径換算値。  
 NGMX ; 1直径の分割群数。  
 NMAX ; ヒストリ数。  
 ILV ; 充填立方体からはみ出した回数 + 1  
 IP ; スタート位置を決定するための球(仮想球)の番号。  
 XX, YY, ZZ ; IP表面の座標(仮想スタート位置)。  
 U, V, W ; 仮想球からスタートする方向。  
 XS, YS, ZS ; 実際のスタート位置  
 DDS ; DDDDに対して考慮するマイナスオフセット距離  
 (XX, YY, ZZ) と (XS, YS, ZS) の距離  
 DDDD ; 粒子のスタート位置から飛行方向充填立方体境界までの距離  
 XB, YB, ZB ; 粒子の飛行方向充填立方体境界交差座標  
 X2, Y2, Z2 ; 入射するかどうかをチェックする球(対象としている球)の  
 中心座標。  
 X, Y, Z ; スタートする粒子がつくる飛行軌跡である直線上の球の中心か  
 ら最短である座標。  
 T ; (XX, YY, ZZ) と (X, Y, Z) の距離。  
 D ; スタートする粒子がつくる飛行軌跡である直線と球の中心との最短  
 距離  
 DDD ; 積算飛行距離  
 IDSS ; はみ出た粒子の再スタート位置から各球を近いものから並べた場  
 合の球番号列  
 ISSS ; はみ出た粒子の再スタート位置から各球を近いものから並べた場  
 合の各球のISSインデックス  
 NCO ; 各レベルでの輸送終了粒子数。  
 XP, YP, ZP ; スタートする粒子がつくる飛行軌跡である直線が初めて対象  
 としている球と交わる座標。  
 U1, V1, W1 ; (XP, YP, ZP)から対象としている球の中心への方向ベクトル。  
 CSN ; (U, V, W) と (U1, V1, W1) がつくる角度。

サブルーチン詳細：サブルーチンNND2よりさらに実際の燃料コンパクトに近づけた模擬を実施するため、球の表面からスタートした粒子がマトリックスと1回目の散乱を起こした場所をスタート場所とした。この粒子が初めて他の球に入射する、距離に対する確率分布をモンテカルロ法により計算する。体系をはみ出した粒子は、充填立方体内の任意の場所から再スタートする。従って、分布は原理的に必要な距離離れた場所まで作成することができる。

## 16) NND3

主要機能 : はみ出し処理を用いた充填立方体表面スタートのNNDの計算（その1）

Called : MCRDF

主要変数 : CCN ; 角度分布用配列。0～1 (rad) を20群に分割  
 NDEB ; このヒストリ以前についてはデバッグ文を出力する。  
 NC ; DDDTを超える位置で初めて球に入射する粒子の数  
 DDDT ; 分布の最大長 (=30直径)  
 NRMX ; 体系内で最大にとれる分布の直径換算値。  
 NGMX ; 1 直径の分割群数。  
 NMAX ; ヒストリ数。  
 ILV ; 充填立方体からはみ出した回数 + 1  
 XX, YY, ZZ ; スタートする充填立方体表面の座標。  
 U, V, W ; スタートする方向。  
 IDSS ; はみ出た粒子の再スタート位置（初めのスタート位置を含む）から各球を近いものから並べた場合の球番号列  
 DDDD ; 粒子のスタート位置から飛行方向充填立方体境界までの距離  
 X2, Y2, Z2 ; 入射するかどうかをチェックする球（対象としている球）の中心座標。  
 X, Y, Z ; スタートする粒子がつくる飛行軌跡である直線上の球の中心から最短である座標。  
 T ; (XX, YY, ZZ) と (X, Y, Z) の距離。  
 D ; スタートする粒子がつくる飛行軌跡である直線と球の中心との最短距離  
 DDD ; 積算飛行距離  
 ISSS ; はみ出た粒子の再スタート位置から各球を近いものから並べた場合の各球のISSインデックス  
 XB, YB, ZB ; 粒子の飛行方向充填立方体境界交差座標  
 NCO ; 各レベルでの輸送終了粒子数。

XP, YP, ZP ; スタートする粒子がつくる飛行軌跡である直線が初めて対象としている球と交わる座標。

U1, V1, W1 ; (XP, YP, ZP) から対象としている球の中心への方向ベクトル。

CSN ; (U, V, W) と (U1, V1, W1) がつくる角度。

**#フルーチン詳細** : 充填立方体表面から法線ベクトル方向にスタートした粒子が初めて他の球に入射する、距離に対する確率分布をモンテカルロ法により計算する。体系をはみ出した粒子は、充填立方体内の任意の場所から再スタートする。従って、分布は原理的に必要な距離離れた場所まで作成することができる。

#### 17) NND3R

**主要機能** : はみ出し処理を用いた充填立方体表面スタートの NND の計算 (その 2)

**Called** : MCRDF

**主要変数** : CCN ; 角度分布用配列。0 ~ 1 (rad) を 20 群に分割  
 NDEB ; このヒストリ以前についてデバッグ文を出力する。  
 NC ; DDDT を超える位置で初めて球に入射する粒子の数  
 DDDT ; 分布の最大長 (=30 直径)  
 NRNX ; 体系内で最大にとれる分布の直径換算値。  
 NGMX ; 1 直径の分割群数。  
 NMAX ; ヒストリ数。  
 ILV ; 充填立方体からはみ出した回数 + 1  
 DDD ; 積算飛行距離  
 DDDD ; 粒子のスタート位置から飛行方向充填立方体境界までの距離  
 XX, YY, ZZ ; スタートする充填立方体内の球が占める領域以外のマトリックス内の座標。  
 IDSS ; はみ出た粒子の再スタート位置 (初めのスタート位置を含む) から各球を近いものから並べた場合の球番号列  
 ISSS ; はみ出た粒子の再スタート位置から各球を近いものから並べた場合の各球のISSインデックス  
 U, V, W ; スタートする方向。  
 XB, YB, ZB ; 粒子の飛行方向充填立方体境界交差座標  
 X2, Y2, Z2 ; 入射するかどうかをチェックする球 (対象としている球) の中心座標。  
 X, Y, Z ; スタートする粒子がつくる飛行軌跡である直線上の球の中心から最短である座標。  
 T ; (XX, YY, ZZ) と (X, Y, Z) の距離。

D ; スタートする粒子がつくる飛行軌跡である直線と球の中心との最短距離

NCO ; 各レベルでの輸送終了粒子数。

XP, YP, ZP ; スタートする粒子がつくる飛行軌跡である直線が初めて対象としている球と交わる座標。

U1, V1, W1 ; (XP, YP, ZP) から対象としている球の中心への方向ベクトル。

CSN ; (U, V, W) と (U1, V1, W1) がつくる角度。

**サブルーチン詳細**：スタート位置を充填立方体内の任意の位置からと変更した以外 NND3 と同じである。具体的には、ILV = 1 では球内からのスタートも許すこととし、ILV > 1 では充填立方体内の球が占める領域外の任意の場所からのスタートを許すこととした。また、ILV = 1 では、スタート直後の壁と干渉している球への入射を無視することとした（これは、スタートベクトルに垂直な面と球の中心の距離が球の半径より小さいとき無視するという意味である）。

#### 18) NND3R2

主要機能 : はみ出し処理を用いた充填立方体表面スタートの NND の計算 (その 3)

Called : MCRDF

主要変数 : NND3R と同じ

**サブルーチン詳細**：次の点を除き基本的に NND3R と同じである。

(1) ILV = 1 においても球内からのスタートを禁止した。

(2) ILV = 1 すなわちスタート直後に、壁と干渉している球への入射は無視する。

#### 19) NND3R3

主要機能 : はみ出し処理を用いた充填立方体表面スタートの NND の計算 (その 4)

Called : MCRDF

主要変数 : NND3R と同じ

**サブルーチン詳細**：次の点を除き基本的に NND3R と同じである。

(1) ILV = 1 では球内からのスタートも許すこととし、ILV > 1 では充填立方体内の球が占める領域外の任意の場所からのスタートを許す。

(2) ILV = 1 すなわちスタート直後に、壁と干渉している球への入射は無視しない。

#### 20) NND3R4

主要機能 : はみ出し処理を用いた充填立方体表面スタートの NND の計算 (その 5)

Called : MCRDF

主要変数 : NND2 と同じ

サブルーチン詳細：ファイル出力に充填率が加えられた点を除き基本的にNND2と同じである。

21) OVLP

主要機能 : 重なり球を見つける

Called : MCRDF

主要変数 : SDR ; 重なり幅

サブルーチン詳細：重なっている球を見つけ、最大重なり幅、最小重なり幅、平均重なり幅、  
1個当たりの平均重なり球数等を求める。

22) OVLP2

主要機能 : 重なり球を見つける

Called : ADJST

主要変数 : RMI2 ; 最小重なり幅

RMA2 ; 最大重なり幅

DD2 ; 平均重なり幅

サブルーチン詳細：ある球に対して重なっている球を見つけ、最大重なり幅、最小重なり幅、  
平均重なり幅を求める。

23) QSORT

主要機能 : ソーティングルーチン

Called : SORT

主要変数 : 省略

サブルーチン詳細：通常のQuick sortである。但し、最も一番目に並ぶものは取り除くよう  
変更した。

24) QSORT2

主要機能 : ソーティングルーチン

Called : SORT2

主要変数 : 省略

サブルーチン詳細：通常のQuick sortである。

25) RANG

主要機能 : 乱数発生ルーチン

Called : ADJST, CRCP, CRCP2, MCRDF, NND, NND2, NND2R, NND3, NND3R, NND3R2, NND3R3,  
NND3R4, VIB

主要変数 : -

サブルーチン詳細：システム乱数発生ルーチンをコールしている。乱数幅は0～1である。

26) SORT

主要機能 : ソーティングルーチン

Called : ADJST, CRCP, MCRDF

主要変数 : 省略

サブルーチン詳細：パラメータ文ISORT=1の時、QSORTをコール、それ以外の時は簡単なアルゴリズムによるソートを実施。やはり、1番目に並ぶものは取り除く。

## 27) SORT2

主要機能 : ソーティングルーチン

Called : NND, NND2, NND2R, NND3, NND3R, NND3R2, NND3R3, NND3R4

主要変数 : 省略

サブルーチン詳細：パラメータ文ISORT=1の時、QSORT2をコール、それ以外の時は簡単なアルゴリズムによるソートを実施。

## 28) UCL

主要機能 : UCL状態に球を充填する

Called : MCRDF

主要変数 : NAN ; 単位セル当たりに含まれる球の数 (=1)

NN ; 単位セルの積み上げ数 (=9)

NLA ; 単位セルの総数

A ; 単位セルの一辺の長さ

AX, AY, AZ ; 単位セル中心から第1象限に存在する球の中心からの方向ベクトル

サブルーチン詳細：単位セル中心から第1象限に存在する球の中心からの方向ベクトルを用いて、UCL状態に球を充填する。

## 29) VIB

主要機能 : 球をランダムに振動させる

Called : MCRDF

主要変数 : DRAR ; 振動させる最大量 (=半径/10)

サブルーチン詳細：座標毎に半径の1/10を最大とした幅で移動させる。充填がロック状態になったとき、大変有効であることが知られている。

## 30) XSEC

主要機能 : 断面図の出力と2d-RDFの計算

Called : MCRDF

主要変数 : NRMX ; 体系内で最大にとれる分布の直径換算値。

NGMX ; 1直径の分割群数。

IXSC ; 2d-RDFの絶対値。

PCF ; 2d-RDFの分布データ。

IZA ; 2d-RDFを計算するためにつくる断面の数。

NNTT ; 断面上に現れる球の総数。

ZA ; 断面の Z 座標。

NN ; 各断面に含まれる球の総数。

NNI ; 各断面に含まれる球の番号。

Z1 ; 断面球の中心の Z 座標。

サブルーチン詳細 : 充填立方体を直径厚さ毎にスライスし各断面に見える球の断面図から  
2d-RDF を計算する。同時に、その内のある断面の断面図情報を出力  
する。

Table A.1 Subroutines using parameter and/or common statements

ノード名	分類	パラメータ文			コモン文							
		MPX	PIE	NRY	NAVE	MAINCM	OVLCM	TRNCM	INPDT	CRC	CRDFCM	RANCOM
ADJUST	#フ"ル-チソ	○	○									
BCC	"	○	○									
BLKDT	フ"ロウテ'-'ト											
CKXYZ	#フ"ル-チソ											
CRCP	"											
CRCP2	"											
CRDF	"											
DIST	フ"リソフ"ソ											
DIST2	"											
DRATE	#フ"ル-チソ											
FCC	"											
MCRDF	メイソル-チソ											
NND	#フ"ル-チソ											
NND2	"											
NND2R	"											
NND3	"											
NND3R	"											
NND3R2	"											
NND3R3	"											
NND3R4	"											
OVLP	"											
OVLP2	"											
QSORT	"											
QSORT2	フ"リソフ"ソ											
RANG	#フ"ル-チソ											
SORT	"											
SORT2	"											
UCL	"											
VIB	"											
XSEC	"											

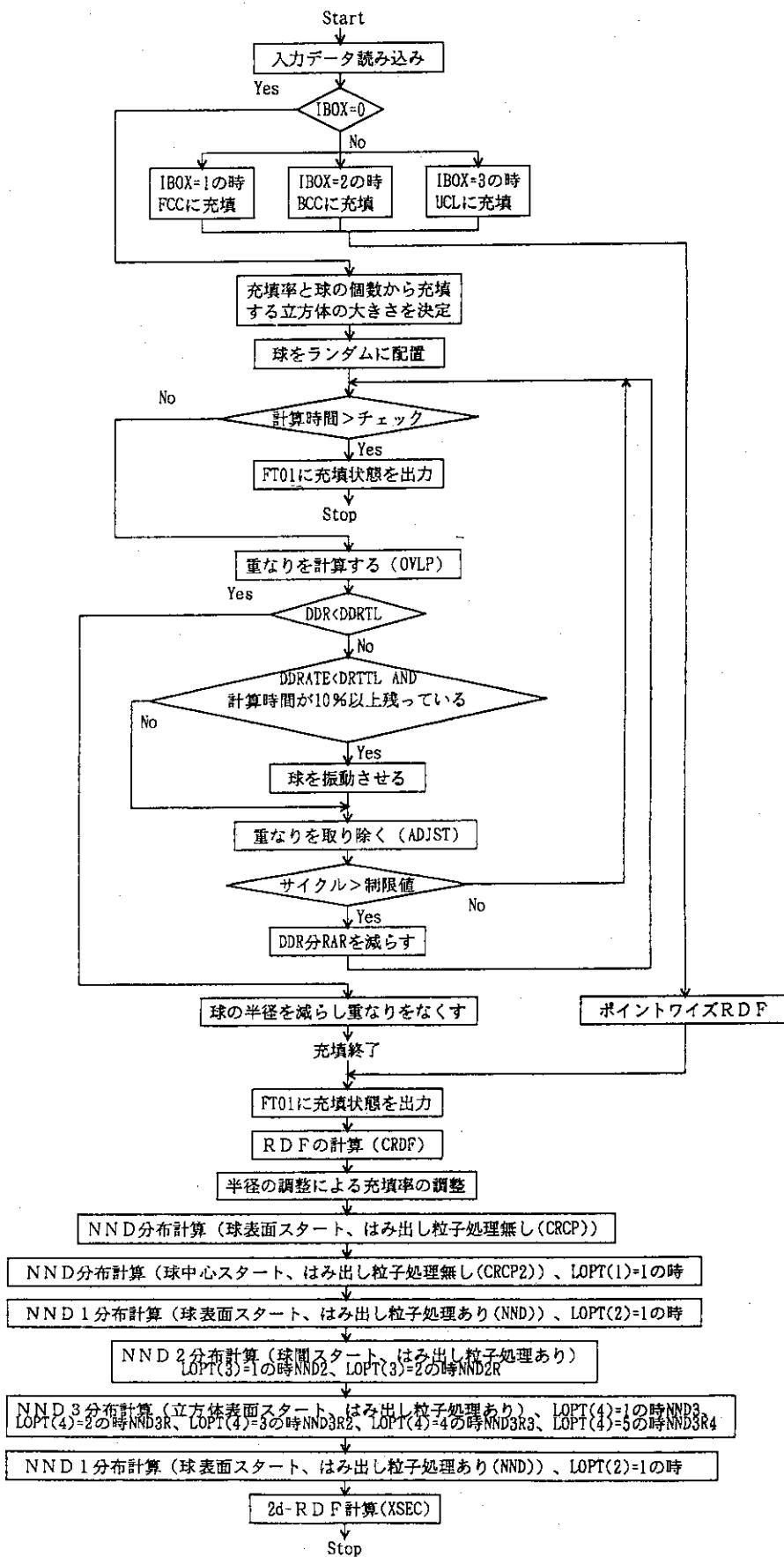


Fig. A.1 Calculation flow of MCRDF