2018年春の年会

計算科学技術部会セッション

計算科学技術分野におけるモンテカルロ（MC）法の活用　～現状と将来展望～

Applications of Monte Carlo method in computational science and engineering field
-challenge and foresight-

（1）炉物理分野におけるモンテカルロ計算の現状と将来展望

(1) Current Status and Future Prospects of Monte Carlo Calculation Methods in Reactor Physics

*長家 康展 [1]
[1] 原子力機構

1. 緒言

乱数を用いた統計的数値計算手法がモンテカルロ法と呼ばれるようになってから 70 年が経つ。黎明期におけるモンテカルロ法の目的は、中性子の輸送や増倍をシミュレーションすることであった。そういう意味において、炉物理分野でモンテカルロ法が開発され、長い間モンテカルロ法に関する研究が行われてきたと言えるだろう。本報では、炉物理分野におけるモンテカルロ計算手法とその応用に関する現状をレビューし、最後に今後の見通しについて述べる。

2. モンテカルロ計算の手法研究の現状

炉物理分野におけるモンテカルロ計算手法に関して近年精力的に研究されてきたトピックスを紹介する。

(1) 随伴中性子束重みタリー : 実効遅発中性子割合(β_{eff})と中性子生成時間(Λ)は動特性パラメータと呼ばれ、炉物理分野では実効増倍率(k_{eff})と並んで重要な核特性パラメータである。実効増倍率は昔からモンテカルロ法で計算可能であったが、動特性パラメータは随伴中性子束で重み付けられているため計算が困難であった。最近では、随伴中性子束を Iterated Fission Probability と解釈することにより、モンテカルロ法による動特性パラメータの計算が可能である[1,2]。

(2) 感度解析 : 炉物理分野の感度解析は、核反応断面積が変化したときに実効増倍率などの核特性パラメータがどれだけ変化するかを計算する。実効増倍率についての感度解析は、随伴中性子束重みの反応率を核種とエネルギー群別にタリーを取ればよいので、前に述べた随伴中性子束重みタリーによって行うことができる[3,4]。それ以外の核特性パラメータについての感度解析は一般化摂動論に基づいた計算が必要であるが、最近モンテカルロ法でも計算が可能となりつつある[5,6]。

(3) 不確かさ評価 : 感度解析によって核特性パラメータに対する感度係数が計算できれば、断面積共分散データとの演算によって不確かさを評価することができる[7]。多群形式の断面積共分散データであれば、エネルギー群別に感度係数を計算し、行列演算するだけでよいが、最近、連続エネルギー形式断面積共分散データを用いて直接不確かさを評価する方法が提案されている[8,9]。

(4) 摂動計算 : 炉物理分野の重要な核特性パラメータとして反応度価値がある。反応度価値は実効増倍率の逆数の差として定義されるため、その差が小さいと統計誤差に隠れて計算が困難になる。微小反応度価値を計算するための手法として、古くから相関サンプリング法や微分演算子サンプリング法が知られているが、最近では核分裂源分布の変化による寄与を考慮できるようになっている[10,11]。また、摂動理論に基づいた微小反応度価値を随伴中性子束重みタリーで計算する手法が提案されており、ドップラー反応度価値[12]や体系変化の反応度価値を計算する手法が開発されている[13]。

(5) オンザフライ・ドップラー拡がり計算(On-the-fly Doppler Broadening) : 実機では炉心内の温度分布を考

*Yasunobu Nagaya[1]
[1]Japan Atomic Energy Agency

慮しなければならない。核反応断面積が温度に依存するため、正確に温度分布を考慮しようとすると多くの温度点における核反応断面積データを用意する必要がある。これは莫大なメモリを必要とすることになるため、中性子のランダム・ウォーク中に任意の温度の核反応断面積データを高速に生成する手法が開発されている[14-16]。この手法は分離共鳴領域におけるドップラー拡がりのみを取り扱うものが多いが、非分離共鳴領域の断面積データを取り扱える手法も提案されている[17]。熱中性子散乱データについては、まだその手法は提案されていないが、確率的に特定の温度を選択する擬似物質法[18]で代用することが可能である。

(6) 分布タリー : 炉物理分野では出力分布や中性子束分布を計算する必要があるが、分布計算はモンテカルロ計算手法の弱点の一つである。古くからある分布計算手法としてはメッシュタリーがある[19]。これは領域をメッシュ状のビンに区切ってタリーに取るという単純なものである。最近では連続的な分布を計算する手法として、関数展開タリー(Functional Expansion Tally)[20,21]やカーネル密度エスティメータ(Kernel Density Estimator)[22,23]が提案されている。

(7) 乱雑化モデル : 一般的な体系には、物質組成が連続的に変化するケースや、物質がランダムに配置されるケースが存在する。炉物理分野で取り扱う乱雑化モデルとして知られているケースは、高温ガス炉で用いられる球状の被覆燃料粒子がランダムに燃料媒質中に配置されるケースであり、この非均質性を正確に取り扱う必要がある。このような体系を取り扱う手法として、古くからデルタ・トラッキング法(Woodcock トラッキング法[24]) が知られているが、MVP コードの STGM モデル[25]や Stochastic Geometry[26]なども開発されている。最近では、燃料デブリの体系を取り扱うための新しい乱雑化モデル[27,28]も開発されつつある。

(8) 正確な統計誤差評価 : 炉物理分野で行うモンテカルロ計算は、ほとんどが固有値計算である。べき乗法（世代間の反復）によって最大固有値（実効増倍率）と固有ベクトル（核分裂源分布）を求めるが、核分裂源点を次の世代のスタート点とするため、世代間に相関が生じる。それゆえ、実効増倍率や中性子束分布の統計誤差を正確に評価するには相関を考慮しなければならない。相関を評価する手法はたくさん提案されているが、時系列解析手法は有望な手法の一つである[29,30]。

(9) 収束判定 : 上で述べたべき乗反復を用いると収束判定をしなければならない。しかも、実効増倍率と核分裂源分布は収束回数が異なることが明らかとなっており[31]、正しく収束判定を行わなければバイアスのかかった結果が得られることになる。従来、ユーザの工学的判断によって収束判定を行ってきたが、最近ではシャノン・エントロピーを用いた収束判定[32]を行うのが主流となりつつある。

3. モンテカルロ計算の応用についての現状

炉物理分野におけるモンテカルロ計算の応用は炉心解析と炉心設計である。これらへの応用は計算機の発展と密接に関連している。現在の計算機の性能はモンテカルロ法の黎明期に比べれば格段に進化しているが、最新のスーパーコンピュータの性能でも炉心設計に利用するにはまだ不十分である。Smith は 2003 年に次のような 1 つの見通しを示した[33]。「軽水炉の設計では 60 億領域のタリーによる分布計算が必要で、集合体毎にピーク燃料棒出力を 1%以内の統計誤差で計算しなければならない。ムーアの法則に従って計算機の性能が向上したとすると、このようなモンテカルロ計算が 1 つの CPU で 1 時間以内に終わるようになるのは 2030 年である。」この課題は、炉心設計に対するモンテカルロ計算手法を応用する上での「グランド・チャレンジ」と呼ばれる。この課題を克服するために最新のハードウェアに適したアルゴリズムの開発が行われている。マルチコア CPU/共有メモリに適したハイブリッド(MPI/OpenMP)並列計算アルゴリズム[34-36]、GPU に適したベクトル化アルゴリズム[37,38]、Many Integrated Core アーキテクチャーをベースとした Xeon Phi に適したアルゴリズム[39,40]等の研究が精力的に行われている。また、この課題に挑戦するためのベンチマーク問題[41]も提案されている。最近では BEAVRS ベンチマーク[42]も提案され、実機 PWR 炉心に対する非常に詳細なモデル化がなされている。

上記の課題はある炉心配置に対する定常状態のモンテカルロ計算 1 回を対象としたものであり、実際の炉心設計においては様々な条件に対する膨大な数のモンテカルロ計算を行わなければならない。さらに、原子炉の設計においては、燃料組成変化を計算するための燃焼計算、反応度フィードバックを計算するための核熱結合計算、事故を想定した過渡計算が必須であり、1 つのケースで何度もモンテカルロ計算を行わなければならない。これらの計算はマルチフィジクス・シミュレーションであり、炉心計算としてモンテカルロコード、炉心以外の物理シミュレーションコードとして決定論的コードを用い、通常これらコードを結合、反復させることによって計算を行う。モンテカルロ燃焼計算では、ORIGEN 一点炉燃焼コードと組み合わせるもの[43,44]が多かったが、燃焼計算手法に CRAM 法（Chebyshev Rational Approximation Method）[45]が用いられるようになってきており、多くの核種を扱っても高速に計算できるようになっている。モンテカルロ核熱結合計算は、現在最も注目されているマルチフィジクス・シミュレーションであり、数多くの論文が発表されている[46-49]。モンテカルロ過渡計算は簡単なベンチマーク問題に対する検証の段階である[50]が、2×2 集合体に対する計算例も報告されている[51]。

4. まとめと今後の見通し

モンテカルロ計算手法に関しては、これまで計算できなかった核特性パラメータが連続エネルギーモンテカルロ法で計算できるようになり、モンテカルロ計算手法の弱点であった分布計算についても連続的な分布として計算できるようになりつつある。今後は、これらの計算精度を高めるためにより高速で効率的な計算アルゴリズムの開発が求められるだろう。

モンテカルロ計算の応用に関しては、炉心計算用モンテカルロコードと他のコードを結合したマルチフィジクス・シミュレーションがますます詳細なモデルで行われるようになり、その上で感度解析・不確かさ評価までも同時に行われる[52]ようになると思われる。それと同時に、最新のハードウェアに対応したり、他のコードと結合したりするため、新しいモンテカルロコードが開発されるようになるだろう。既に LANL では MCATK コード[53]、ORNL では Shift コード[54]、その他の新しいコード[55]が開発されている。従来のプロダクション・モンテカルロコードは多機能、行数が膨大、レガシー・アルゴリズムであるため、最新のハードウェアに対応したり、他のコードと結合したりするために膨大な労力を必要とする。そのため、今後はモンテカルロコードをモジュール、ソルバー、ツールキットといった形で開発することが多くなると思われる。

参考文献

[1] Y. Nauchi, T. Kameyama, *J. Nucl. Sci. Technol*., **47**, 977-990 (2010). [2] B.C. Kiedrowski, et al., *Nucl. Sci. Eng*., **168**, 226-241 (2011). [3] B.C. Kiedrowski, F.B. Brown, *Nucl. Sci. Eng*., **174**, 227-244 (2013). [4] H.J. Shim, C.H. Kim, *J. Nucl. Sci. Technol*., **48**, 1453-1461 (2011). [5] C.M. Perfetti, B.T. Rearden, *Nucl. Sci. Eng*., **182**, 354-368 (2016). [6] M. Aufiero, et al., *Ann. Nucl. Energy*, **85**, 245-258 (2015). [7] B.T. Rearden, *Nucl.Technol*., **174**, 236-288 (2011). [8] D.H. Lee, et al., *Nucl. Sci. Eng*., **187**, 154-165 (2017).

[9] M. Aufiero, et al., *Ann. Nucl. Energy*, **96**, 295-306 (2016). [10] Y. Nagaya, T. Mori, *J. Nucl. Sci. Technol*., **42**, 428–441 (2005).

[11] Y. Nagaya, T. Mori, *Prog. Nucl. Sci. Technol*., **2**, 842-850 (2011). [12] H.J. Shim, C.H. Kim, *Nucl. Sci. Eng*., **177**, 184–192 (2014). [13] T.P. Burke, B.C. Kiedrowski, *Nucl. Sci. Eng*., **189**, 199-223 (2018). [14] G. Yesilyurt, et al., *Nucl. Sci. Eng*., **171**, 239-257 (2012). [15] T. Viitanen, J. Leppänen, *Nucl. Sci. Eng*., **171**, 165-173 (2012). [16] C. Dean, et al., *J. Korean Phys. Soc*., **59**, 1162-1165 (2011). [17] J.A. Walsh, et al., *Proc. M&C+SNA+MC 2015* (2015). [18] J. L. Conlin et al., *Tran. Am. Nucl. Soc*., **92**, 225-227 (2005).

[19] A.L. Swift, et al., *Tran. Am. Nucl. Soc*., **111**, 1141-1144 (2014). [20] D.P. Griesheimer, Ph.D. thesis, University of Michigan (2005). [21] B. Wendt, et al., *Tran. Am. Nucl. Soc*., **116**, 552-555 (2017). [22] K. Banerjee, W.R. Martin, *Nucl. Sci. Eng*., **170**, 234-250 (2012). [23] T.P. Burke, et al., *Nucl. Sci. Eng*., **188**, 109-139 (2017). [24] E.R. Woodcock, et al., ANL-7050 (1965).

[25] I. Murata, et al., *J. Nucl. Sci. Technol*., **34**, 734-744 (1997). [26] F.B. Brown, et al., *Proc. MC2005* (2005).

[27] T. Ueki, *J. Nucl. Sci. Technol*., **54**, 267-279 (2017). [28] C. Larmier, et al., *Ann. Nucl. Energy*, **111**, 391-406 (2018).

[29] T. Ueki, et al., *Nucl. Sci. Eng*., **148**, 374-390 (2004). [30] T. Ueki, *J. Nucl. Sci. Technol*., **47**, 739-753 (2010).

[31] T. Ueki, et al., *Nucl. Sci. Eng*., **145**, 279-290 (2003). [32] T. Ueki, F.B. Brown, *Trans. Am. Nucl. Soc*., **87**, 156 (2002).

[33] K. Smith, "Reactor Core Methods," Invited lecture at the M&C 2003, April 6-10, 2003, Gatlinburg, TN, USA (2003).

[34] F.B Brown, *Proc. SNA-2003* (2003). [35] D.P. Griesheimer, B.R. Nease, et al., *Proc. M&C+SNA+MC 2015* (2015).

[36] Y. Nagaya, M. Adachi, *Proc. M&C 2017* (2017). [37] A. Ding, T. Liu, et al., *Proc. M&C 2011* (2011).

[38] T. Liu, N. Wolfe, et al., *Proc. M&C+SNA+MC 2015* (2015). [39] P.S. Brantley, et al., Proc M&C 2017 (2017).

[40] T. Liu, et al., *EPJ Web of Conf*., **153**, 06022 (2017). [41] J.E. Hoogenboom, W.R. Martin, *Proc. M&C 2009*, 854-869 (2009).

[42] N. Horelik, B. Herman, et al., *Proc. M&C 2013* (2013). [43] 鹿島, 他, JAEA-Data/Code 2014-028 (2014).

[44] H.R Trellue, D.I. Poston, LA-UR-99-4999 (1999). [45] M. Pusa, *Nucl. Sci. Eng*., **169**, 155–167 (2011).

[46] A. Bennett, M. Avramova, et al., *Proc. M&C 2017* (2017). [47] A.S. Bikeev, M.A. Kalugin, et al., *Proc. M&C 2017* (2017).

[48] M. Lemairea, H. Leea, et al., *Proc. M&C 2017* (2017). [49] J. Guo, S. Liu, et al., *Proc. M&C 2017* (2017).

[50] Y. Jo, B. Cho, *Proc. M&C+SNA+MC 2015* (2015). [51] N. Shaukat, et al., *Nucl. Eng. Technol*., **49** 920-927 (2017).

[52] S.C. van der Marck, et al., *Proc. SNA+MC 2013*, 02410 (2013). [53] Terry Adams, et al., *Ann. Nucl. Energy*, **82**, 41-47 (2015).

[54] T. M. Pandya, S. R. Johnson, et al., *Proc. M&C+SNA+MC 2015* (2015). [55] X.G. Xu, et al., *Ann. Nucl. Energy*, **82**, 2-9 (2015).