JAERI-Data/Code
95-019

二重有限要素法による3次元中性子輸送コードDFEMの開発

1996年1月

藤村統一郎

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。
入手の問合わせは，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, Tokai-mura, 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　㈱原子力資料サービス

JAERI－Data／Code 95－019

二重有限要素法による3次元中性子輸送コードDFEMの開発

日本原子力研究所東海研究所原子炉工学部
藤村統一郎

（1995年12月13日受理）

大型高速炉を中心とした複雑形状の炉心を解析するため，二重有限要素法による3次元中性子輸送コードDFEMを開発した。

基本となる数値解法としては，空間変数と角度変数に有限要素法を適用する二重有限要素法を用いている。原子炉炉心体系を3角柱と4角柱に分割してその中の中性子束の空間分布を1次の基底関数で近似するが，角度変数に対しては様々な基底関数について比較し，特徴を明らかにした。また，計算の高精度化と高速化のため，有限要素法に特有の反射境界打ち切り誤差について一般的な修正法を導出するとともに，反復解法に適応的加速法や中性子源外挿法を適用した。

本コードの利用の便のためプログラム構造について概説し，使用法とサンプル入力例を示す。また，検証計算例として実在規模の原子炉やNEAベンチマーク問題を採り上げ，体系固有値や中性子束分布等について他のコードによる計算結果と比較し，検討を行った。

東海研究所：〒319-11　茨城県那珂郡東海村白方白根2-4

JAERI－Data／Code 95－019

Development of a Three-dimensional Neutron Transport Code DFEM Based on the Double Finite Element Method

Toichiro FUJIMURA

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

(Received December 13, 1995)

A three-dimensional neutron transport code DFEM has been developed by the double finite element method to analyze reactor cores with complex geometry as large fast reactors.

Solution algorithm is based on the double finite element method in which the space and angle finite elements are employed. A reactor core system can be divided into some triangular and/or quadrangular prism elements, and the spatial distribution of neutron flux in each element is approximated with linear basis functions. As for the angular variables, various basis functions are applied, and their characteristics were clarified by comparison. In order to enhance the accuracy, a general method is derived to remedy the truncation errors at reflective boundaries, which are inherent in the conventional FEM. An adaptive acceleration method and the source extrapolation method were applied to accelerate the convergence of the iterations.

The code structure is outlined and explanations are given on how to prepare input data. A sample input list is shown for reference. The eigenvalue and flux distribution for real scale fast reactors and the NEA benchmark problems were presented and discussed in comparison with the results of other transport codes.

Keywords: DFEM, Double Finite Element Method, Neutron Transport, Complex Geometry, Prism Elements, Basis Functions, Accuracy, Truncation Error Remedy, Acceleration, Iterative Method, Eigenvalue, Flux Distribution, Benchmark Problem

目　　次

1. はじめに …… 1
2. 二重有限要素法による３次元輸送方程式の定式化 …… 3
2.1 変分法の適用 …… 4
2.2 空間の基底関数と境界打切り誤差の解消法 …… 6
2.3 様々な角度の基底関数とその特徴 …… 8
2.4 反復解法と高速化 …… 11
3. DFEMコードの概要とデータ入力形式 …… 15
3.1 DFEMコードの概要 …… 15
3.2 入力データの取扱い法 …… 17
3.3 入力形式の詳細 …… 18
4. 検証計算と検討 …… 25
5. あとがき …… 44
謝　辞 …… 44
参考文献 …… 45
付録A　偶然パリティ方程式とその係数 …… 47
付録B　空間の基底関数の具体的表現 …… 50
付録C　３次スプラインによる角度の基底関数の具体的表現 …… 51
付録D　選点法における係数行列 …… 52
付録E　サンプル入力例 …… 53

Contents

1. Introduction ····· 1
2. Formulation of Three-dimensional Transport Equation by the Double Finite Element Method ····· 3
2.1 Application of Variational Method ····· 4
2.2 Spatial Basis Functions and the Remedy for Truncation Error ····· 6
2.3 Various Angular Basis Functions and Their Characteristics ····· 8
2.4 Iterative Solution Method and the Acceleration ····· 11
3. Outline and Input Form of the DFEM Code ····· 15
3.1 Outline of the DFEM Code ····· 15
3.2 Input Data Treatment ····· 17
3.3 Details of Input Form ····· 18
4. Validation and Discussions ····· 25
5. Concluding Remarks ····· 44
Acknowledgements ····· 44
References ····· 45
Appendix A Even Parity Equation and the Coefficients ····· 47
Appendix B Concrete Expressions of Spatial Basis Functions ····· 50
Appendix C Concrete Expressions of Angular Basis Functions with Cubic Spline ····· 51
Appendix D Coefficient Matrices in Collocation Method ····· 52
Appendix E Sample Input ····· 53

1. はじめに

実用をめざした高速炉の設計精度の向上と安全性の確保を炉物理的観点から考えると、３次元的な複雑さを持つ炉内中性子の挙動を正しく把握する必要がある。このような場合、３次元拡散計算か２次元にモデル化した輸送計算が行われてきたが、近年の著しい計算機の発達と計算技法の進歩は３次元輸送計算を可能にし、様々な解法によるコードが開発されている。 これら３次元コードの遮蔽計算への応用は古いが、以下、本稿の主題である炉心計算を扱うコード[1)-8)] を中心に、その数値解法の特徴について述べる。

有限差分 S_n 法[3)-5),9)] は輸送方程式の伝統的な解法であり、空間変数に関してはダイアモンド差分法を用い、角度変数に関しては discrete ordinate（離散方向）法を用いている。この方法の長所は、計算時間が短くかつ決定論的な解を与えることであるが、ray effect（光線効果）による中性子分布の歪みを生じ易く[10)]、直方体や円柱などの規則正しい形状でないと長所が活かせないという弱点を持っている。このため、多くが（x,y,z）形状に限定されている。一方、現実的な不規則形状の殆どを扱うことのできるモンテカルロ法[1),2)] は、中性子の挙動を忠実に追うことができる反面、要求精度内に統計誤差を減少させるためには計算時間が長くなりがちである。特に、中性子束分布のような分布量を求めるとき顕著になる。

有限要素法（FEM）は元来不規則形状の構造物を対象とする機械工学の分野で発達したものであり[11)]、核計算への応用も古い[12)]。しかし、３次元輸送問題における定式化[7),13)-16)] が困難でその発展が遅れていた。この方法を適用する目的は、決定論的な解を与えるという有限差分 S_n 法の長所と不規則形状を扱えるというモンテカルロ法の長所を併せ持つためであり、更に角度変数にも FEM を適用する二重有限要素法の場合、ray effect を和らげることも可能である[17)]。一方、この方法の短所は反復計算時に処理すべきデータが多いことである。既に十分最適化が行われている有限差分 S_n 法に比べ多少計算時間がかゝるが、最近発展の著しい大規模並列演算処理に適し[18)]、将来高速化が期待できる。

以上、輸送方程式の様々な解法について述べたが、現在の計算機システムでは安いコストで十分精度の良い解を得るのは難しく、合成法[19)] やノード法[6)] など様々な種類の簡便法が用いられることもある。

一般的に言えば、二重有限要素法の定式化はガレルキン法[12)-14),20)] と変分法[7),8),15)-17),20)-23)] に大別される。前者の特徴は定式化が簡単なことであるが、境界条件の記述が厳密でないことと体系方程式が非対称になり、数値的安定性にも問題があることが分った。従って、ここでは対称な体系方程式を与える後者による定式化とコードの改良を行った。

原子炉の形状をモデル化する場合、モンテカルロ法のように平面と曲面を用いれば現実に近い近似ができる。しかし、有限要素法では基底関数を用いるので、平面と曲面を同時に扱い難い。従って、原子炉を任意の多面体で分割すれば一般的である[22]が、形状データの入力や反復計算の便を考え、多角柱に限定することが多い[7),8),20),23)]。現実的な多くの原子炉炉心体系が多角柱形状であることを考慮し、本解法ではこれを３角柱と４角柱に分割する[8),20),24)]。このとき、空間変数に対しては１次の基底関数に固定しているが、角度変数に対しては様々な基底関数を用い、これらを比較してその特徴を明らかにする。変分法では各群の中性子束を偶数パリティと奇数パリティに分けて解くが、体系内の節点を径方向の同一平面上に揃えて取っているので、偶数パリティは平面を　sweep（走査）することにより求める。奇数パリティ中性子束は得られた偶数パリティ中性子束を使い、別の方法で求める。

今回、解法に関して行った主な工夫は

i) 二重有限要素法を新しく３次元非等方散乱問題へ拡張したこと
ii) 偶数パリティ中性子束の反復に独自の適応的加速法[25)]を採用していること
iii) 奇数パリティ中性子束の計算に選点法を用い、計算の高速化を計っていること
iv) FEM に特有の反射境界における打切り誤差に対し、他の分野の FEM にも使用可能な修正法を考案[8)]して応用したこと

にある。

以下、これらのアルゴリズムに基づいたコード DFEM の構造の概略を述べる。また、コード使用法とともにサンプル入力例も与える。検証計算例としては、まず高速炉の模擬炉心等を採り上げ、様々な機能のテストを行うとともに、角度の基底関数に適当な修正を加えれば ray effect[10),17)] が和らげられることを示す。次に、制御棒挿入状態における実験結果が得られている FCA XII-1 集合体[26)]、および NEA/CRP（炉物理委員会）輸送ベンチマーク問題[19)]　を選び、体系の固有値や核反応率分布等の計算結果を実験や他のコードと比較することにより本コードの検証を行う。

2. 二重有限要素法による３次元輸送方程式の定式化

微分型の多群中性子輸送方程式を

$$\Omega \nabla \psi^g(r,\Omega) + \sigma_t^g(r)\,\psi^g(r,\Omega)$$

$$= \sum_{g'=1}^{G} \int_S \sum_{l=0}^{L} \left(\frac{2l+1}{4\pi}\right) P_l(\mu_0)\,\sigma_{sl}^{g'\to g}(r)\,\psi^{g'}(r,\Omega')\,d\Omega' \qquad (1)$$

$$+ \frac{\chi^g}{\lambda} \sum_{g'=1}^{G} \nu\sigma_f^{g'}(r)\,\phi^{g'}(r) + Q^g(r,\Omega) \qquad (g=1\sim G)$$

と表わすことにする。ここに、

$r=(x,y,z)$	：３次元空間変数ベクトル
S	：全角度空間（４πステラジアン）
$\Omega \in S$	：角度変数ベクトル
G	：全エネルギー群数
$g=1\sim G$	：エネルギー群の指数
ψ^g	：角度中性子束
ϕ^g	：全中性子束
Q^g	：外部中性子源密度
σ_t^g	：巨視全断面積
$\sigma_{sl}^{g'\to g}$	：巨視散乱断面積
$\sigma_f^{g'}$	：巨視核分裂断面積
ν	：一回の核分裂で放出される中性子の平均個数
χ^g	：核分裂スペクトル
$\mu_0=(\Omega'\cdot\Omega)$	：散乱角
L	：ルジャンドル展開の打切り次数
$l=o\sim L$	：散乱の異方性を表わすルジャンドル展開の次数
P_l	：ルジャンドルの多項式
λ	：体系の固有値（中性子実効増倍率）

である。

境界条件としては、真空条件

$$\psi^g(r,\Omega) = 0 \qquad for\ r\in\Gamma_v,\quad \Omega \in S_-$$

および反射条件

$$\psi^g(r,\Omega) = \psi^g(r,\Omega') \quad for\ r\in\Gamma_r,\quad \Omega = \Omega'-2(\Omega' n)n$$

を考える。ここに、

Γ_v ：真空境界

Γ_r ：反射境界

S_- ：境界における全角度 S のうち、体系に入射する方向の全角度

n ：境界上に立てた外向きの法線ベクトル

である。

二重有限要素法では、FEM を空間変数と角度変数に適用する。いま、 $\phi_i(r)$, $\chi_j(\Omega)$ をそれぞれ空間および角度の基底関数とすれば、角度中性子束は

$$\psi^g(r,\Omega) = \sum_{i=1}^{I}\sum_{j=1}^{J} c_{ij}^g \phi_i(r)\chi_j(\Omega) \qquad (2)$$

のように近似できる。ここに、 I は空間の全節点数、 J は角度の全節点数であり、節点値 c_{ij}^g は ψ^g の汎関数の停留点として求められる[18),20),21)]。以下、これらの具体的な決め方について述べる。

2．1　変分法の適用

輸送方程式の変分法による解法は早くから提案されている。Kaper らは、まず等方散乱問題において様々な角度の基底関数を用いて定式化とテストを行い、変分法の有効性を示した[13)]。Tomlinson らは、角度の基底関数に Legendre 関数を用い、散乱の非等方性を P_1 まで扱う効率的なアルゴリズムを示した[21)]。これらはともに２次元問題を対象としており、３角形の要素を用いている。一方、Fletcher は (x,y,z) 形状で、角度の基底に Legendre 関数を用いて高次の非等方性を扱う定式化を行ったが、計算を簡単化するため、当初２次以上の係数 $\sigma_{sl}^{g'g}$ が一定という仮定を設けていた[27)]。これらに対し、我々の方法は多角柱を３角柱のほかに４角柱を用いてデータ処理の簡略化を行っていること、散乱の異方性を P_3 まで扱ったこと、それに、角度の基底として Legendre 関数のほかに３次元に拡張したスプライン関数や階段型の関数を適用するなど、様々な関数を用いたことに特徴がある[8),20)]。その後、計算機や解法の発達により、より複雑な形状やより高次の非等方性も扱うコードが開発されるに至っ

た[7),22)]。

変分法では角度中性子束 $\psi^g(\Omega)$ を

$$^e\psi(\Omega) = \frac{1}{2}\{\psi(\Omega)+\psi(-\Omega)\},$$

$$^o\psi(\Omega) = \frac{1}{2}\{\psi(\Omega)-\psi(-\Omega)\}$$

により偶数パリティと奇数パリティの中性子束に分ける。こゝに、空間変数の r は省略されている。同様な分離の操作を中性子源（(1) 式の右辺）や角度の基底関数 χ_j に行い、輸送方程式を整理すると、 $^o\psi$ を $^e\psi$ で表わした式

$$\begin{aligned} ^o\psi(\Omega) &= \frac{1}{\sigma_t}\{-\Omega\nabla\,^e\psi(\Omega)+\,^oS(\Omega)\} \\ &+ \frac{1}{\sigma_t}[\sum_{l}^{odd}\frac{\sigma_{sl}}{\sigma_t-\sigma_{sl}}\sum_{m=-l}^{l}Y_{lm}(\Omega) \\ &\cdot \int_S\{-\Omega'\nabla\,^e\psi(\Omega')+\,^oS(\Omega')\}\;\bar{Y}_{lm}(\Omega')d\Omega'] . \end{aligned} \qquad (3)$$

を得る。こゝに、

$$^e\psi(\Omega)=\sum_{i=1}^{I}\sum_{j=1}^{J/2}\,^ec_{ij}\,\phi_i\,^e\zeta_j(\Omega),$$

$$^o\psi(\Omega)=\sum_{i=1}^{I}\sum_{j=1}^{J/2}\,^oc_{ij}\,\phi_i\,^o\zeta_j(\Omega)$$

および

$$^ec_{ij}=\frac{1}{2}\{c_{ij}+c_{i\bar{j}}\},\quad ^oc_{ij}=\frac{1}{2}\{c_{ij}-c_{i\bar{j}}\},$$

$$^e\zeta_j(\Omega)=\chi_j(\Omega)+\chi_{\bar{j}}(\Omega),\quad ^o\zeta_j(\Omega)=\chi_j(\Omega)-\chi_{\bar{j}}(\Omega)\quad (j=1\sim J) \qquad (4)$$

であり、 $\bar{j}$ は j の反対側の角度方向の添字である。この式では、記述の簡単化のためエネルギーの添字も省略されている。こゝで、元の方程式を $^e\psi$ のみで表わすと Euler 方程式が得られ、変分問題における汎関数が次の形で得られる[21)]。

$$
\begin{aligned}
{}^{e}F = & -\frac{1}{2}\int_D\int_S [\frac{1}{\sigma_t}(\Omega\nabla\,{}^{e}\psi)^2 + \sigma_t({}^{e}\psi)^2 \\
& - {}^{e}\psi\int_{\Omega'} {}^{e}K\,{}^{e}\psi(\Omega') + (\Omega\nabla\,{}^{e}\psi)\int_{\Omega'} {}^{o}g\{\Omega'\nabla\,{}^{e}\psi(\Omega')\} \\
& - \frac{2}{\sigma_t}(\Omega\nabla\,{}^{e}\psi)\,{}^{o}S - 2\,{}^{e}\psi\,{}^{e}S - 2(\Omega\nabla\,{}^{e}\psi)\int_{\Omega'} {}^{o}g\,{}^{o}S(\Omega')]\,dr\,d\Omega \\
& + \int_{\Gamma_v}\int_S |\Omega\cdot n|({}^{e}\psi)^2\,dr\,d\Omega
\end{aligned}
$$

この停留点を求める方程式は

$$
{}^{e}A^{g}\,{}^{e}C^{g} = {}^{e}b^{g} \qquad (5)
$$

と書けるが、係数行列 ${}^{e}A^{g}$ や定数ベクトル ${}^{e}b^{g}$ の各成分は付録Ａに示した。

以上により、着目するエネルギー群の偶数パリティ中性子束が求まった。最終的に全エネルギー群の中性子束をどういう手順で求めるかは後の節で詳しく述べる。

２．２　空間の基底関数と境界打切り誤差の解消法

解析の対象となる原子炉炉心体系等の形状の大部分は角柱または円柱で構成されることが多く、これを Fig. 1 のような多角柱で模擬することにする。このとき、全体系領域 D を (x,y) 平面に平行な平面でいくつかの層に分け、更に各層を３角柱と４角柱に分割したとすれば、任意の節点 i の基底関数 $\phi_i(r)$ が各要素内において１次の関数で、

$$
\phi_i(r_{i'}) = \delta_{ii'} \quad for \quad i' \in D
$$

を満たすようにできる。この基底は FEM による拡散コード[24] でも使われており、それぞれの角柱要素内における具体的表現を付録Ｂに示しておく。空間の基底関数としては更に高次のものを用いることもできるが、３次元輸送問題を扱う本コードでは、精度の向上は要素分割を細かくすることにより達成する。

次に境界打切り誤差について考察しよう。いま、節点 i が体系の反射境界上にあるとすると、付録Ａに示したように、例えば ${}^{e}A_{51}^{g'g}$ の係数は輸送項に起因する $< \frac{\sigma_{sl}^{g'g}}{\sigma_t}\frac{\partial\phi_i}{\partial x}\phi_i >$ を用いて計算できる。ところがこの内積は内側と外側とで値が異なるのに対し、反射条件を使って解く場合、体系の内側の値しか採用されない。このような偏った取扱いに起因する誤差を反射境界における打切り誤差、あるいは単に打切り誤差ともいう[28),29)]。この種の誤差は核計算以外の分野にも共通であり、これを解消する一般的な方法を考案した[8)]。

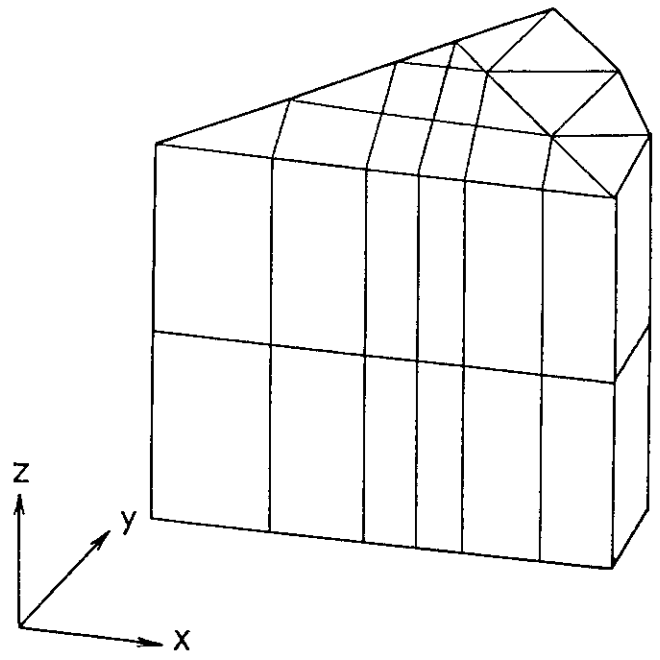


Fig. 1 An example of partitioning of a multilateral prism reactor into triangular and quadrangular prism elements

例として Fig. 2 のような場合を考える。本来は全体系 ABCDEFGH に対して解くところを、反射条件を使い体系 OAB で解くと、固有値や全中性子束に誤差が生じる他、反射条件を満たさない角度中性子束が得られる。この場合、体系 OAB のデータのみ入力して全体系のデータを構成し、この中から図の斜線の部分の内積も考慮して体系方程式を導けば、従来と殆んど変らぬ手続きで誤差が解消される。この図は (x,y) 方向の対称性に関するものであるが、 z 方向の対称性に関する修正はもっと容易である。なお、この方法は有限差分法で反射境界の外側に仮想分点をとる方法[28)29)]の、複雑形状に対する一般化とも言える。

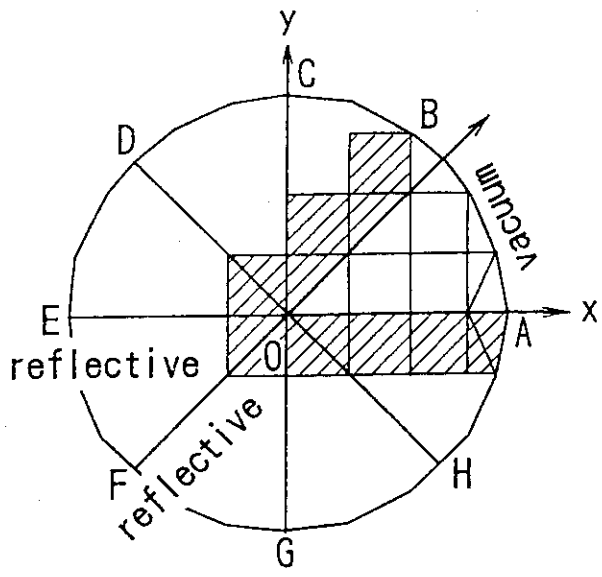


Fig. 2 Extended element zone in the remedial scheme of truncation error in the calculation with reflective boundary condition

2．3 様々な角度の基底関数とその特徴

先に述べたように、角度変数に対しては様々な型の基底関数の適用を試みた。最初に用いた３次元のスプラインによる基関数底は、２次元等方散乱問題を解くためにKaperら[13]が用いたものを３次元非等方散乱問題が扱えるよう拡張したものである。Fig. 3 は角度の座標系と、この基底関数 $\chi_j(\Omega)$ $(j=1\sim6)$ が対応する６つの角度方向（角度分点）を示している。 χ_j の具体的表現は付録Ｃで示したが、このときも空間の基底と同様な関係式

$$\chi_j(\Omega_{j'}) = \delta_{jj'} \quad (j,j'=1\sim6)$$

が成り立つ。従って、近似式 (2) における節点値 c_{ij}^g は、空間の節点 i における Ω_j 方向の第 g 群の角度中性子束を意味していることになる。

DFEM コードの開発段階において、簡単のためまずこのような基底を用いたが、より精度を向上させるには角度分点数がオプションで増やせるような基底を開発する必要があるため、新しい角度の基底について検討を行った。このとき留意すべきことは、付録Aに示されるように角度の基底に対する内積の計算が極端に複雑にならないようにすることである。次の２種類の基底は実際に応用を試みたものである。

まず、一層簡単なスプライン型の基底として次のような２次のものを考えてみる[30]。Fig. 4 に示されるように、全角度空間 S 内における任意の３つの方向 OX, OY, OZ に対し

$$\chi_X(\Omega) = X^2 + 2YZ\cos\theta_{YZ}$$

$$\chi_Y(\Omega) = Y^2 + 2ZX\cos\theta_{ZX}$$

$$\chi_Z(\Omega) = Z^2 + 2XY\cos\theta_{XY}$$

と置く。ここに、 X, Y, Z は斜交座標であり、 $\cos\theta_{XY}$ 等は２つの方向に対する余弦である。従って、角度 $(O-XYZ)$ を狭めていけば、全角度空間における角度分点数が増やせることになる。

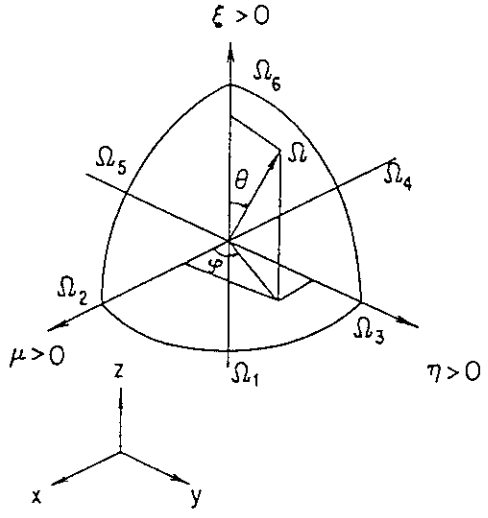


Fig. 3 Angular co-ordinate system and six representative directions

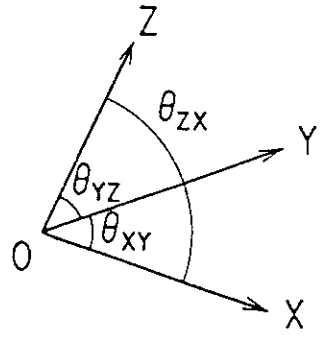


Fig. 4 Three adjacent angular directions and the angles between them

次に、角度分点を増やす最も簡単な方法について示す。それは、有限差分 S_n 法に見られるように階段型の基底関数を用いる方法である[8),9)]。例えば、Fig. 5 に示すように、S_4 相当の分点数をもつ場合を考える。各方向 $\Omega_j = (\mu_j, \eta_j, \xi_j)$ が図の点線で示される領域 W_j の代表点であるとすれば、

$$\chi_j(\Omega) = 1 \quad on\ W_j$$
$$= 0 \quad elsewhere \quad (j = 1 \sim J)$$

で基底を定義する。この場合も、先の２次のスプラインによる基底と同様

$$\chi_j(\Omega_{j'}) = \delta_{jj'} \quad (j, j' = 1 \sim J)$$

が成り立つ。また、任意の角度変数の関数 $f(\Omega)$ に対する積分は

$$\int_S f(\Omega)\, d\Omega = \sum_{j=1}^{J} f(\Omega_j)\, w_j$$

で行う。ここに、 w_j は Ω_j の面積であり、また、 W_j の重みとも呼ばれるものである。こうすれば我々が必要とする内積の計算は

$$<\mu\eta\ {}^e\zeta_j\ {}^e\zeta_{j'}> = \frac{1}{2\pi}\delta_{jj'} \cdot \mu_j \eta_j w_j \qquad (j, j' = 1 \sim J)$$

のように簡単になる。このような S_n 型の基底を用いる場合、S_n 定数にあたるものをコードに組込んでおくだけでよい。高速炉の炉心解析では余り心配はないが、ray effect には充分注意する必要がある。本コードには、S_n コードとの比較を容易にするため、S_6 までの定数[9)]が組込まれている。

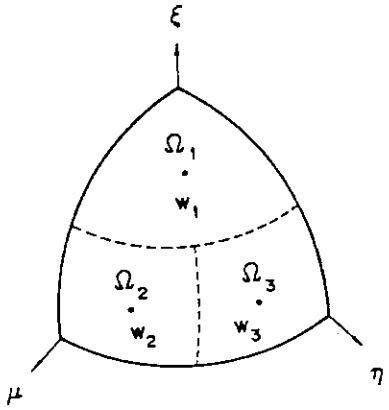


Fig. 5 An arrangement of directions in the case of angular bases by step functions

最後に、我々も定式化を試みた Legendre 関数の適用について述べておこう。この場合、角度中性子束は

$$ {}^{e}\psi^{g}(\Omega) = \sum_{i=1}^{I} \sum_{l}^{even} \sum_{m=-l}^{l} c_{ilm}^{g}\, \phi(r)\, Y_{lm}(\Omega) $$

$$ {}^{o}\psi^{g}(\Omega) = \sum_{i=1}^{I} \sum_{l}^{odd} \sum_{m=-l}^{l} c_{ilm}^{g}\, \phi(r)\, Y_{lm}(\Omega) $$

と表わされる。(1) 式を見ると散乱の非等方性が Legendre 展開で表現されており、角度変数にこの関数を適用すると直交関係が利用でき、定式化が簡単になる。この利点のため、Legendre 関数が用いられることが多いが[7),13),21)]、負の中性子束を生じ易いという恐れがある。また、２つのパリティ中性子束 ${}^{e}c$, ${}^{o}c$ のベクトルとしての長さが異なり、計算の複雑さが増すのでコード化に工夫が必要となる。

２．４　反復解法と高速化

変分法では、基本方程式の (1) 式を直接解く代わりに２つのパリティ中性子束を別々に求める。その詳細は解法により異なるが、我々の現在の求解手順を示すと、

i) 初期値を与える。（標準値は全ての g, i, j について ${}^{e}c_{ij}^{g} = 1$, ${}^{o}c_{ij}^{g} = 0$. 継続計算のときは前回のランの値を用いる。）

ii) 第１群の偶数パリティ中性子束 ${}^{e}c^{1}$ の式 (5) において、最初（底）の (x, y) 平面の平面方程式を SSOR 法で解く。

iii) ii) の結果を使って次の平面の方程式を解く。

iv) 以下同様、最後（蓋）の平面方程式までを解く。（ ii)～iv)を平面反復法と呼ぶ。）

v) ${}^{e}c^{1}$ の収束が不充分なとき、ii) に戻って平面反復法を繰り返す。（これは ${}^{e}c^{1}$ についての内側反復法と言える。）

vi) v)までに求まった ${}^{e}c^{1}$ を使って (3) 式より ${}^{o}\psi^{1}$ 即ち ${}^{o}c^{1}$ を求める。

vii) 第１群の結果 （${}^{e}c^{1}$, ${}^{o}c^{1}$） を使って第２群を求める。

viii) 以下同様、最後の群の中性子束を求める。（ ii)～viii) は通常の外側反復法である。）

ix) 外側反復法が収束するまで反復を繰り返す。

x) 収束したパリティ中性子束を用い、(4) 式から元の中性子束 ψ^{g} を求める。

以上の過程を図示したのが Fig. 6 である。この図で、 l, m はそれぞれ外側および内側の反復回数を示している。また、 ${}^{e}c_{lp}^{gk}$, ${}^{e}c_{ln}^{gk}$ はそれぞれ内側反復における第 g 群、第 k 番目の偶数パリティ中性子束の古い値と新しい値であり、内側反復や平面反復を行わない奇数パリティ中性子束に対し、それらの添え字は省略されている。なお、反復計算の収束判定は最大偏差を用いて行うが、収束しない場合は入力データの反復打切り回数や打切り計算時間等で制御される。

ii) の SSOR 法については独自の適応的加速法を用いたが、その有効性は理論的にも既に証明した[25]。いま、SSOR 法の k 回目の中性子束を ${}^{e}c^{(k)}$ とすれば、$(k+1)$ 回目の値は

$$ {}^{e}c^{(k+1)} = \varphi({}^{e}c^{(k)}, b) = B\,{}^{e}c^{(k)} + Cb $$

と書ける。このとき、適応的加速法は ${}^{e}c^{(0)}$ から出発して

$$ \begin{aligned} &d = \varphi({}^{e}c^{(k)}), \qquad e = d - {}^{e}c^{(k)}, \\ &f = \varphi(e, o), \qquad \alpha^{(k)} = (e, e-f)/\|e-f\|^2, \\ &{}^{e}c^{(k+1)} = d + \alpha^{(k)} f \end{aligned} $$

と簡単に記すことができる。内側反復の他の収束加速法としては、粗メッシュ再釣合法[9] を採用している。

外側反復法における中性子源外挿法[31] は以下のように記すと分り易い。まず、第 $(l-1)$ 回目の外側反復後の角度中性子束が $\lambda_{l-1} = \int_D f(\psi_{l-1})\,dr$ と正規化されているとする。ここに、 f は $f(\psi) = \dfrac{1}{4\pi}\int_S \sum_{g=1}^{G} \nu\sigma_f \psi^g d\Omega$ で定義される作用素とする。

続いて、内側反復で得られる角度中性子束 ψ に対し、必要な助変数を

$$ \begin{aligned} &\lambda_l = \int_D f(\psi_l)\,dr, \quad \varepsilon_l = (\lambda_l - \lambda_{l-1})/\lambda_{l-1}, \quad \mu_l = \varepsilon_l(1+\varepsilon_{l-1})/\varepsilon_{l-1}, \\ &\tau_l = \mu_l/(1-\mu_l), \quad \delta_l = |\tau_l - \tau_{l-1}|/\tau_{l-1} \end{aligned} \tag{6} $$

で与えたとき、適用条件

$$ l \geq 4, \quad 0.5 < \mu_l < 1.0, \quad \max(\delta_{l-1}, \delta_l) < 0.1 $$

を同時に満たした場合のみ

$$ f_l = f(\psi_l) + \tau_l \{ f(\psi_l) - f(\psi_{l-1}) \} $$

により核分裂中性子源分布を外挿する。適用条件を満たさない場合は $\tau_l = 0$ とすればよい。差分法では、核分裂中性子源の計算をメッシュ平均の中性子束を用いて行うが、有限要素法では基底関数を用いて厳密に取り扱うため、一般に精度が高い。

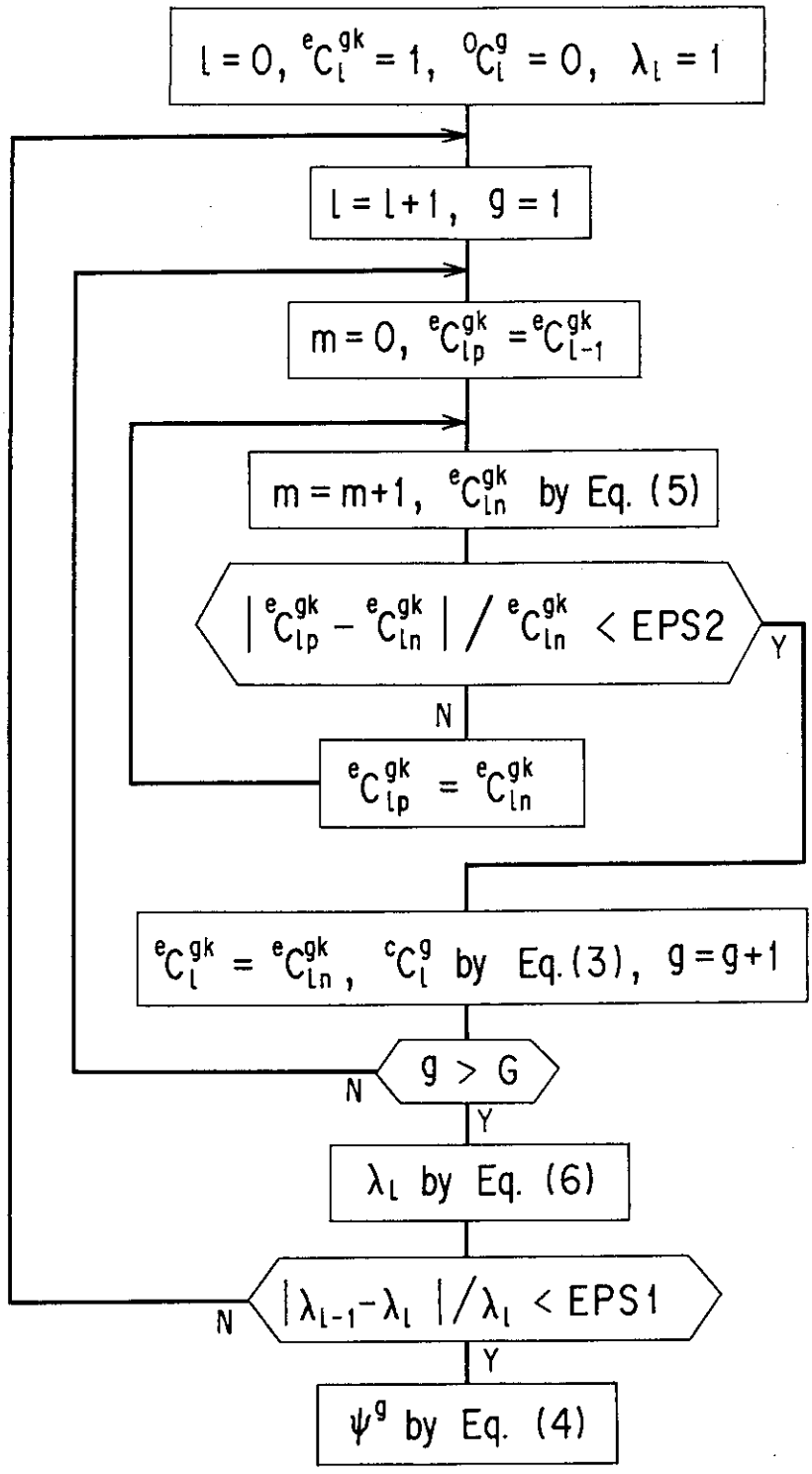


Fig. 6 Flow chart of inner and outer iterations

次に、vi) の過程で用いる (3) 式について述べる。この式は奇数パリティ中性子束を偶数パリティ中性子束で表わしたものであるが、右辺が r の連続関数でないこと等により、右辺 (2) 式の形に整理することが難しい。そこで、「全ての角度方向 Ω_j において両辺が一致するよう ${}^oc$ を決める方法」を用い、これを選点法と呼ぶことにする。具体的には、節点 r_i を含む全ての要素 α の体積平均を用い、

$$ {}^oc_{ij}^{g} = \frac{1}{\sum_{\alpha} V_\alpha} [\sum_{\alpha} V_\alpha R_\alpha^g(r_i, \Omega_j)] $$

により求める。こゝに、 $R^g(r,\Omega)$ は (3) 式の右辺、 V_α は α の体積である。上の式の右辺は

$$ R_\alpha^g = {}^oA_1^{gg}\, {}^eC^g + \sum_{g' \neq g} {}^oA_2^{g'g}\, {}^oC^{g'} + {}^oA_3^{gg}\, {}^oq^g $$

と行列演算で求めると計算が速い。各行列の成分は付録Dに掲げた。

3． DFEM コードの概要とデータ入力形式

本章では、DFEM コードを使用する上で必要な入力データ取扱い法を中心に、コードの概略を述べる。

3．1 DFEM コードの概要

コードを構成する全てのサブルーチンと計算の流れを示したのが Fig. 7 であるが、システム組込みルーチンは除かれている。 MAIN プログラムでは、計算規模に見合った COMMON の大きさを使用者が定める。 DTLIST は入力されたデータをカード・イメージで打ち出し、入力エラーを捜すのに有用である。計算の主な流れは MAIN1 で制御される。 INPUT は入力を行うブロックであり、FIDO は FEM コードに共通の大量のデータを扱う作業の労を軽減してくれる。 PRINT1 ~ PRINT9 は入力データを整理して打ち出すルーチンである。 RESTAT は後出のダンプと呼応して、予定時間内に収束解が得られない場合の継続計算を可能にする。また、MECHK は主記憶領域が共通ブロックや INPUT, MATRIX, OUTER, OUTPUT の４つのブロックでどのくらい必要かを示す。本コードはオーバーレイ構造になっているので、（共通ブロック＋最大ブロック）の領域を MAIN の COMMON で与えることになる。

MATRIX は体系方程式の係数行列を構成するブロックである。空間変数に関しては、３角柱 (PRISM) 、４角柱 (BOX) と別々にデータを作成し、角度変数に関しては ANGLE でデータを作成する。SURFS と SURFA はこれらの表面積分（付録Aの ${}^{e}A_{8}$ ）の項に当たる。また、DEFXY は選点法に必要なデータを用意するルーチンであり、MTRXA ~ MTRXQ はそれぞれ、吸収、核分裂、群外散乱、固定中性子源に対応する行列を作成するルーチンである。なお、REFL1, REFL2 は MATRIX のブロックの一部とみなすことができ、第２．２節で述べたように、対称条件を用いて小さくなった基本領域を反射させながら係数行列を修正していく部分である。

反復計算を行うのは OUTER のブロックであり、INITAL で初期値を与えたあと、各群の源を構成する固定中性子源 (EXSOUR) 或いは核分裂源 (LAMBDA) の項を呼び出し、SOURCE で散乱源に加えている。一方、輸送項などを含む係数行列（(5)式の ${}^{e}A^{g}$ ）は PICKHM で平面ごとのデータに分け、INNER に送られる。内側反復の中心は平面内の走査を行う SSOR と、それに適応的加速法を応用する ACCEL である。

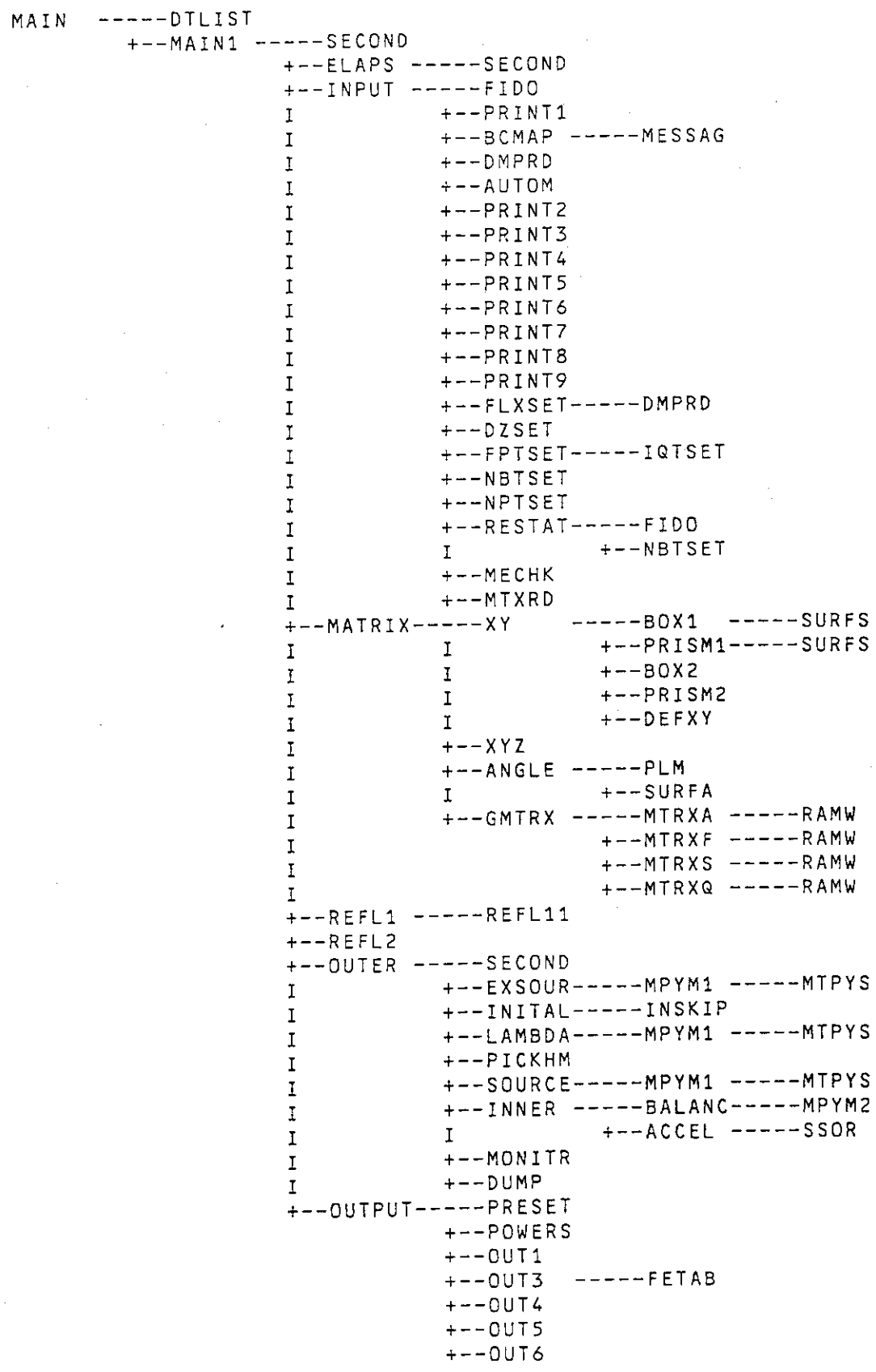


Fig. 7 Stratified structure of the DFEM code

計算結果の出力は OUTPUT のブロックで行われる。POWERS で出力分布と反応率分布を印刷するほか、OUT1 ~ OUT6 で指定した場所の全中性子束や角度中性子束を出力する。実規模炉心の本格的な解析のためには更に編集機能を拡充することが望まれる。

3．2　入力データの取扱い法

次に、入力データの取扱い法の一般的な規則を示そう。

i)　中性子断面積

中性子断面積は、ダンプされたファイルから入力される場合を除いて、カードイメージで TWOTRAN-II と同様、FIDO format[9] で入力できる。いま、G 群、P_N の計算において、上方散乱群数を U 、下方散乱群数を D 、物質数を M とする。このとき、標準的な断面積の list :

$$(\sigma_a, \nu\sigma_f, \sigma_t, \sigma^{g+U\to g}, \cdots, \sigma^{g+1\to g}, \sigma^{g\to g}, \sigma^{g-1\to g}, \cdots, \sigma^{g-D\to g})$$

に対し、 $(((list), g=1\sim G), n=1\sim N), m=1\sim M)$ で入力される。この処理は list 上における各断面積の位置を指示することにより行うので、σ_a の前や σ_t の後などに不要な断面積が入っていても構わない。

ii)　要素分割

一般に FEM は不規則な形状を扱うので、要素分割を規定するための入力データは厖大となる。本コードの場合、Fig. 1 のように多角柱の原子炉体系を扱うので、節点を (x,y) および z 方向に揃えてとることができる。しかし、有限差分法のメッシュ分割に比べるとこれでも入力が増えるので、直方体や円柱などの規則正しい形状の場合には、(x,y) 平面に関して要素の自動分割が行えるようになっている。Fig. 8 はこれらの自動分割例を示したものである。

z 方向は有限差分法と同様に扱えるので、まず物質領域に合せて粗い分割を行い、次に各領域を等分割して要素に分割する。なお、(x,y) 方向に関する物質の指定は各要素ごとに行う。

iii)　継続計算法

3次元輸送計算のような大規模の反復計算では、精度のよい初期値の採用が重要となる。本コードでは、初期推定値として正の平坦な値を標準値として用いるが、別のファイルから任意の推定値を与えることもできる。

反復計算が一度のランで収束しなかった場合、継続計算に必要な全てのデータがダンプファイルに保存される。継続計算では、例えば反復打切り回数や収束判定基準など、計算の主な流れを変えない変数は変更可能である。どの変数が変更可能かについては、次節で述べる。

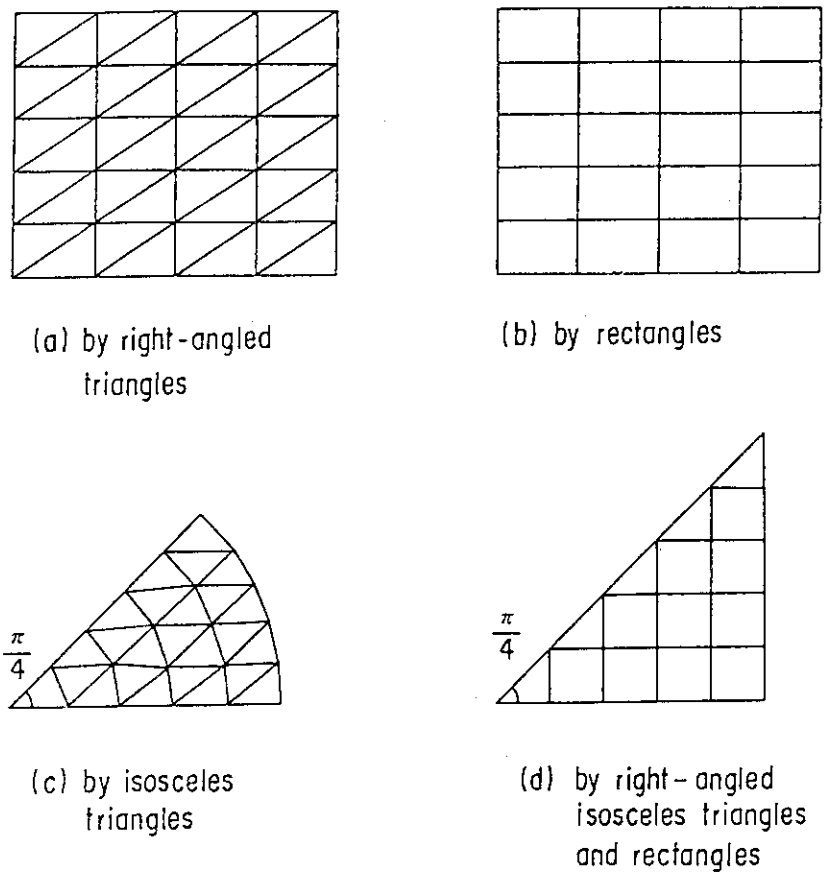


Fig. 8 Auto mesh generation in an (x,y) plane for various reactor configurations

3．3 入力形式の詳細

以下に、入力形式の詳細を示す。但し、右肩に ＊ 印の付いた項目は継続計算で変更が可能であることを示す。

A．タイトルカード*

1．カード枚数 ; format (I6)
2．タイトル ; format (18A4)

B．整数データ

1$ (50 項目)
1．ISCT 散乱の非等方性を示す次数
0 : 等方散乱
n : n 次の非等方散乱 (n≦3)

2. NGRP　エネルギー群数
3. NPOINT　(x,y) 方向の節点数
4. NZMAX　z 方向の節点数
5. NELEM　(x,y) 方向の要素数
6. NXYRN　(x,y) 方向の物質領域数
7. NZRN　z 方向の物質領域数
8. MTT　物質数
9. NBF　前面境界の節点数　(真空境界のとき正、反射境界のとき負)
10. NBB　後面境界の節点数　(同上)
11. NBL　左面境界の節点数　(同上)
12. NBR　右面境界の節点数　(同上)
13. NBOTOM　底面の境界条件
    0 : 真空境界
    1 : 反射境界
14. NTOP　蓋面の境界条件
    0 : 真空境界
    1 : 反射境界
15. NIMAX* 内側反復の打切り回数
16. NOMAX* 外側反復の打切り回数
17. NKXY　(x,y) 方向の粗メッシュ再釣合領域の数
18. NKZ　z 方向の粗メッシュ再釣合領域の数
19. NSTART* 中性子束分布の初期推定値を与えるためのオプション
    0 : 平坦な中性子束分布を与える。
    1 : 外部ファイル（機番 9 ）から読み込む。
    2 : ダンプファイル（機番 12 ）から読み込む。
    3 : 完全継続計算時にダンプファイルから読み込む。
    4 : 修正継続計算時にダンプファイルから読み込む。
20. NMTRX　係数行列作成のためのオプション
    1 : 新規に作成する。
    2 : ダンプファイル（機番 12 ）の (x,y) 形状データを使って作成する。
    3 : ダンプファイル（機番 12 ）の３次元形状データを使って作成する。
    4 : ダンプファイル（機番 12 ）に作成済みの係数行列をそのまま用いる。
21. NPRN1　中性子断面積データに関する印字オプション
    0 : 印字しない。
    1 : 印字する。
22. NPRN2　物質領域データに関する印字オプション
    0 : 印字しない。
    1 : 印字する。
23. NPRN3　要素および節点の座標に関する印字オプション
    0 : 印字しない。
    1 : 印字する。
24. NXYOP　(x,y) 方向の物質領域データに関する入力オプション
    0 : カードによる入力
    1 : ダンプファイル（機番 12 ）から入力

25. NMOPT　物質番号に関する入力オプション
0 : カードによる入力
1 : ダンプファイルから入力
26. NCSOP　中性子断面積データに関する入力オプション
0 : カードによる入力
1 : ダンプファイルから入力
27. NFISOP　核分裂スペクトルに関する入力オプション
0 : カードによる入力
1 : ダンプファイルから入力
28. NBCOP　境界条件に関する入力オプション
0 : カードによる入力
1 : ダンプファイルから入力
29. NKOPT　粗メッシュ再鈎合法に関する入力オプション
0 : カードによる入力
1 : ダンプファイルから入力
30. NAUTO　(x,y) 方向のメッシュ分割に関するオプション
0 : 自動メッシュ分割を利用しないでカードで指定する。
1 : 全要素が直角３角柱になるよう自動メッシュ分割する。
2 : 全要素が直方体になるよう自動メッシュ分割する。
3 : 全要素が２等辺３角柱になるよう自動メッシュ分割する。
4 : 全要素が直方体か直角２等辺３角柱になるようになるよう自動メッシュ分割する。
5 : 外部ファイル（機番 19 ）からメッシュ分割データを読み込む。
31. NXP1　自動メッシュ分割を行う場合の、x 方向の節点数
32. NYP1　自動メッシュ分割を行う場合の、y 方向の節点数
33. IHT　中性子断面積表で全断面積が占める行
34. IHS　中性子断面積表で群内散乱断面積が占める行
35. IHM　中性子断面積表の全行数
36. NQRN1　(x,y) 方向に関し、固定中性子源の存在する物質領域数
37. NQRN2　z 方向に関し、固定中性子源の存在する物質領域数
38. NQOPT　固定中性子源に関する入力オプション
0 : カードによる入力
1 : ダンプファイルから入力
39. NTFOP　全中性子束の編集に関するオプション
0 : (x,y) 方向に節点値を編集する。
1 : z 方向に節点値を編集する。
40. NTFNO　(x,y) 方向に全中性子束の節点値を編集する z 節点の個数、または z 方向に全中性子束の節点値を編集する (x,y) 節点の個数
41. NTFPT　全中性子束の節点値を編集する箇所を入力するためのオプション
0 : カードによる入力
1 : ダンプファイルから入力
42. NPDOP　出力分布の編集に関するオプション
0 : (x,y) 方向に要素値を編集する。
1 : z 方向に要素値を編集する。

43. NPDNO　(x,y) 方向に出力分布の要素値を編集する z 要素の個数、または z 方向に出力分布の要素値を編集する (x,y) 要素の個数
44. NPDPT　出力分布の要素値を編集する箇所を入力するためのオプション
0 : カードによる入力
1 : ダンプファイルから入力
45. NAFOP　角度中性子束の編集に関するオプション
0 : (x,y) 方向に節点値を編集する。
1 : z 方向に節点値を編集する。
46. NAFNO　(x,y) 方向に角度中性子束の節点値を編集する z 節点の個数、または z 方向に角度中性子束の節点値を編集する (x,y) 節点の個数。
47. NAFGR　角度中性子束の節点値を編集するエネルギー群の個数
48. NAFPT　角度中性子束の節点値を編集する箇所を入力するためのオプション
0 : カードによる入力
1 : ダンプファイルから入力
49. ISN　s_n 型基底関数の角度分割の次数を示す n (2,4,6)
50. NSYSXY 原子炉体系の (x,y) 方向の対称性を示す数 (1,2,4,8)。例えば、45° 対称のときは 1/8 になるので 8 を入力する。
'T'　入力ブロックが終了したことを示す記号（以下、同様）

C．浮動小数点データ

2* (7 項目)
1. EPS1*　外側反復（体系固有値）に対する収束判定規準
2. EPS2*　内側反復（角度中性子束）に対する収束判定規準
3. SORF*　平面反復の SSOR 法で用いる加速因子 (1.0<SORF<2.0)
4. POWER*　中性子束を正規化するために用いる全体系の出力レベル (MW)。核分裂が無い場合 0.0 を入れる。
5. TIME*　計算打切りのための CPU 時間（分）
6. FA1　原子炉体系の３次元方向の対称性を示す数。核分裂が無い場合 0.0 を入れる。
7. FA2　1 W・s 当りの核分裂数（通常 3.285×10^{10} ）
'T'

D．幾何形状データ

節点データ　('1$' カードで NMTRX=1 かつ NAUTO=0 としたとき入力)
3$ NELNO(4,NELEM)
各要素を定義する節点の (x,y) 方向の番号を反時計向きに ((NELNO(i,j),i=1~4),j=1~NELEM) の順に入力する。三角柱のときは NELNO(3,NE)=NELNO(4,NE) とする。
4* PX(NPOINT)
各節点の x 座標
5* PY(NPOINT)
各節点の y 座標
'T'

自動メッシュ分割のためのデータ　（NMTRX=1 かつ NAUTO>0 としたとき入力）

6*　XNODE(NXP1)
　　自動メッシュ分割に使う x 方向の節点の、原点からの距離

7*　YNODE(NYP1)
　　自動メッシュ分割に使う y 方向の節点の、原点からの距離

'T'

Z メッシュのデータ　（NMTRX=1 としたとき入力）

8$　NDZR(NZRN)
　　z 方向における各物質領域を等間隔にメッシュ分割するときの分割数（底から順に与える。）

9*　ZNODE(NZRN)
　　z 方向における各物質領域の領域幅（底から順に与える。）

'T'

(x,y) 方向における物質領域データ　（NXYOP=0 かつ NMTRX<=3 としたとき入力）

10$ NXYGN(NELEM)
　　各要素の (x,y) 方向における物質領域番号

'T'

E．物質データ

組成表　（NMOPT=0 かつ NMTRX<=3 としたとき入力）

11$ NMRGN(NXYRN,NZRN)
　　各物質領域に対応する物質番号を
　　((NMRGN(i,j),i=1~NXYRN),j=1~NZRN) の順に入力。

'T'

断面積データ　（NCSOP=0 かつ NMTRX<=3 としたとき入力）

12* CS(IHM,NGRP,MTT*(ISCT+1))
　　FIDO format[9]で入力

'T'

F．核分裂スペクトル　（NFISOP=0 としたとき入力）

13* AKAI(NGRP)
　　χ^g を g=1～NGRP の順に入力

'T'

G．(x,y) 方向における真空境界条件のデータ　（NBCOP=0 かつ NMTRX<=3 としたとき入力）

14$ NFVP(NBF)
　　前面境界が真空条件のとき、境界上の節点を反時計回りに入力

'T'

15$ NBVP(NBB)
後面境界が真空条件のとき、境界上の節点を反時計回りに入力
'T'
16$ NLVP(NBL)
左面境界が真空条件のとき、境界上の節点を反時計回りに入力
'T'
17$ NRVP(NBR)
右面境界が真空条件のとき、境界上の節点を反時計回りに入力
'T'

H．粗メッシュ再釣合データ　(NKOPT=0 としたとき入力)

(x,y) 方向の節点データ
18$ KRPNT(NPOINT)
(x,y) 方向の各節点に対し、粗メッシュ再釣合領域の番号を入力
'T'

Z 方向のメッシュデータ
19$ KZRN(NZRN)
各 z メッシュに対し、粗メッシュ再釣合領域の番号を底から入力
'T'

I．固定中性子源データ　(NQRN1>0 かつ NQOPT=0 かつ NMTRX<=3 としたとき入力)

20$ NQXYR(NQRN1)
(x,y) 方向に関し、固定中性子源が与えられる物質領域番号を入力
21$ NQZR(NQRN2)
z 方向に関し、固定中性子源が与えられる物質領域番号を底から入力
22* DQ(NQRN1,NQRN2,NGRP)
固定中性子源の値を
(((DQ(i,j,k),i=1~NQRN1),j=1~NQRN2),k=1~NGRP) の順に入力
'T'

J．全中性子束を編集するデータ　(NTFNO>0 かつ NTFPT=0 としたとき入力)

23$ NTFTB(NTFNO)
(x,y) 方向に全中性子束の節点値を編集する z 節点の番号、または z 方向に全中性子束の節点値を編集する (x,y) 節点の番号個数
'T'

K．出力分布を編集するデータ　（ NPDNO>0 かつ NPDPT=0 としたとき入力）

24$ NPDTB(NPDNO)
　　(x,y) 方向に出力分布の要素値を編集する z 要素の番号、または z 方向に出力分布の要素値を編集する (x,y) 要素の番号
'T'

L．角度中性子束を編集するデータ　（ NAFNO>0 かつ NAFPT=0 としたとき入力）

25$ NAFTB(NAFNO)
　　(x,y) 方向に角度中性子束の節点値を編集する z 節点の番号、または z 方向に角度中性子束の節点値を編集する (x,y) 節点の番号
26$ NAFEG(NAFGR)
　　角度中性子束の節点値を編集するエネルギー群
'T'

以上で個々の入力データ作成法の説明を終わるが、参考のため、後出の FCA-V-2 集合体によるサンプル入力例を付録Ｅに掲げておく。

4． 検証計算と検討

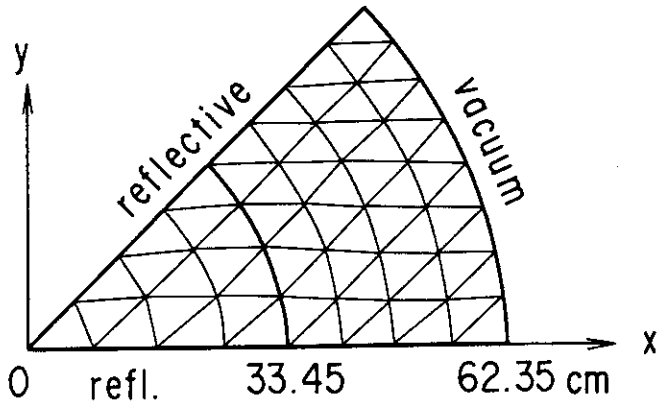
二重有限要素法による３次元中性子輸送コードの開発に着手して以来、コードの改良を重ねつゝ様々な問題を解いてきた。現在のコードは数値的安定性に優れる変分法的定式化に基づいているが、本章ではこの版による FCA V-2 集合体（２群、P_0 計算）、LMFBR のモデル炉心（４群、P_0 計算）、MOZART の模擬炉心（３群、P_1 計算）、固定中性子源問題（１群、P_0 計算）、FCA XII-1 集合体（３群、P_0計算）、NEA ベンチマーク問題（２群、P_0 計算）の６例を採り上げる。なお、角度の基底として様々な型のものを用いた旨第２．３節で述べたが、検証計算を通してこれらの特徴が確認された。以下、どの基底を用いたかはその都度明らかにしたい。

i) FCA-V-2 集合体

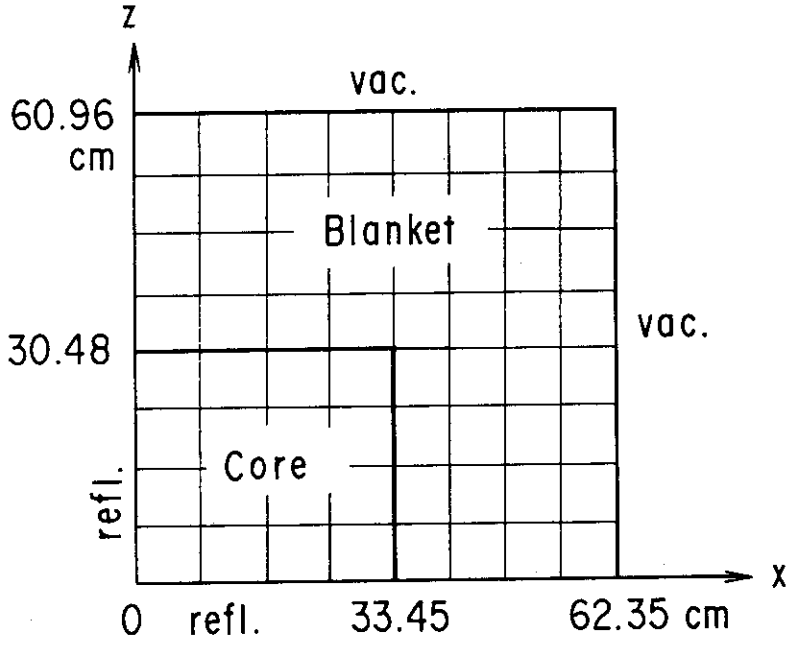
この例は (r,z) 体系であり、２次元輸送コードと容易に比較できるため、早くから検証計算に採用している。Fig. 9 は、この集合体の 1/16 炉心を採り上げ、64 × 8 要素に分割した例を示したものである。中性子断面積は、後の FCA-XII-1 集合体の例と同様、JFS-V2 セット[32]を縮約して得たものである。

次の Fig. 10 は、2 群、P_0 計算において、要素を細かくしていく場合の体系固有値 k_{eff} の収束状況を示したものであり、Fig. 9 は $\sqrt[3]{N}=8$ の場合に当たる。点線は有限差分 S_n コード TWOTRAN-II[9] による S_8, 40 × 40 メッシュ計算の結果を参考値として示したものである。こゝに、黒丸印は角度の基底として３次のスプラインを用いた場合の値であり、同じ角度分点数による２次のスプラインの場合はそれより参考値に近付き、解が改善された。一方、白丸印は階段型の S_2 相当の基底を用いた場合であり、メッシュを細かくしたときには参考値よりわずかながら過大評価となる。これに対し S_4 相当の場合には、スプラインの場合と同様に解が改善された。角度の基底として階段型の関数を用いると、方程式の次元数が増え、作業用ファイルのアクセス回数の制限に触れ易くなる。このため、現時点では空間も含めたより細かいメッシュによる計算は行っていない。この例で見ると、同程度のメッシュ幅の計算による比較では、階段型がスプライン型より大きい固有値を与える。この傾向は他のサンプル計算でも同様であった。しかし、一般的な結論を出すには、それを裏付ける理論と検証が必要であろう。

なお、この例や類似のデータに対し、中性子源外挿法の有効性について調べた。Fig. 11 は実際に外挿を２度行った例であるが、最大で約３倍の速度向上が達成された。



(a) x－y section



(b) x－z section

Fig. 9 Element partitioning for the FCA V-2 assembly calculation

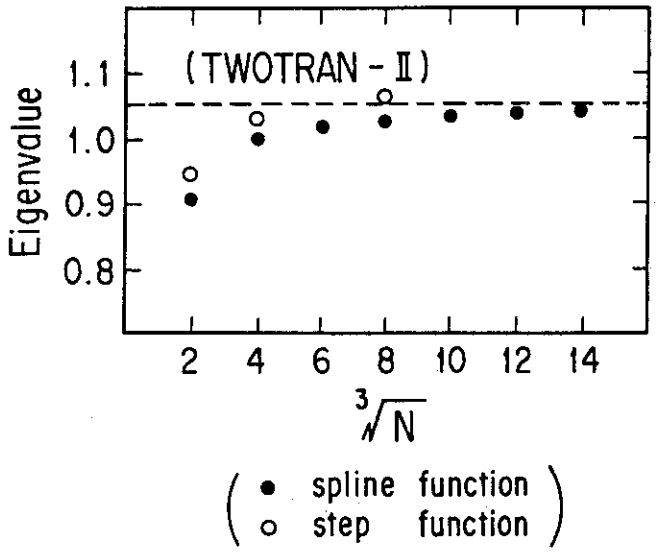


Fig. 10 Dependencies of the eigenvalue convergence on the number N of elements

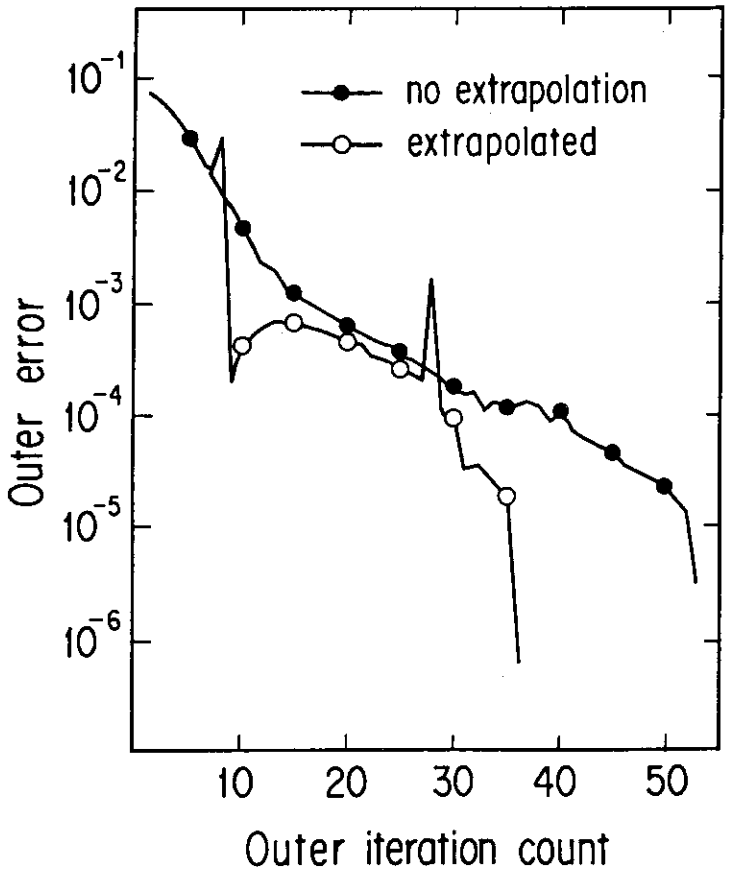


Fig. 11 An example of acceleration of the outer iteration convergence by source extrapolation

ii) LMFBR のモデル炉心

この例は、多群多領域の問題として採用した。これは Kaper ら[33]が提案したもので、4群の断面積も与えれており、検証計算によく引用されている。その (x,y) 形状を Fig. 12 に示す。体系としては、図の x 軸に関して対称で、 z 軸を軸として回転させてできる円柱を考える。Fig. 13 は第3群の半径方向の全中性子束を、TWOTRAN-II の S_4, 12 × 16 メッシュ計算の値と比較して示したもので、角度の基底としては3次のスプラインを用い、要素数は $N = 490$ である。このとき、中性子束の相対的な差異の最大値はおよそ 15 %であり、他の群についても同様な結果が得られた。また、固有値の差異は 0.0066 であり、要素の平均体積が約 $(12.74\ \mathrm{cm})^3$ という粗いメッシュにしては比較的精度の良い解が得られたことが分る。一般に、要素の平均体積を r^3 とするとき、固有値の精度を 1 桁上げるには r^2 を 1 桁下げることが必要となる[19]。

iii) MOZART の模擬炉心

この炉心は MOZART 炉心から外側ブランケットを取り除いたもので、任意の要素分割に対する打切り誤差解消と選点法の検証のために採り上げる。角度の基底としては階段型を適用する。このため、固有値計算を意図的に不規則な要素分割を用い、3群、P_1 計算で実施する。 Fig. 14 は、その円柱体系に対する粗メッシュ計算時の不規則な要素分割を示したものである。Table 1 には、要素の平均的な大きさとともに、打切り誤差解消を施した場合とそうでない場合の値が示されており、最後の欄は要素の大きさを無限小にした場合への外挿値[19]である。この問題の TWOTRAN-II による S_4, 36 × 26 (r,z) メッシュ計算の結果は 0.99791 である。この表に示したように、打切り誤差解消を施した場合は両者が良く一致するが、そうでない場合は 1.1 ~ 1.7% の誤差が生じた。

iv) 固定中性子源問題

Fig. 15 で示した例は固定中性子源問題であるが、S_n コードに対して ray effect を生じ易いことで有名で、Lathrop の問題と呼ばれるものである[10]。こゝでは、第2.3節で定義した階段型の基底関数を「 S_n 型」と呼ぶことにし、その S_n 型とは別の基底を以下に定義する。これを「 B_n 型」と呼ぶことにするが、その角度方向は

$$\mu_j^2 = \frac{6}{\pi}\int_{S_j}\mu^2 d\Omega,\quad \eta_j^2 = \frac{6}{\pi}\int_{S_j}\eta^2 d\Omega,\quad \xi_j^2 = \frac{6}{\pi}\int_{S_j}\xi^2 d\Omega$$

で与えられ、内積は

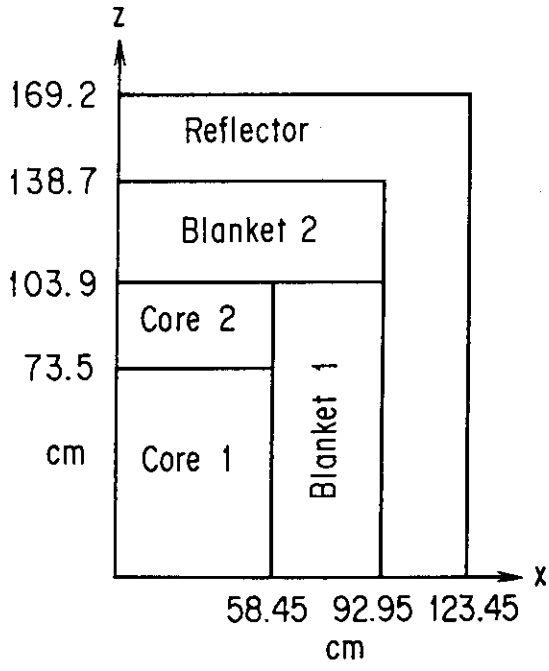


Fig. 12 Typical oxide-fueled LMFBR configuration

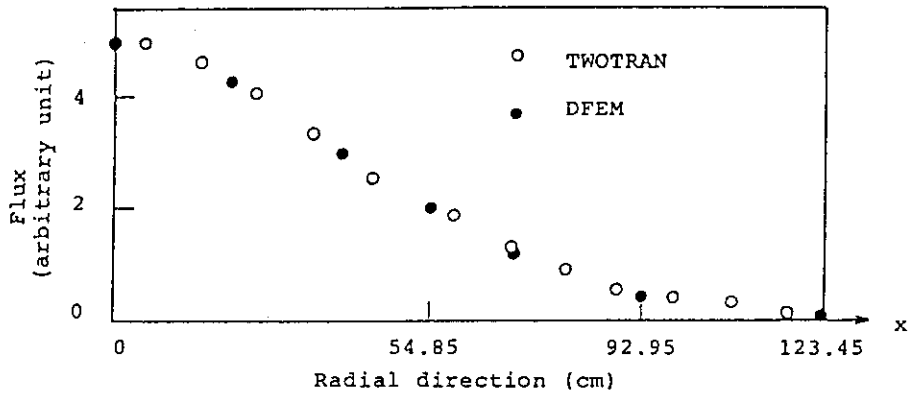
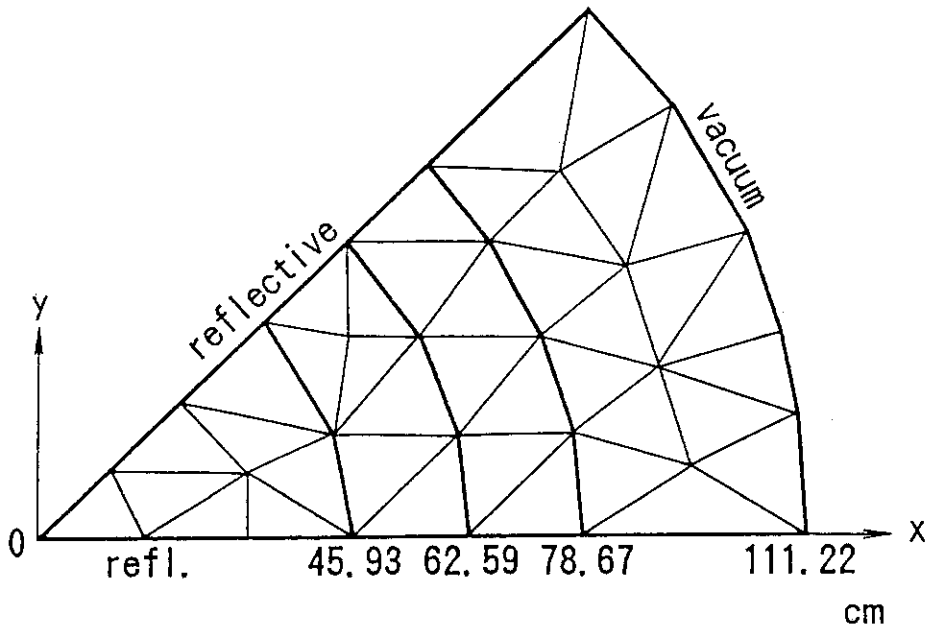
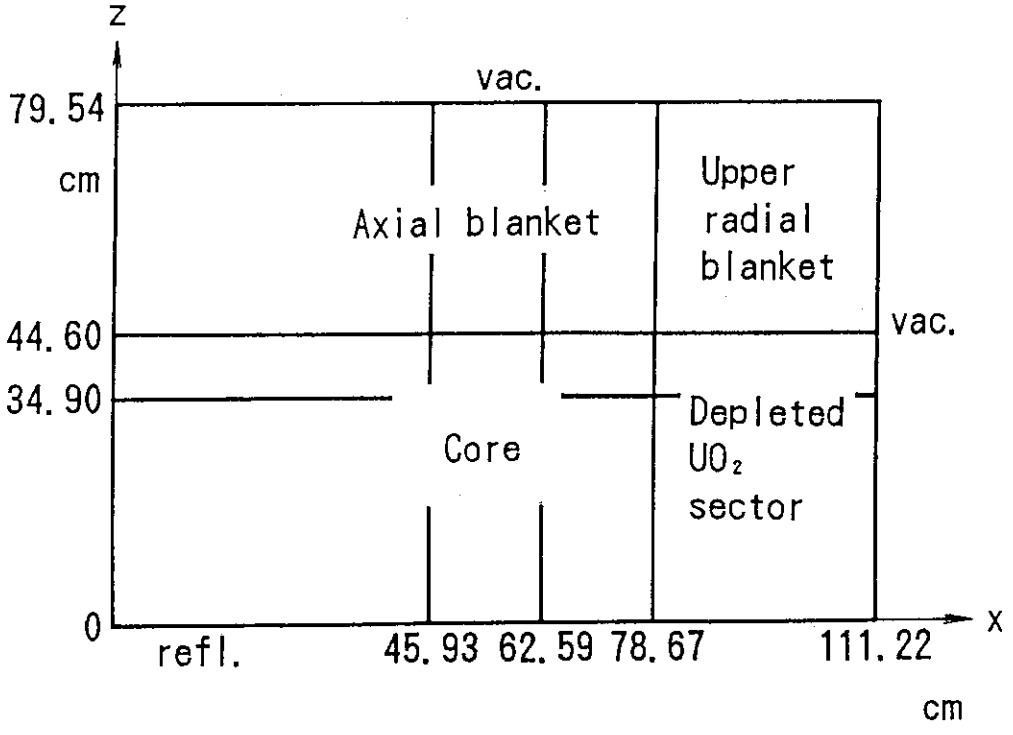


Fig. 13 Comparison of the third group flux distribution along the radial direction



(a)



(b)

Fig. 14 An irregular element partitioning for modified MOZART core configuration.
(a) (x,y) section (b) (x,z) section

Table 1 k_{eff}'s of modified MOZART core problem for various spatial meshes with and without accurate reflective boundary condition treatment

Average elment size (cm)	12.56	8.15	6.33	Extrapolated
With accurate treatment	0.98883	0.99444	0.99554	0.99831
Without accurate treatment	1.00042 (1.17)*	1.00889 (1.45)	1.01161 (1.61)	1.01530 (1.70)

* The numbers in parentheses are the percent errors from accurate treatment.

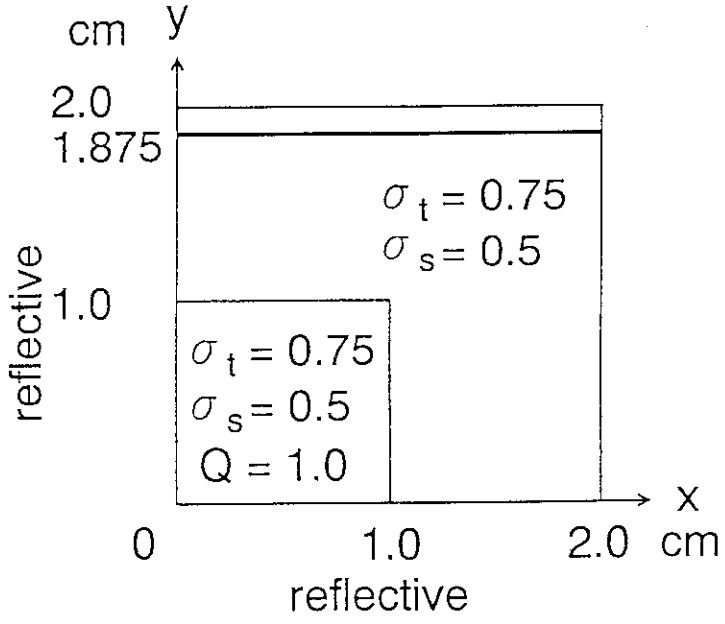


Fig. 15 Illustration of ray effect problem
(The flux is plotted along the bold line.)

$$\langle \mu\eta\ {}^{e}\zeta_j\ {}^{e}\zeta_{j'} \rangle = \frac{1}{2\pi}\delta_{jj'}\int_{S_j}\mu\eta\, d\Omega$$

のように厳密に計算される。 Table 2 は双方の諸定数を参考のために示したものである。

この問題は図のように (x,y) 形状なので、 z 方向の境界に反射条件を適用し、1群、P_0 計算を行う。Fig. 16 は y = 1.875 cm における中性子束をプロットしたものであるが、角度変数の扱いが S_n 型である TWOTRAN-II と DFEM のみに物理的に不自然な湾曲が 2 度現れている。Briggs ら[17] は、「B_n 型」の基底は ray effect をかなり和らげるが、中性子束の全体像は S_n 型の方が正しい。」と報告しており、本コードにおいてもこの事実が確認できた。従って、以後の計算には S_n 型の基底を用いることにする。

v) FCA-XII-1 集合体

この集合体は軸方向核特性を測定するための標準炉心であり、その (r,z) モデルを Fig. 17 に示す[26]。この例では3次スプラインの基底を用い、3ケースの制御棒挿入パターンに対する軸方向の反応率分布を計算し、実験や他の3次元コードの結果と比較する。

FCA は左右2分割型の臨界集合体であり、内部に内側ブランケット(I. B.) および外側にもブランケットを持っている。Fig. 18 は XII-1 集合体の標準炉心を模擬制御棒（天然 B_4C ピン）[26] の挿入を想定し、少し修正した炉心（以下、これを参考炉心または Na フォロワ挿入体系と呼ぶ）の固定側 $(z>0)$ 断面を示したものである。例えば、図中の記号□は、その位置のドロワが T2B2 という名の内容であることを示しており、記号 E はその位置のドロワが標準炉心から参考炉心に移行することにより、臨界調整のため EUCD という名の内容のドロワに置き換えられたことを意味している。計算に必要なドロワの構造の詳細や中性子断面積などは文献 34) に与えられている。制御棒挿入パターンとしては、この

Case 1. Na フォロワ挿入体系

のほかに

Case 2. 部分挿入体系

Case 3. 半挿入体系

の3ケースを考える。標準炉心は分割面 $(z=0)$ に対して対称になっており、参考炉心の移動側 $(z<0)$ と、他の2つの体系を含めたドロワ置換法を Table 3 に示しておく。

Table 2 Quadrature sets used for ray effect problem

	μ	η	ξ	weight
S_4	0.30163878	0.30163878	0.90444905	π/6
	0.90444905	0.30163878	0.30163878	π/6
	0.30163878	0.90444905	0.30163878	π/6
B_4	0.38490018	0.38490018	0.83491245	π/6
	0.83491245	0.39341207	0.38490018	π/6
	0.39341207	0.83491245	0.38490018	π/6

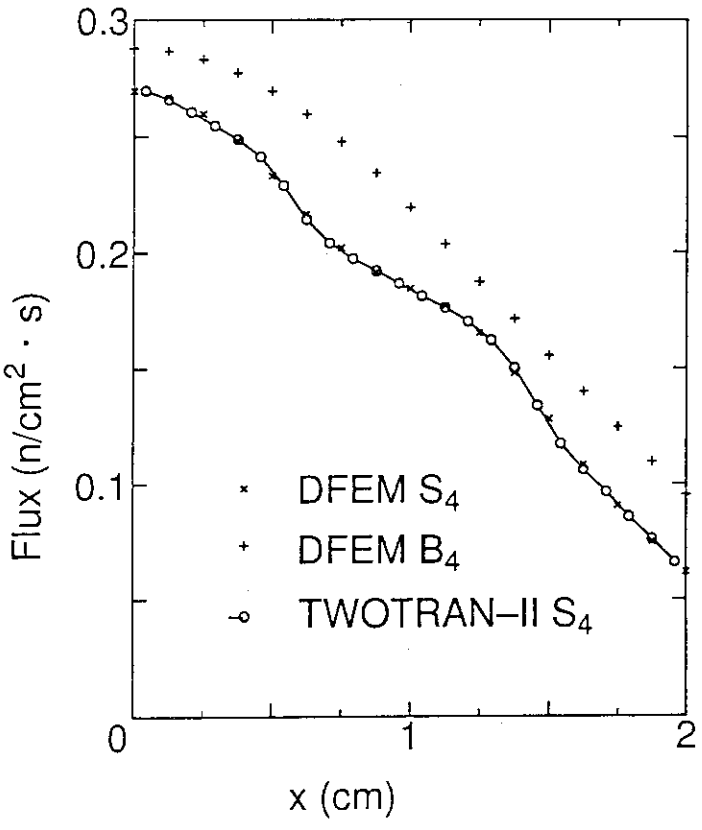


Fig. 16 Comparison of fluxes in ray effect problem at $y = 1.875\,cm$

Fig. 19 は３ケースの模擬制御棒挿入状態を示したもので、ドロワ内のセルは分割面から順に記号 1Z ~ 16Z で表示される。例えば、部分挿入の場合、固定側 16Z から 7Z まで制御棒が挿入され、6Z から -16Z までは Na 板が装填されている。

ベンチマーク問題の項目としては、U-235 の核反応率分布を採り上げる。Fig. 20 は３ケースの制御棒挿入状態における、制御棒位置の隣 (27,126) の z 方向の分布を示したもので、z = -27.94 cm で正規化されている。図では、○印等の記号で示されているのが実験値であり、制御棒挿入による分布の歪みが表れている。線で示されているのは、DFEM コードによる計算値である。計算は３群、P_0, 3240 要素で行った。参考炉心および半挿入炉心の場合は良い一致が見られるが、半挿入の場合、内側ブランケット (I. B.) で最大約 5% の過小評価になっている。また、内側ブランケットと炉心との境界における段差は異なる微視断面積を用いるために起るものである。

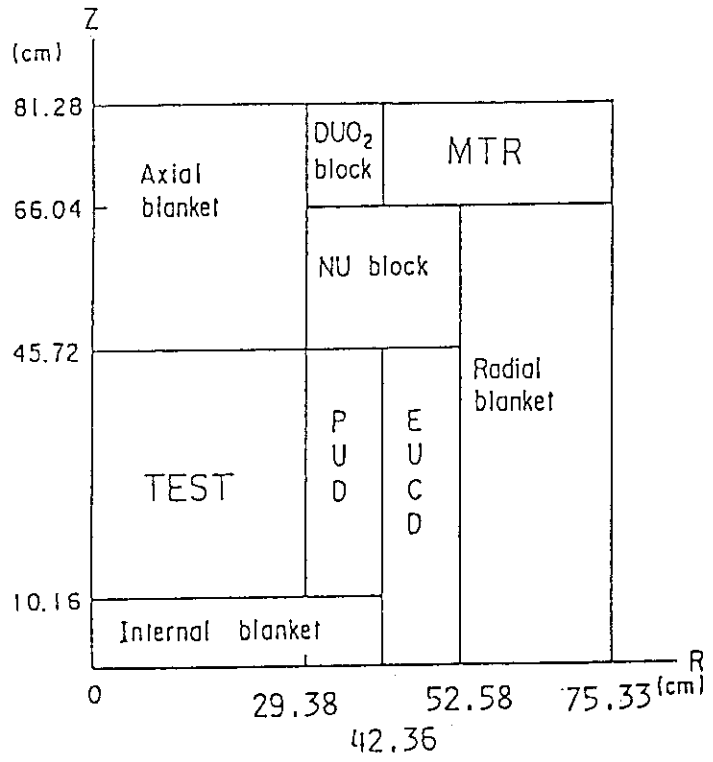
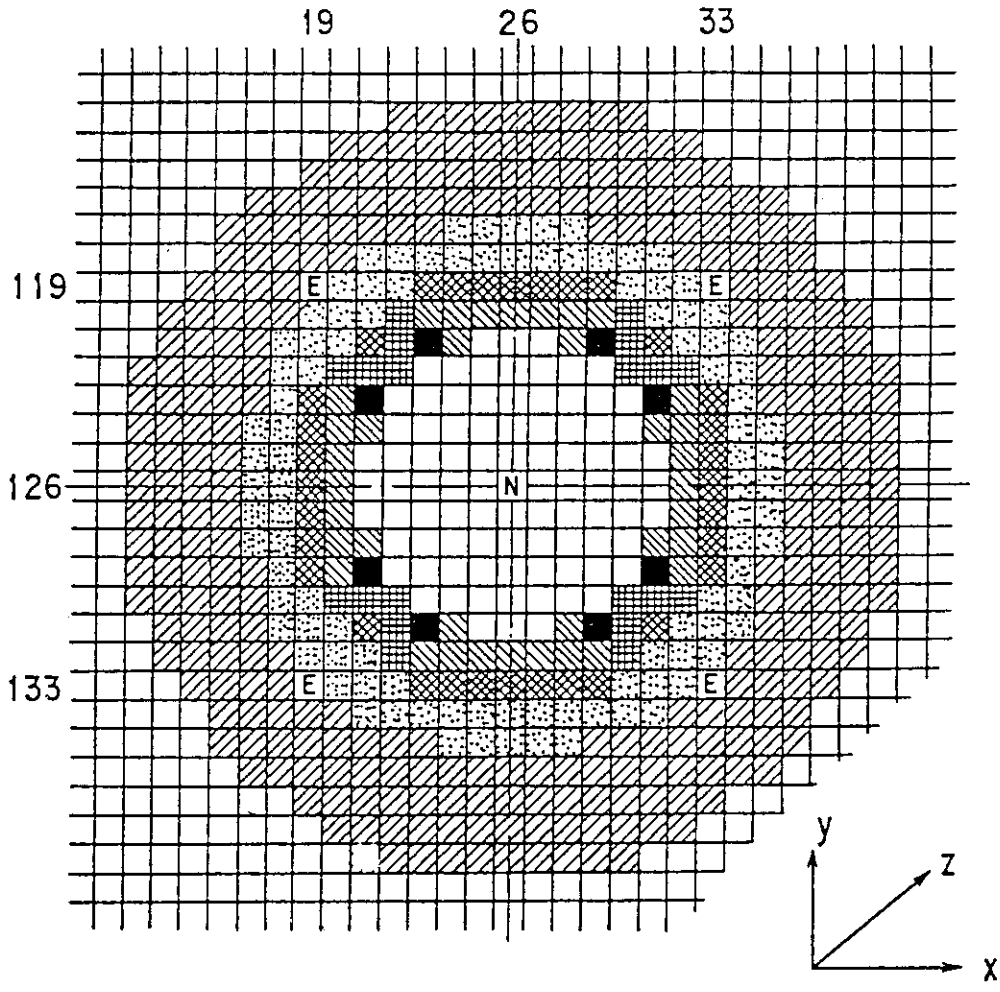


Fig. 17 (r,z) model of the FCA XII-1 assembly



□	T2B2
▦	PD92B
▧	PD81B
▩	PUDB
■	CRSR
⁘	EUCD

▨	DUB
E	EUCD
N	CRNI

Fig. 18 Cross sectional view of the fixed side of the reference core

Table 3 Replacement of drawers in various control rod patterns

Position	Case 1. Na follower insertion	Case 2. B_4C partial insertion	Case 3. B_4C half insertion
Fixed side			
(26,126)	CRNI	CRPI	CRBI
(19,119)	EUCD	EUCD	EUCD
(33,119)	〃	〃	〃
(19,133)	〃	〃	〃
(33,133)	〃	〃	〃
Movable side			
(26,126)	CRNI	CRNI	CRNI
(19,119)	DUB	DUB	EUCD
(33,119)	〃	〃	〃
(19,133)	〃	〃	〃
(33,133)	〃	〃	〃

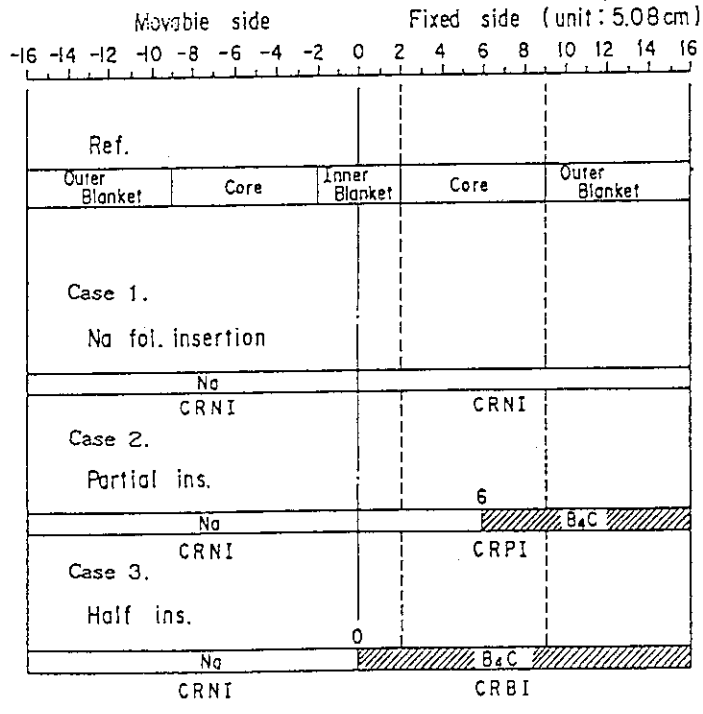


Fig. 19 Three cases of the control rod insertion problem

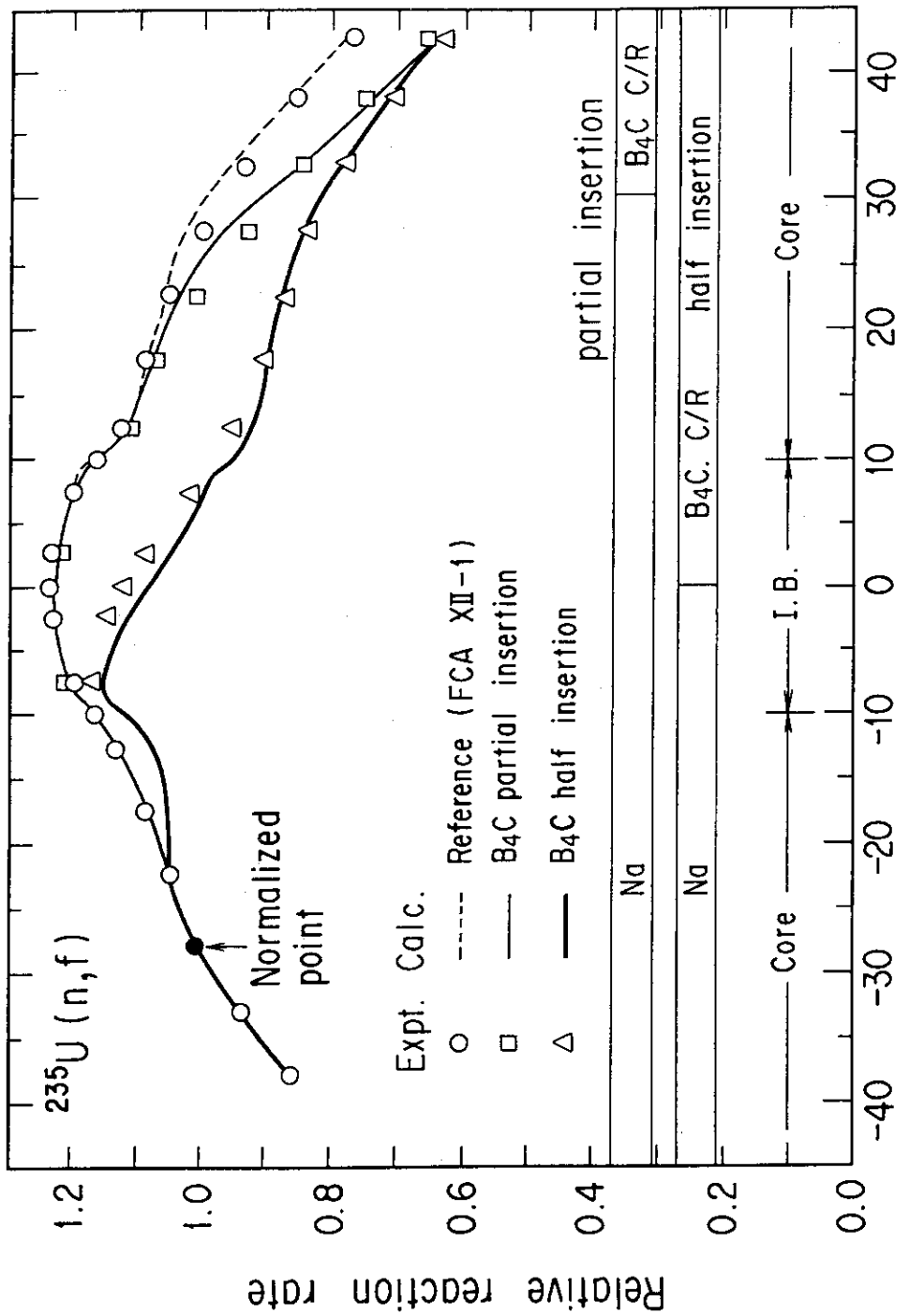


Fig. 20 Axial ^{235}U fission rate distributions at various states of control rod insertion

Fig. 21 は部分挿入の場合の結果を様々な３次元コードと比較したもので、□印は実験値である。拡散コードの CITATION[35] で用いる拡散係数は JOINT コード[36]で縮約した。CITATIONでのメッシュは、プロットの便と DFEM との比較のため 14 × 14 × 32 （メッシュ幅は約 5cm ）とやゝ粗くなっているかも知れないが、ブランケットと炉心の境界における段差については、図にも見られるように DFEM と同様の傾向を示した。また、図には示されていないが、半挿入の場合も DFEM と同様に過小評価を与えた。このことは、現在用いている３群の断面積による厳密解が実験値よりかなり離れている可能性を示しており、詳細メッシュ計算や別のコードとの対比が次の課題となる。換言すれば、実験のより正しい解析という意味ではもう少し多群の計算が必要かも知れない。

一方、太線で示されるモンテカルロ・コード MORSE-DD[37] の結果は 1 セル 1 領域に取って track length estimator を用いて評価したものであり、ヒストリー数は 36000 である。炉心部では、最大 8% の統計誤差があり、差が見られるもののブランケット部では良い一致を示している。従って、ヒストリー数を増やせば、更に良い推定値を与えるものと思われる。

vi) NEA ベンチマーク問題

OECD/NEA ベンチマーク問題は Takeda ら[19] により提唱されたもので、輸送効果が重要な役割を果たす。 Fig. 22 はその内の Model 1 と呼ばれるもので、Case 1 、Case 2 はそれぞれ、制御棒を引き抜いた（ボイドの）場合と制御棒を挿入した場合であり、２群、P_0 計算を他の解法による３次元コードと比較する。Table 4 は DFEM による様々な空間メッシュに対する固有値を示したものであり、例えば最初の欄は要素の大きさの平均が $(5.0\ cm)^3$ であることを表わしている。

一方、Table 5 は様々な解法による固有値と制御棒価値を示したものである。二重有限要素法以外の解法では、同一解法の異なったコードによる外挿値[19]の平均が与えられており、参考にするモンテカルロ法の標準偏差はせいぜい 0.0005 Δk である。一般的に制御棒領域での空間メッシュ効果は重要であるが、この傾向は DFEM の Case 2 の結果にも明らかに見受けられる。この差異は不充分な外挿によるもので、その理由は、計算機資源の制約から S_4 による充分細かいメッシュの計算が出来ないことから来るのものである。

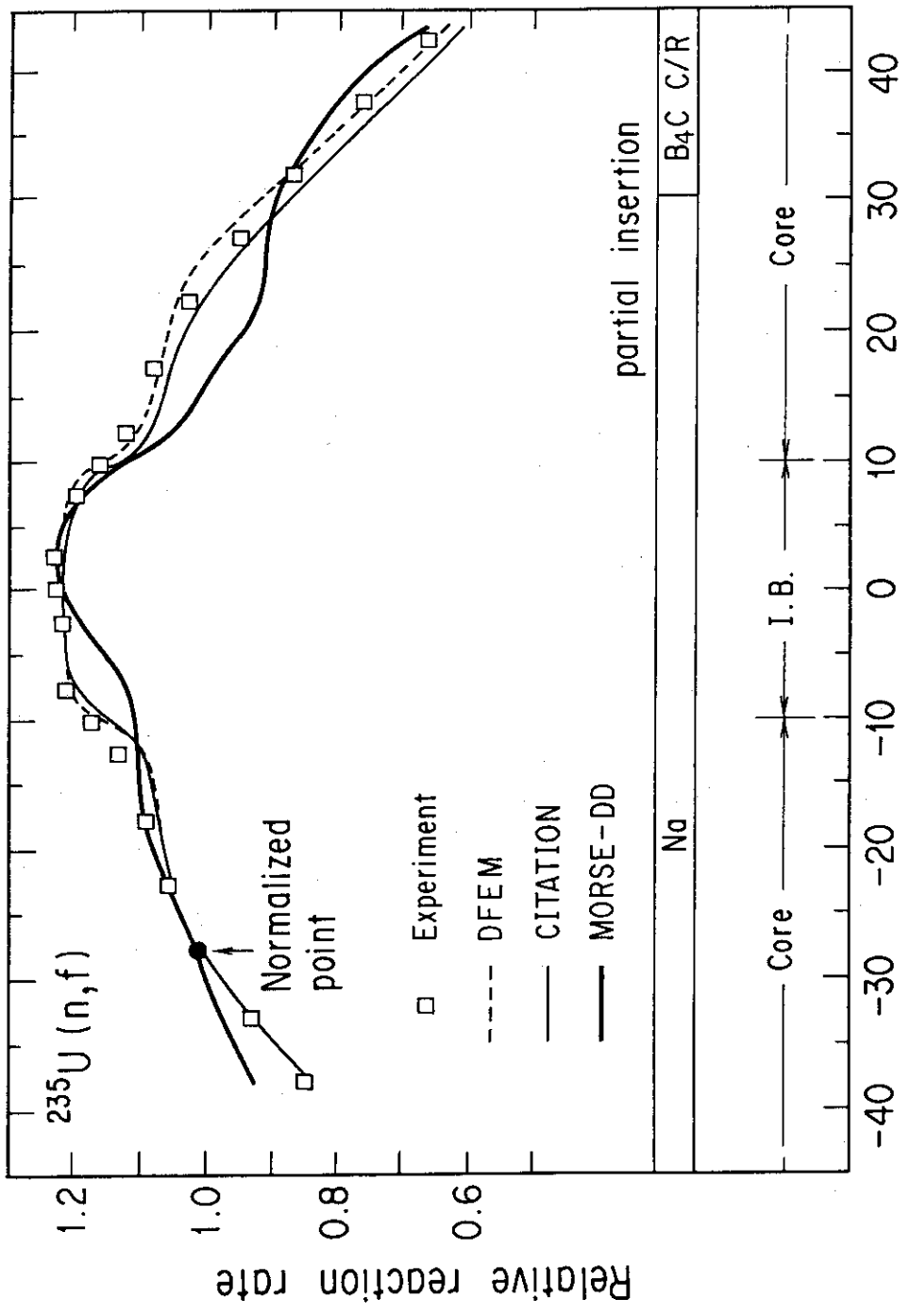


Fig. 21 Axial ^{235}U fission rate distribution at the partial control rod insertion

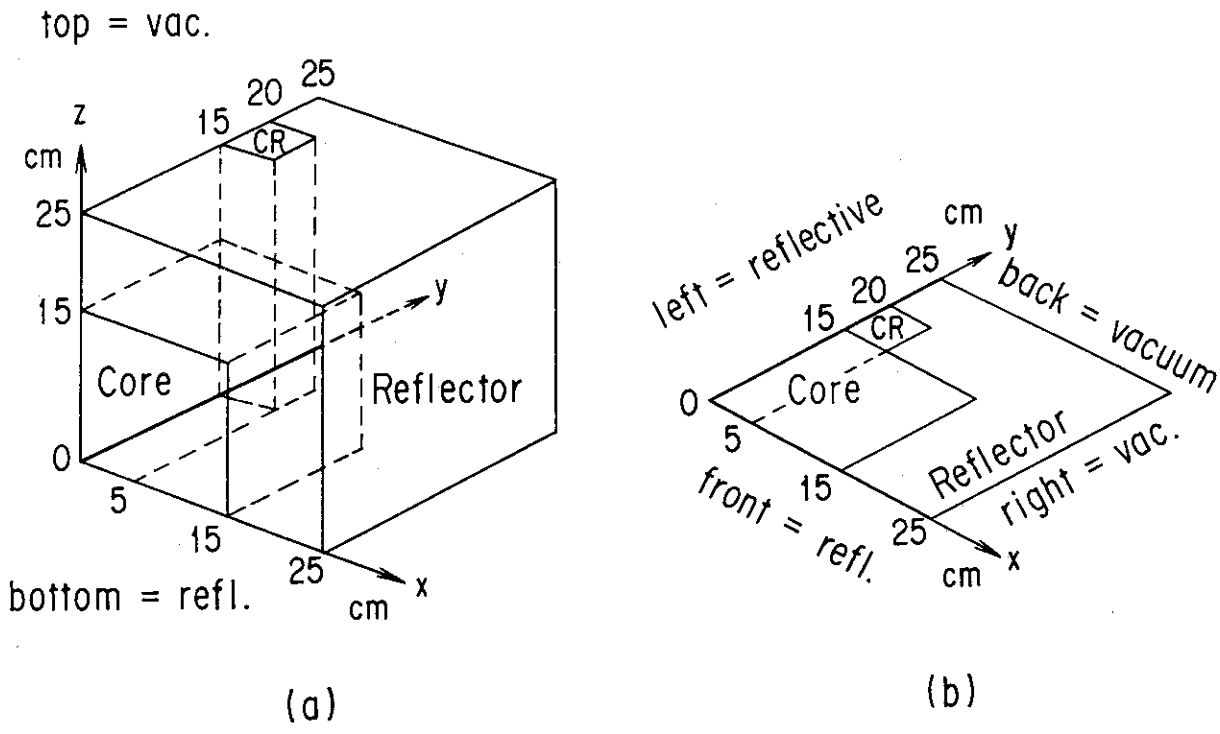


Fig. 22 Reactor configuration of small LWR problem in OECD/NEA-CRP benchmarks
(The flux is compared along the bold line.)
(a) Bird's-eye view (b) (x,y) section at bottom

Table 4 k_{eff}'s of a small LWR problem obtained by the present code with various spatial meshes

Case	1	1	1	2	2	2
Spatial mesh size (cm)	5.0	1.876	1.7857	5.0	1.876	1.7857
k_{eff}	0.99061	0.98046	0.97766	0.97694	0.96648	0.96485

Table 5 Comparion of k_{eff}'s of a small LWR problem with other methods

Method	Case 1	Case 2	CR-worth
Monte Carlo	0.9778	0.9624	1.64E-2
S_n	0.9772	0.9623	1.58E-2
DFEM S_4	0.9772 (-0.06)*	0.9639 (0.16)	1.41E-2 (-14.02)

* The numbers in parentheses are the percent difference from the Monte Calro method.

Fig. 22 に示された位置で Case 2 の場合の両群の中性子束を比較したのが Fig. 23 および 24 である。こゝに、DFEM の折れ線はそれぞれの角度のメッシュに対する最も細かい空間メッシュによる結果であり、他の折れ線は固有値と同様、解法ごとの平均値である。一般に、制御棒領域における角度のメッシュ効果はさほど重要でないが、DFEM の S_2 による両群の中性子束は、炉心中央部で他の解法に比べ大きくなっている。このことは、例え細かい空間メッシュを用いても S_2 では不充分で、S_4 を用いればより粗いメッシュでも解が改善されることが示されている。

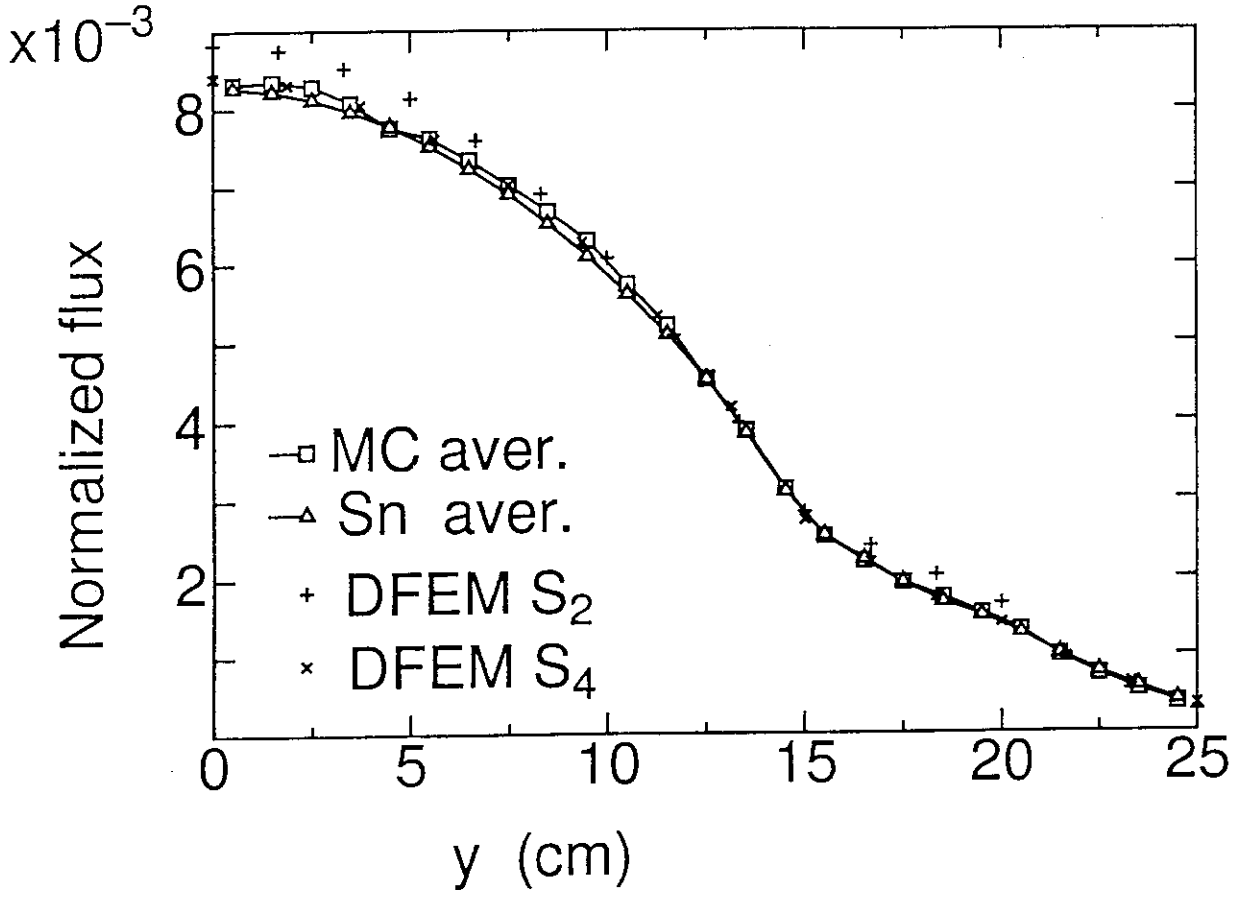


Fig. 23 Comparison of the first group fluxes in rod-in case of small LWR problem (The DFEM S_2 and S_4 calculations were performed with average element size of $(1.6667\text{cm})^3$ and $(1.7857\text{cm})^3$, respectively.)

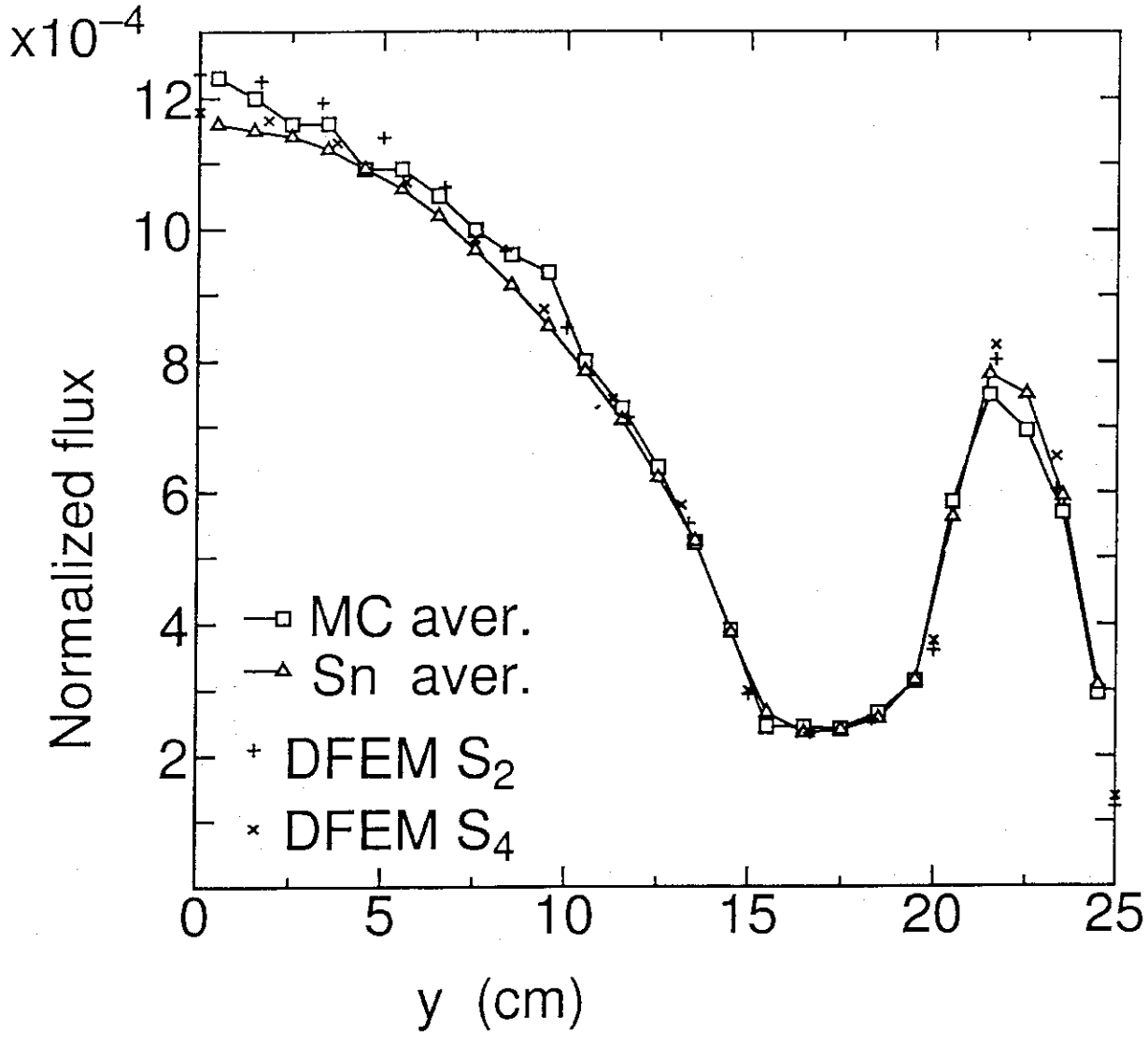


Fig. 24 Comparison of the second group fluxes in rod-in case of small LWR problem

5. あ と が き

二重有限要素法による３次元中性子輸送コード DFEM の機能の拡張と実用性を高めるためのコードの拡充と改良を行い、更に検証計算を行った。コードの利用範囲は、多群輸送方程式の固有値問題か中性子源問題を多角柱形状体系に対して解くものとするが、今回のコードの改良は高速炉の炉心解析に主眼を置いている。

数値解法としては、様々な方法が考えられたが、実際に一つ一つこれらを適用して比較研究を行った結果、変分法により偶数パリティ中性子束を求め、これを用いて選点法により奇数パリティ中性子束を求める方法に落ち着いた。空間変数に対する基底関数は１次式に固定されているが、精度の向上は要素数を増やすことにより達成できる。一方、角度変数に対しては様々な基底関数を検討したが、現時点では分点数が簡単に変えられる階段型のものが適用し易いと考えられる。特に、高速炉の解析には S_4 相当のもので充分であり、これがオプションで指定できるようになっている。

このような改良の成果としては、解法の定着により、計算時の作業用ファイルが大幅に整理できたこと、コードのベクトル化の経験では、簡単な修正により ３ ～ ８ 倍の高速化が得られることが判明したこと、一般的な境界打切り誤差解消法により物理的に正しい角度中性子束が得られるようになったこと、現実規模の原子炉の問題がまずまずのコストと精度で求まるようになったこと等が掲げられる。また、炉心解析コードとして必要な要素自動分割機能、核データの汎用的な format による入力機能、中性子束分布、出力分布、反応率分布等の特性値の編集機能等も整備されている。

本コードの検証は、先に述べたように、高速炉を模擬した様々な体系を用いて行い、妥当な解が得られた。また、FCA XII-1 集合体による他のコードとの比較では、計算しにくい核分裂反応率分布に対し、現実的なコストでモンテカルロ法と同様に安定して求める見通しが得られた。このことは、同じ不規則形状を扱う輸送コードとしての一つの長所が確証されたと言えよう。今後はより効率的なベクトル化や並列化による高速化が主な課題となろう。

謝 辞

先端基礎研究センター・中原康明博士および動力炉・核燃料開発事業団・白方敬章博士には、この研究の間、絶えざる激励と助言を仰ぎ、深く感謝します。

5. あ と が き

二重有限要素法による３次元中性子輸送コード DFEM の機能の拡張と実用性を高めるためのコードの拡充と改良を行い、更に検証計算を行った。コードの利用範囲は、多群輸送方程式の固有値問題か中性子源問題を多角柱形状体系に対して解くものとするが、今回のコードの改良は高速炉の炉心解析に主眼を置いている。

数値解法としては、様々な方法が考えられたが、実際に一つ一つこれらを適用して比較研究を行った結果、変分法により偶数パリティ中性子束を求め、これを用いて選点法により奇数パリティ中性子束を求める方法に落ち着いた。空間変数に対する基底関数は１次式に固定されているが、精度の向上は要素数を増やすことにより達成できる。一方、角度変数に対しては様々な基底関数を検討したが、現時点では分点数が簡単に変えられる階段型のものが適用し易いと考えられる。特に、高速炉の解析には S_4 相当のもので充分であり、これがオプションで指定できるようになっている。

このような改良の成果としては、解法の定着により、計算時の作業用ファイルが大幅に整理できたこと、コードのベクトル化の経験では、簡単な修正により ３ ～ ８ 倍の高速化が得られることが判明したこと、一般的な境界打切り誤差解消法により物理的に正しい角度中性子束が得られるようになったこと、現実規模の原子炉の問題がまずまずのコストと精度で求まるようになったこと等が掲げられる。また、炉心解析コードとして必要な要素自動分割機能、核データの汎用的な format による入力機能、中性子束分布、出力分布、反応率分布等の特性値の編集機能等も整備されている。

本コードの検証は、先に述べたように、高速炉を模擬した様々な体系を用いて行い、妥当な解が得られた。また、FCA XII-1 集合体による他のコードとの比較では、計算しにくい核分裂反応率分布に対し、現実的なコストでモンテカルロ法と同様に安定して求める見通しが得られた。このことは、同じ不規則形状を扱う輸送コードとしての一つの長所が確証されたと言えよう。今後はより効率的なベクトル化や並列化による高速化が主な課題となろう。

謝 辞

先端基礎研究センター・中原康明博士および動力炉・核燃料開発事業団・白方敬章博士には、この研究の間、絶えざる激励と助言を仰ぎ、深く感謝します。

参 考 文 献

1) Blomquist R.N., Lell R.M. and Gelbard E.M. : ORNL/RSIC-44 (1980)
2) Nakagawa M., Mori T. and Sasaki M. : "Proc. Int. Conf. Supercomputing in Nuclear Applications", Mito, 183 (1991).
3) Nishimura T., Tada K.,Yokobori H. and Sugawara A. : J. Nucl. Sci. Technol. (Tokyo), 17, 539 (1980)
4) Bando M., Yamamoto T., Saito Y. and Takeda T. : J. Nucl. Sci. Technol. (Tokyo), 22, 841 (1985).
5) O'Dell R.D., Brinkley F.W., Marr D.R. and Alcouffe R.E. : LA-9184-M Rev. (1989).
6) Lawrence R.D. : Prog. Nucl. Ener. 18, 101 (1986).
7) Fletcher J.K. : RTS-R-002 (1988).
8) Fujimura T. : Comp. Phy. Comm. 82, 111 (1994).
9) Lathrop K.D. and Brinkley F.W. : LA-4848-MS (1973).
10) Lathrop K.D. : Nucl. Sci. Eng., 45, 255 (1971).
11) Zienkiewicz O.C. and Cheung Y.K. : "The Finite Element Method in Structural and Continuum Mechanics", McGraw-Hill, New York (1967).
12) Ohnishi T. : CONF-710302, 723 (1971).
13) Kaper H.G., Leaf G.K. and Lindeman A.J. : ANL-8126 (1974).
14) 藤村統一郎,中原康明： "三次元中性子輸送問題を解くガレルキン型の二重有限要素法アルゴリズム", JAERI-M 83-144 (1983)
15) Kaplan S. and Davis A. : Nucl. Sci. Eng., 28, 166 (1967).
16) Ackroyd R.T. : Ann. Nucl. Ener., 9, 95 (1982).
17) Briggs L.L., Miller W.F.Jr. and Lewis E.E. : Nucl. Sci. Eng., 57, 205 (1975).
18) Gloudeman J.F. : "Proc. IEEE", Vol. 72, No. 1 (1984).
19) Takeda T. and Ikeda H. : J. Nucl. Sci. Technol. (Tokyo), 28, 656 (1991).
20) Fujimura T., Nakahara Y. and Matsumura M. : "Proc. Sixth Int. Conf. Radiation Shielding", Tokyo, 302 (1983).
21) Tomlinson E.T. and Robinson J.C. : Nucl. Sci. Eng., 63, 167 (1976).
22) De Oliveira C.R.E. : Prog. Nucl. Ener., 18, 227 (1986).
23) Issa J.G., et al. : Prog. Nucl. Ener., 18, 251 (1986).
24) T. Ise T., T. Yamazaki T. and Nakahara Y. : "A Computer Program for Solving Three-Dimensional Neutron Diffusion Equation by the Finite Element Method", JAERI-1256 (1978).
25) Fujimura T. and Matsui Y. : Nucl. Sci. Eng., 77 360 (1981).
26) 飯島進,他： "FCA による大型軸方向非均質炉心の炉物理研究 (Ⅲ) FCA XII-1 集合体による実験と解析", JAERI-M 85-045 (1985).
27) Fletcher J.K. : Nucl. Sci. Eng., 84 33 (1983).
28) Fowler T.B. and Tobias M.L. : ORNL-4078 (1967).

29) Grenfell D.T. : "Workshop Seminar on Finite Element Multi-Dimensional Diffusion Codes", Saclay, France 15-16, Sep. (1983).
30) Lafore P. : 私信 (1982).
31) Wagner M.R. : GA-8307 (1968).
32) Takano H., et al. : "JAERI Fast Reactor Group Constants Set Version II", JAERI 1255 (1978).
33) Kaper H.G., Leaf G.K. and Lindeman A.J. : ANL-7925 (1972).
34) 藤村統一郎,笹本宣雄,小手川洋 : "三次元輸送コードのベンチマーク問題の提案", in JAERI-M 86-178 (1986)
35) Fowler T.B. Vondy D.R. and Cunningham G.W. : ORNL-TM-2496 (Rev. 2) (1971).
36) 中川正幸,阿部純一,佐藤若英 : "高速炉の核特性解析コードシステム", JAERI-M 83-066 (1983).
37) Nakagawa M. and Mori T. : "MORSE-DD A Monte Carlo Code Using Multi-Group Double Differential Form Cross Sections", JAERI-M 84-126 (1980)

付録A　偶数パリティ方程式とその係数

方程式は

$$ {}^{e}A^{g}\,{}^{e}C^{g} = {}^{e}b^{g}, $$

であり、こゝに

$$ {}^{e}A^{g} = {}^{e}A_1^{g} + {}^{e}A_2^{g} + {}^{e}A_3^{gg} + {}^{e}A_4^{gg} + {}^{e}A_5, $$

$$ {}^{e}b^{g} = -\frac{1}{2}\left(\sum_{g'\neq g}^{G} {}^{e}A_6^{g'g}\,{}^{o}C^{g'} + {}^{e}A_7^{g}\,{}^{o}q^{g} + \sum_{g'\neq g} {}^{e}A_8^{g'g}\,{}^{e}C^{g'} + \sum_{g'=1}^{G} {}^{e}A_9^{g'g}\,{}^{e}C^{g'} + {}^{e}A_{10}\,{}^{e}q^{g} + \sum_{g'\neq g} {}^{e}A_{11}^{g'g}\,{}^{o}C^{g'} + {}^{e}A_{12}^{gg}\,{}^{o}q^{g} \right) $$

である。各行列の成分は以下に与えられる。

$$ \begin{aligned} ({}^{e}A_1^{g})_{iji'j'} = {} & \left\langle \frac{1}{\sigma_t^g}\frac{\partial\phi_i}{\partial x}\frac{\partial\phi_{i'}}{\partial x}\right\rangle\langle\mu^2\,{}^{e}\zeta_j\,{}^{e}\zeta_{j'}\rangle + \left\langle \frac{1}{\sigma_t^g}\frac{\partial\phi_i}{\partial y}\frac{\partial\phi_{i'}}{\partial y}\right\rangle\langle\eta^2\,{}^{e}\zeta_j\,{}^{e}\zeta_{j'}\rangle \\ & + \left\langle \frac{1}{\sigma_t^g}\frac{\partial\phi_i}{\partial z}\frac{\partial\phi_{i'}}{\partial z}\right\rangle\langle\xi^2\,{}^{e}\zeta_j\,{}^{e}\zeta_{j'}\rangle \\ & + \left\langle \frac{1}{\sigma_t^g}\left(\frac{\partial\phi_i}{\partial x}\frac{\partial\phi_{i'}}{\partial y}+\frac{\partial\phi_i}{\partial y}\frac{\partial\phi_{i'}}{\partial x}\right)\right\rangle\langle\mu\eta\,{}^{e}\zeta_j\,{}^{e}\zeta_{j'}\rangle \\ & + \left\langle \frac{1}{\sigma_t^g}\left(\frac{\partial\phi_i}{\partial x}\frac{\partial\phi_{i'}}{\partial z}+\frac{\partial\phi_i}{\partial z}\frac{\partial\phi_{i'}}{\partial x}\right)\right\rangle\langle\mu\xi\,{}^{e}\zeta_j\,{}^{e}\zeta_{j'}\rangle \\ & + \left\langle \frac{1}{\sigma_t^g}\left(\frac{\partial\phi_i}{\partial y}\frac{\partial\phi_{i'}}{\partial z}+\frac{\partial\phi_i}{\partial z}\frac{\partial\phi_{i'}}{\partial y}\right)\right\rangle\langle\eta\xi\,{}^{e}\zeta_j\,{}^{e}\zeta_{j'}\rangle, \end{aligned} $$

$$ ({}^{e}A_2^{g})_{iji'j'} = \langle\sigma_t^g\phi_i\phi_{i'}\rangle\langle\,{}^{e}\zeta_j\,{}^{e}\zeta_{j'}\rangle, $$

$$ ({}^{e}A_3^{gg})_{iji'j'} = \sum_{lm}^{even}(-4\pi)\langle\sigma_{sl}^{gg}\phi_i\phi_{i'}\rangle\langle Y_{lm}\,{}^{e}\zeta_j\rangle\langle\overline{Y}_{lm}\,{}^{e}\zeta_{j'}\rangle, $$

$$ \begin{aligned} ({}^{e}A_4^{gg})_{iji'j'} = {} & \sum_{lm}^{odd} 4\pi\times \\ & \left\{\left\langle\frac{\sigma_{sl}^{gg}}{\sigma_t^g(\sigma_t^g-\sigma_{sl}^{gg})}\cdot\frac{\partial\phi_i}{\partial x}\cdot\frac{\partial\phi_{i'}}{\partial x}\right\rangle\langle\mu Y_{lm}\,{}^{e}\zeta_j\rangle\langle\mu\cdot\overline{Y}_{lm}\,{}^{e}\zeta_{j'}\rangle\right. \\ & +\langle\quad"\quad\quad"\quad\frac{\partial\phi_{i'}}{\partial y}\rangle\langle\quad"\quad\rangle\langle\eta\quad"\quad\rangle \\ & \left.+\langle\quad"\quad\quad"\quad\frac{\partial\phi_{i'}}{\partial z}\rangle\langle\quad"\quad\rangle\langle\xi\quad"\quad\rangle\right. \end{aligned} $$

$$+\langle \quad " \quad \frac{\partial\phi_i}{\partial y}\frac{\partial\phi_{i'}}{\partial x}\rangle\langle\eta\, Y_{lm}\,{}^{e}\zeta_j\rangle\langle\mu \quad " \quad\rangle$$

$$+\langle \quad " \quad " \quad \frac{\partial\phi_{i'}}{\partial y}\rangle\langle \quad " \quad\rangle\langle\eta \quad " \quad\rangle$$

$$+\langle \quad " \quad " \quad \frac{\partial\phi_{i'}}{\partial z}\rangle\langle \quad " \quad\rangle\langle\xi \quad " \quad\rangle$$

$$+\langle \quad " \quad \frac{\partial\phi_i}{\partial z}\frac{\partial\phi_{i'}}{\partial x}\rangle\langle\xi\, Y_{lm}\,{}^{e}\zeta_j\rangle\langle\mu \quad " \quad\rangle$$

$$+\langle \quad " \quad " \quad \frac{\partial\phi_{i'}}{\partial y}\rangle\langle \quad " \quad\rangle\langle\eta \quad " \quad\rangle$$

$$+\langle \quad " \quad " \quad \frac{\partial\phi_{i'}}{\partial z}\rangle\langle \quad " \quad\rangle\langle\xi \quad " \quad\rangle\}$$

$$({}^{e}A_5)_{iji'j'} = \sum_{\Delta\Gamma_v}\langle\phi_i\phi_{i'}\rangle_{\Delta\Gamma_v}\langle|\Omega n|\;{}^{e}\zeta_j\,{}^{e}\zeta_{j'}\rangle,$$

$$({}^{e}A_6^{g'g})_{iji'j'} = \sum_{lm}^{odd}(-8\pi)\times\{\langle\frac{\sigma_{sl}^{g'g}}{\sigma_t^g}\frac{\partial\phi_i}{\partial x}\phi_{i'}\rangle\langle\mu\, Y_{lm}\,{}^{e}\zeta j\rangle\langle\bar{Y}_{lm}\,{}^{o}\zeta_{j'}\rangle$$

$$+\langle\frac{\sigma_{sl}^{g'g}}{\sigma_t^g}\frac{\partial\phi_i}{\partial y}\phi_{i'}\rangle\langle\eta\, Y_{lm}\,{}^{e}\zeta_j\rangle\langle\bar{Y}_{lm}\,{}^{o}\zeta_{j'}\rangle$$

$$+\langle\frac{\sigma_{sl}^{g'g}}{\sigma_t^g}\frac{\partial\phi_i}{\partial z}\phi_{i'}\rangle\langle\xi\, Y_{lm}\,{}^{e}\zeta_j\rangle\langle\bar{Y}_{lm}\,{}^{o}\zeta_{j'}\rangle\},$$

$$({}^{e}A_7^{g})_{iji'j'} = -2\times\{\langle\frac{1}{\sigma_t^g}\frac{\partial\phi_i}{\partial x}\phi_{i'}\rangle\langle\mu\;{}^{e}\zeta j\;{}^{o}\zeta_{j'}\rangle$$

$$+\langle\frac{1}{\sigma_t^g}\frac{\partial\phi_i}{\partial y}\phi_{i'}\rangle\langle\eta\;{}^{e}\zeta_j\;{}^{o}\zeta_{j'}\rangle+\langle\frac{1}{\sigma_t^g}\frac{\partial\phi_i}{\partial z}\phi_{i'}\rangle\langle\xi\;{}^{e}\zeta_j\;{}^{o}\zeta_{j'}\rangle\},$$

$$({}^{e}A_8^{g'g})_{iji'j'} = \sum_{lm}^{even}(-8\pi)\times\{\langle\sigma_{sl}^{g'g}\phi_i\phi_{i'}\rangle\langle Y_{lm}\,{}^{e}\zeta j\rangle\langle\bar{Y}_{lm}\,{}^{e}\zeta_{j'}\rangle,$$

$$({}^{e}A_9^{g'g})_{iji'j'} = \frac{-2\chi^g\nu}{\lambda}\langle\sigma_f^{g'}\phi_i\phi_{i'}\rangle\langle\,{}^{e}\zeta_j\rangle\langle\,{}^{e}\zeta_{j'}\rangle,$$

$$({}^{e}A_{10})_{iji'j'} = -2\langle\phi_i\phi_{i'}\rangle\langle\,{}^{e}\zeta_j\,{}^{e}\zeta_{j'}\rangle,$$

$$({}^{e}A_{11}^{g'g})_{iji'j'} = \sum_{lm}^{odd}(-8\pi)\times$$

$$\{\langle\frac{\sigma_{sl}^{gg}\sigma_{sl}^{g'g}}{\sigma_t^g(\sigma_t^g-\sigma_{sl}^{gg})}\cdot\frac{\partial\phi_i}{\partial x}\cdot\phi_{i'}\rangle\langle\mu\,.\,Y_{lm}\,{}^{e}\zeta_j\rangle\langle\bar{Y}_{lm}\,{}^{e}\zeta_{j'}\rangle$$

$$+\langle \quad " \quad \frac{\partial\phi_i}{\partial y} \quad "\rangle\langle\eta \quad " \quad\rangle\langle \quad " \quad\rangle$$

$$+\langle \quad " \quad \frac{\partial\phi_i}{\partial z} \quad "\rangle\langle\xi \quad " \quad\rangle\langle \quad " \quad\rangle\},$$

$$({}^{e}A_{12}^{gg})_{iji'j'} = \sum_{lm}^{odd}(-8\pi)\times$$

$$\{<\frac{\sigma_{sl}^{gg}}{\sigma_t^g(\sigma_t^g-\sigma_{sl}^{gg})}\cdot\frac{\partial\phi_i}{\partial x}\cdot\phi_{i'}><\mu\cdot Y_{lm}\,{}^{e}\zeta_j><\overline{Y}_{lm}\,{}^{o}\zeta_{j'}>$$

$$+<\quad"\quad\frac{\partial\phi_i}{\partial y}\quad">\!<\eta\quad"\quad>\!<\quad"\quad>$$

$$+<\quad"\quad\frac{\partial\phi_i}{\partial z}\quad">\!<\xi\quad"\quad>\!<\quad"\quad>\}\,.$$

こゝに、内積は $<u(r)>=\int_D u dr$ または $<u(\Omega)>=\frac{1}{4\pi}\int_S u d\Omega$ で定義される。

付録B　空間の基底関数の具体的表現

節点 i の３角柱要素内での局所的な番号を n とし、３角柱を構成する６つの節点の座標をそれぞれ、(x_1, y_1, z_1), (x_2, y_2, z_1), (x_3, y_3, z_1), (x_1, y_1, z_2), (x_2, y_2, z_2), (x_3, y_3, z_2) とすれば、その基底関数は

$$v_n^p(x,y,z) = \frac{z_2-z}{z_2-z_1} u_n^p(x,y) \quad for\ n \in bottom$$

$$= \frac{z-z_1}{z_2-z_1} u_{n-3}^p(x,y) \quad for\ n \in top$$

であり、こゝに、

$$u_1^p(x,y) = \{x_2y_3-x_3y_2+x(y_2-y_3)+y(x_3-x_2)\}/J_p,$$

$$u_2^p(x,y) = \{x_3y_1-x_1y_3+x(y_3-y_1)+y(x_1-x_3)\}/J_p,$$

$$u_3^p(x,y) = \{x_1y_2-x_2y_1+x(y_1-y_2)+y(x_2-x_1)\}/J_p,$$

$$J_p = x_1(y_2-y_3)+x_2(y_3-y_1)+x_3(y_1-y_2)$$

である。一方、４角柱要素の場合はその節点の座標を

(x_1, y_1, z_1), $(x2, y1, z1)$, $(x2, y2, z1)$, $(x1, y2, z1)$,
(x_1, y_1, z_1), $(x2, y1, z1)$, $(x2, y2, z1)$, $(x1, y2, z1)$,

とすれば、その基底関数は

$$v_n^b(x,y,z) = \frac{z_2-z}{z_2-z_1} u_n^b(x,y) \quad for\ n \in bottom$$

$$= \frac{z-z_1}{z_2-z_1} u_{n-4}^b(x,y) \quad for\ n \in top$$

である。こゝに、

$$u_1^b(x,y) = (x_2-x)(y_2-y)/J_b,$$

$$u_2^b(x,y) = (x-x_1)(y_2-y)/J_b,$$

$$u_3^b(x,y) = (x-x_1)(y-y_1)/J_b,$$

$$u_4^b(x,y) = (x_2-x)(y-y_1)/J_b,$$

$$J_b = (x_2-x_1)(y_2-y_1)$$

である。

付録C　3次スプラインによる角度の基底関数の具体的表現

最初に方位角 φ について考える。 φ の全領域 $[0,2\pi]$ を $h=\pi/2$ の刻みで4等分し、節点 $\varphi=h$ に対応する基底として

$$\lambda_2(\varphi) = \frac{(h-\varphi)^3}{h^3} - \frac{\varphi^3}{h^3} - \frac{(h-\varphi)}{h} + 2\frac{\varphi}{h} \quad on\ [0, h],$$

$$= -\frac{(2h-\varphi)^3}{h^3} - \frac{(h-\varphi)^3}{h^3} + 2\frac{(2h-\varphi)}{h} + \frac{(h-\varphi)}{h} \quad on\ [h, 2h],$$

$$= 0 \quad on\ [2h, 4h]$$

を定義する。他の節点 $\varphi=0, 2h, 3h$ に対する基底は φ 軸方向に h ずつ平行移動することにより得られる。

次に、天頂角 θ の余弦 $\xi=\cos\theta$ について考える。 ξ の全領域 $[-1,1]$ を刻み1で2等分し、節点 ξ_l $(l=1\sim3)$ に対応する基底 τ_l を次式で定義する。

$$\tau_1(\xi) = \xi^3 + (1+\xi)^3 - 2\xi - (1+\xi) \quad on\ [-1,0],$$

$$= 0 \quad on\ [0,1],$$

$$\tau_2(\xi) = \tau_1(-1-\xi) \quad on\ [-1,0],$$

$$= \tau_1(\xi-1) \quad on\ [0,1],$$

$$\tau_3(\xi) = 0 \quad on\ [-1,0],$$

$$= \tau_1(-\xi) \quad on\ [0,1].$$

このとき、 Ω_j $(j=1\sim6)$ に対応する基底は、

$$\chi_1=\tau_1,\quad \chi_j=\lambda_{j-1}\tau_2\ (j=2\sim5),\quad \chi_6=\tau_3$$

であてられる。

付録D　選点法における係数行列

$$
\begin{aligned}
({}^{o}A_1^{gg})^{\alpha}_{iji'j'} &= -\frac{1}{\sigma_t^g}\Big[\Big\{\mu_j\Big(\frac{\partial\phi_{i'}}{\partial x}\Big)_{\alpha}+\eta_j\Big(\frac{\partial\phi_{i'}}{\partial y}\Big)_{\alpha}+\xi_j\Big(\frac{\partial\phi_{i'}}{\partial z}\Big)_{\alpha}\Big\} \\
&\quad+\sum_{lm}^{odd}\Big(\frac{\sigma_{sl}^{gg}}{\sigma_t^g-\sigma_{sl}^{gg}}\Big)_{\alpha}Y_{lm}(\Omega_j)\Big\{\langle\mu\ {}^{e}\zeta_j\overline{Y}_{lm}\rangle\Big(\frac{\partial\phi_{i'}}{\partial x}\Big)_{\alpha} \\
&\quad+\langle\eta\ {}^{e}\zeta_j\overline{Y}_{lm}\rangle\Big(\frac{\partial\phi_{i'}}{\partial y}\Big)_{\alpha}+\langle\xi\ {}^{e}\zeta_j\overline{Y}_{lm}\rangle\Big(\frac{\partial\phi_{i'}}{\partial z}\Big)_{\alpha}\Big\}\Big] \qquad (j=j'), \\
&= -\frac{1}{\sigma_t^g}\Big[\sum_{lm}^{odd}\Big(\frac{\sigma_{sl}^{gg}}{\sigma_t^g-\sigma_{sl}^{gg}}\Big)_{\alpha}Y_{lm}(\Omega_j)\Big\{\langle\mu\ {}^{e}\zeta_{j'}\overline{Y}_{lm}\rangle\Big(\frac{\partial\phi_{i'}}{\partial x}\Big)_{\alpha} \\
&\quad+\langle\eta\ {}^{e}\zeta_{j'}\overline{Y}_{lm}\rangle\Big(\frac{\partial\phi_{i'}}{\partial y}\Big)_{\alpha}+\langle\xi\ {}^{e}\zeta_{j'}\overline{Y}_{lm}\rangle\Big(\frac{\partial\phi_{i'}}{\partial z}\Big)_{\alpha}\Big\}\Big] \qquad (j\neq j'),
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
({}^{o}A_2^{g'g})^{\alpha}_{iji'j'} &= \sum_{lm}^{odd}\Big(\frac{\sigma_{sl}^{g'g}}{\sigma_t^g-\sigma_{sl}^{gg}}\Big)_{\alpha}Y_{lm}(\Omega_j)\langle\overline{Y}_{lm}\ {}^{o}\zeta_{j'}\rangle \qquad (g\neq g',\ i=i'), \\
&= 0 \qquad (g\neq g',\ i\neq i'),
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
({}^{o}A_3^{gg})^{\alpha}_{iji'j'} &= \frac{1}{\sigma_t^g}\Big\{1+\sum_{lm}^{odd}\Big(\frac{\sigma_{sl}^{gg}}{\sigma_t^g-\sigma_{sl}^{gg}}\Big)_{\alpha}Y_{lm}(\Omega_j)\langle\overline{Y}_{lm}\ {}^{o}\zeta_j\rangle\Big\} \qquad (i=i',j=j'), \\
&= \sum_{lm}^{odd}\frac{1}{\sigma_t^g}\Big(\frac{\sigma_{sl}^{gg}}{\sigma_t^g-\sigma_{sl}^{gg}}\Big)_{\alpha}Y_{lm}(\Omega_j)\langle\overline{Y}_{lm}\ {}^{o}\zeta_{j'}\rangle \qquad (i=i',j\neq j'), \\
&= 0 \qquad (i\neq i').
\end{aligned}
$$

付録E　サンプル入力例

i) ジョブ制御文

```
     C(03) T(03) I(03) W(00) E(00) MSGLEVEL(2,0)
//*---  < DFEM >   FCA V-2  2-GR., S2, (2+2,2+2,2+2) ET. CALCULATION
//ST1 EXEC FORTEX,SO='JNNNN.DFEMTP',Q='.FORT',DISP=MOD,
//         A='NOS,ELM(MAINC3)'
//ST2 EXEC LKEDITEX,LM='JNNNN.DFEMLM',Q='.LOAD'
//ST3 EXEC GOEX
//FT05F001 DD DSN=JNNNN.DFEMIN.DATA(FCAV2REP),DISP=SHR
//*T12F001 DD DSN=JNNNN.FCAV2RST.DATA,DISP=OLD,
//*           DCB=(BLKSIZE=32760,LRECL=X,RECFM=VBS,DSORG=PS)
//FT12F001 DD DSN=&&UNI04,UNIT=WK10,SPACE=(TRK,(500,200),RLSE),
//            DISP=NEW,DCB=(BLKSIZE=32760,LRECL=X,RECFM=VBS,DSORG=PS)
//*-------------------------------------------------------------------
//FT01F001 DD DSN=&&UNI01,UNIT=WK10,SPACE=(TRK,(50,10),RLSE),
//            DISP=NEW,DCB=(BLKSIZE=32760,LRECL=X,RECFM=VBS,DSORG=PS)
//FT02F001 DD DSN=&&UNI02,UNIT=WK10,SPACE=(TRK,(50,10),RLSE),
//            DISP=NEW,DCB=(BLKSIZE=32760,LRECL=X,RECFM=VBS,DSORG=PS)
//FT03F001 DD DSN=&&UNI03,UNIT=WK10,SPACE=(TRK,(50,10),RLSE),
//            DISP=NEW,DCB=(BLKSIZE=32760,LRECL=X,RECFM=VBS,DSORG=PS)
//FT04F001 DD DSN=&&UNI04,UNIT=WK10,SPACE=(TRK,(500,200),RLSE),
//            DISP=NEW,DCB=(BLKSIZE=32760,LRECL=X,RECFM=VBS,DSORG=PS)
//FT06F001 DD SYSOUT=*,DCB=(RECFM=FBA,LRECL=137,BLKSIZE=137)
//FT07F001 DD DSN=&&UNI07,UNIT=WK10,SPACE=(TRK,(500,300),RLSE),
//            DISP=NEW,DCB=(BLKSIZE=32760,LRECL=X,RECFM=VBS,DSORG=PS)
//FT08F001 DD DSN=&&UNI08,UNIT=WK10,SPACE=(TRK,(500,300),RLSE),
//            DISP=NEW,DCB=(BLKSIZE=32760,LRECL=X,RECFM=VBS,DSORG=PS)
//FT09F001 DD DSN=&&UNI10,UNIT=WK10,SPACE=(TRK,(500,200),RLSE),
//            DISP=NEW,DCB=(BLKSIZE=32760,LRECL=X,RECFM=VBS,DSORG=PS)
//FT10F001 DD DSN=&&UNI10,UNIT=WK10,SPACE=(TRK,(500,200),RLSE),
//            DISP=NEW,DCB=(BLKSIZE=32760,LRECL=X,RECFM=VBS,DSORG=PS)
//FT11F001 DD DSN=&&UNI11,UNIT=WK10,SPACE=(TRK,(50,10),RLSE),
//            DISP=NEW,DCB=(BLKSIZE=32760,LRECL=X,RECFM=VBS,DSORG=PS)
//FT13F001 DD DSN=&&UNI13,UNIT=WK10,SPACE=(TRK,(500,200),RLSE),
//            DISP=NEW,DCB=(BLKSIZE=32760,LRECL=X,RECFM=VBS,DSORG=PS)
//FT14F001 DD DSN=&&UNI14,UNIT=WK10,SPACE=(TRK,(500,200),RLSE),
//            DISP=NEW,DCB=(BLKSIZE=32760,LRECL=X,RECFM=VBS,DSORG=PS)
//FT15F001 DD DSN=&&UNI15,UNIT=WK10,SPACE=(TRK,(50,10),RLSE),
//            DISP=NEW,DCB=(BLKSIZE=32760,LRECL=X,RECFM=VBS,DSORG=PS)
//FT16F001 DD DSN=&&UNI16,UNIT=WK10,SPACE=(TRK,(50,10),RLSE),
//            DISP=NEW,DCB=(BLKSIZE=32760,LRECL=X,RECFM=VBS,DSORG=PS)
//FT17F001 DD DSN=&&UNI17,UNIT=WK10,SPACE=(TRK,(50,10),RLSE),
//            DISP=NEW,DCB=(BLKSIZE=32760,LRECL=X,RECFM=VBS,DSORG=PS)
//FT18F001 DD DSN=&&UNI18,UNIT=WK10,SPACE=(TRK,(50,10),RLSE),
//            DISP=NEW,DCB=(BLKSIZE=32760,LRECL=X,RECFM=VBS,DSORG=PS)
//FT30F001 DD DSN=&&UNI30,UNIT=WK10,SPACE=(TRK,(50,10),RLSE),
//            DISP=NEW,DCB=(BLKSIZE=32760,LRECL=X,RECFM=VBS,DSORG=PS)
//FT34F001 DD DSN=&&UNI34,UNIT=WK10,SPACE=(TRK,(900,300),RLSE),
//            DISP=NEW,DCB=(BLKSIZE=32760,LRECL=X,RECFM=VBS,DSORG=PS)
//FT37F001 DD DSN=&&UNI37,UNIT=WK10,SPACE=(TRK,(900,300),RLSE),
//            DISP=NEW,DCB=(BLKSIZE=32760,LRECL=X,RECFM=VBS,DSORG=PS)
//FT38F001 DD DSN=&&UNI38,UNIT=WK10,SPACE=(TRK,(900,300),RLSE),
//            DISP=NEW,DCB=(BLKSIZE=32760,LRECL=X,RECFM=VBS,DSORG=PS)
//
```

ii) 入力データ

```
     2
      < DFEM >
          FCA-V-2  2-GR., S2, (2+2,2+2,2+2) ET. CALCULATION
 1$
           0          2          15          5          16          2
           2          2          -5          0          -5          5
           1          0          10         10           1          1
           0          1           1          1           1          0
           0          0           0          0           0          3
           5          5           4          5           6          0
           0          0           0          5           0          0
           0          0           0          0           0          0
           2          8  T
 2*
   1.0E-05         1.0E-4          1.2         1.0         0.5         16.0
   3.285E+10  T
 6*
 1I       0.0 1I     33.45        62.35
 7*
 1I       0.0 1I     33.45        62.35  T
 8$
           2          2
 9*
       30.48        30.48  T
10$
 4R         112R         2  T
11$
           1          2
           2          2  T
12*
   4.712E-03   5.633E-03   1.178E-02   2.175E-01   2.045E-01   0.0
   5.631E-03   1.042E-02   1.408E-02   3.469E-01   3.364E-01   5.647E-03
   1.971E-03   7.001E-03   4.927E-03   3.395E-01   3.258E-01   0.0
   6.292E-04   1.619E-02   1.573E-03   5.493E-01   5.331E-01   6.695E-03
  T
13*
   0.98877     0.01123    T
14$
           1          2          4          7          11  T
16$
          15         10          6          3           1  T
17$
 3I        11         15  T
18$
  F         1  T
19$
  F         1  T
23$
 3I         1          5  T
```