

JAERI-M
6 3 7 3

時間依存輸送方程式の数値解法アルゴリズムと
ベンチマークテストの現状

(空間依存動特性計算コードのベンチマークテスト・1)

1976年1月

伊勢 武治・堀上 邦彦・小林 健介

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

この報告書は、日本原子力研究所が JAERI-M レポートとして、不定期に刊行している研究報告書です。入手、複製などのお問合せは、日本原子力研究所技術情報部（茨城県那珂郡東海村）あて、お申しこしください。

JAERI-M reports, issued irregularly, describe the results of research works carried out in JAERI. Inquiries about the availability of reports and their reproduction should be addressed to Division of Technical Information, Japan Atomic Energy Research Institute, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken, Japan.

時間依存輸送方程式の数値解法アルゴリズムとベンチマーク
テストの現状

(空間依存動特性計算コードのベンチマークテスト・1)

日本原子力研究所東海研究所原子炉工学部

伊勢武治・堀上邦彦・小林健介⁺

(1975年12月25日受理)

空間依存動特性計算コードのベンチマークテストの指針を得るために、輸送理論に基づく動特性計算コードに対して、その数値解法のアルゴリズムとベンチマークテストの現状が調べられ、評価がなされた。拡散理論に基づくコードに比べて開発されているものは非常に少なく、1次元コードで3つ、2次元コードで1つ、公開されているのみである。

T A S K アルゴリズムに基づくものを除いては、時間に関してもダイヤモンド型差分の解法を用いているものが殆んどである。加速法としては、指数差分式によるもの、指数外挿法によるもの、リバランス法によるもの、などが用いられていて、小さい時間ステップに対しては特に指数外挿法が有効である。実在体系における輸送理論動特性コードのベンチマークテストは未だ行われていないので今後の課題であろう。空間については収束の速いアルゴリズム、時間については安定性が良くて速い方法、の開発が望まれる。

Present Status on Algorithms and Benchmark Tests for Numerical
Solution of the Time-Dependent Neutron Transport Equation
(Benchmark Tests on the Space-Dependent Neutron Kinetics Codes^{•1})

Takeharu ISE, Kunihiko HORIKAMI and Kensuke KOBAYASHI[†]

Division of Reactor Engineering, Tokai, JAERI

(Received December 25, 1975)

Review studies have been made on algorithms of numerical analysis and benchmark tests on neutron transport kinetics computer codes for performing efficient benchmark tests on space-dependent neutron kinetics codes.

At present, there are few transport kinetics codes available, compared with the diffusion kinetics codes: the programs are 3 one-dimensional codes and 1 two-dimensional code.

Two codes use TASK algorithm and almost of all other codes use algorithms based on the diamond difference method. Exponential difference, exponential extrapolation, coarse mesh rebalancing are adopted in some codes for accelerations. The exponential extrapolation technique is effective particularly in smaller time steps. Benchmark tests for practical problems have not yet been performed.

It is desirable to develop methods with a high convergence rate in space, and with a good stability and a high computing speed in time.

[†] Division of Power Reactor Projects, JAERI

目 次

1. 緒 言	1
2. 代表的な輸送理論動特性計算コードの数値解法アルゴリズム	3
2.1 TDA コードの方法	3
2.2 TIMEXコードの方法	6
2.3 TASK アルゴリズムを用いた方法	11
2.4 TRANZIT コードの方法	15
3. ベンチマーク・テストの現状	20
3.1 TDA コードのテスト	20
3.2 TIMEXコードのテスト	20
3.3 TASK アルゴリズムを用いたコードのテスト	26
3.4 TRANZIT コードのテスト	34
3.5 その他の方法によるコードのテスト	36
4. 結 言	47
文 献	49

Contents

1. Introduction	1
2. Algorithms of Numerical Analysis Used in Representative Neutron Transport Kinetics Codes	3
2.1 TDA Code	3
2.2 TIMEX Code	6
2.3 Codes on TASK Algorithm	11
2.4 TRANZIT Code	15
3. Present Status on Benchmark Tests	20
3.1 Tests of TDA Codes	20
3.2 Tests of TIMEX Codes	20
3.3 Tests of Codes on TASK Algorithm	26
3.4 Tests of TRANZIT Code	34
3.5 Tests of Codes on Other Methods	36
4. Conclusions	47
References	49

1 緒 言

原子炉の安全からも、最適設計の上からも、原子炉の不測の事故のときの時間的ふるまいを知っておくことは重要である。このような時間的ふるまいに対して、即効的に応答できることもあれば、そうできないときもある。我々のベンチマークテスト¹⁾の設定に際しては、即効的に応答できない様な炉心動特性（reactor transient）の様子を調べるために主眼をおくことにする。時間的变化がゆっくりな現象は、急激な現象と較べて数値解析上からも方法が異なり、また、困難さも少ない。したがって、Xenon 振動、燃焼度、最適制御、雑音、パルス中性子実験、および中性子波伝播、などの時間的变化の解析は原則として除外するが、ここでの輸送理論に基づく議論には、最後の 2 つも含める。また、解析的に解けるような問題も（実在体系に対しても不能であるが）除外する。^{9, 22)} このような訳で、我々の対象としているのは主に制御棒が突然移動するような時間的に急激な現象である。

空間的には変化しないとする 1 点近似による動特性解析は、温度などのフィードバックが簡単に入るので、数値解析上からも興味があるが、空間依存性を伴う実在体系には、この近似そのままでは適用することはできない。^{*} 一般には、空間依存動特性解析に頼らねばならないが、実用上からは多次元まで考えた拡散近似に基づく動特性解析で充分なことが多い。しかしながら、中性子の深度侵入問題（deep penetration problems），局所的ふるまいが強い場合、などのように輸送理論による方が適切なときには、時間依存輸送方程式を解かなければならぬ。これは、数値解析の立場からいえば容易なことではない。対象とする原子炉にもよるが、一般に中性子の速度は、 $2 \times 10^5 \sim 10^{10}$ cm/sec とかなり広い範囲に亘るので、解くべき微分方程式は硬い（stiff）系となってしまい数値解析上扱い難くなる。そして、時間ステップの数も非常に多く必要とする。また、拡散近似に対する時間依存微分方程式が楕円型（elliptic）であるのに対し、輸送理論の時間依存微分方程式は双曲型（hyperbolic）なので、拡散近似による方法が常に正の解（中性子束が）を示すのに反し、輸送理論による方法は必ずしも正の解を示さない。²⁾ したがって、時間ステップのとり方と、空間メッシュの切り方とは相互に関連性があり、これらのこと考慮して安定な解法が採られる。

このような訳で、第 2 章で示すように現在ある輸送理論に基づく動特性計算コードの数は非常に少ない。ここ数年間の多次元拡散近似の動特性計算コードの著しい発展に較べて、殆んど進展が見られない。^{4~7)} 公開されているコードも 2 次元が 1 つ（TRANZIT¹⁹⁾）で、あとは 1 次元が 3 つ（TDA¹⁰⁾, TIMEX^{11, 12)}, TASK^{13~15)}）である。また、解法の繁雑性から、TASK コードを除いては、遅発中性子を取り扱うことはできない（拡散近似に基づくコードでは、殆んど全すべてが遅発中性子の取り扱いができる）。

第 3 章で示すように、数値計算の例も非常に少ない。特に実在の体系に応用した例が少なく、計算結果の比較検討も殆どなされていない。僅かに、単純な体系において、TDA コードと

* 1 点近似の位置付け、準静的近似、およびその他の方法による動特性解析については、続報で論ずる予定である。

拡散近似による比較、TRANZIT コードと Monte Carlo 法 (MORSE コード) の比較がなされている。計算時間は、拡散近似に基づくコードより遙かに余計かかるので、解法アルゴリズムにおいて拡散近似による方法のときの経験が生かされている。いろいろな加速法による計算時間への影響が TIMEX コードを用いて調べられている。

このリポートでは数値解析上の詳細なアルゴリズムを述べるのが目的でないので、アルゴリズムについては簡単に記述した。数値計算例については、今後行われるベンチマークテストの指針を得る為にも、できるだけ記したつもりである。ここでの読者は既に定常状態における輸送理論に関する知識は持たれていると仮定しているので、本文中においては詳しい記号の定義は省略してある。適当な文献（例えば文献 26）を参照されたい。

2. 代表的な輸送理論動特性計算コードの数値解法アルゴリズム

計算コードの数が少ないので、各々の計算コード自身のアルゴリズムについて述べる。いづれの計算コードも空間分布の解法は S_N 法に基づくもので、時間も差分解法に基づくものである。TASK アルゴリズムに基づくものには TASK コードとそれを改良した TDT コードがある。TRANZIT コードは TDA の 2 次元（但し、R-Z 体系）への拡張に相当する。

2.1 TDA コードの方法 (Dupree et al)¹⁰⁾

S_N 法に基づく 1 次元差分輸送方程式は一般に次式で示される。

$$\frac{V}{v \Delta t} (N_{i+1} - N_i) + \mu (A_{i+1} N_{i+1} - A_i N_i) + \frac{1}{w} (\alpha_{m+1} N_{m+1} - \alpha_m N_m) + \Sigma V N = S V \quad (2.1)$$

ここに

Δt は時間ステップの巾

S は固定、核分裂および散乱を含む中性子源

他は S_N 法で普通に用いられている意味である。

TDA コードでは、重み（以下 a, b, c ）付き差分（weighted difference）が、時間、空間、および方向に対して採用されている。これらの重みは、解の精度と正の中性子束の保証のために選ばれる。重みが $1/2$ のときがダイヤモンド差分（diamond difference）である。重み付き差分は次式で与えられる。

$$\left. \begin{aligned} N &= a N_{i+1} + (1-a) N_i \\ &= b N_{i+1} + (1-b) N_i \\ &= c N_{m+1} + (1-c) N_m \end{aligned} \right\} \quad (2.2)$$

(2.1) と (2.2) 式から

$$N_{i+1} = \frac{S V + C_2 N_i + C_3 N_m + [V/(v \Delta t) - (1-a) D_1] N_i}{a D} \quad (2.3)$$

$$N_{i+1} = \frac{S V + C_1 N_i + C_3 N_m + [\mu A_i - (1-b) D_2] N_i}{b D} \quad (2.3)$$

$$N_{m+1} = \frac{S V + C_1 N_t + C_2 N_i + [\alpha_m / w - (1-c) D_3] N_m}{c D} \quad (2.3)$$

ここに

$$C_1 = \frac{V}{v \Delta t a}$$

$$C_2 = \mu [A_i + A_{i+1} (\frac{1}{b} - 1)]$$

$$C_3 = \frac{\alpha_m}{w} + \frac{\alpha_{m+1}}{w(1/c - 1)}$$

$$D = \Sigma V + C_1 + \frac{\mu A_{i+1}}{b} + \frac{\alpha_{m+1}}{w c}$$

$$D_1 = D - C_1$$

$$D_2 = D - \frac{\mu A_{i+1}}{b}$$

$$D_3 = D - \frac{\alpha_{m+1}}{w c}$$

中性子源と前回の反復から得られた中性子束が正であっても、中性子束は必ずしも正でない。すなわち、散乱断面積の計算の際、Legendre 展開を有限項で打ち切るが、このことから、中性子束が必ずしも正でなくなる。中性子束が正であることの保証は(2.3)式でいえば、各々の式の分子の[]内が正であることである。Lathrop はこれらの条件式の近似式として、等方散乱に対して成り立つ次の式を導いた。

$$\left. \begin{aligned} 1-a &= \frac{\frac{V}{v \Delta t}}{\Sigma V + 2 \mu A_{i+1} + 2 \frac{\alpha_{m+1}}{w}} \\ 1-b &= \frac{\mu A_i}{\Sigma V + 2 \frac{V}{v \Delta t} + 2 \frac{\alpha_{m+1}}{w}} \\ 1-c &= \frac{\frac{\alpha_m}{w}}{\Sigma V + 2 \frac{V}{v \Delta t} + 2 \mu A_{i+1}} \end{aligned} \right\} \quad (2.4)$$

この結果と、今までの TDA コード作成の際の経験とから、 a, b, c は 0.5 より大きいが 0.5 に近い値の方が精度上から望ましいことがわかっている。結局、これらの経験をふまえて、TDA コードでは重み a, b, c の選び方に対する式として、次式が採用されている。

$$\begin{aligned}
 1 - a &= \frac{\frac{V}{v\Delta t} + \frac{SV}{N_t}}{\Sigma V + 2\mu A_{i+1} + 2\frac{\alpha_{m+1}}{w}} \\
 1 - b &= \frac{\mu A_i + \frac{SV}{N_i}}{\Sigma V + 2\frac{V}{v\Delta t} + 2\frac{\alpha_{m+1}}{w}} \\
 1 - c &= \frac{\frac{\alpha_m}{w} + \frac{SV}{N_m}}{\Sigma V + 2\frac{V}{v\Delta t} + 2\mu A_{i+1}}
 \end{aligned} \tag{2.5}$$

結局、セル中心の中性子束 N は次式で与えられる。

$$\begin{aligned}
 N &= [SV + \frac{V}{v\Delta t a} N_t + \mu \{ A_i + (\frac{1}{b} - 1) A_{i+1} \} N_i \\
 &\quad + \frac{1}{w} \{ \alpha_m + (\frac{1}{c} - 1) \alpha_{m+1} \} N_m] / (\Sigma V + \frac{V}{v\Delta t a} + \frac{\mu A_{i+1}}{b} + \frac{\alpha_{m+1}}{w c})
 \end{aligned} \tag{2.6}$$

(2.2) から (2.6) までの式は $\mu > 0$ に対してであるが、 $\mu < 0$ のときの式は、 μ を $|\mu|$ と置き換え、指標の i と $i+1$ を交換すれば得られる。

さらに、中性子束が指数関数的に時間変化するときは、次式で示す指数差分式 (exponential difference equations) を用いることもできる。

$$\frac{N_{t+1}}{N} = \frac{N}{N_t} \tag{2.7}$$

実際には、これを直接用いるのではなく、(2.7) 式を (2.2) 式に代入して得られた結果の式

$$a = \frac{N_t}{N + N_t} \tag{2.8}$$

を用いる。すなわち、内側反復の際に、この式によって得られた時間に関する重み a を用いる。

この指数差分式は、増倍系に対して精度の低下なしにかなりの時間ステップ幅まで許すことができる。特に重み付き差分とともに大きい時間ステップ幅がとれる。これは、大きいステップ幅に対しては、重み付き差分式による解は真の解より大き目になってくるのに対し、指数差分式による値が、この値を相殺するような動きをするからである。しかし

$$\Delta t \gg \frac{1}{v \sum_a} \tag{2.9}$$

であるような大きなステップ幅をとるのは良くない。

収束性を議論する際、時間ステップ巾と空間メッシュ巾 (Δr) で定義される式

$$p = \frac{v \Delta t}{\Delta r} \quad (2.10)$$

がよく用いられる。ダイヤモンド差分では、 $p > 1$ に対して、良い精度が得にくいが、TDA で用いられている重み付き差分は、 p の値に比較的無関係に良い精度および収束の安定性を与える。

波面の伝播 (wave propagation) を扱うような問題のときは $p = 1$ に採る。多群中性子輸送のときは、一般に p はエネルギーグループに依存するが、1 エネルギーグループのみに中性子源があるときは $p = 1$ に採る。中性子源のないエネルギーグループや、波面の伝播以外の問題に際しては $p \geq 1$ が最善の結果を与えるが、 $p < 1$ でもよい。 γ 線輸送では、 γ 線は速度一定なので、エネルギー依存のない p を採る。

2.2 TIMEX コードの方法 (Reed)^{11,12)}

初期条件 $\psi(0) = \psi_0$ の下における多群輸送方程式は、次のように書くことができる。

$$V^{-1} \frac{\partial \psi}{\partial t} = B \psi + q \quad (2.11)$$

ここで、

V は中性子の速度を示す対角マトリックス

q は非同次の中性子源ベクトル

B は線形演算子で次式で定義される。

$$B \psi = (L - S) \psi$$

$$(L \psi)_g = \varrho \cdot \Delta \psi_g + \sigma(r) \psi_g \quad (2.12)$$

$$(S \psi)_g = \sum_g \int d\Omega' K(r; g', \Omega' \rightarrow g, \Omega) \psi_{g'}(r, \Omega')$$

そして、(2.11) 式で同次の境界条件は B に含まれ、非同次の境界条件は q に含まれている。

S はすべての同次の中性子源、すなわち、散乱および核分裂による中性子源を示す。

空間および角度に関するダイヤモンド差分から、 $\mu_m > 0$ を例にとると、TIMEX で用いられている差分式は

$$\left[\frac{V_i}{v \Delta t} + \mu_m (A_{i+\frac{1}{2}} + A_{i-\frac{1}{2}}) + \frac{\alpha_{m+\frac{1}{2}} + \alpha_{m-\frac{1}{2}}}{w_m} + \sigma_i V_i \right] \psi^{j+1}$$

$$= \mu_m (A_{i+\frac{1}{2}} + A_{i-\frac{1}{2}}) \psi^{j+1}_{i-\frac{1}{2}} + \frac{\alpha_{m+\frac{1}{2}} + \alpha_{m-\frac{1}{2}}}{w_m} \psi^{j+1}_{m-\frac{1}{2}}$$

$$+ \frac{V_i}{v \Delta t} \phi^j + S_{m,i} V_i + q_{m,i} V_i \quad (2.13)$$

ここで、指標の j は時刻を、 i は空間メッシュを、 m は角度を示す。空間のダイヤモンド差分の関係式を用いると中性子束が負になることがある。また、

$$\left(\sigma_i + \frac{1}{v \Delta t} \right) V_i$$

が大きい値を持つときも中性子が負になるが、このようなときは、その空間点の中性子束を零にする negative flux fixup を行う。

加速法

TIMEXコードでは、精度の良い数値解を求めるために指数外挿 (exponential extrapolation) 法とリバランス (rebalance) 法が採用されている。どちらも安定な方法であるが、ある状況の下ではリバランス法が不安定性を示すときがある。

指数外挿法とは次のようなものである。いま、時間以外は既に離散化されているとして、次式 (半離散方程式 semi-discrete equation) を考える。

$$v^{-1} \frac{\partial \phi}{\partial t} = -B \phi + q \quad (2.14)$$

このとき中性子束は次のように書くことができる。

$$\phi(t) = e^{\omega t} \phi(0) \quad (2.15)$$

ここに、 ω は対角マトリックスで、 $\phi(t)$ は時間に関して緩やかに変化するものとすると、

$$v^{-1} \frac{d \phi}{dt} = e^{-\omega t} (B - v^{-1} \omega) e^{\omega t} \phi + e^{-\omega t} q$$

を解いて (ω は適当に選ばなければならないが) 得ることができる。

いま、 $B = L - S$ と分解して、時間項も差分化すると (2.14) 式は次のようになる。

$$\left(\frac{v^{-1}}{\Delta t} + L \right) \phi^{j+1} = \left(\frac{v^{-1}}{\Delta t} + S \right) \phi^j + q \quad (2.16)$$

ここで、(2.15) 式の ω を $\omega = \omega_+ + \omega_-$ のように正の成分 ω_+ と負の成分 ω_- に分解する。さらに、最初のステップでは、 $\phi^j = \phi^0$ と仮定し、他のステップでは、 $\phi^{j+1} = e^{\omega \Delta t} \phi^j$ であることを用い、(2.15) 式を (2.16) 式に代入すると次式を得る。

$$\left[\frac{v^{-1}}{\Delta t} + L + v^{-1} \omega_+ \right] \phi^{j+1} = \left[\frac{v^{-1}}{\Delta t} + S - v^{-1} \omega_- \right] e^{\omega \Delta t} \phi^j + q \quad (2.17)$$

この式は、 $v^{-1} \omega_+$ および $v^{-1} \omega_-$ が対角マトリックスなので、殆んど(2.16)式のアルゴリズムで解くことができる。

この振動数(frequency) ω は、精度の良い解を得るために次のようにして選ばれる。すなわち、 ψ^{i+1} を得るときには、

$$\omega_j = \frac{1}{\Delta t} \ell n \frac{\psi^j}{\psi^{j-1}} \quad (2.18)$$

から ω_j を求めて、(2.17)式を解く。

次にリバランス法について述べる。これは特に、中性子束が時間的に急速に変化するようなときに有効である。(2.16)式からわかるように、時刻 $j + 1$ の中性子束は、この新しい時刻の中性子の損失 L に関連し、時刻 j の中性子束は古い時刻の中性子源に関連するので、時刻 j から時刻 $j + 1$ の間に中性子バランスが崩れ、精度が悪くなってくる。

精度を上げる方法としては、無条件に安定な、陰解法(fully implicit method)：

$$v^{-1} \frac{\psi^{i+1} - \psi^i}{\Delta t} = B \psi^{i+1} + q \quad (2.19)$$

あるいは、Crank-Nicolson 法：

$$v^{-1} \frac{\psi^{i+1} - \psi^i}{\Delta t} = B \frac{\psi^{i+1} + \psi^i}{2} + q \quad (2.20)$$

があるが、^{*} 時間ステップ毎に B の逆マトリックスをとらなければならない。このことは、定常状態の問題の解を求めるに相当し、反復法が用いられる。しかし、この反復法は収束が遅いので、これを加速するために TIMEX コードでは、粗格子リバランス法が導入された。

このリバランス法とは次のようなものである。いま、 ψ^i が既知であるとして、 ψ^{i+1} の近似を $\tilde{\psi}^{i+1}$ とすると(2.16)式から

$$\left(\frac{v^{-1}}{\Delta t} + L \right) \tilde{\psi}^{i+1} = \left(\frac{v^{-1}}{\Delta t} + S \right) \psi^i + q \quad (2.21)$$

そして、 ψ^{i+1} は $\tilde{\psi}^{i+1}$ から次式によって得られると考える。

$$\psi^{i+1} = \sum_i f_i \tilde{\psi}_i^{i+1} \quad (2.22)$$

ここに、 f_i はリバランス因子(rebalance factor)と呼ばれるもので、 $\tilde{\psi}_i^{i+1}$ は、 i 番目の空間メッシュに対する ψ^{i+1} の要素で、他の処ではゼロである。 ψ^{i+1} を求めるために

* 精度からいえば、陰解法が $O(\Delta t)$ 、Crank-Nicolson 法が $O(\Delta t^2)$ である。なお、後者の方法はダイヤモンド差分と等価である。

(2.22) 式を (2.19) 式に代入して、全方向について積分すると、リバランス因子に対する連立方程式が得られる。すなわち、

$$\begin{aligned} & (-FL_{i+\frac{1}{2}}^{j+1}) f_{i+1} + (AB_i^{j+1} + FL_{i-\frac{1}{2}}^{j+1} + FR_{i+\frac{1}{2}}^{j+1}) f_i + (-FR_{i-\frac{1}{2}}^{j+1}) f_{i-1} \\ & = Q + \frac{\phi^j V_i}{v \Delta t} \end{aligned} \quad (2.23)$$

ここに、 $FL_{i+\frac{1}{2}}^{j+1}$, $FR_{i+\frac{1}{2}}^{j+1}$, ……は、空間メッシュの表面を横切る流れを表わす。例えば、

$$FL_{i+\frac{1}{2}}^{j+1} = \sum_m |\mu_m| \tilde{\psi}_m^{j+1} w_m, \quad (\mu_m < 0 のとき, メッシュ i + \frac{1}{2} で) \quad (2.24)$$

$$FR_{i+\frac{1}{2}}^{j+1} = \sum_m \mu_m \tilde{\psi}_m^{j+1} w_m, \quad (\mu_m > 0 のとき, メッシュ i + \frac{1}{2} で) \quad (2.25)$$

.....

また、 AB_i^{j+1} は、 i 番目のメッシュ内での吸収と $\frac{\tilde{\psi}^{j+1} V_i}{v \Delta t}$ ($\tilde{\psi}^{j+1} = \int \psi^{j+1} d\mu$) の和である。

(2.23) 式はリバランス因子について、三重対角マトリックスを持つ式なので容易に解くことができ、結局これから時間ステップ $j + 1$ の ψ^{j+1} が (2.22) 式によって求められることになる。

*) 第1衝突(中性子)源について

Dirac δ 関数形のような中性子源があるときの中性子束を求めるることは、極端に細かいメッシュが必要なので普通の差分型では難しい。このような問題のために TIMEX コードでは、第1衝突(中性子)源(first collision source)をとり入れた取扱いができるようになっている。この第1衝突中性子源では、板状体系では板状形、円柱体系では線状形、球体系では点、のそれぞれ解析的な中性子源を取り扱っていて、いづれの体系でも角度依存性は $\delta(\mu - 1)$ で与えられている。

この第1衝突中性子源を用いたときの中性子束は、衝突をしていない中性子束 ψ_u (uncollided flux) と衝突をした中性子束 ψ_c (collided flux) の成分に分けて考え、 $\psi = \psi_u + \psi_c$ とし、 ψ_u , ψ_c はそれぞれ次の式に従うと考える。すなわち、

$$\frac{1}{v} \frac{\partial \psi_u}{\partial t} + L \psi_u = q \quad (2.26)$$

$$\frac{1}{v} \frac{\partial \psi_c}{\partial t} + L \psi_c = S(\psi_u + \psi_c) \quad (2.27)$$

* 他の時間依存輸送コード； TDA(1次), TRANZIT(2次元)にもこのオプションが付いている。

また、これら両式の和は次のように書ける。

$$\frac{1}{v} \frac{\partial \psi}{\partial t} + L\psi = S\psi + q \quad (2.28)$$

上記のように中性子束を2つの成分に分解したのは、(2.26)式は解析的に求めることができ、(2.27)式の方に数値解析的誤差が入ってきてても、 ψ_u は ψ_a より滑らかであるので、これらの誤差が(2.28)式の差分解より小さいからである。尚、解析的に求められた ψ_u をTable. 2.1に示しておく。

Table 2.1 Analytic uncollided flux used in TIMEX code

Geometry	Source	Uncollided flux
Slab	$N_0 \delta(x) \delta(1-\mu) \delta(t)$	$N_0 e^{-\int_0^x \sigma(x') dx'} \delta(t - \frac{x}{v}) \delta(1-\mu)$
Cylindrical	$N_0 \frac{\delta(r) \delta(1-\mu) \delta(t)}{2\pi r^2}$	$N_0 e^{-\int_0^r \sigma(r') dr'} \delta(t - \frac{r}{v}) \delta(1-\mu)$
Spherical	$N_0 \frac{\delta(r) \delta(t)}{4\pi r^2}$	$N_0 e^{-\int_0^r \sigma(r') dr'} \delta(t - \frac{r}{v}) \delta(1-\mu)$

(2.27)式の ψ_u による中性子源を計算するためには、板状体系および球状体系に対しては

$$\phi_\ell(r, t) = \int_{-1}^{+1} d\mu P_\ell(\mu) \psi_u(\mu) \quad (2.29)$$

円柱体系に対しては、(2.29)式の $P_\ell(\mu)$ (Legendre polynomials)を $Y_\ell^\beta(\mu, \eta)$ (spherical harmonics)に置き換えたもの、を求めなければならないが、 ψ_μ の μ 成分は $\delta(1-\mu)$ であるので、結局、全ての体系に対しては、(2.29)式は0次モーメントのみ求めればよいことになる。

すなわち、メッシュ体積 V_i における時間ステップ Δt_j に対する平均値 ϕ_i^j は、これらの結果を用いて、球状体系については次式によって求められる。

$$\phi_i^j = \frac{N_0 e^{-\int_0^{a_j} \sigma(r') dr'} \{ 1 - e^{-\sigma(r_i)(b_j - a_j)} \}}{V_i \Delta t \sigma(r_i)} \quad (2.30)$$

ここに

$$a_j = \max_{i-\frac{1}{2}} (r_{i-\frac{1}{2}}, v t)$$

$$b_j = \min_{i+\frac{1}{2}} (r_{i+\frac{1}{2}}, v t + v \Delta t)$$

また、他の体系に対しても同様な表現が得られる。(2.30)式は、 ψ_u に対する式が散乱源を持たないことから、エネルギーグループに関係ない。このようにして、 ψ_u に関する式は容易に解けるので、あとは、これを用いて、 ψ_u が求められ((2.27)式参照)、結局、 ψ が求められることになる。

2.3 TASKアルゴリズムを用いた方法 (Dodds¹³, Tomlinson¹⁷ }

輸送方程式を時間に関して Laplace 変換した結果を Taylor 級数展開して、最後に逐次形を解く方法は、TASKアルゴリズムと呼ばれているが、途中に内側反復が含まれないので、空間に関する古典的な差分解法に伴う欠点を克服している。

時間依存輸送方程式のTASKアルゴリズムによる解法に初めて成功したのは Dodds らで(TASK * コード)^{13~15}、その後、加速法の改良を Lillie¹⁶ が行って、更に時間依存項の改良をもとり入れたプログラムを Tomlinson らが発表している(TDT コード)^{17, 18}。いづれも板状体系に対してであるが、最近の TDT コードでは球状体系も取り扱っている。また、いづれのコードも遅発中性子に関する取り扱いができる。ここでは、板状体系を例にとって、アルゴリズムの要旨を述べる。

板状体系に対する時間依存多群方程式は次のように書くことができる。ここでは一応均質体系を仮定するが、これは説明の都合からである。

$$\frac{1}{v_g} \frac{\partial}{\partial t} \phi_{gd}(x, t) + \sum_g \phi_{gd}(x, t) + \mu_d \frac{\partial}{\partial x} \phi_{gd}(x, t) = H_{gd}(x, t), \\ g = 1, 2, \dots, G; d = 1, 2, \dots, D \quad (2.29)$$

$$H_{gd}(x, t) = S_{gd}(x, t) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^M \lambda_i r_g^i C^i(x, t) \\ + (1 - \beta) \chi_g \sum_{g'=1}^G \sum_{d'=1}^D (\nu \Sigma_f)_{g'} \phi_{g'd'}(x, t) w_{d'} \\ + \sum_{g=1}^G \sum_{d=1}^D T_{gd \leftarrow g'd'} \phi_{g'd'}(x, t) w_d \quad (2.30)$$

* TASKは Transfer And Scattering Kinetics から、TDTは、Time Dependent TASK からきたものである。

$$T_{g d \leftarrow g' d'} = \sum_{\ell=0}^L \Sigma_s^\ell (g \leftarrow g') P_\ell (\mu_g) P_\ell (\mu_{d'}) \quad (2.31)$$

および

$$\frac{\partial}{\partial t} C^i(x, t) = 2 \beta_i \sum_{g'=1}^G \sum_{d'=1}^D (\nu \Sigma_f)_{g'} \phi_{g'd'}(x, t) w_{d'} - \lambda_i C^i(x, t),$$

$$i = 1, 2, \dots, M$$

ここに, g, g' はエネルギーグループ, d, d' は角度成分 (S_N quadrature), i は遅発中性子グループ, ℓ は散乱の非等方性を表わす Legendre 成分, の指標である。

ここで, 中性子束が時間に関して, 指数関数と $\phi_{gd}(x, t)$ との合成的な振舞いをするとして, 各時間ステップ毎に近似式*

$$\phi_{gd}(x, t) = e^{\omega_g(x) \Delta t} \phi_{gd}^j(x, t) \quad (2.33)$$

を導入し, (2.29) 式を時間ステップの表示 (指標 j , ステップ巾 Δt) で整理すると次式を得る。

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \phi_{gd}^{j+1}(x) + \frac{1}{\mu_d} \left\{ \Sigma_g - T_{g d \leftarrow g' d'} w_{d'} + \frac{1}{v_g} \left[\frac{1}{\Delta t} + \omega_g(x) \right] \right\} \phi_{gd}^{j+1}(x) \\ = \frac{\bar{S}_{gd}(x)}{\mu_g} + \frac{1}{2\mu_d} \sum_{i=1}^M \lambda_i r_g^i C_i^{j+1}(x) + \frac{e^{\omega_g(x) \Delta t}}{v_g \mu_d \Delta t} \phi_{gd}^j(x) \\ + \frac{(1-\beta)}{\mu_d} \chi_g \sum_{g'=1}^G \sum_{d'=1}^D (\nu \Sigma_f)_{g'} \phi_{g'd'}^{j+1}(x) w_{d'} \\ + \frac{1}{\mu_d} \sum_{g'=1}^{g-1} \sum_{d'=1}^D T_{g d \leftarrow g' d'} w_{d'} \phi_{g'd'}^{j+1}(x) \quad (2.34) \end{aligned}$$

$$\bar{S}_{gd}(x) = \frac{1}{\Delta t} \int_0^{\Delta t} S_{gd}(x, t) dt \quad (2.35)$$

* (2.33) 式は指数外挿 (exponential extrapolation; Reed) あるいは予測子修正子法 (predictor-corrector method; Tomlinson) と呼ばれているが, 後者の呼名は, もっと一般的に使われることが多いので, 前者の呼名の方が良いと思う。

ここに、(2.34)式を作る際

$$\phi_{g d}^j(x) = \phi_{g d}^j(x) \quad (t = 0 \text{ のときの定義}) \quad (2.36)$$

$$\phi_{g d}^{j+1}(x) = e^{\omega_g(x)\Delta t} \phi_{g d}^{j+1}(x) \quad (2.37)$$

が用いられた。

上記で用いられた ω_g (振動数, frequency) は解の誤差を最小にするように選ぶべきなのだが、実際的な経験から、前回までの時間ステップの中性子束によって次式から求められる。

$$\omega_g(x) = \frac{1}{\Delta t} \ln \left[\frac{\phi_g^j(x)}{\phi_g^{j-1}(x)} \right] \quad (2.38)$$

ここに

$$\phi_g(x) = 2 \sum_{d=1}^D \phi_{g d}(x) w_d \quad (2.39)$$

(2.32)式にも同様な取扱いをして次式が得られる。

$$\begin{aligned} C_i^{j+1}(x) &= C_i^j(x) e^{-\lambda_i \Delta t} + \frac{\beta_i}{2} \sum_{g=1}^G \frac{(\nu \Sigma_f)_g}{\omega_g(x) + \lambda_i} \left\{ e^{\omega_g(x) \Delta t} - e^{-\lambda_i \Delta t} \right\} \phi_g^j(x) \\ &+ \frac{\beta_i}{2} \sum_{g=1}^G \frac{(\nu \Sigma_f)_g}{\omega_g(x) + \lambda_i} \left\{ e^{\omega_g(x) \Delta t} - e^{-\lambda_i \Delta t} \right\} e^{-\omega_g(x) \Delta t} \phi_g^{j+1}(x) \end{aligned} \quad (2.40)$$

ここで、状態ベクトル $\psi(x)$:

$$\underline{\psi}(x) = [\phi_{11}, \dots, \phi_{G1}, \dots, \phi_{gd}, \dots, \phi_{GD}]^T \quad (2.41)$$

を用いると (2.34)式は次のように書くことができる。

$$\frac{\partial}{\partial x} \underline{\psi}^{j+1}(x) + \underline{B} \underline{\psi}^{j+1}(x) = \underline{Z}(x) \quad (2.42)$$

ここに、係数マトリックス \underline{B} の要素は次式で与えられ、

$$(B)_{ij} = \frac{1}{\mu_d} \left\{ \left[\Sigma_{g'} + \frac{1}{v_{g'}} \left(\frac{1}{\Delta t} + \omega_{g'}(x) \right) \right] \delta_{gg'} \delta_{dd'} - T_{gd \leftarrow g'd'} w_{d'} \right\} \quad (2.43)$$

源ベクトル $\underline{Z}(x)$ の要素 ($Z(x)$)_i は (2.34)式の右辺で与えられる。

いま、(2.42)式において、 \underline{B} と \underline{Z} が Δx について一定 (Δx 内では一様媒質なので) であり、 ψ が x に関して連続微分可能である、と仮定して、 $\underline{\psi}(x)$ を x について Taylor 展開すると、(2.42)式は次のように書くことができる。

$$\underline{\psi}(x + \Delta x) = \underline{A}^{(1)}(\Delta x) \underline{\psi}(x) + \underline{A}^{(2)}(\Delta x) \underline{Z}(x) \quad (2.44)$$

$$\underline{A}^{(1)}(\Delta x) = 1 - \underline{B} \Delta x + \frac{1}{2!} \underline{B}^2 (\Delta x)^2 \dots \dots \quad (2.45)$$

$$\underline{A}^{(2)}(\Delta x) = \Delta x \left(1 - \frac{1}{2!} \underline{B} \Delta x + \frac{1}{3!} \underline{B}^2 (\Delta x)^2 \dots \dots \right) \quad (2.46)$$

ここに $\underline{A}^{(1)}(\Delta x)$ が 伝達マトリックス (transfer matrix) と呼ばれるものである。また、 \underline{B} が Δx に関して定数でなくとも、 x について連続微分可能である。そのときは $\underline{A}^{(1)}$ および $\underline{A}^{(2)}$ の要素は递次形 (recursive) で求められる。¹³⁾

この伝達マトリックスを用いて解く方法は、 2 点境界値問題に対しては、特に大きい Δx のとき、打ち切り誤差および丸め誤差により失敗に帰することがある。その誤差のひとつは、 \underline{A} マトリックスの計算における級数展開のところで起り、 Δx の大きさをコントロールすることで防ぐ方法が採られる。もう 1 つの誤差は、全体系に対しての \underline{A} マトリックスを作るときに起り、これは、次に述べる散乱マトリックス法に変換することによって、改良することができる。

いま、各領域における Δx は最適に選ばれたと仮定して、それを $\Delta x'$ とする。また、取り扱いの便宜上

$$\underline{A}(\Delta x') = \underline{A}^{(1)}(\Delta x') \quad (2.47)$$

$$\underline{F}(\Delta x') = \underline{A}^{(2)}(\Delta x') \underline{Z}(x) \quad (2.48)$$

とおくと (2.44) 式は次式のようになる。

$$\underline{\psi}(x + \Delta x') = \underline{A}(\Delta x') \underline{\psi}(x) + \underline{F}(\Delta x') \quad (2.49)$$

この式は次式のように分解できる。

$$\begin{bmatrix} \underline{\psi}_u(x + \Delta x') \\ \underline{\psi}_L(x + \Delta x') \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \underline{A}_{11}(\Delta x') & \underline{A}_{12}(\Delta x') \\ \underline{A}_{21}(\Delta x') & \underline{A}_{22}(\Delta x') \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \underline{\psi}_u(x) \\ \underline{\psi}_L(x) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \underline{F}_u(\Delta x') \\ \underline{F}_L(\Delta x') \end{bmatrix} \quad (2.50)$$

ここに、指標 u と L は、ベクトルの上半分および下半分を示す。

この (2.50) 式から、次式に示す如く、右辺に境界条件を含めた既知の量、左辺に未知の量を持つ 2 点境界値問題に対する式を得ることができる。

$$\begin{bmatrix} \underline{\psi}_u(x + \Delta x') \\ \underline{\psi}_L(x) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \underline{G}_{11}(\Delta x') & \underline{G}_{12}(\Delta x') \\ \underline{G}_{21}(\Delta x') & \underline{G}_{22}(\Delta x') \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \underline{\psi}_u(x) \\ \underline{\psi}_L(x + \Delta x') \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \underline{S}_u(\Delta x') \\ \underline{S}_L(\Delta x') \end{bmatrix} \quad (2.51)$$

右辺第 1 項内の第 1 因子 \underline{G} マトリックスは 散乱マトリックス (scattering matrix ; Redheffer) あるいは応答マトリックス (response matrix ; Schimiz, Pfeiffer) と呼ばれるものである。また、 \underline{G}_{11} および \underline{G}_{22} は 透過マトリックス (transmission matrices) \underline{G}_{21} は 反射マトリックス (reflection matrices) と呼ばれている。これらの意味については Fig. 2.1 から察知されたい。(2.51) 式の右辺の \underline{G} マトリックスおよび \underline{S} ベクトルの各要

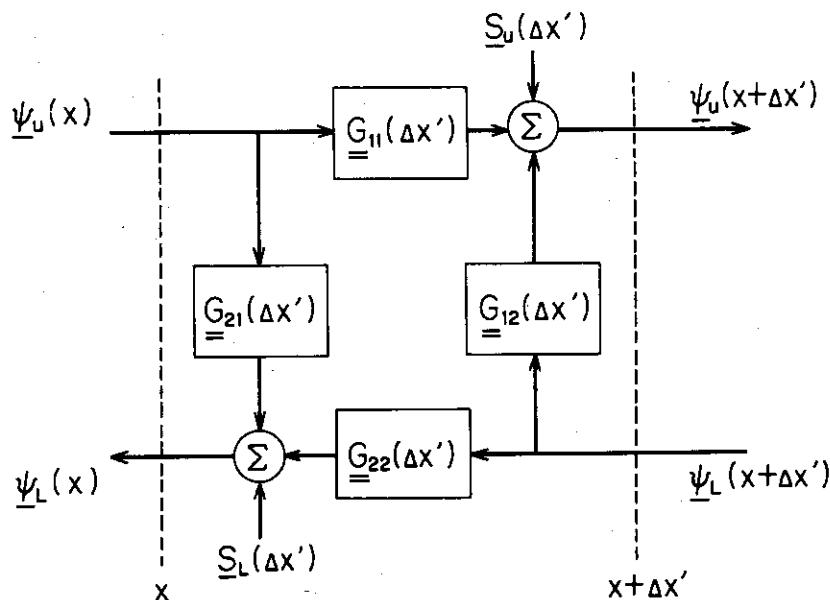


Fig. 2.1 Block diagram representation of a scattering matrix for a homogeneous region of thickness $\Delta x'$

素は $\Delta x'$ に対する(2.45)式、(2.46)式を計算することにより求められる。このようにして均質体系に対しては、 $\Delta x'$ を更に細分化して、その $\Delta x'$ に対して(2.51)式をくり返し用いることによって問題を解くことができる。

更に一般化する為に、異った物質からなる多領域に対する(2.51)式に相当する式を作ることができる2領域からなる体系に対する解法アルゴリズムをFig. 2.2(a)に示しておいた。問題は結局Fig. 2.2(b)のようにひとつの体系にまとめてことによって解かれる。

ここに、マトリックス $G_{11}(\Delta x_1 + \Delta x_2)$, …, およびベクトル $S_u(\Delta x_1 + \Delta x_2)$, …, は、それぞれ、 $G_{11}(\Delta x_1)$, …, $S_u(\Delta x_1)$, …, から求められる。境界条件はFig. 2.2(b)で説明すると、外側境界に対しては $\psi_u(x_1)$ および $\psi_L(x_3)$ で、内側境界に対しては、 $\psi_u(x_2)$ および $\psi_L(x_2)$ で考慮されている。同様にして、多領域に対しても $\Delta x'$ に対する逐次形で記述することができる。以上((2.42)式以後)がTASKアルゴリズムの要旨である。

初めに述べたようにTASKアルゴリズムを用いたプログラムは2つある。DoddsのTASKコードでは、時間に関しては陽差分で特別な加速は用いず、空間に関しては、Laplace変換して時間項を陽的には消去した形を(2.42)式以後に述べたTASKアルゴリズムで解いている。一方、TomlinsonのTDTコードでは、空間については、TASKコードと同じTASKアルゴリズムで解いているが、時間に関しては、この節の前半で述べた指数外挿による加速を用いているので、プログラム全体としてはTDTコードの方が優れている。

2.4 TRANZITコードの方法 (Lathrop¹⁹⁾)

TRANZITは2次元 S_N 法による(R, Z)体系に対する時間依存輸送方程式を解く計算コードである。重み付き差分を全変数(空間、角度および時間)に対して適用し、リバランス法

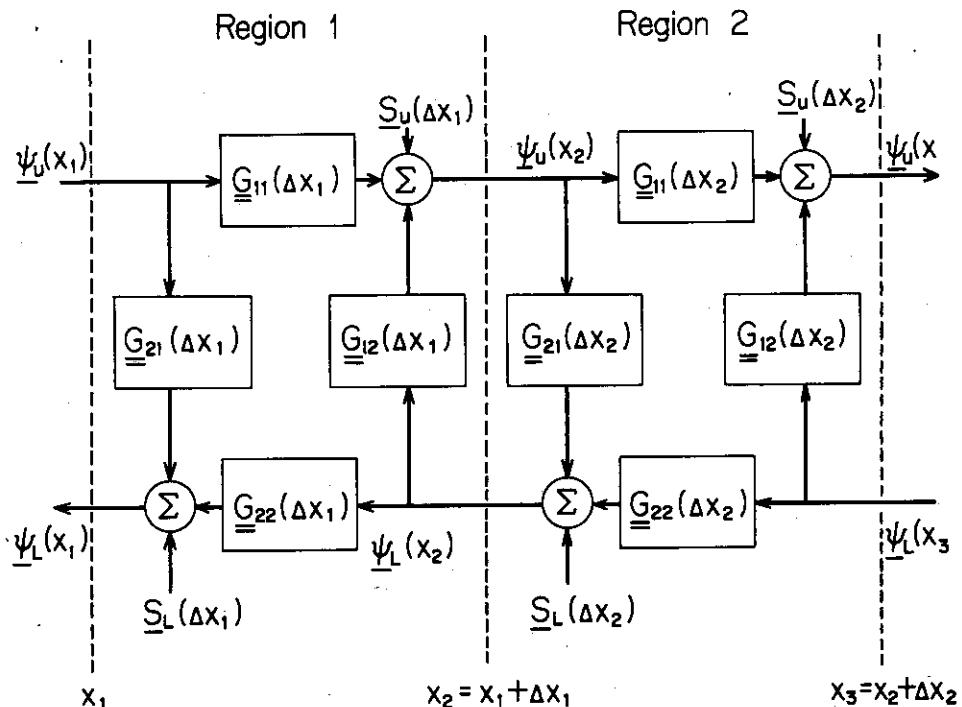


Fig. 2.2(a) TASK algorithm for two adjacent regions

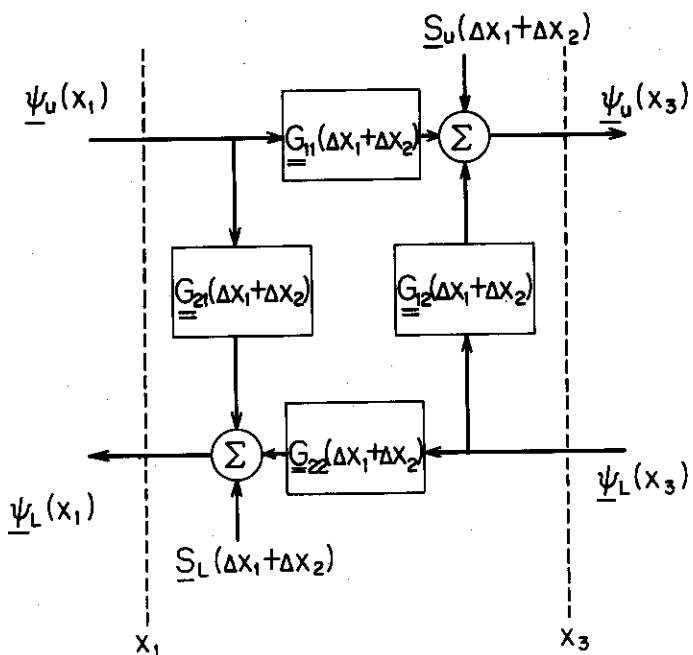


Fig. 2.2(b) TASK algorithm for combined regions

による加速, 第1衝突源, 等を用いているので1次元輸送コードTDAの2次元版に相当する。しかし, TDAコードの指数差分式による加速は用いていない。また, 核分裂中性子源の取り扱いはできない。一方, TWOTRANコードにはないアルベド(albedo)境界条件の取り扱いができる。

TWOTRAN コードで用いられている記号定義に従うと、多群輸送方程式は次式で示される。

$$\begin{aligned}
 & \frac{1}{v_g} \frac{\partial \psi_g}{\partial t} + \nabla \cdot (\varrho \psi_g) + \sigma_{t,g} \psi_g = \sum_{h=1}^n \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1) \sigma_{s,n,h} \rightarrow g \sum_{k=0}^n R_n^k \psi_{n,h}^k \\
 & \quad \text{IGM ISCT} \\
 & + \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1) \sum_{k=0}^n R_n^k Q_{n,g}^k \quad (2.52)
 \end{aligned}$$

ここに

$$R_n^k = \sqrt{\frac{(2-\delta_{k0})(n-k)!}{(n+k)!}} P_n^k(\mu) \cos k\psi \quad (2.53)$$

(2.52) 式を差分式で書くと

$$\begin{aligned}
 & \frac{\psi_{i,j,m,s+\frac{1}{2}} - \psi_{i,j,m,s-\frac{1}{2}}}{v_g \Delta t_s} + \mu_m \frac{A_{i+\frac{1}{2},j} \psi_{i+\frac{1}{2},j,m,s} - A_{i-\frac{1}{2},j} \psi_{i-\frac{1}{2},j,m,s}}{V_{ij}} \\
 & + \frac{(A_{i+\frac{1}{2},j} - A_{i-\frac{1}{2},j})}{V_{ij}} - \frac{(\alpha_{m+\frac{1}{2}} \psi_{i,j,m+\frac{1}{2},s} - \alpha_{m-\frac{1}{2}} \psi_{i,j,m-\frac{1}{2},s})}{w_m} \\
 & + \eta_m \frac{(B_{i,j+\frac{1}{2}} \psi_{i,j+\frac{1}{2},m,s} - B_{i,j-\frac{1}{2}} \psi_{i,j-\frac{1}{2},m,s})}{V_{ij}} + \sigma_t \psi_{i,j,m,s} \\
 & = S_{i,j,m,s} \quad (2.54)
 \end{aligned}$$

ここに、各々の指標は以下に示すように各座標のメッシュを示し、

半径 : $r_{i-\frac{1}{2}} < r_i < r_{i+\frac{1}{2}}$, $i = 1, 2, \dots, IT$

軸方向 : $Z_{j-\frac{1}{2}} < Z_j < Z_{j+\frac{1}{2}}$, $j = 1, 2, \dots, JT$

角度 : $\varrho_{m-\frac{1}{2}} < \varrho_m < \varrho_{m+\frac{1}{2}}$, $m = 1, 2, \dots, MT$

時間 : $t_{s-\frac{1}{2}} < t_s < t_{s+\frac{1}{2}}$, $s = 1, 2, \dots, ITM$

また、中性子源全すべてを S で記した。さらに、

$$\Delta t_s = t_{s+\frac{1}{2}} - t_{s-\frac{1}{2}}$$

$$V_{i,j} = \pi (r_{i+\frac{1}{2}}^2 - r_{i-\frac{1}{2}}^2) \Delta z_j \quad (2.55)$$

$$A_{i \pm \frac{1}{2}, j} = 2\pi r_{i \pm \frac{1}{2}} \Delta z_j$$

$$B_{i,j \pm \frac{1}{2}} = \pi (r_{i+\frac{1}{2}}^2 - r_{i-\frac{1}{2}}^2)$$

である。全変数に関するメッシュの中心に対する指標（例えば、 $\psi_{i,j,m,s} = \psi(r_i, z_j, \theta_m, t_s)$ ）を省略して、(2.52)式の差分形式を書くと

$$\begin{aligned} & \frac{\psi_{s+\frac{1}{2}} - \psi_{s-\frac{1}{2}}}{v \Delta t} + \mu \frac{(A_{i+\frac{1}{2}} \psi_{i+\frac{1}{2}} - A_{i-\frac{1}{2}} \psi_{i-\frac{1}{2}})}{V} \\ & + \frac{A_{i+\frac{1}{2}} - A_{i-\frac{1}{2}}}{V} \frac{(\alpha_{m+\frac{1}{2}} \psi_{m+\frac{1}{2}} - \alpha_{m-\frac{1}{2}} \psi_{m-\frac{1}{2}})}{W} \\ & + \eta \frac{B (\psi_{i+\frac{1}{2}} - \psi_{i-\frac{1}{2}})}{V} + \sigma_t \psi = S \end{aligned} \quad (2.56)$$

この差分式を解くには、さらに中性子束に関する別の式が必要で、TRANZIT コードでは、次に示す重み付きダイヤモンド差分の関係式を用いている。

$$\begin{aligned} \psi &= a \psi_{i+\frac{1}{2}} + (1-a) \psi_{i-\frac{1}{2}} \\ \psi &= b \psi_{j+\frac{1}{2}} + (1-b) \psi_{j-\frac{1}{2}} \\ \psi &= c \psi_{m+\frac{1}{2}} + (1-c) \psi_{m-\frac{1}{2}} \\ \psi &= d \psi_{s+\frac{1}{2}} + (1-d) \psi_{s-\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (2.57)$$

ここに重みパラメータは次式によって求められる。

$$\begin{aligned} a &= \max \left(\frac{1}{2}, 1 - a' \right) \\ b &= \max \left(\frac{1}{2}, 1 - b' \right) \\ c &= \max \left(\frac{1}{2}, 1 - c' \right) \\ d &= \max \left(\frac{1}{2}, 1 - d' \right) \end{aligned} \quad (2.58)$$

そして、 a' , b' , c' および d' は、例えば $\mu, \eta > 0$ のときには次式によって求められる。

$$\begin{aligned}
 a' &= \frac{\mu A I^- + (\eta B J \psi_{j-\frac{1}{2}} + \alpha_{m-\frac{1}{2}} A D \psi_{m-\frac{1}{2}} + R V T \psi_{s-\frac{1}{2}} + S) / \psi_{i-\frac{1}{2}}}{\sigma_t + 2(\eta B J + \alpha_{m+\frac{1}{2}} A D + R V T)} \\
 b' &= \frac{\eta B J + (\mu A I^- \psi_{j-\frac{1}{2}} + \alpha_{m-\frac{1}{2}} A D \psi_{m-\frac{1}{2}} + R V T \psi_{s-\frac{1}{2}} + S) / \psi_{j-\frac{1}{2}}}{\sigma_t + 2(\mu A I^+ + \alpha_{m+\frac{1}{2}} A D + R V T)} \quad (2.59) \\
 c' &= \frac{\alpha_{m-\frac{1}{2}} A D + (\mu A I^- \psi_{i-\frac{1}{2}} + \eta B J \psi_{j-\frac{1}{2}} + R V T \psi_{s-\frac{1}{2}} + S) / \psi_{m-\frac{1}{2}}}{\sigma_t + 2(\mu A I^+ + \eta B J + R V T)} \\
 d' &= \frac{R V T + (\mu A I^- \psi_{i-\frac{1}{2}} + \eta B J \psi_{j-\frac{1}{2}} + \alpha_{m-\frac{1}{2}} A D \psi_{m-\frac{1}{2}} + S) / \psi_{s-\frac{1}{2}}}{\sigma_t + 2(\mu A I^+ + \eta B J + \alpha_{m+\frac{1}{2}} A D)}
 \end{aligned}$$

また、

$$R V T = \frac{1}{v \Delta t}, \quad A I^\pm = \frac{A_{i \pm \frac{1}{2}}}{V}, \quad A D = \frac{A_{i+\frac{1}{2}} - A_{i-\frac{1}{2}}}{V}, \quad B J = \frac{B}{V} \quad (2.60)$$

$\eta, \mu < 0$ のときは $\psi_{j-\frac{1}{2}}$ の代りに $\psi_{j+\frac{1}{2}}, \psi_{i-\frac{1}{2}}$ の代りに $\psi_{i+\frac{1}{2}}$ が用いられる。(2.58)式および(2.59)式は、中性子束が正の値を持つように a, b, c, d を選ぶ式であるが、実際には、解の安定性から、 $1/2$ に近い値が選ばれる。特に $d \approx 1$ のときは時間に関する差分が陰解法になり安定であることが証明されている。また a, b, c, d が $1/2$ のときが打ち切り誤差が最も少ないと経験からわかっている。

3 ベンチマーク・テストの現状

本来の意味でのベンチマークテストは未だ行われていないので、ここでは、現在用いられている方法による計算例をできるだけ収集して、今後行われるベンチマークテストの資料にしたい。解析の対象となった体系はいづれもアカデミックな意味での体系であるが、いくつかの例が示されている。いろいろな加速法についての吟味はTIMEXで行われている。TASKアルゴリズムを用いたTASKコードは、拡散近似も扱える。TDTコードはTASKコードを収束加速の点で改良したものであり、コードとしては未だ公開されていないが、最近用いている方法による数値例が最後に示されている。

3.1 TDAコードを用いた計算¹⁰⁾

いま、球状体形をとり上げ、時間依存に対する拡散近似と輸送理論（TDAコード）との比較を行う。球は半径13cmで、 $C (= \Sigma_s / \Sigma_T) = 0.9$ で $\Sigma_T = 1 \text{ cm}^{-1}$ の物質である。この球に δ 関数形の速度 1 cm/sec の粒子1ヶが入射したとする。TDAコードでは、 δ 関数の中性子源に対しては解析的な第1衝突源（first-collision source）^{*} を用いて S_8 で解いている。拡散近似では、解析的に解いた次の式を用いる。

$$\phi(r, t) = \frac{\exp\left\{-\left[\frac{r^2}{4vDt} + v\Sigma_a t\right]\right\}}{\left[4\pi vDt\right]^{3/2}} \quad (3.1)$$

Fig. 3.1 に示すように、この体系は吸収が比較的少ないので、中性子源の効果が認められる時刻や外側境界近くのときを除いては拡散理論とTDAコードとの一致は良い。3つの曲線とも初めの頃の時刻では、TDAコードの方は、波面の影響が出ているのに反し、拡散理論では、この影響は出でていない。Fig. 3.2 は、Fig. 3.1 のときの空間分布を示したもので、これらの図から、拡散近似は輸送理論の良い近似であるということができる。

その他に、TDAコードを用いてできる計算は、 r 線や中性子束の未臨界体系による即効的な（prompt）振舞いが追求でき、漸近的（asymptotic）になる前の状況を調べることができる。

3.2 TIMEXコードを用いた計算¹¹⁾

時間依存輸送理論コードあるいはTIMEXコードの応用性を示すために3つの計算例を掲げる。

イ) 問題1.

ここでは、中性子ストリーミング（streaming）が重要な体系、あるいは、中性子波が存在するような問題で、厳密解が得られる例を考える。すなわち、初期条件はゼロの両端真空の

* 第1衝突源についてはTIMEXコードの説明参照。

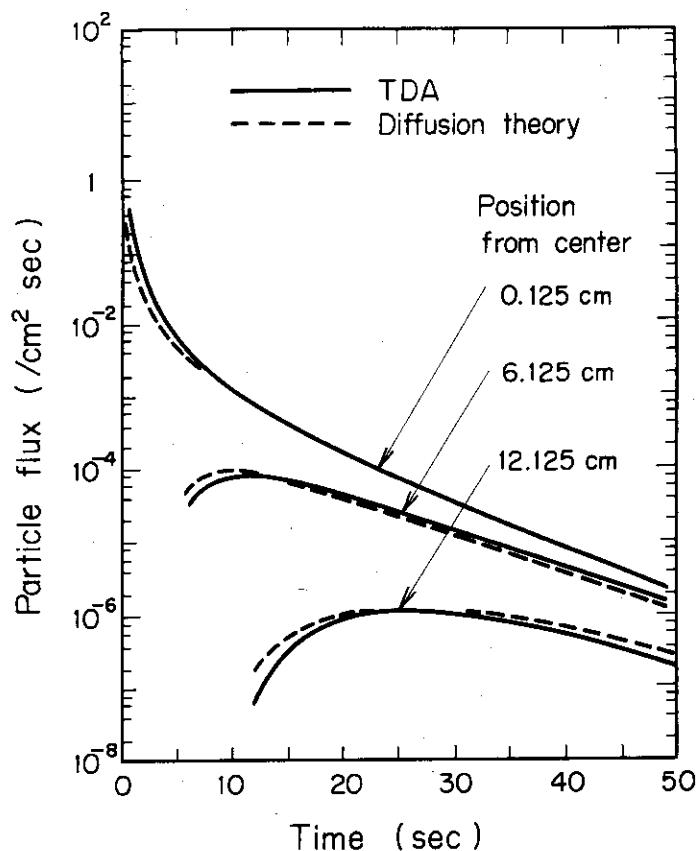


Fig. 3.1 Comparison between fluxes calculated by TDA code and diffusion theory at various radii in a scattering and absorbing sphere

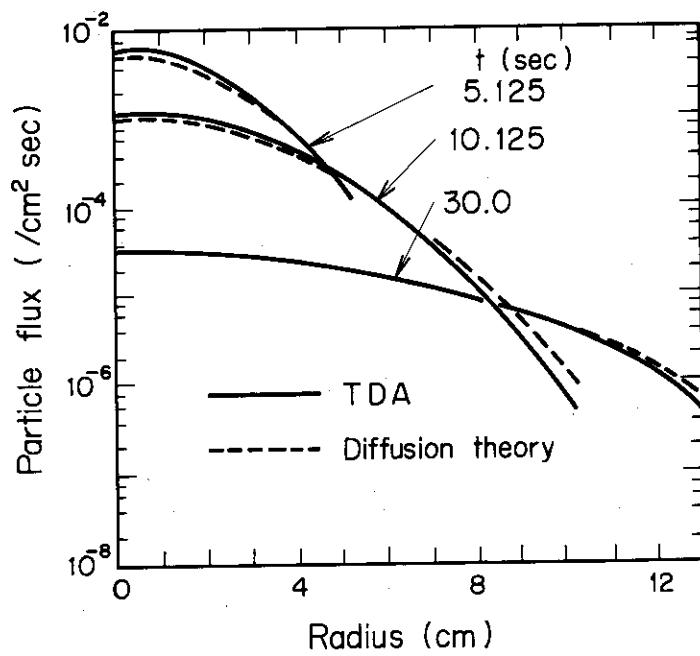


Fig. 3.2 Comparison between fluxes calculated by TDA code and diffusion theory at various times in a scattering and absorbing sphere

板状体系の左端に時間に関して一定の中性子が入射する1群問題である。この問題では、 S_2 の厳密解は一定速度 $\mu_2 v$ (μ_2 は S_2 近似における方向余弦 = $\sqrt{3}/3$) で右側に移動している波面で、Fig. 3.3 に exact と示されているのがそれである。図でわかるように Δx および Δt をゼロを持っていくと、 S_2 近似で厳密解に近づいていくのが予想され、TIMEXコードがこのような問題の大変よい近似を与えることがわかる。

□) 問題 2.

この問題では散乱が主要な役割を果してい、Table 3.1 のようなデータを持っている。この臨界体系全体に一様な吸収の摂動を与えることを考える。したがって厳密解は、 $\psi(t) = \exp(-v\Delta\sigma_a t)\psi_0$ である。ここに ψ_0 は時刻ゼロにおける臨界中性子束である。Table 3.2 および Fig. 3.4 はこの問題に対して、TIMEXコードで用いられている2つの加速法の有効性について吟味したものである。この図表からわかるように指数外挿法とリバランス法の両方を用いると、用いないのに比較して誤差が 1000 分の 1 近くに減少することがわかる。また、時間ステップの巾を小さくさせたとき、リバランス法では必ずしも精度が上がるとは限らないときがあるが、指数外挿法では、対数目盛で殆んど線形的に（実際には $O(\Delta t^2)$ であるが）精度が上がっていく現象は興味深い。

ハ) 問題 3

この問題は今までの問題より複雑で、データは Table 3.3 に示している。この未臨界体系の中心領域 (Material 1) に対して、第1エネルギーグループに比較的ゆるやかな1次形式の (ramp) 吸収の摂動を起させたときの中性子束分布を調べる。Fig. 3.5 および Table 3.4 がこの問題の結果であるが、リバランス法を用いた結果は厳密解に 0.1 % の精度で良い一致を示している。

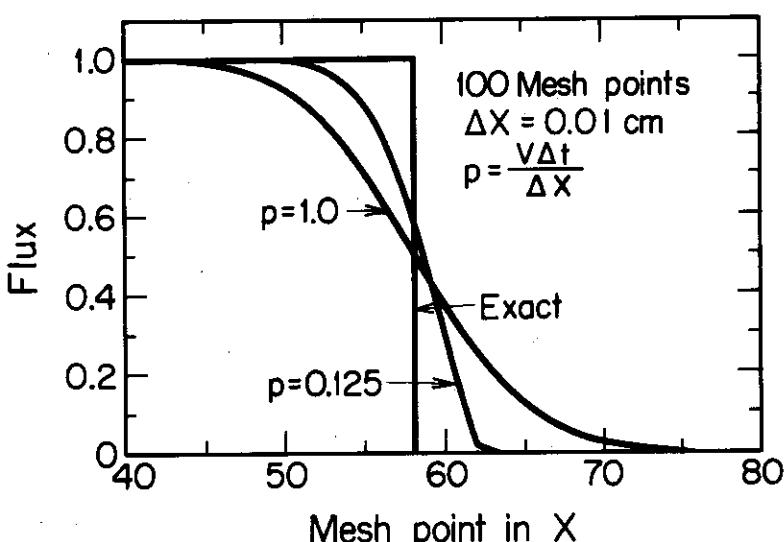


Fig. 3.3 Numerical results for problem 1 (neutron wave propagation) by TIMEX code (TIMEX's values get equal to exact as p becomes smaller)

Table 3.1 Data of test problem 2 for TIMEX code

		Material 1	Material 2
Cross sections (cm ⁻¹)	$\Sigma_a (\Delta\Sigma_a)$	1.0(-0.1)	0.5(-0.1)
and	$v\Sigma_f$	0.0	0.7
Neutron velocity (cm/sec)	$\Sigma_t (\Delta\Sigma_t)$ Σ_s	1.0(-0.1) 0.0	1.0(-0.1) 0.5
	v	1 (normalized)	
Region boundary from the left boundary (cm), Number of spatial mesh points		0.621024 10	3.10512 20
Left boundary		reflective	
Right boundary		vacuum	
Geometry		slab	
Energy group		1	
Order of S _N		S_4	

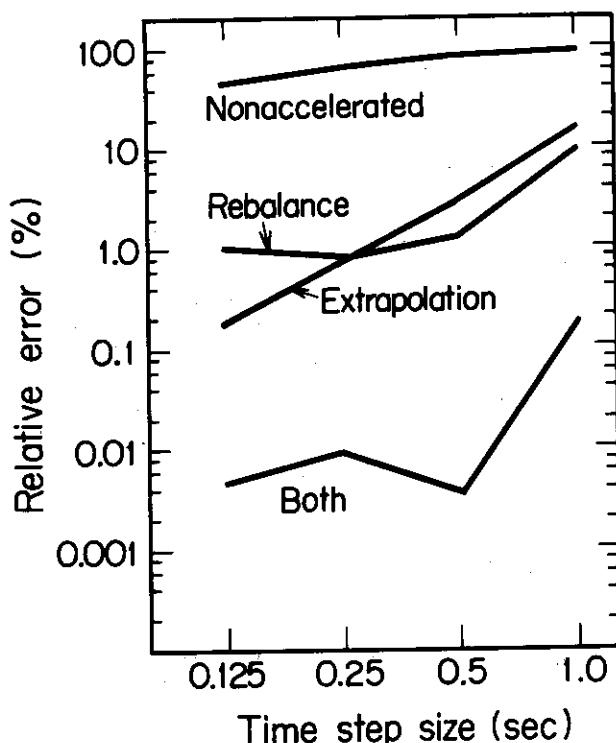


Fig. 3.4 Effects of two acceleration methods for test problem 2 by TIMEX code

Table 3.2 Neutron flux after 50 sec. for test problem 2

Acceleration methods		At mesh point 1	At mesh point 10	At mesh point 20
Exact		149.605	278.047	632.771
No acceleration $\Delta t:$	1.0	10.612	18.865	41.145
	0.5	24.245	43.698	96.576
	0.25	48.800	88.990	198.898
	0.125	79.409	146.003	328.893
Rebalance $\Delta t:$	1.0	164.090	311.123	689.236
	0.5	151.384	283.067	632.962
	0.25	148.259	275.906	621.286
	0.125	148.123	275.361	622.903
	0.0625	148.611	276.221	626.563
Extrapolation $\Delta t:$	1.0	132.426	246.121	560.113
	0.5	145.124	269.721	613.821
	0.25	148.475	275.949	627.994
	0.125	149.321	277.522	631.575
Both $\Delta t:$	1.0	149.884	278.568	633.955
	0.5	149.610	278.058	632.794
	0.25	149.591	278.024	632.716
	0.125	149.598	278.036	632.745

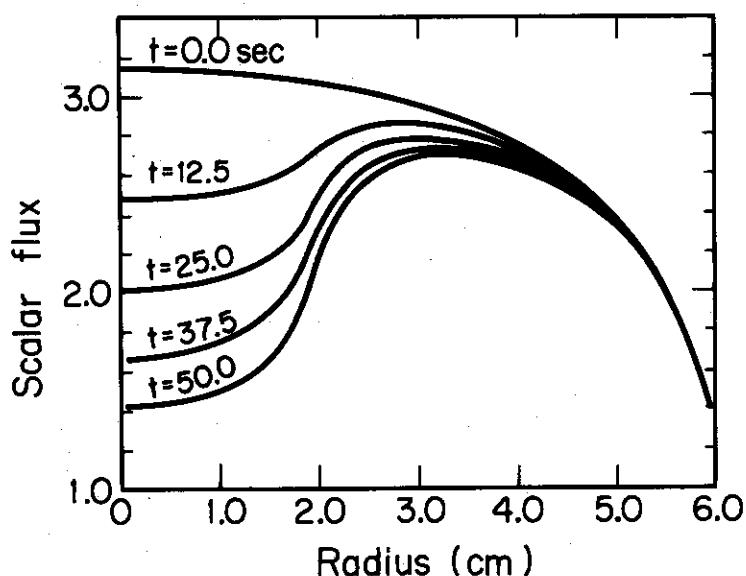


Fig. 3.5 Numerical results for test problem 3 by TIMEX code

Table 3.3 Data of test problem 3 for TIMEX code

		Material 1		Material 2	
		Energy group 1	Energy group 2	Energy group 1	Energy group 2
Cross sections (cm ⁻¹) and Neutron velocity (cm/sec)	Σ_a	0.05, +0.01t ($\Delta\Sigma a$)	1.0	0.05	1.0
	$v\Sigma_f$	0.0	0.0	0.0	0.0
	Σ_t	0.05, +0.01t	5.0	0.5	5.0
	$\Sigma_s^{1 \rightarrow 1}$	0.2	4.0	0.2	4.0
	$\Sigma_s^{2 \rightarrow 1}$	0.0	0.25	0.0	0.25
	v	1000	1	1000	1
Region boundary from the left boundary (cm)		2.0		6.0	
Number of spatial mesh points		20		40	
Left boundary		reflective			
Right boundary		vacuum			
Geometry		cylinder			
Order of S _N		S ₈			

Table 3.4 Comparison of the TIMEX's method and the exact
method for test problem 3 (flux of group 2 at
mesh point 1)

Time (sec)	Methods of one dimensional kinetics	
	With rebalance (Δt=0.5 sec.)	Matched asymptotic expansion (exact)
0.0	0.7822	0.7822
12.5	0.6311	0.6312
25.0	0.5140	0.5139
37.5	0.4280	0.4278
50.0	0.3630	0.3628

3.3 TASKアルゴリズムを用いた方法の計算

TASKアルゴリズムを用いた計算コードは第2章に述べたようにTASKコードとTDTコードであるが、最初にTASKコードを用いた例を述べ、次にTDTコードを用いた例を述べる。

イ) TASKコードを用いた計算

TASKコードはコードの使用マニュアル¹⁵⁾によると拡散近似と輸送理論両方の計算ができるが両方の近似の比較はここでの目的ではないので、専ら輸送理論に基づく検討を行う。¹⁴⁾

まづ最初にTASKアルゴリズムによる空間分布の解き方は第2.3章で説明した現在広く用いられているダイヤモンド差分を用いた解法(ANISNコード)とは異なる。この両方の解法の比較を高速炉の体系(LMFBR、しかし、解いたときの体系は板状)で行ったのがFig. 3.6である。P₃-散乱、5群定数¹³⁾を用いてS₄で解かれている。ANISNコード²⁵⁾と非常に良く一致している。第2.3章の説明では、時間に関してLaplace変換した後のパラメータは記述の簡略化のため省略してあるが、このパラメータ(これも振動数frequencyと呼ばれる。ここでの説明では専らこの意味で用いる)の広い範囲に亘って、TASKコードを用いて(板状13領域)、高速中性子の体系FTR-3(反射体付き、1035リッターの容量の2領域中炉心から成る)において実験と対比したのがFig. 3.7である。¹⁴⁾広い振動数範囲に亘ってTASKコードと実験値との一致は良い。

未臨界体系でのパルス中性子実験での実験値との比較検討も行われている。熱中性子体系(重水散速、天然ウラン燃料)に対する検討では、実験値と良く一致しているが、このときはTASKコードの中の拡散近似との対比であった。¹³⁾高速炉体系(LMFBR)において、未臨界-3.13、-10.03(通常の反応度変化most kinetics of reactivityに相当)および-29.86(炉心完全停止、full shutdownに相当)の3ケースについて、TASKコード(輸送理論)を用いて実験をシミュレーションした図がFig. 3.8、Fig. 3.9およびFig. 3.10に示されている。検出器の応答値とパルス中性子源のFourier変換した値(振幅amplitudeと位相phaseで)が図の中で示されている。比較のために1点近似動特性解析による値が示されているが、TASKコードとの差が可成りあり、TASKコードはこの方面での利用にも価値があることが分る。

ロ) TDTコードを用いた計算¹⁷⁾

TDTコードはTASKコードの収束の悪さ($\Sigma_{s,0}^{g \rightarrow g}$ の値が $\Sigma_{t,g}$ の値と同じオーダーの大きさのとき、内側反復の収束が遅いのと、上方散乱が存在するときは外側反復の収束が遅い)を、空間に関しては外側反復に粗格子リバランス(coarse mesh rebalancing)を主体とした改良を施し、時間に関しては、指數外挿法を適用して、制御棒の突然の移動などの場合でも解析できるように、改良されたものである。^{16, 17)}

TDTコードの妥当性を検討するために最初にZPR-9のFTR-3m装置(ANLにある)を用いて1点近似動特性解析との検討が行われた。Table 3.5に示す3つのテスト(体系についてはFig. 3.11(a)、群定数などについてはTable 3.6参照)の結果を示してあるがテスト1では、空間変化の歪みを小さくするため、反応度の摂動を対称にとったが1点近似が良く成り立つ問題である。したがってTDAコードとの差も1%と僅少である。テスト2は、同じ

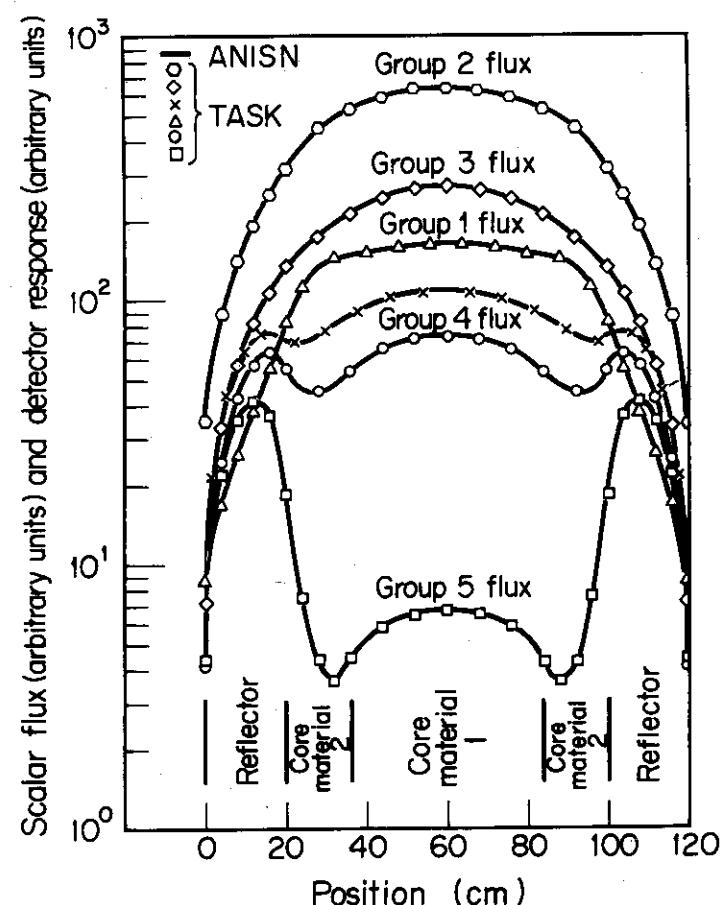


Fig. 3.6 Group fluxes and detector response versus position obtained from K_{eff} calculations performed by ANISN and TASK codes for a LMFBR system at $\sim 3.13 \pm$

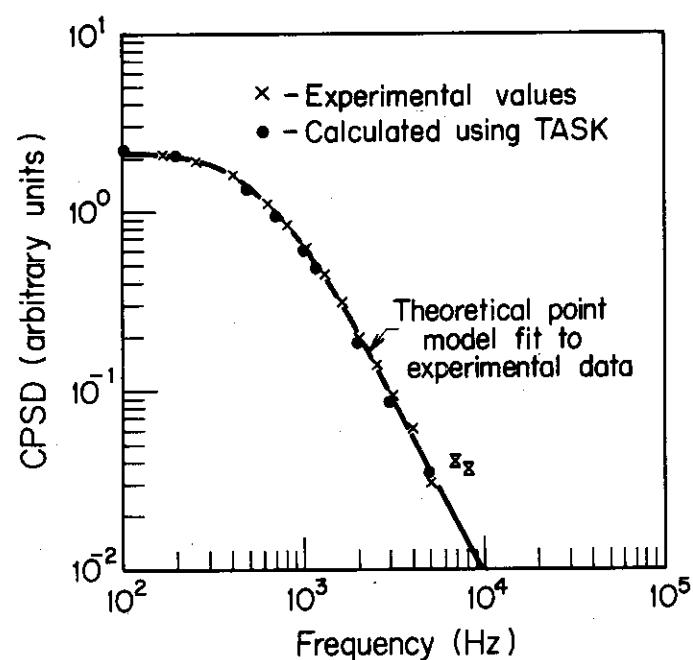


Fig. 3.7 The experimental and computed CPSD (cross-power spectral density) at critical for the homogeneous FTR-3 in ZPR-9

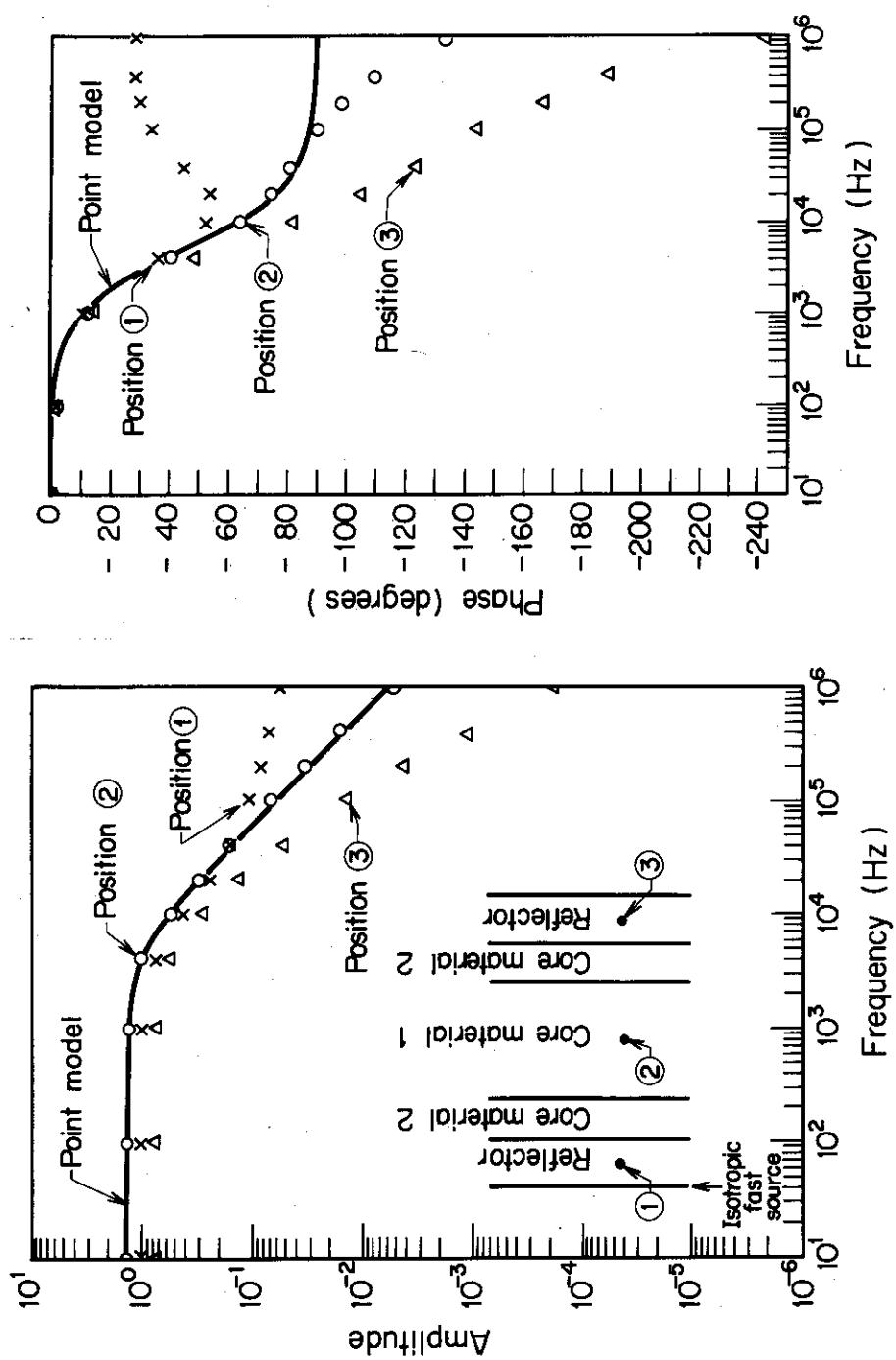


Fig. 3.8 Amplitude and phase of the source transfer function versus frequency for the three detector positions in a LMFBR at - 3.13. \$ (point model data are normalized to the position 2 at 10 Hz)

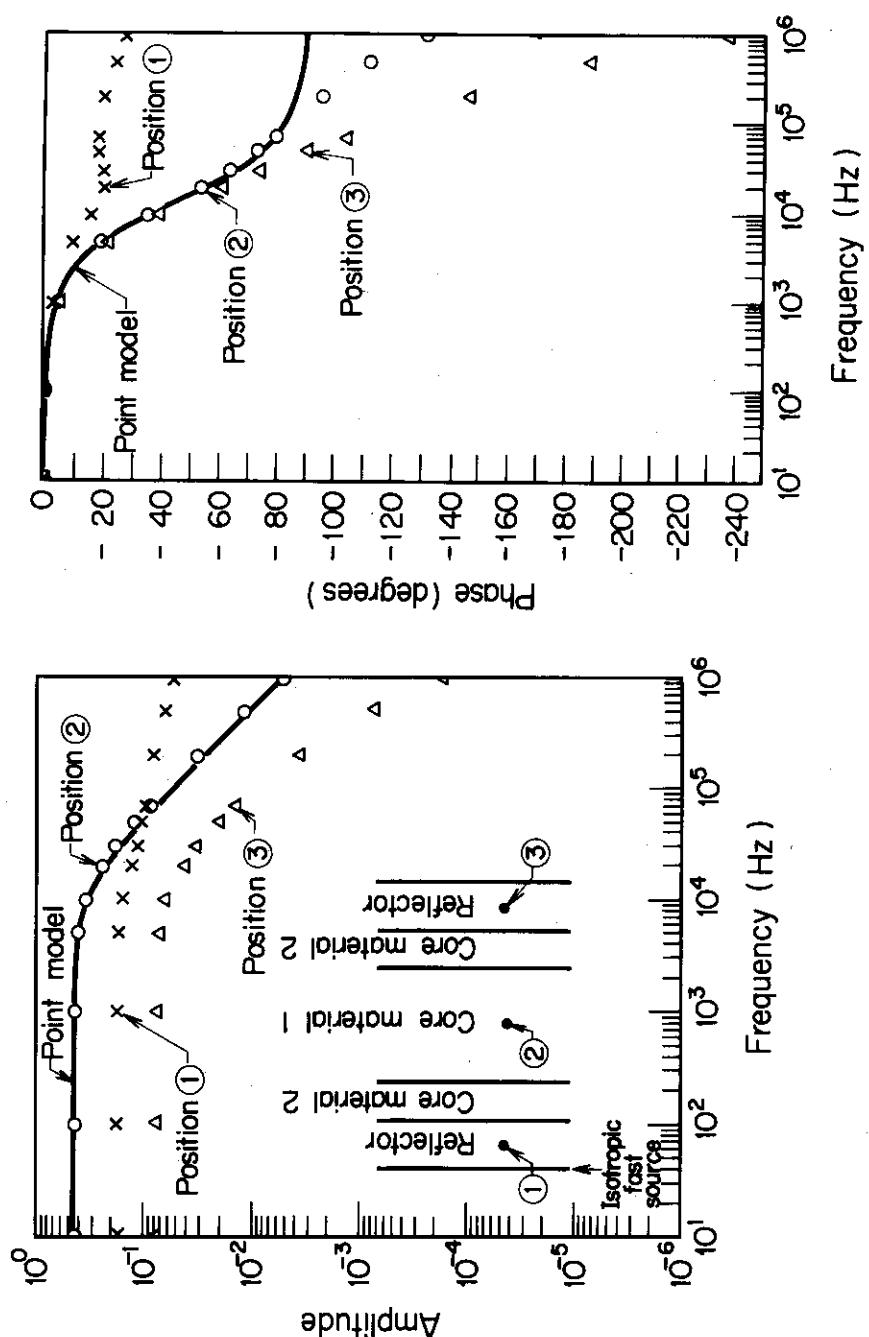


Fig. 3.9 Amplitude and phase of the source transfer function versus frequency for three detector positions in a LMFBR at -10.03 \$

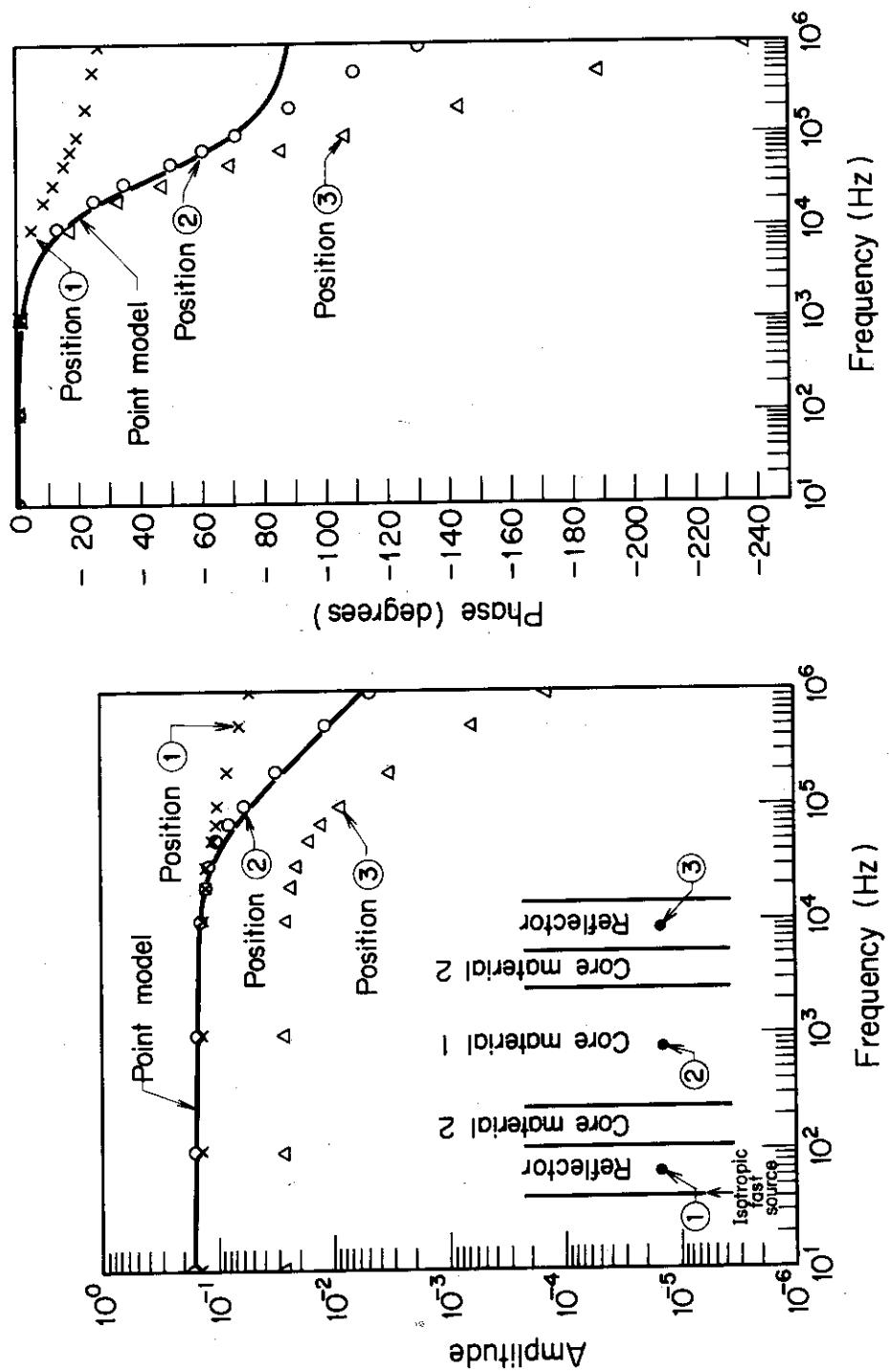


Fig. 3.10 Amplitude and phase of the source transfer function versus frequency for three detector positions in a
LMFBR at - 29.86 \$

Table 3.5 Comparison between TDT code and the point kinetics model

	Test 1	Test 2	Test 3
Problem description:	far sub-critical	near critical	
Initial reactivity (\$)	- 3.0932	- 0.1876	- 0.1876
Final reactivity (\$)	- 8.4407	- 0.9718	- 5.0490
Generation time (μ sec)	0.72	0.75	0.75
Reactivity perturbation in space	symmetry	symmetry	nonsymmetry
Comparison of the powers	within 1 %	within 1 %	11.6 % #1) 11.7 % #2)

Note: Two detectors with ^{235}U fission counters were located in the reactor shield. Detector # 1 was located at 68.3 cm from the center of core and detector # 2 was located in the center of the core.

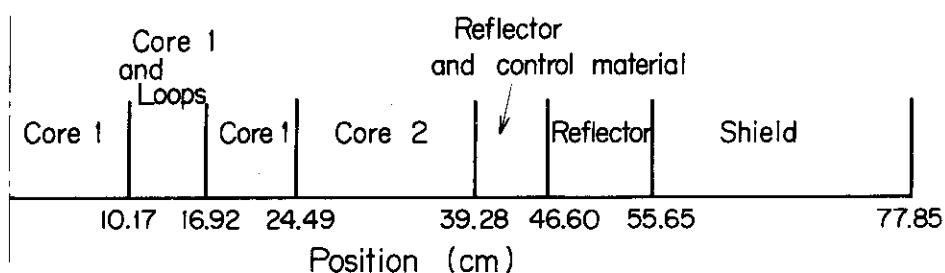


Fig. 3.11(a) One-dimensional model of FTR-3m for comparison between the point kinetics model and TDT code

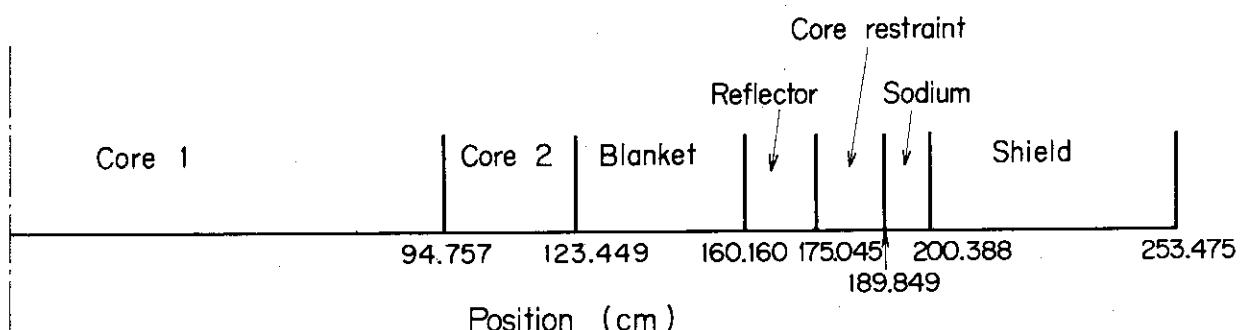


Fig. 3.11(b) One-dimensional model of a hypothetical fast reactor for comparison between TDA and TDT codes

のような摂動で、臨界に近い体系を採ったが、同様な結果を示している。テスト3ではかなり端のところ（中心から 68.3 cm の遮蔽内）に検出器1 (^{235}U 分裂カウンター)，また中央にも検出器2（検出器1と同じもの）を置いた問題だが、摂動が空間について非対称のためにスペクトルラムシフトを生じ、その結果、1点近似と TDA コードとの差が現われてくる（Fig. 3.12 および Table 3.5 参照）。

次に行われた数値実験は仮想的に設定された高速炉（体系については Fig. 3.11(b)、群定数については Table 3.6 参照）を用いて、TDT コードと TDA コード（第 2.1 章参照）の比較検討が行われた。Fig. 3.13 に示すように両コードの一一致は良い。若干の相違は、TDA コードでの計算が円柱状であるのに対し、TDT コードの計算が板状（TDT コードでは円柱状は不能）であるためによる固有値の差によるもので、この補正を行うと、両コードの結果は全く一致する。要した計算時間は、TDT コードで 22.56 分、TDA コードで 5.16 分 (IBM 360/91) である。TDT コードの時間のかかり過ぎが目立つが、これは未だ外側収束の加速の工夫が不充分なためであろう。

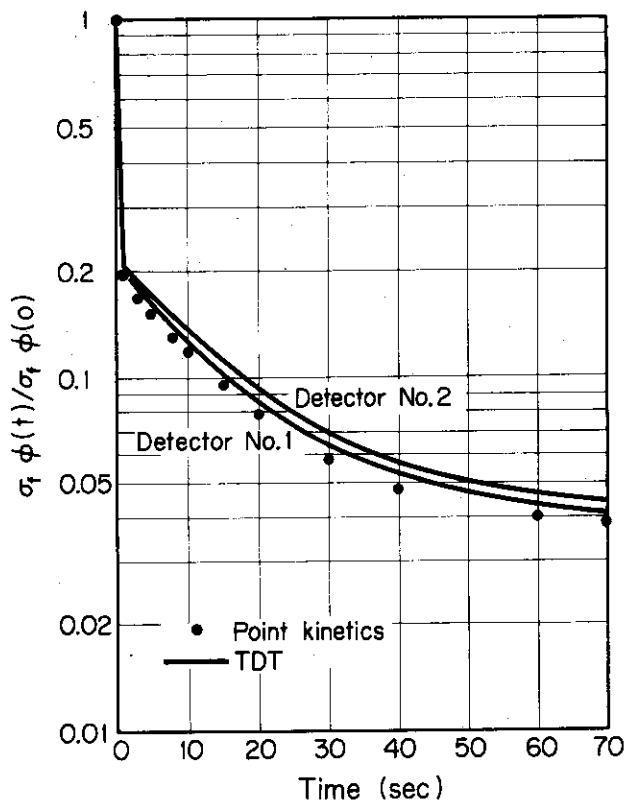


Fig. 3.12 Relative reaction rates versus time on TDT and point kinetics calculations

Table 3.6 Problem description for numerical test of TDT code

	Test of Fig. 3.11	Test of Fig. 3.13
Object	Comparison of the point model and TDT Rod drop in sub-critical reactor	Comparison of TDA and TDT Rod drop in a sub-critical reactor
Reactor regions	13	13
Group constants	XSDRN & ANISN	XSDRN & ANISN
Energy groups	5.	6
N of S_N	4	2
Scattering	P_3	P_1
Transverse leakage	DB^2	B^2 adjusted to TDT for the same eigenvalue
Delayed neutron group	1	2
Delayed neutron fraction	0.0032 (β)	0.005 (β_1) 0.003 (β_2)
Delayed neutron decay constant	0.08 sec^{-1} (λ)	3.0 sec^{-1} (λ_1) 0.02 sec^{-1} (λ_2)

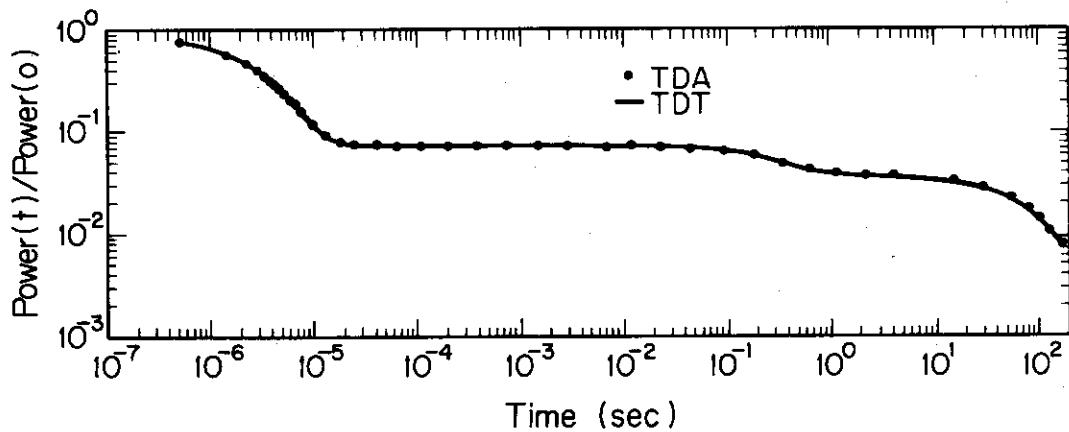


Fig. 3.13 Relative reactor power versus time by TDT and TDA calculations

3.4 TRANZIT コードを用いた計算¹⁹⁾

ここでは、TRANZIT コードと Monte Carlo 法 (ANDYIR2 コード) との比較を示す。特に、TRANZIT コードでの第 1 衝突源の有無に対する検討を行う。

いま、 $\sigma_s / \sigma_t = 0.2$ の一様等方散乱媒質の円柱（半径； $0 < r < 1.0\text{m}$ ， 高さ； $0 < z < 2.0\text{m}$ ）の頂き（ $0 < r < 0.1\text{m}$, $1.99 < z < 2.0\text{m}$ の処）に、一様に分布した等方粒子源を考える。そのとき、粒子は 1 cm/sec の速度を持っているとする。TRANZIT コードを用いた計算は S_8 で 400 空間メッシュで行われた。Monte Carlo 法コードは 10^5 の粒子を 3 回別々に走らせて、計算を行った。これらの計算結果は Fig. 3.14 に示されているが、第 1 衝突中性子源を用いないとき、時間ステップが 0.2 sec のときは Monte Carlo 法の結果より悪く、時間ステップを 0.05 sec にとると良い一致をみるとわかる。

今度は、同じ体系であるが、 $r = 0$, $z = 1.9\text{ m}$ に点状源を考える。また TRANZIT コードによる計算では S_4 を用い、Monte Carlo 法の計算では、120,000 の粒子で出発する。これらの計算結果は Fig. 3.15 に示されるが、全体として、第 1 衝突源を用いた場合は良い一致を示す。時刻 1.9 , 2.0 , 2.76 sec の変曲点は衝突しない波面が、それぞれ、底面又は右側面に達する時刻あるいは、この円柱を逃げ出す時刻を示している。右側面の洩れ (right leakage) の曲線が 2.76 sec を過ぎたところで振動しているのは、陰解法差分による影響と思われるが、スカラー中性子束では、これより大きい時間ステップでも、この振動は現われない。尚、計算時間は、Monte Carlo 法では 4 min. (CDC6600 CPU time) であった。TRANZIT コードによる計算では、5.5 秒までの間、56 ステップのときで 9 min., 25 ステップのときで 5 min であった。また、これら時間ステップの相違による吸収の値は、 $5.2\text{ sec} < t < 5.6\text{ sec}$ のときであるが、 2.2×10^{-5} (56 ステップのとき), 2.9×10^{-5} (25 ステップのとき) であった。

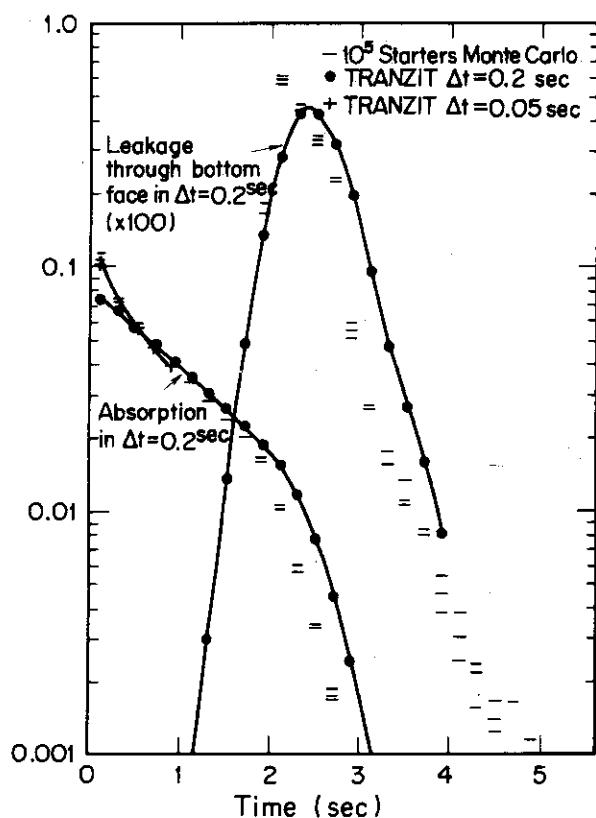


Fig. 3.14 Comparison of Monte Carlo method and TRANZIT code without using first collision source

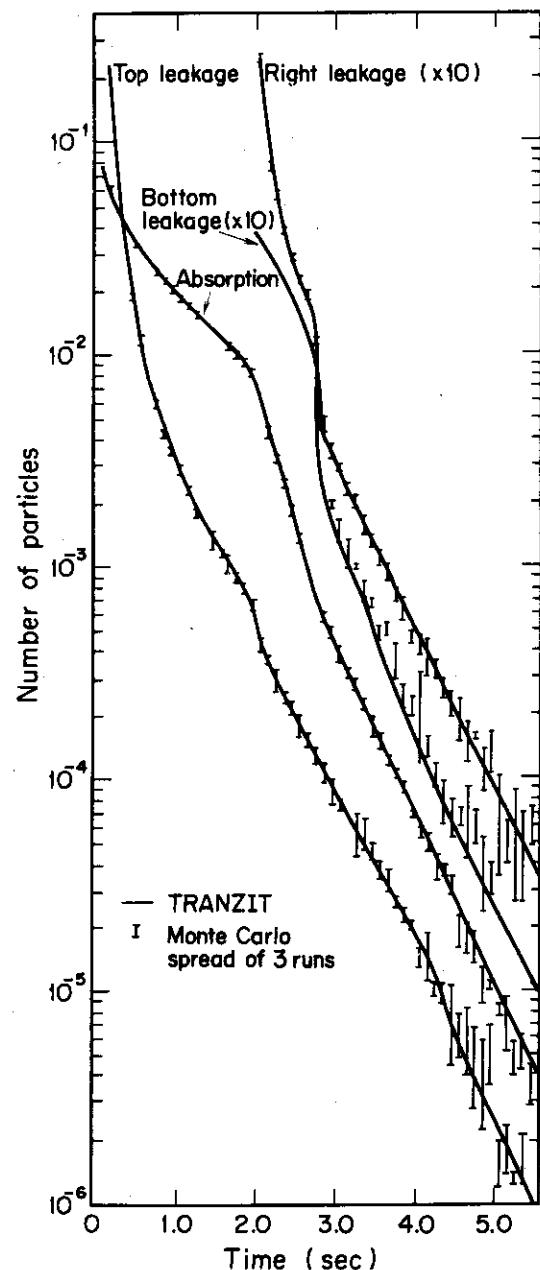


Fig. 3.15 Comparison of Monte Carlo method and TRANZIT code using the first collision source

3.5 その他の方法による計算

一様媒質板状体系で、中性子1群ならば解析的な取り扱いが可能である。Ganapol⁹⁾は多重衝突理論を応用した衝突中性子束展開法（Collided Flux Expansion Method, CFE法）を板状体系に応用して、時間依存輸送方程式を解いている。数値積分および有限な級数展開などによる数値的な誤差を除いては厳密な解を与える。CFE法⁹⁾とは簡単に示すと次のようなものである。

いま、一様な板状体系に対する輸送方程式を次式のように書く。

$$\left[\frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} + \mu \frac{\partial}{\partial x} + \Sigma \right] \phi(x, \mu, t) = C \frac{\Sigma}{2} \phi(x, t) + S(x, \mu, t) \quad (3.2)$$

ここに

$$\phi(x, t) = \int_{-1}^1 \phi(x, \mu', t) d\mu' : \text{スカラー中性子束}$$

$$S(x, \mu, t) = \frac{\delta(x) \delta(t)}{2} : \text{時刻 } t = 0 \text{ で, 位置 } x = 0 \text{ のところに存在している等分布中性子源}$$

$$C = \frac{\Sigma_s + \nu \Sigma_t}{\Sigma} : 1 \text{ 回の衝突について生まれる 2 次中性子の数}$$

その他の記号は自明と思われる。

(3.2)式の $\phi(x, \mu, t)$ を次式の如く、衝突中性子束（collided flux）で展開し、

$$\phi(x, \mu, t) = \sum_{n=0}^{\infty} \phi_n(x, \mu, t) \quad (3.3)$$

初期条件および境界条件を適用すると、スカラー中性子束は次式で与えられる。

$$\phi(x, t) = \frac{e^{-\Sigma_v t}}{2t} \left[1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{C \Sigma_v t}{2} \right)^n (n+1) Q_{n+1}^{n-1}(\eta) \right] H(1 - |\eta|) \quad (3.4)$$

ここに

$$Q_{n+1}^{n-1}(\eta) = -\frac{1}{2\pi i} \frac{n}{(n+1)!} \int_{\eta}^1 (y-\eta)^{n-1} M_{n+1}(y) dy$$

$$M_{n+1}(y) = \left\{ \left[\ell n \left| \frac{1+y}{1-y} \right| - i\pi \right]^{n+1} - \left[\ell n \left| \frac{1+y}{1-y} \right| + i\pi \right]^{n+1} \right\}$$

$$H(1 - |\eta|) = \begin{cases} 1, & 0 \leq |\eta| < 1 \\ 0, & |\eta| > 1 \end{cases} \quad (\text{Heaviside のステップ})$$

関数と呼ばれる

この(3.4)式を数値的に解いた、すなわち、CFE法と P_1 近似、拡散近似および極近似((3.2)式を空間に関してはFourier変換し、時間に関してはLaplace変換するのであるが逆変換の際の積分における極の寄与に近似を施したもの)を比較したのがFig.3.16である。厳密解(CFE法)に最も近いのが極近似(pole approximation)であるのは近似のアルゴリズムからいっても当然と考えられるが、 P_1 近似より拡散近似の方が近似が良いことは注目をひく。尚、 P_1 近似、拡散近似および極近似での解は次式で与えられる。

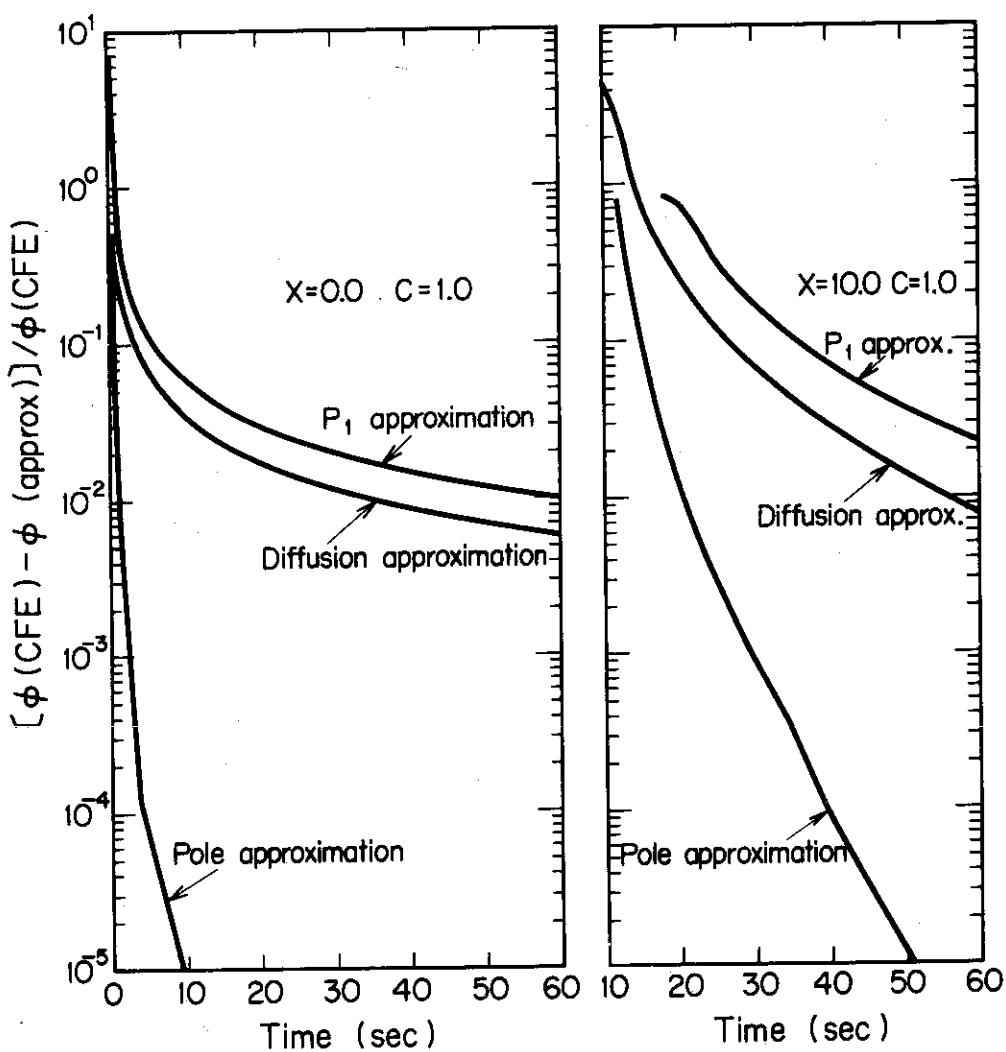


Fig. 3.16 Comparison of CFE solution (exact) and several approximate solutions

P₁ 近似では

$$\begin{aligned}\phi(x, t) = & e^{-\Sigma(1-C)v t} \frac{\sqrt{3}}{2} \left[\Sigma_s + \frac{\theta}{\theta t} \right] e^{-\Sigma_s v t} \times \\ & \times I_0 \left(\frac{\Sigma_s v t}{2} \sqrt{1 - 3 \left(\frac{x}{v t} \right)^2} \right) H \left(1 - \sqrt{3} \frac{|x|}{v t} \right)\end{aligned}\quad (3.5)$$

ここに $I_0(u)$ は第 1 種変形 Bessel 関数である。

拡散近似では、

$$\phi(x, t) = \frac{v}{\sqrt{\frac{4\pi v t}{3\Sigma_s}}} \cdot \exp \left\{ -\Sigma(1-C)v t + \frac{x^2}{4 \frac{v t}{3\Sigma_s}} \right\} \quad (3.6)$$

極近似では

$$\begin{aligned}\phi(x, t) = & \Sigma_s e^{-(1-C)\Sigma v t} \sqrt{\frac{3}{4\pi\theta}} e^{-\frac{\xi^2}{4\theta}} \times \left\{ 1 + 0.35 \frac{1}{\theta} + (0.099107 - 0.1\xi^2) \frac{1}{\theta^2} \right. \\ & \left. - (0.027723 - 0.010714\xi^2 + 0.0125\xi^4) \frac{1}{\theta^3} + \dots \right\}\end{aligned}\quad (3.7)$$

ここに

$$\theta = v \Sigma_s t, \quad \xi = \sqrt{3} \Sigma_s x$$

Yingling ら²¹⁾ は、上で述べた極近似に似た方法で、Laplace 変換および Fourier 変換した後の近似に連分数による展開を適用した式を導き出している。いま球形に対する結果の式を示すが、ゼロ次オーダーの式では、

$$\phi(r, t) = \frac{v \Sigma_{so}^3 \exp \left\{ -(\Sigma_a v t + \frac{\rho^2}{\tau}) \right\}}{(\pi \tau)^{\frac{3}{2}}} \cdot \left\{ 1 - \left(\frac{\rho}{\tau} \right)^2 + \frac{3}{2\tau} \right\} \quad (3.8)$$

1 次オーダーの式では

$$\begin{aligned}\phi(r, t) = & \frac{\Sigma_{so}^3 \exp \left\{ -(\Sigma_a v t + T) \right\}}{2\pi a_1^{\frac{3}{2}}} \cdot \left\{ \left[\frac{2I_1(Z)}{Z} - \frac{T I_2(Z)}{Z^2} \right] \times \right. \\ & \left. \times H(T-R) + \left(\frac{2}{R} - \frac{1}{2} \right) \delta(T-R) - \frac{1}{R} \delta'(T-R) \right\}\end{aligned}\quad (3.9)$$

である。ここに

$$\tau = \Sigma_{s_0} v t, \quad T = 2\tau, \quad R = \frac{\rho}{\sqrt{a_1}}, \quad a_1 = \frac{1}{3},$$

$$Z = \sqrt{T^2 - R^2},$$

I_n = n次の変形 Bessel 関数,

δ' = Dirac の δ 関数の微分

で、Hは(3.5)式の際に用いたものと同じである。この連分数を用いての近似(Continued Fraction approximation, CF近似)のゼロ次オーダの式は実は既に示した(3.1)式の拡散近似と同じ結果を与える。CFE法で述べた拡散近似と P_1 近似との比較のために別の表現の式を用いると、拡散近似の式は

$$\phi_{\text{diff}}(K^2, L) = \frac{1}{-\Sigma_{s_0} + L + \frac{a_1 K^2}{\Sigma_1}} \quad (3.10)$$

で示される。

ここに、 K^2 は空間を示す Fourier 変換パラメーター、Lは時間についての Laplace 変換パラメータである。この式は CF近似において連分数の第1項までとった表現であるのに P_1 近似では、分母の $-\Sigma_{s_0} + L$ の項が無い表現であるので、拡散近似より近似が良くない、という説明を Yingling は与えている。厳密解(TDAコード)と比較するために、Fig. 3.1 および Fig. 3.2 で与えたのと同じ例を Fig. 3.17 および Fig. 3.18 に示す。CF-1近似((3.9)式)と拡散近似とは比較的良く一致している。これらは、全時間範囲に亘って厳密解に良く一致しているのは中性子源(δ 関数)の近くで(Fig. 3.17参照)、中性子源から充分離れた空間まで厳密解と良く一致するのは、充分時間が経過したとき(Fig. 3.18参照)である。

第2.3章で述べた応答マトリックス法(response matrix method)は、積分型輸送方程式の解法(衝突確率法, collision probability method)の長所、すなわち、比較的粗い空間メッシュを探っても精度が落ちないこと、をベースに発展させたものである。

Sicilian^{20,28)}らは、この応答マトリックス法の長所を生かして、これを時間依存の輸送方程式の解法に応用し、コード TRASCAL を開発している。すなわち、六方格子を構成する各々のセル(cell)に対する時間依存応答マトリックスを作り、これが、全体系でのバランスをとった中性子の流れに結びつけられる。これはちょうど、差分型でいえばセルが群定数を持つ空間メッシュに相当するが、このメッシュより大きなセル、例えば燃料セルが採られる。時間については指數外挿法の加速による前進差分が用いられている。

このTRASCAL コードを用いた例を3ケース、以下に示す。計算はエネルギー2群、遅発中性子の組6で行われた。体系は Fig. 3.19 に示すように対称性から 1/6 炉心で、3領域に分けてある。まづ、Case 1では、炉心全体に一様に、0.25%の反応度をステップ状に挿入

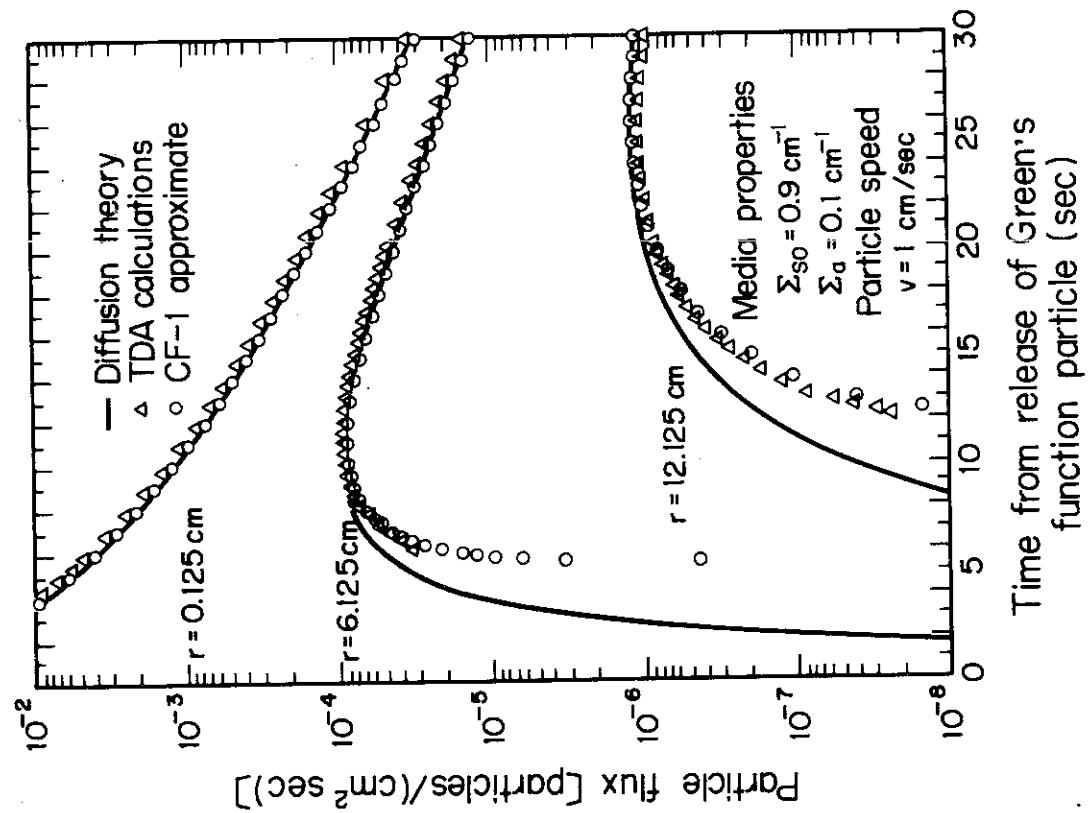
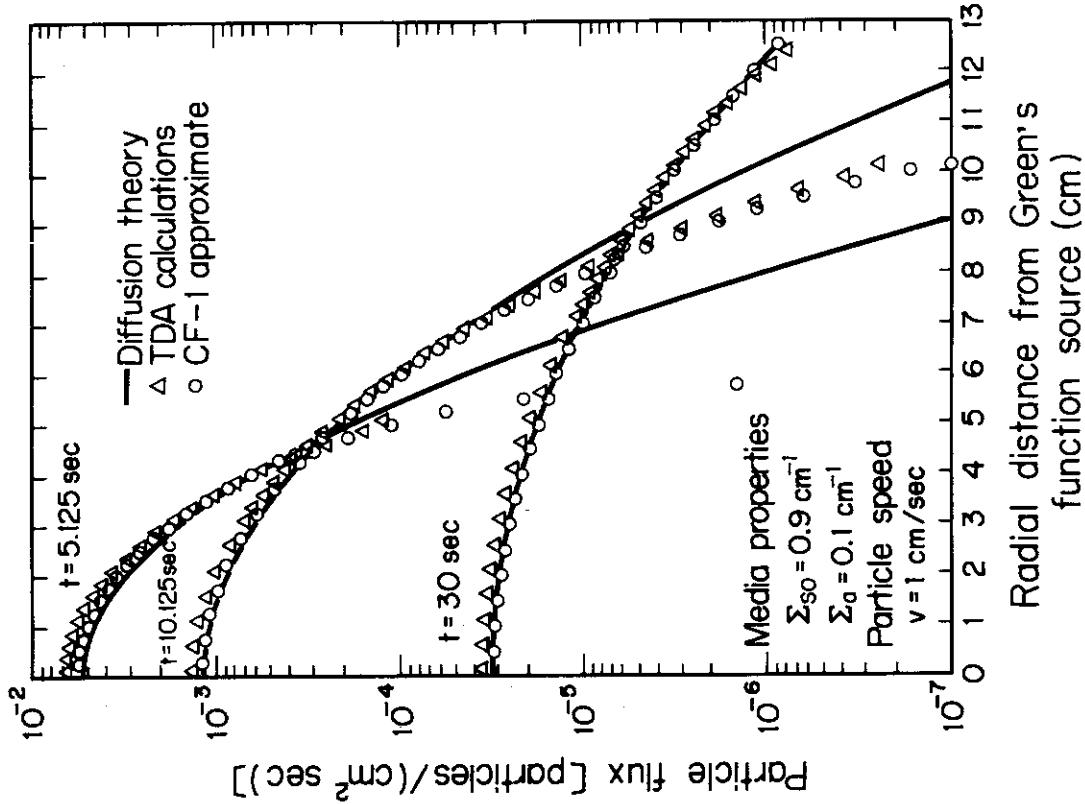


Fig. 3.17 Comparison of temporal histories for a spherical case

Fig. 3.18 Comparison of spatial distributions for a spherical case

したときで、Fig.3.20 に出力変化の様子が示されている。輸送コード TRASCAL と拡散コード (TRIMHX : 差分法を用いた動特性計算コード)との一致は非常に良い。Case 2 では第1 および第2 領域に 0.65% の反応度挿入を考える。この場合の出力変化の様子は Fig.3.21 に示されている。漸近的 (asymptotic) なところでは両コードの差が出てくる。次に、輸送理論の効果をより強く出した例を掲げる。Case 3 は、領域1 の減速材 (重水) が通常の 0.5 % の密度に落ちてしまうことを考える。Fig.3.22 には静的状態のときの中性子束分布を示すが、熱群では、特に拡散近似 (TRIMHX コード) が、ボイド領域への洩れを過大評価していることがわかる。Fig.3.23 は出力変化の様子を示したものだが、輸送理論によるものと拡散近似によるものとではかなりの差が現われている。

以上の例でわかるように、輸送理論によるコードは明らかに拡散近似によるコードより良い値を示すが、応答マトリックス法を用いた動特性計算コードでは、収束の点から云えば、拡散近似に基づくものとあまり変わらない。1 反復計算当たりの平均 C P U 時間は、TRASCAL コード (輸送理論) で 0.35 秒、TRIMHX (拡散近似) で 0.31 秒である。Table 3.7 に上記の 3 ケースに対する両コードの計算時間を示す。このように両コードの計算時間は略等しいと云うことはできるが、この計算に入る前の準備段階では著しく異なる。TRIMHX コードの群定数作成は RAHAB コードで行われるが、ここでの問題では 1 分以内である。一方これに対応する TRASCAL コードの応答マトリックスの計算は Monte Carlo 法と衝突確率法を併用した RESPONSE コードで行われるが、セル 1 ケ当り 10 分かかる。この辺が今後の残された問題であろう。

Lefvert²³⁾ は、パルス中性子実験の解析のために、点状中性子源を持つ球体系に対して、時間依存の衝突確率法の公式化に成功し、その計算結果を発表している。26 領域からなる一様媒質の球 (半径、13 mfp) の中心にパルス中性子を打ち込んだときの中性子束の時間変化の様子を厳密解と比較している。Fig.3.24 は、吸収の少ない体系のときであるが、厳密解 (TDA コード) との一致は良い。Fig.3.25 は、吸収の強い体系に対してであるが、時間が経過するに従い、厳密解 (TDA コードおよび MORSE (Monte Carlo 法) コード) に比べて過少評価となっており、ここでの方法は適してないと思われる。

最近、Hill²⁴⁾ は、空間的に 1 次の有限要素法を取り入れ時間的には陰形差分法をとり入れた 1 次元の時間依存輸送方程式の解法を発表している。すなわち、B を除去演算子、S を中性子源とすると、陰形差分を用いた時間差分方程式として次式が用いられる。

$$\frac{1}{v \Delta t} (\psi^{j+1} - \psi^j) + B \psi^{j+1} = S^j(r) \quad (3.11)$$

ここに、 ψ^j は時間ステップ j のときの角度中性子束である。一方、空間差分に関しては、中性子束は、各メッシュセルに 1 次の Lagrange 型内挿式を用いた表現で表わされる：

$$\psi^{j+1}(r) = \frac{1}{\Delta r_i} \left[(r_{i+\frac{1}{2}} - r) \psi_{i-\frac{1}{2}}^{j+1} + (r - r_{i-\frac{1}{2}}) \psi_{i+\frac{1}{2}}^{j+1} \right] \quad r \in (r_{i-\frac{1}{2}}, r_{i+\frac{1}{2}}) \quad (3.12)$$

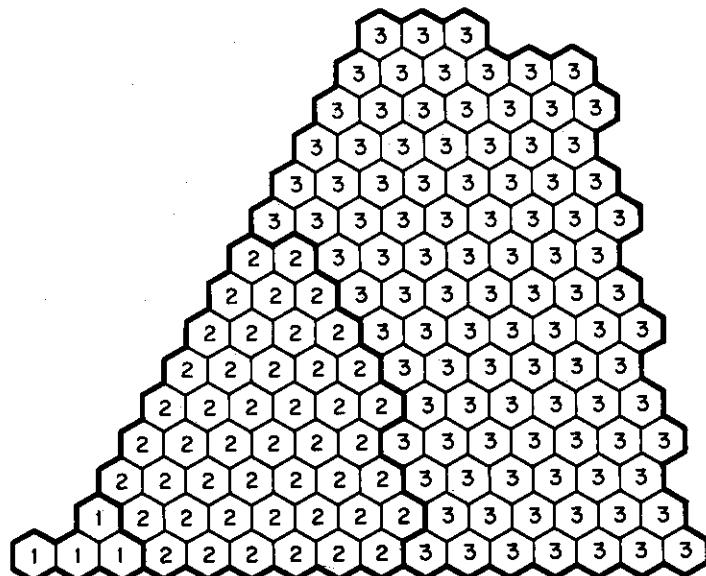


Fig. 3.19 Three-zoned reactor for sample calculations (unit cell consists of concentric tubes of Al-cladded enriched uranium surrounding heavy-water coolant)

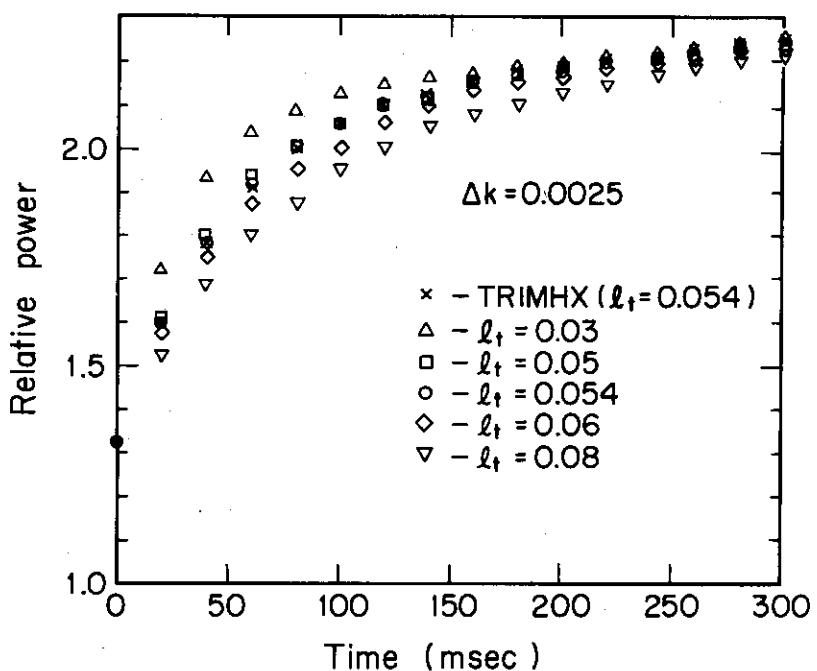


Fig. 3.20 Reactor power variations for a uniform step reactivity insertion of 0.25 % (l_t = thermal groups prompt neutron life time in sec., TRIMHX = diffusion approximation kinetics code) --- Case 1

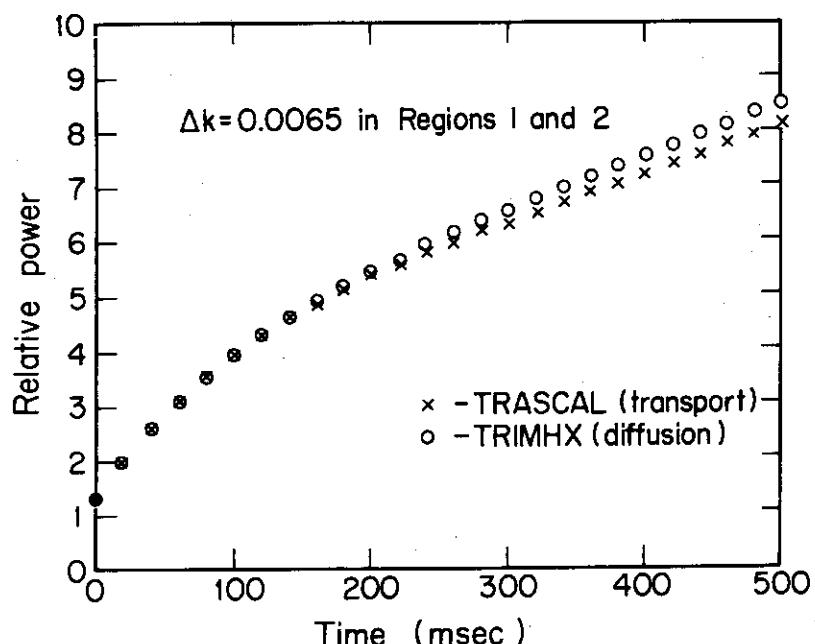


Fig. 3.21 Reactor power transient for 0.5 % step reactivity insertion in regions 1 and 2 --- Case 2

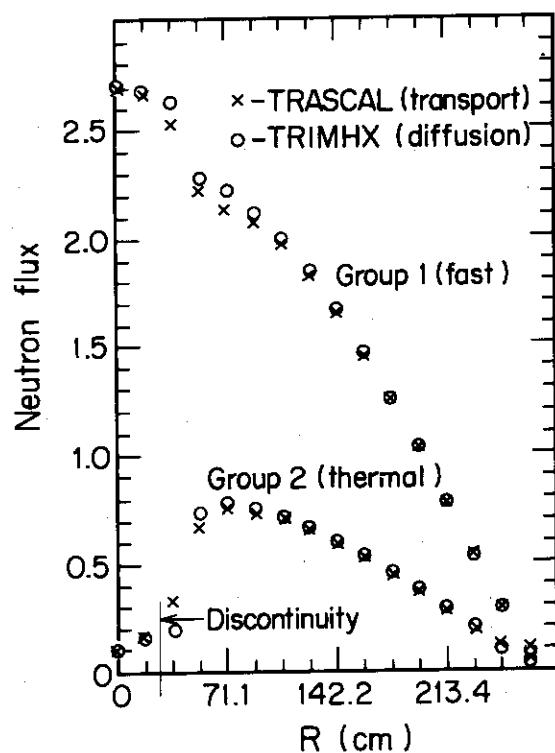


Fig. 3.22 Stationary flux shapes in a reactor with a central void (moderator density in region 1 is 0.5 % of normal value) --- Case 3

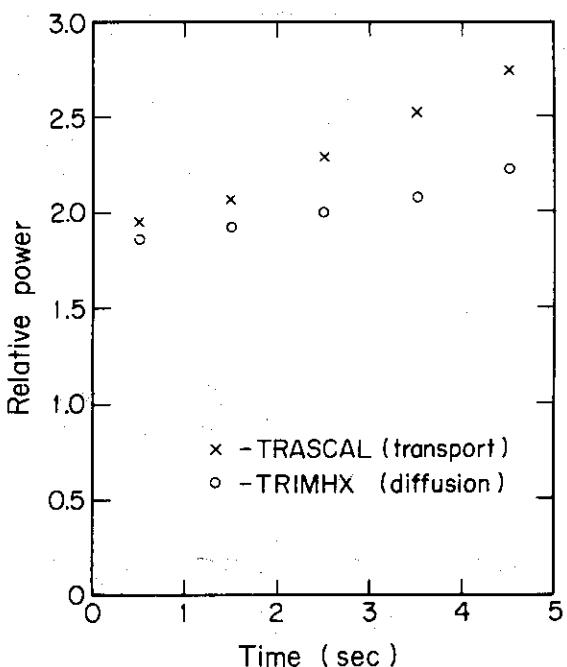


Fig. 3.23 Reactor power for void flooding transient in Case 3

Table 3.7 CPU time requirement for TRASCAL (transport) and TRIMHX (diffusion) codes

Problem	Total CPU time (min. on IBM 360/195)	
	TRASCAL *)	TRIMHX
Case 1 (450 time steps)	10.0	10.2
Case 2 (700 time steps)	14.5	15.0
Case 3 (450 time steps)	10.5	11.0

*) Core storage is less than 500 K bytes for all of the problems and somewhat higher than TRIMHX code.

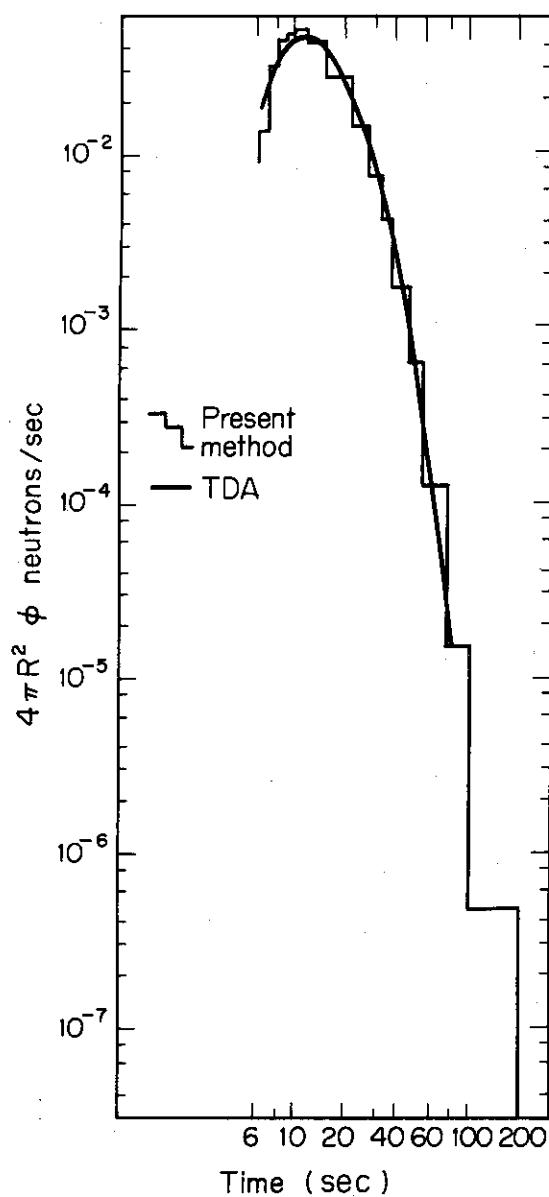


Fig. 3.24 $4\pi R^2$ flux at 6 mean free paths from the center of a spherical system with the nonabsorption probability of 0.9

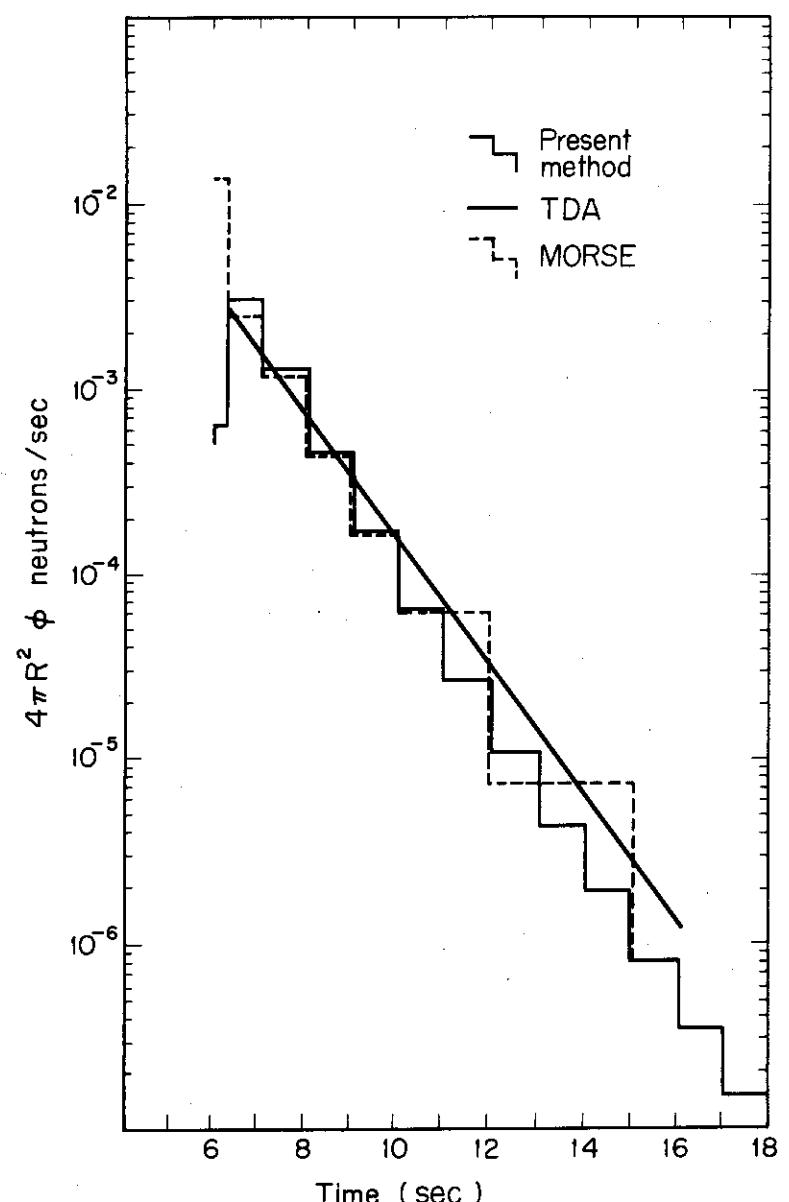


Fig. 3.25 $4\pi R^2$ flux at 6 mean free paths from the center of a spherical system with the nonabsorption probability of 0.3

この他の変数には従来のダイヤモンド差分を用いる。この方法の特徴をみるために板状体系の中性子波伝播について調べたのが Fig. 3.26 である。厳密解 (S_2) は、この場合は

$$\phi(x, t) = \frac{1}{2} H(\mu v t - x) + \frac{1}{2} H(\mu v t - 2 + x) \quad (3.13)$$

である。Hは(3.4)式で用いたものと同じである。この図によると、この方法がダイヤモンド差分より厳密解に近い良い近似であることが分る。

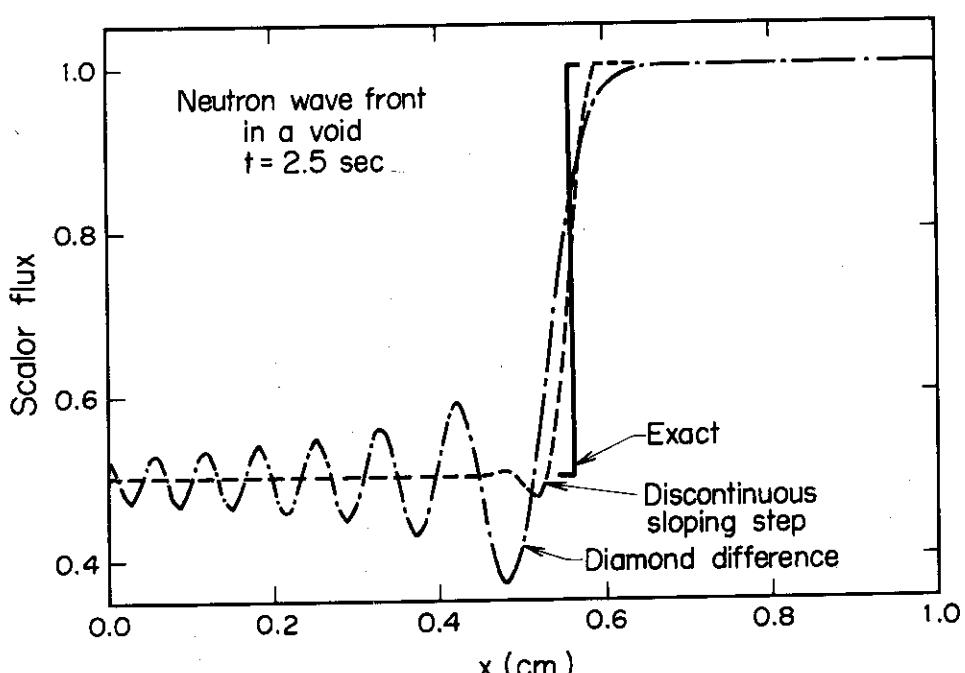


Fig. 3.26 Neutron wave front at $t = 0.25$ sec for $v = 1$ cm/sec,
 $\Delta t = 0.5 \times 10^{-5}$ sec, $\Delta x = 0.01$ cm, due to a unit
source on the left boundary of a slab with a re-
flective boundary on the right side

4 結 言

今まで観てきたとおり、公開されている輸送理論動特性計算コードは Table 4.1 に示すものだけである。輸送理論に基づくコードは、解法自身も不安定になりやすく、また計算時間も非常に長い。したがって、コード自身にも取り扱う対象に制限があり、拡散近似のコードのように多様性を持っていない（例えば、遅発中性子の取扱いができないとか、熱水力計算が含まれていないとか）。

安定な解法に基づく輸送コードによる計算値は、一応厳密解とみなされるので、本当の意味での比較は、Monte Carlo 法によるものと行わなければならないであろうが、Fig. 3.25 でも示したように Monte Carlo コード自身も、計算時間の点で信頼できる値を得ることは難しい。したがって、上手にベンチマーク問題を設定して、解析的な方法を用いることも含めて、検討を行う必要があるかと思う。実験からの情報が殆んど得られていないので尚一層の注意が望まれる。

実在体系に対するベンチマークテストは、第 3.5 章に示したように、ぱつぱつ見られるようになったが、このような体系には拡散近似で充分なことが多いと思われる。しかし、拡散近似では扱いにくいような問題（例えば中性子ストリーミング、中性子波伝播など）に対しては輸送近似が用いられるべきであるので、目的によって使いわける必要があろう。

拡散近似動特性計算コードでの経験は充分生かされていると思われるが、今までの実用的な方法としては、信頼性の点から見て、TIMEX コードで用いられているアルゴリズムが有用と思われる。最近発表された TRASCAL コードを含めて、TASK アルゴリズムに基づく方法（衝突確率法も含めて）は、粗い空間メッシュ（セル）を探っても精度が保てるとう点においては魅力的であるが、1つのセルに対する応答マトリックスの計算に大きな時間をくわれるので、この時間を大巾に短縮する必要がある。有限要素法を用いた例は、僅かに Hill のが 1 つあっただけであるが、複雑な体系に対しては無駄のない空間メッシュが採れる筈なので、今後もっと用いられてよい方法であろう。

我々のベンチマークテストとしては、これらサーヴェイの結果を生かして、問題を設定したいと思うが、Monte Carlo 法について我々の研究室でかなり経験があるので、この方法を、輸送理論動特性解析コードの検討に加えたい。尚、パルス中性子実験の解析では、今までのところ、殆んど 1 点動特性近似しか用いられていないようなので、²⁷⁾ 問題によりけりだが、輸送理論コードの適用が、今後考えられていいように思う。

Table 4.1 Characteristics of space-dependent neutron transport kinetics codes available

Code	Code developer	Characteristics	Availability JAERI
TDA	Dupree et al (LA, '70)	one-dimension. time dependent ANISN. weighted diamond difference on time, space and angle. exponential difference acceleration on time. 1st collision source. no delayed neutrons.	tested
TIMEX	Reed (LA, '72)	one-dimension. fully implicit difference and exponential transformation on time. diamond difference on space and angle. coarse mesh rebalancing. 1st collision source. no delayed neutrons.	tested
TASK	Dodd (ORNL, '71)	one-dimensional slab. TASK algorithm.	
TDT	Tomlinson (ORNL, '74)	one-dimensional slab and sphere. TASK algorithm. exponential extrapolation on time. coarse mesh rebalancing.	no
TRANZIT	Lathrop et al (LA, '71)	two dimensional (R,Z). weighted diamond difference on time, space, angle. coarse mesh rebalancing. 1st collision source. no delayed neutrons.	tested

文 献

(文献番号の肩に * 印が付いているものは、計算コードが既に日本原子力研究所に存在していることを指す。また、 ** 印はプログラムリストが文献に載っていることを示す。)

- 1) 朝岡卓見, 中原康明, 伊勢武治, 筒井恒夫, 西田雄彦, 堀上邦彦, 藤村統一郎, 出田隆士, 鈴木忠和, “中性子・ガンマ線輸送と動特性計算コードのベンチマーク・テストの問題点”, JAERI-M 5557 (1974)
- 2) Varga R.S., "Matrix iterative analysis," Prentice-Hall : 渋谷, 棚町, 金子, 野田, 共訳, “大型行列の反復解法,” サイエンス社 (1974)
- 3) Stacey Jr. W. M., "Space-time nuclear reactor kinetics," Academic Press (1969).
- 4) Hetrick D.L., "Dynamics of nuclear reactor systems," Univ. of Arizona (1972).
- 5) _____, "Space dependent reactor dynamics," Proceeding of specialist meeting on 'reactivity effects in large power reactors' at Ispra, Oct. 1970, EUR 4731f-e (1970).
- 6) Stacey Jr. W. M., "Space- and energy-dependent neutrons in reactor transient analysis," Reactor Tech. 14, 169~196 (1971).
- 7) Winton M.L., "Computer codes for analyzing nuclear accidents," Nuclear Safety, 15, 535~553 (1974).
- 8) _____, "Argonne Code Center benchmark problem book: Numerical determination of the space, time, angle, or energy distribution of particles in an assembly," ANL-7416 Supplement 1 (1972).
- 9) ** Ganapol B., "An analytic time dependent neutron transport benchmark solution," EIR-Bericht Nr. 220 (1972).
- 10) Dupree S.A., Sandmeier H.A., Hansen G.E., Engle Jr. W.W., Mynatt F.R., Time-dependent neutron and photon transport calculations using the method of discrete ordinates," LA-4557 (1971).
- 11) Reed W.H., "A non-iterated method for time dependent transport," Proceeding of conference on new developments in reactor mathematics and applications and Idaho Falls, Mar. 1971, CONF-710302 Vol.2, 679~700 (1971)
- 12) * Reed W.H., "TIMEX: A time-dependent explicit discrete ordinates program for the solution of multigroup transport equations," LA-4800 (1972).
- 13) Dodds Jr. H.L., "A new calculational method and for space-energy-angular dependent reactor kinetics," ORNL-TM-3136 (1971).
- 14) Dodds Jr. H.L., Robinson J.C., "The formulation and application of

- the transfer-scattering matrix method to space-, energy-, and angular-dependent fast reactor kinetics," Nucl. Sci. Eng., 47, 262~274 (1972).
- 15)* Buhl A.R., Dodds Jr. H.L., Robinson J.C., Lillie R.A., "A user's manual for TASK, a generalized one-dimensional transport and diffusion kinetics code," ORNL-TM-3811 (1972).
- 16) Lillie R.A., "Incorporation of outer iteration techniques into the TASK algorithm," ORNL-TM-3958 (1972).
- 17) Tomlinson E.T., "Approximate numerical solutions to the time-dependent neutron transport equation using the TASK algorithm," ORNL-TM-4595 (1974).
- 18) Tomlinson E.T., Dodds Jr. H.L., Lillie R.A., Robinson J.C., "A user's manual for TDT (Time dependent TASK)," ORNL-TM-4869 (1975).
- 19) Lathrop K.D., Anderson R.E., Brinkley F.W., "TRANZIT: A program for multigroup time-dependent transport in (ϕ, Z) cylindrical geometry," LA-4575 (1971).
- 20) Sicilian J.M., Pryor R.J., "TRASCAL: A two-dimensional multigroup response matrix code," CONF-750413, VI-103~122 (1975).
- 21) Yingling W.A., Brindgman C.J., "The continued fraction approximation: A time-dependent transport method," Nucl. Sci. Eng., 53, 123~136 (1974).
- 22) Canfield E.H., "Exact time-dependent spatial and Legendre moments for the monoenergetic transport equation," Nucl. Sci. Eng., 53, 137~140 (1974).
- 23) Lefvert T., "Time-dependent collision probability method for analyzing transient neutron behaviour," Proceeding of conference on numerical method in nuclear engineering at Charleston, South California, Apr. 1975, CONF-750413, VI-85~102 (1975).
- 24) Hill T.R., "The linear discontinuous finite element scheme in time dependent transport calculations," Trans. Am. Nucl. Soc., 21, 228~230 (1975).
- 25) _____, "ANISN: A one dimensional discrete ordinates transport code," RSIC Computer Code Collection CCC-82, ORNL.
- 26) Lathrop K.C., "DTF-IV: A FORTRAN-IV program for solving the multigroup transport equation with anisotropic scattering," LA-3373 (1965).
- 27) 伊勢武治, "内挿法, 最小自乗法, ミニマックス近似 (科学計算用サブルーチン・ライブラリーのアルゴリズム調査No.11)," 未公開 memo (1975)
- 28) Sicilian J.M., Response matrices in space-time reactor dynamics," Nucl. Sci. Eng., 56, 291~300 (1975).