

JAERI-M
82-071

有限要素法における 6 角形要素の
高速炉・3 次元拡散問題への応用

1982年7月

石黒美佐子・樋口 健二

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

JAERI-M レポートは、日本原子力研究所が不定期に公刊している研究報告書です。

入手の問合せは、日本原子力研究所技術情報部情報資料課（〒319-11 茨城県那珂郡東海村）あて、お申しこしください。なお、このほかに財團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。

JAERI-M reports are issued irregularly.

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

© Japan Atomic Energy Research Institute, 1982

編集兼発行 日本原子力研究所
印 刷 日立高速印刷株式会社

有限要素法における 6 角形要素の高速炉・3 次元拡散問題への応用

日本原子力研究所東海研究所計算センター

石黒美佐子・樋口 健二

(1982年5月31日受理)

中性子拡散を取扱うために、差分法がよく使用されてきた。ところが差分法では扱いにくい形状を取り扱ったり、差分法では計算精度上問題があったりする場合に、有限要素法の適応性に期待が持たれる。

著者らは、既成の有限要素法コード、FEM・BABELを拡張し、高速炉の典型的な形状である6角格子形状を取扱えるようにした。この際、これまで使用されたことのない6角形要素分割方式を採用した。

この報告書では、(1) 有限要素法の適応性、(2) 拡散方程式の有限要素法近似、(3) 6角形要素関数、(4) 6角格子形状メッシュゼネレーション、(5) コードの拡張点、(6) 計算時間の比較などが記述される。

Application of a Hexagonal Element Scheme in
the Finite Element Method for Three-Dimensional
Diffusion Problems of Fast Reactors

Misako ISHIGURO and Kenji HIGUCHI

Computing Center, Tokai Research Establishment, JAERI

(Received May 31, 1982)

In treating neutron diffusions the finite difference method has been used. But it is expected that the finite element method is applicable for treating the awkward shapes and/or for the problems whose computing accuracy is unsatisfied by the finite difference method.

Here, we extend the existing finite element diffusion code FEM.BABEL for treating the hexagonal-shaped array which is a typical geometry in fast reactors, where we adopt a new element scheme "hexagonal element".

In the report, described are (1) applicability of the finite element method, (2) finite element approximation for the neutron diffusions, (3) hexagonal element function, (4) treatment of inhomogeneous subassembly, (5) mesh generation of the hexagonal array, (6) extension of the code, (7) comparison of the computing times.

Keywords; Finite Element Methods, Neutron Diffusions, Nuclear Codes, Hexagonal Elements, Mesh Generators, Fast Reactors, FEM.BABEL, Three-dimensional Problems

目 次

1. はじめに	1
2. 有限要素法の適応性	2
2.1 なぜ6角要素関数を使用するか	2
2.2 なぜ有限要素法を使用するのか	6
2.3 有限要素法と差分法の計算結果の比較	8
3. 拡散方程式の有限要素法近似	14
3.1 多群中性子拡散方程式	14
3.2 有限要素法による中性子束の近似	14
3.3 拡散方程式の有限要素法近似	18
4. 6角形要素関数	20
4.1 3角座標の取扱い	20
4.2 要素関数の作り方	22
4.3 B_{ij} , Q_{ij} の計算	29
5. 非均質燃料集合体の取扱い	32
6. 6角格子メッシュゼネレーション	32
7. 計算結果の評価	36
7.1 基本問題	36
7.2 GCFR計算モデル	39
8. 計算コードと入力データの修正点	44
8.1 計算できるモデルの拡張	44
8.2 入力データの追加と修正	44
8.3 追加したサブルーチン	44
8.4 既成のサブルーチンに対する修正	51
9. 入力データの例	52
9.1 基本問題の入力データ	52
9.2 GCFRモデル(6角形要素)	53
9.3 GCFRモデル(3角形要素)	54
10. まとめ	55
謝辞	56
参考文献	56

Contents

1. Introduction	1
2. Applicability of finite element method	2
2.1 Why hexagonal element function is used	2
2.2 Why finite elements method is used	6
2.3 Comparison of the computing results of finite element method and finite difference method	8
3. Finite element approximation to diffusion equations	14
3.1 Multi-group neutron diffusion equations	14
3.2 Approximation of the neutron fluxes by the finite element method	14
3.3 Finite element approximation to diffusion equations	18
4. Hexagonal element function	20
4.1 Triangular coordinate	20
4.2 How to generate the hexagonal element function	22
4.3 Bij and Qij values	29
5. Treatment of the inhomogeneous subassemblies	32
6. Mesh generation for Hexagonal-array geometry	32
7. Evaluation of the computed results	36
7.1 Basic sample problem	36
7.2 GCFR model	39
8. Modification to the code and the input data	44
8.1 Extension of the computable models	44
8.2 Addition and modification of the input data	44
8.3 Added subroutines	44
8.4 Modification to the existing subroutines	51
9. Examples of the input data	52
9.1 Input data for the basic sample problem	52
9.2 Input data for GCFR model (hexagonal elements)	53
9.3 Input data for GCFR model (triangular elements)	54
10. Conclusion	55
Acknowledgements	56
References	56

1. はじめに

従来、原子炉の臨界計算は、中性子の従う拡散方程式または、ボルツマンの輸送方程式を差分近似により解くことによりなされてきた。⁽¹⁾これら中性子の拡散と輸送に関する問題に対し、近年、有限要素法の適用が試みられているが、計算時間に関しては、差分法にはかなわない。⁽²⁾しかしながら差分法では解決し得ない複雑な形状を取り扱ったり、差分法では計算精度上問題があつたりする場合に有限要素法の適応性に期待が持たれる。

高速炉の断面は通常6角格子で構成され、各燃料集合体（サブアセンブリ）もまた正6角形状をなす。そこで高速炉を取り扱うために、原研で伊勢氏らによって作成された有限要素法コードFEM・BABEL⁽³⁾を、6角格子形状を取り扱えるように拡張した。この際、これまで使用されたことのない6角形要素関数を採用した。

本報告では、FEM・BABELの報告で記述されている拡散方程式の有限要素法近似については簡単に触れるに留め、新たになされた次の項目を重点的に記述する。

- (1) 6角形要素関数の作り方、図形、要素関数間積分(B_{ij})、要素関数の微係数間積分(Q_{ij})の値を提示
- (2) 非均質サブアセンブリの取り扱い
- (3) 6角形メッシュ・ゼネレータ、图形化
- (4) FEM・BABELコード拡張時の問題点と対応策
- (5) 計算結果、計算速度の比較（有限要素法と差分法、6角形要素と3角形要素）

FEM・BABELコード（以下FEMコードと略す）は、6角格子形状を取り扱えるようにするために、6角形要素関数の導入、6角格子形状のための自動メッシュゼネレーションなどコード本体に対し1/3程度分が新たに追加・拡張された。また、計算時間を短くするために既成部分の1/2程度が修正された。

現時点では、有限要素法でなければ取り扱えない体系の問題が提示されることはあまりないが、差分法で適用上問題のあるものについて、有限要素法の優位性を引き出していくことは意味がある。今後、有限要素法コードが使い込まれていくうちに適用分野が広がることを期待したい。

2. 有限要素法の適応性

2.1 なぜ6角形要素関数を使用するか

Fig.1にフランスで開発された高速炉 SUPER-PHENIX の断面図を示す。⁽²⁾ 図で見るとおりサブアセンブリが6角格子をなすように配列されており、1つのサブアセンブリは、1辺が10.4 cm の正6角形をなす。炉心は核分裂性均質から成る2種の炉心領域と、数層のブランケット領域から成り、その外側面に遮蔽領域が置かれている。

このように高速炉を対象とした核計算では、差分法を適用する場合も含め、正6角形またはその細分である正3角形（3次元問題では正6角柱または正3角柱）をメッシュ単位とした問題を解く必要がある。

原研でよく使用されている差分法による中性子拡散コード CITATION を使用した高速炉の3次元計算は、当時の高速炉設計班のメンバー（現在、高速炉物理研究室）によって評価され、計算時間、精度の比較、問題点などが報告されている。⁽³⁾ そこでは、1つの6角形状サブアセンブリを1メッシュとする6角メッシュ法と、それを6個の正3角形に分割した3角メッシュ法が比較されている。高速炉が大型化するのに伴い、サブアセンブリの数が増加し、また1つのサブアセンブリの1辺の長さが10~20 cm と大きくなり、両メッシュ法共にその適応性に問題があると述べられている。つまり、3角メッシュ法では、空間メッシュ数が多すぎて、現在の計算機では記憶容量および計算時間の点で3次元計算が不可能に近く、一方、6角メッシュ法では、メッシュ点間隔が20 cm を超え、数値計算、特に中性子束の計算、で十分な精度が得られない。文献⁽⁵⁾では、これを解決するために、6角メッシュ法を改良した修正メッシュ法を用いて一応の成果を得ている。

差分法では、中性子束 ϕ の値はメッシュの中心の値で代表させ、離散的に計算される。CITATION の6角メッシュ法、Fig.2(FD1)では、ある点における ϕ の値は隣接する6点の ϕ の値を用いて反復計算される。3角メッシュ法(FD6)では3点の値を使用して計算される。

一方、有限要素法ではメッシュのコーナの点（節点）の ϕ の値を求めることが問題となる。そしてある要素内の任意の点 r (Fig.3) における中性子束の値 $\phi(r)$ は、その要素を構成する節点における中性子束の値 ϕ_k (k はローカルインデックス) と、6角形要素上の基底関数(basis function)，つまり、6角形要素関数、によって連続量として近似される。

$$\phi(r) = \sum_{k=1}^6 \phi_k u_k(r), \quad u_k(r) \text{ は要素関数} \quad (2.1)$$

6角形要素分割を行った場合は、Fig.2(FEM6)で示されるように、節点 i 上の中性子 ϕ の値は、節点 i が属する要素上の他の12点上の ϕ の値を使って、また、3角形要素を用いた場合(FEM7)は6点を使って反復法により順次計算される。

今、2次元断面上の6角形の数をnとすれば、計算コードで取扱うべき2次元断面上のメッシュ数は、FD1, FD6, FEM6, FEM7に対し、各々n, 6n, 2n, 3nとなる(Table 1)。FD1で計算精度の面で満足すべき中性子束分布が得られない問題に対し、有限要素法によって妥当な時間で妥当な精度が得られるなら、FD6に較べてメッシュ数が少なく、有限要素法の適用に期待が持てる。

従来、有限要素法では、3角形または4辺形を基本とした要素分割が用いられてきた。⁽⁶⁾ 6角形要素分割を用いた有限要素法の応用については、SUPER-PHENIXの核計算の比較をする際に少し触れられているがあまり例がない。⁽²⁾ そこでは内部資料が参照されているが入手の難しい資料である。このようなことから、6角形要素関数に関する情報を明らかにするために、6角形要素上の基底関数の定義、その3次元図形の提示、さらに拡散方程式の有限要素法近似で重要な量である。 B_{ij}^r と Q_{ij}^r の具体的な値を示すことは意味がある。ここで⁽⁷⁾

$$B_{ij}^r = \int_{E_r} u_i(x, y, z) u_j(x, y, z) dE_r, \quad (2.2)$$

$$Q_{ij}^r = \int_{E_r} \nabla u_i(x, y, z) \nabla u_j(x, y, z) dE_r$$

ここで、 E_r は3次元要素

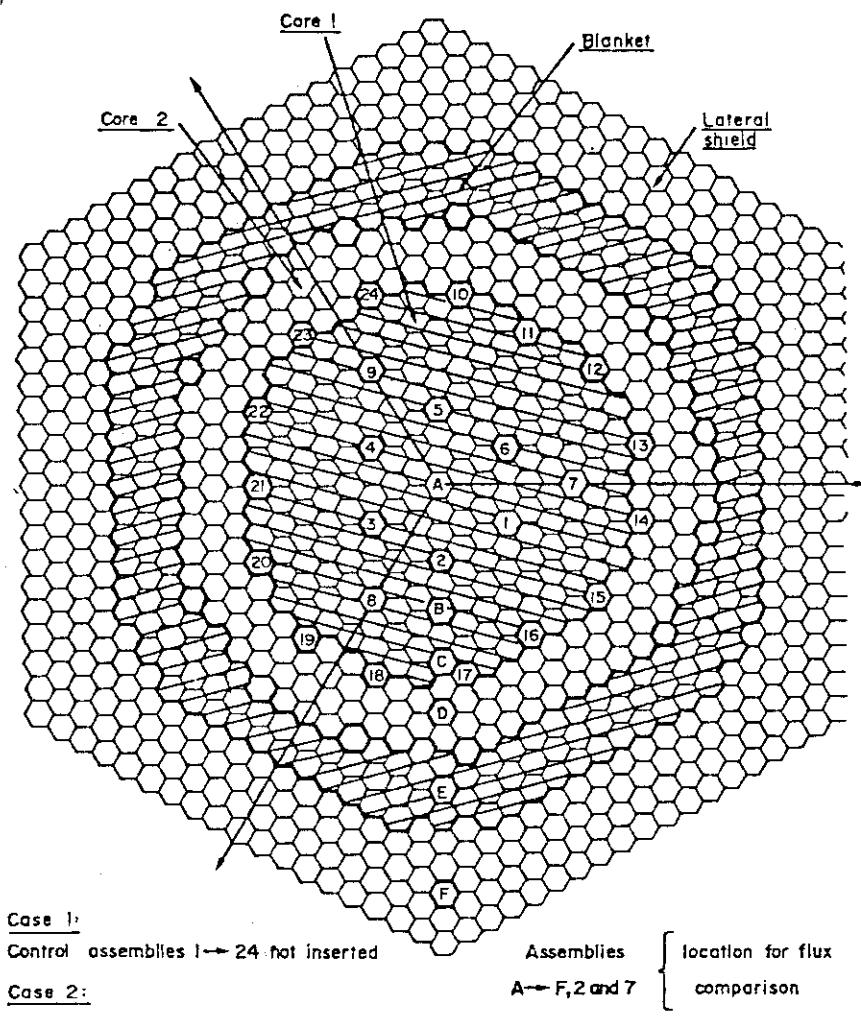
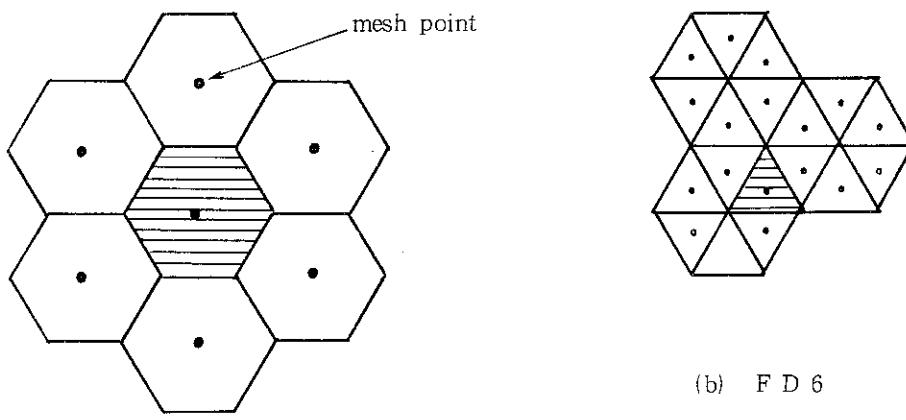


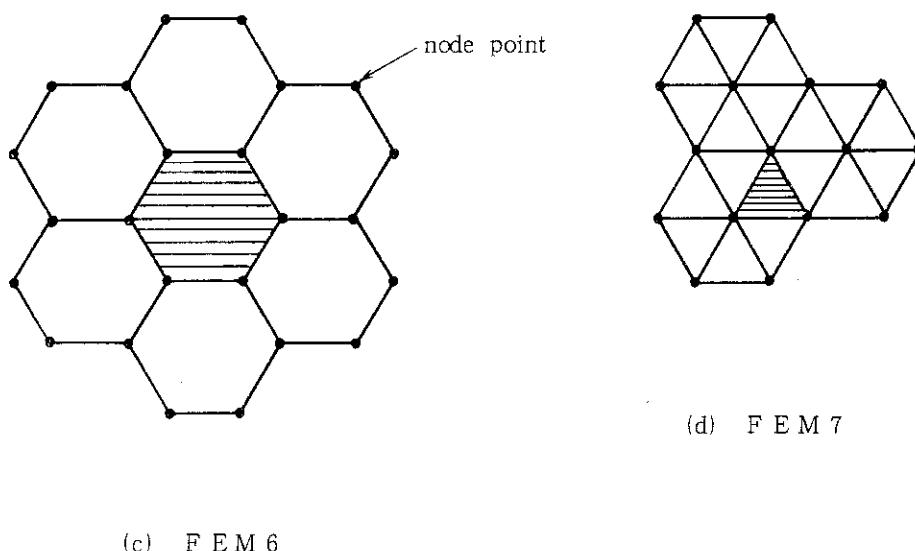
Fig.1 Configuration of SUPER-PHENIX

Finite difference



(b) FD 6

Finite element



(d) FEM 7

Fig. 2 Two-dimensional mesh points or node points representations

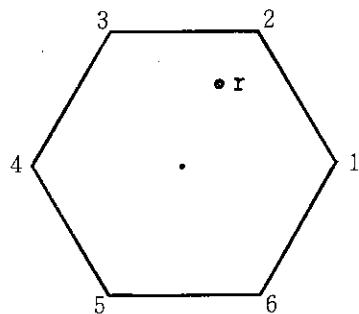


Fig. 3 Point within an element and local index numbers

Table 1 Comparison of mesh partition

	F D 1	F D 6	F E M 6	F E M 7
number of points / hexagon	1	6	6	7
total point number	n	6n	2n	3n
point-wise equation used	7-points equation	4-points equation	13--points * equation	7-points * equation

n : number of hexagonal subassemblies on a plane

* : node points are irregularly ordered.

2.2 なぜ有限要素法を使用するのか

高速炉を構成するサブアセンブリ数の増加と1つのアセンブリの大きさの拡大化傾向が続いている。高速炉の計算で、3角メッシュ法では計算時間がかかり過ぎ、6角形メッシュ法では計算精度の点で不適当であるという先に述べた差分法の適用上の問題を有限要素法でどの程度解決できるかを確かめるのが、ここで研究の動機となっている。

SUPER-PHENIX原子炉に対する2次元拡散問題の差分法と有限要素法の比較においては、有限要素法は何ら利点がないと記述されている。⁽²⁾

このように差分法で解ける問題に有限要素法を適用しても意味がない。有限要素法は、差分法では取扱えない問題、例えば、原子炉建屋の中に曲がりくねった配管があるなど、の場合に効力を発揮できる。差分法よりは、むしろモンテカルロ法との比較で論じられるべきであると言わ
れている。⁽⁸⁾

有限要素法の一般的な利点は、いろいろ挙げられているが、ここでの課題と関連して次のものが挙げられる。⁽⁸⁾

(1) 境界条件の組込が容易

要素関数に境界条件の特性を持たせることにより解決できる。また境界条件がreflectiveな場合には、特別な考慮なしに境界条件が成立している場合が多い。

(2) 中性子束の値が連続量として定義（前述）

このことにより、節点間の長さが大きくても適用でき、また、z軸方向を差分法の場合よりメッシュサイズを大きくできる。

また、高速炉における1つのサブアセンブリの断面は、通常、平均化された物質特性を持つ均質なものとして取扱われている。実際はFig.4⁽⁹⁾で示されるように、サブアセンブリは非均質なものである。有限要素法では、非均質物質の取扱いを、要素の細分割を行わずに、要素の積分時に、物質に応じた係数を与えることにより計算できる。例えば $\sum u_i(r)u_j(r)$ の2次元要素上の積分計算は次のように行うことができる。

$$\sum_A \int_{\Omega_A} u_i(r)u_j(r)d\Omega_A + \sum_B \int_{\Omega_B} u_i(r)u_j(r)d\Omega_B + \sum_C \int_{\Omega_C} u_i(r)u_j(r)d\Omega_C \quad (2.3)$$

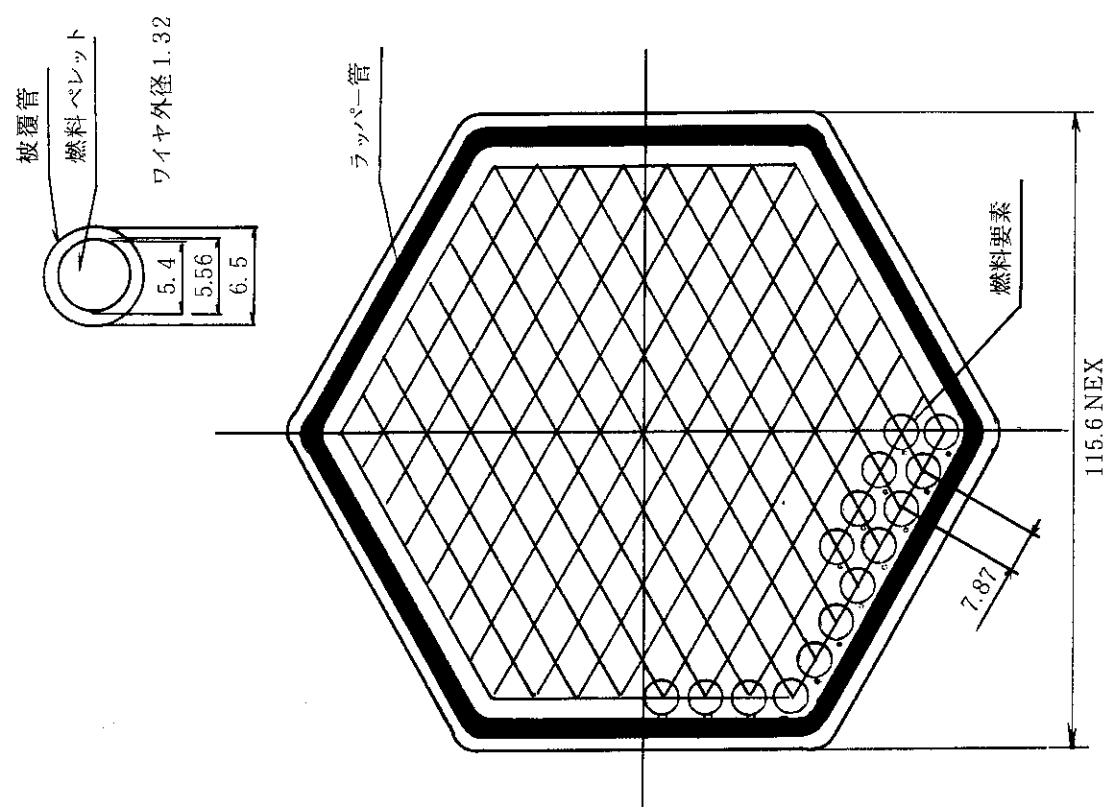


Fig. 4(a) Sectional diagram of a core subassembly
(inner core, outercore, blanket)

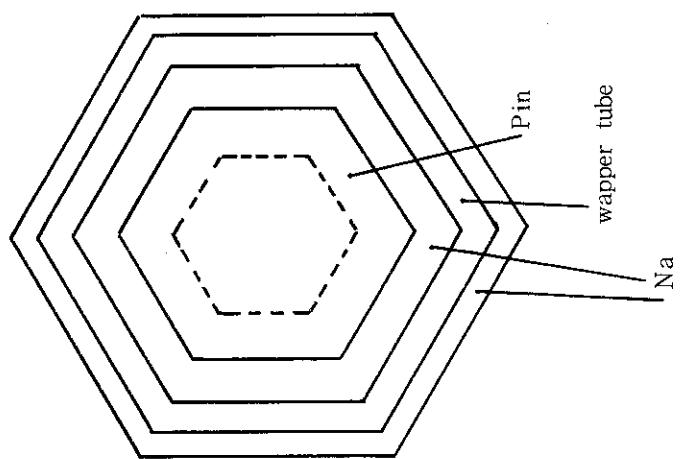


Fig. 4(b) Computing model of a subassembly

2.3 有限要素法と差分法の計算結果の比較

2.3.1 CITATIONコードとFEMコード

従来から、原子炉の核計算のために、差分法に基づく中性子拡散、輸送コードが数多く開発されてきた。とりわけORNLで1969年に開発された3次元拡散コードCITATIONは、多くのユーザによる長い使用経験の蓄積から今だにこの分野の計算コードの基準を成している。⁽⁴⁾

CITATIONは適用できる原子炉の形状が多いこと、計算時間に関して徹底的に最適化されていること、作成当時の計算機の主記憶の制約から、小さな主記憶領域で計算できるなど勝れた点が多い。

一方、有限要素法コードでは、現在この分野で実用に供しているものが少なく、コードそのものが、プログラム上も数値解析上もオプティマイズされていない場合が多い。

ここで報告するFEMコードもそのようなコードに属するので、計算時間をCITATIONと比較するには厳しい面がある。有限要素法の方がz軸方向の刻みを少なくできることを考慮に入れても、結果的に有限要素法が計算時間の点でそれ程有利ではない。

2.3.2 計算結果の比較

GCFR（ガス冷却高速炉）におけるCITATIONコードと、我々が改良整備したFEMコードの計算結果の比較はTable 2で示される。

計算時間に関しては、CITATIONの3角メッシュ法（FD6）の方がFEMの6角形要素法（FEM6）に較べ2倍近く時間がかかる。しかし、3角形要素法（FEM7）よりやや短い。総じて、1点当たりの計算時間は、CITATIONの方が半分以下の計算時間となる。

実行増倍係数 K_{eff} の値は、FEMの両計算はほぼ一致した値を取り、両者共にCITATIONより小さい値となる。一方、CITATIONでは、FD1とFD6の差は1.4%と大きく、これはまたFEM7とFD6の差0.88よりもずっと大きい。

中性子束の値についても、FEMの両計算はほぼ同じ値となる。ただし、制御棒が挿入されたサブアセンブリの中心では、FEM6とFEM7で差が出る。これはFEM6ではサブアセンブリの中心に節点が置かれていないことによる(Fig. 2参照)。一方、CITATIONでは両計算の差は著しく、炉心部ではFD1の方が定性的に約17%小さくなる。FEMとの差では約20%小さい。FD6の場合でさえ、FEMの両計算に較べて炉心部では定性的に4%程度小さくなる。炉の中心部断面(A)と中間部断面(B)における第1群の中性子分布はFig. 5で示される。より詳細は7で与えられる。

このようにCITATIONとFEMコードの計算の間で生じる計算結果の差違は、今後、多くの問題で計算し、定性的なものかどうか確めてみる必要がある。

有限要素法は、差分法と異なり、外側反復計算に時間を費やすので、内側反復計算の回数を増やし、外側反復回数を減らした方が良い。CITATIONなど差分法では、極端に内部反復回数を少なくし、“one-through”で実行する方が短い時間で収束するとされているが、有限要素法では、これはあてはまらない。GCFR計算における内部反復時に用いる緩和因子 ω と反復回数の関係をTable 3に挙げる。

Table 2 Comparison of finite-differences and finite elements on the three-dimensional problem of GCFR *¹

items	F D 1	F D 6	F E M 6	F E M 7
mesh or element scheme used	hexagonal	triangular	hexagonal	triangular
number of meshgor nodes * ²	118 × 20	708 × 20	223 × 12	369 × 12
computer code used	CITATION	CITATION	FEM	FEM
computing time on the F-M200	1 M 5 2 S	7 M 5 1 S	4 M 1 2 S	1 1 M 3 5 S
K _{eff} (error * ⁴)	1.0596 (+ 2.39%)	1.0440 (+ 0.88%)	1.0333 (- 0.15%)	1.0348 (0.0%)
maximum error * ³ of fluxes	- 21.4% * ³	- 4.9%	+ 5.2%	0.0%

*1 GCFR Gas cooled fast reactor

*2 60° - rotation (1/6 geometry), 軸方向 1/2

*3 neutron fluxes at the center of reactor are qualitatively small

*4 compared with FEM 7

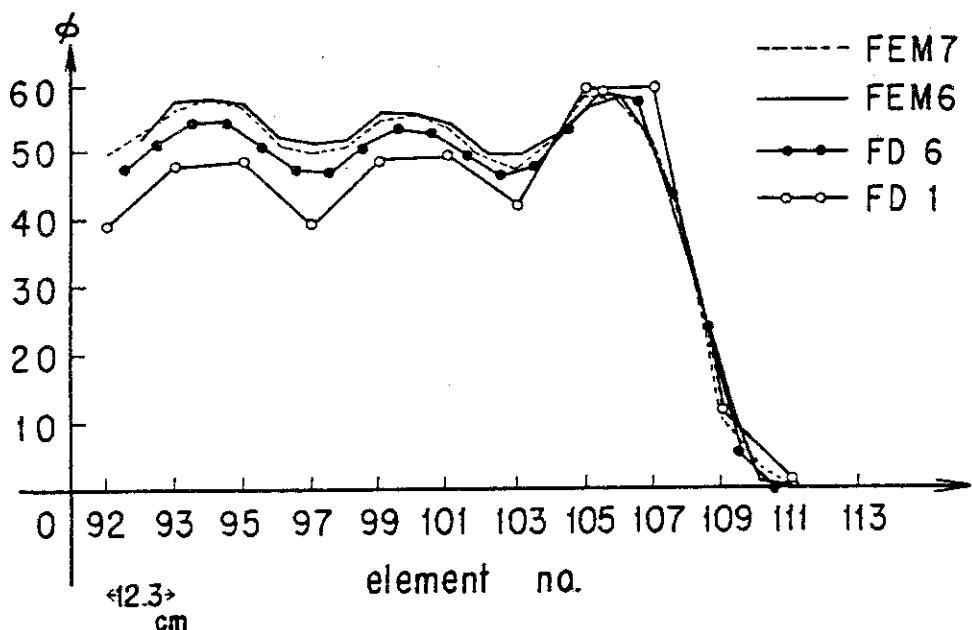


Fig. 5 (a) Radial flux distribution in GCFR
(group 1, midplane)

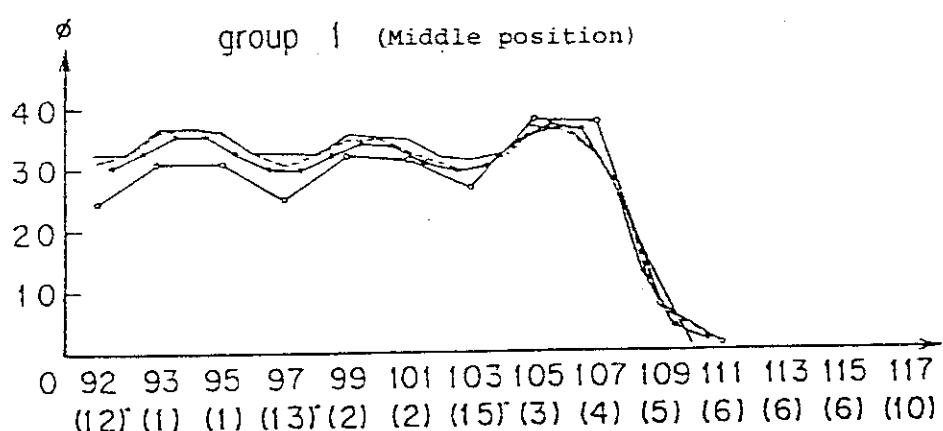


Fig. 5 (b) Radial flux distribution in GCFR

Table 3 Comparison of the computing times on overrelaxation factor,
 ω in the GCFR problem

ω	element schme	inner max.	outer	CPU time	K_{eff}
1.0	hexagonal	1 5	9	4 M 15 S	1.03325
1.1		1 2	1 0	4 M 14 S	1.03332
1.1		1 5	9	4 M 12 S	1.03327
1.2		1 2	1 7	6 M 22 S	1.03318
1.2		1 5	1 0	4 M 43 S	1.03335
1.3		1 5	2 2	8 M 57 S	1.03360
1.3		3 0	1 0	5 M 52 S	1.03330
1.1	triangular	3 0	1 0	11 M 57 S	1.03471
1.2		2 5	1 2	12 M 24 S	1.03481
1.2		3 0	1 0	11 M 37 S	1.03473
1.3		3 0	1 0	11 M 35 S	1.03475
1.4		3 0	1 0	11 M 45 S	1.03476
1.5		3 0	1 1	13 M 4 S	1.03481

The value ω and inner max. are input data.

Errors of K_{eff} and fluxes are 10^{-4} .

2.3.3 FEMコードの計算時間がかかる理由

(1) FEMコードは自由な形状に対応できることが前提となっており、差分法における方形を基本とした形状に限定していない。CITATIONでFig.1で示したような6角形状の原子炉を計算する場合には、例えば、1/6形状に対し、60度回転条件で計算される場合には、同形状のダミイ部分を追加した菱形形状(Fig.6)に対し、メッシュ点を割当てることにより無理に方形化している。

FEMコードでは、2次元平面上の外形のデコボコに対し、そのまま節点番号がつけられる。このため、差分法では、例えば内側反復計算において5対角行列となる係数行列がFEMコードでは、ノンゼロ要素の位置が不規則なため、あるバンド巾内を計算の対象とする。例えば、FD1の場合にCITATIONでは7対角の係数行列となるものが、FEM6ではバンド巾59の行列となる。このことは、内側反復の計算時間に大きく影響する。

(2) 中性子源と固有値を計算するのに要する計算時間が有限要素法特有の計算手法のためにかなり(5倍程度)長くなる。

例えば、2次元問題で*i*点における中性子源*S_i*の計算は、差分法の場合には以下のよう简单な計算となる。

$$S_i = \sum_{g=1}^G (\nu \Sigma_f)_g \phi_i^g \quad (2.4)$$

有限要素法では、節点*i*に隣接するすべての節点(FEM6では13)の各群の中性子束の値と($\nu \Sigma_f$)が関係し、以下のように*n*元バンド行列とベクトルの積となる。

$$S_i = \sum_{g=1}^G F^g \phi^g$$

ここで、

$$F^g = \begin{pmatrix} 0 & & \\ & \ddots & \\ & & 0 \end{pmatrix}, \quad \phi^g = \begin{pmatrix} \phi_1^g \\ \phi_2^g \\ \vdots \\ \phi_n^g \end{pmatrix} \quad (2.5)$$

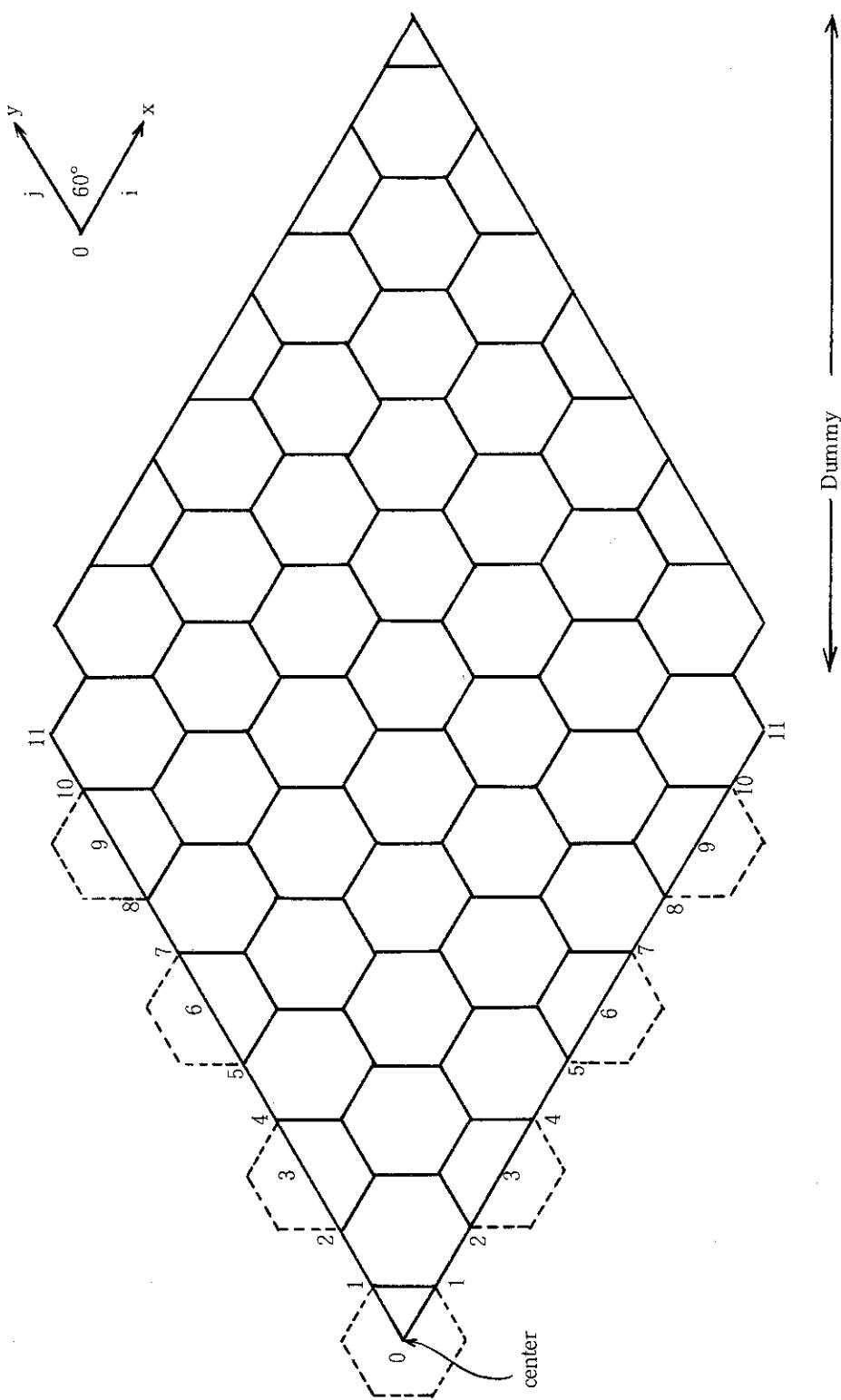


Fig. 6 60° rotation mesh arrangement on CITATION code

3. 拡散方程式の有限要素法近似

3.1 多群中性子拡散方程式

一般的に、多群中性子拡散方程式は、下記の偏微分方程式によって表現される⁽³⁾。

$$\begin{aligned} -\nabla D_g(r) \nabla \phi_g(r) + \sum_{r,g} \phi_g(r) = & \sum_{\substack{g=1 \\ (g \neq g')}}^G \sum_{s,g',g} (r) \\ & + \sum_{g'=1}^G \frac{x_g}{K_{\text{eff}}} (\nu \sum_f)_{g'}(r) \phi_{g'}(r), \end{aligned} \quad (3.1)$$

$g = 1, 2, \dots, G, \quad \text{for } r \in \Omega$

ここでは、次の記号が用いられた。

g	the energy group index,
ϕ_g	the flux in the g -th energy group ($\text{cm}^{-2} \text{sec}^{-1}$),
D_g	the diffusion constant (cm),
$\Sigma_{r,g}$	the total removal cross section (cm^{-1}),
$\Sigma_{s,g',g}$	the scattering cross section from g' into g (cm),
x_g	the fission source spectrum normalized as $\sum_{g=1}^G x_g = 1.0$,
K_{eff}	the effective multiplication factor,
ν	the average number of neutrons produced by fissions induced in group g ,
$\Sigma_{f,g}$	the fission cross section (cm^{-1}).

境界条件は、 r が境界上の点、 $\frac{\partial \phi_g}{\partial n}$ を法線方向の ϕ_g の微分値とするなら、以下のように与えられる。

$$a(r) \left(D_g \frac{\partial \phi_g}{\partial n} \right)(r) + b(r) \phi_g(r) = 0, \quad (3.2)$$

$a = 0$ のときは $\phi_g(r) = 0$ で $b = 0$ のときは reflective バウンダリ、 $a > 0$ 、 $b > 0$ のときは外挿バウンダリとなる。

3.2 有限要素法による中性子束の近似

任意の点 r における中性子束の値 $\phi(r)$ は、有限要素法では、次式によって近似される。

$$\hat{\phi}_g(r) = \sum_{i=1}^N \phi_i^g u_i(r), \quad N \text{ は節点の数} \quad (3.3)$$

ここで $u_i(r)$ は基底関数で、 ϕ_i^g は節点 i 上における第 g 群の中性子束の値（分布）を示す。基底関数 $u_i(r)$ は、次の性質を持つ。

(1) 節点 i 上で 1

(2) i と同じ要素内の他の節点では 0

(3) i が属さない要素上ではすべて 0

Fig. 7(a), 7(b)は要素の例を示す。Fig. 8 は 3 角形および 4 角形要素における 1 つの要素上の基底関数、つまり 3 角形要素関数(a)と 4 角形要素関数(b)について示す。Fig. 9 は 3 角形要素関数を用いた場合の点 P_0 に対する基底関数について示す。

基底関数の持つべき数学的な性質は文献(3), (6)で論じられている。つまり、基底関数は Sobolev 空間と呼ばれる関数空間 $W_2^{(1)}$ (1 次微係数が 2 乗可積分であるすべての関数) に属する。このことは関数が要素の境界上で連続であることと同値である。

6 角形要素関数については、次章で詳しく述べられる。

(3.3) 式を拡散方程式 (3.1), (3.2) に代入し、未知量 ϕ_i^g について解くのが課題である。

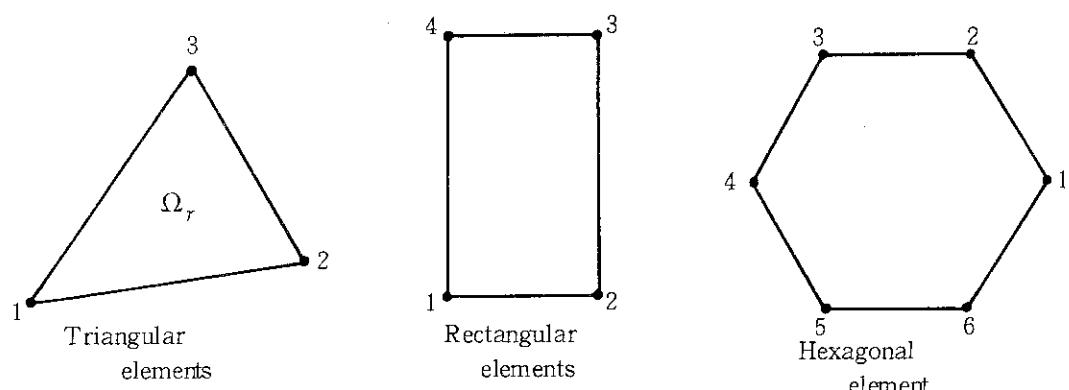


Fig. 7(a) Two-dimensional finite elements (Ω_r)

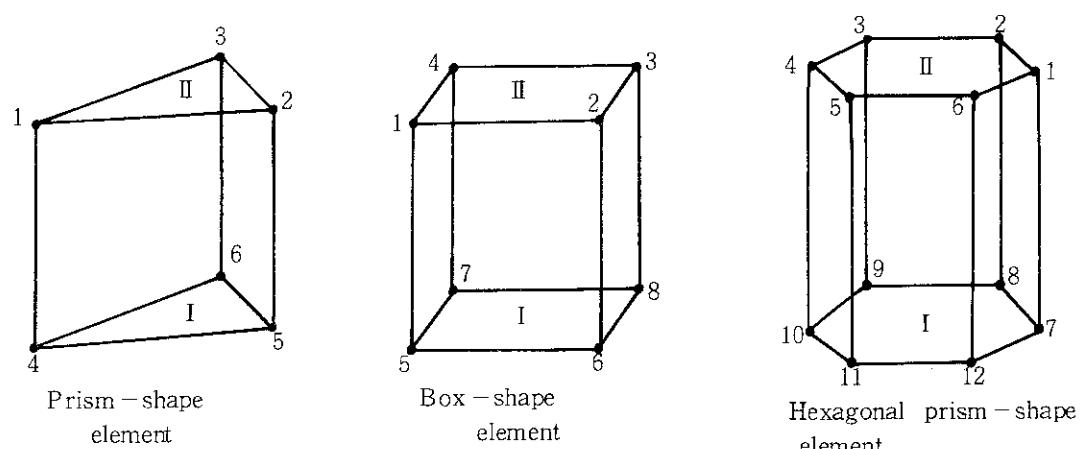


Fig. 7(b) Three-dimensional finite elements (E_r)

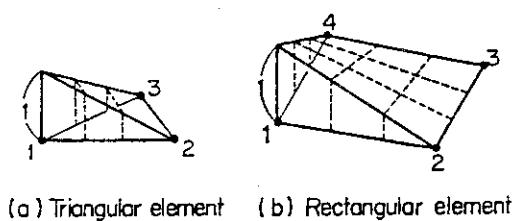


Fig.8 Basis functions at the first node

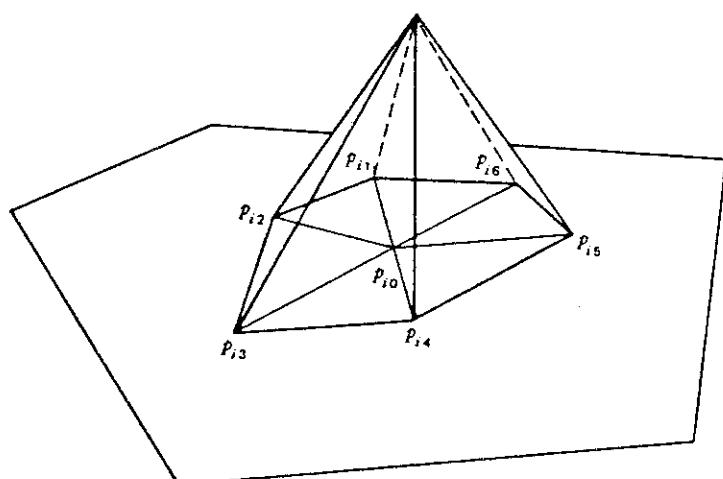


Fig.9 Graph of a basis function $U_{i0}(x,y)$

3.3 拡散方程式の有限要素法近似

式(3.1)はガレルキン法による有限要素法近似⁽³⁾によって、次のように書き表わすことができる。

$$\begin{aligned} [\mathbf{H}]^g \phi^g &= \mathbf{S}^g, \quad g = 1, 2, \dots, G \\ \mathbf{S}^g &= \frac{1}{\lambda} \mathbf{x}_g \sum_{g'} [\mathbf{F}]^{g'} \phi^{g'} + \sum_{g'=1}^{g-1} [\mathbf{K}]^{g'g} \phi^{g'} \end{aligned} \quad (3.4)$$

$[\mathbf{H}]^g$, $[\mathbf{F}]^g$, $[\mathbf{K}]^{g'g}$ は $N \cdot N_Z (= N_T)$ 元の行列で、Z軸の各段に対し、Fig.7(b)で示すインデックス I (下面), II (上面)を使って次のように表わせる。

$$[\mathbf{H}] = \begin{pmatrix} \mathbf{A}_I & \mathbf{C}_I \\ \mathbf{C}_I & \mathbf{A}_{II} \end{pmatrix}, \quad [\mathbf{F}] = \begin{pmatrix} \mathbf{F}_I & \mathbf{G}_I \\ \mathbf{G}_I & \mathbf{F}_{II} \end{pmatrix}, \quad [\mathbf{K}] = \begin{pmatrix} \mathbf{S}_I & \mathbf{R}_I \\ \mathbf{R}_I & \mathbf{S}_{II} \end{pmatrix} \quad (3.5)$$

ここで、

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_I &= \mathbf{A}_{II} = \mathbf{DQ}_I + \sum_r \mathbf{B}_I, & \mathbf{C}_I &= \mathbf{DP}_I + \sum_r \mathbf{D}_I \\ \mathbf{F}_I &= \mathbf{F}_{II} = (\nu \sum_r) \mathbf{B}_I, & \mathbf{G}_I &= (\nu \sum_r) \mathbf{D}_I \\ \mathbf{S}_I &= \mathbf{S}_{II} = \sum_s \mathbf{B}_I, & \mathbf{R}_I &= \sum_s \mathbf{D}_I \end{aligned} \quad (3.6)$$

上記の、例えば $\sum_r \mathbf{B}_I$ と \mathbf{DQ}_I のij要素は、3次元要素 E_r 上の積分値

$$[\mathbf{B}]_{ij}^r = \int_{E_r} u_i(\mathbf{r}) u_j(\mathbf{r}) dE_r, \quad [\mathbf{Q}]_{ij}^r = \int_{F_r} \nabla u_i(\mathbf{r}) \nabla u_j(\mathbf{r}) dE_r \quad (3.7)$$

を使って、ijに関係する要素の重ね合わせとして、次のように計算される。

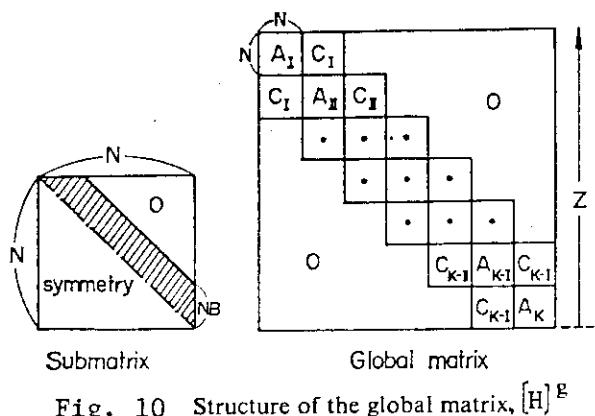
$$[\sum_r \mathbf{B}_I]_{ij} = \sum_{r \in F_{ij}} \sigma_r^r [\mathbf{B}]_{ij}^r, \quad [\mathbf{DQ}_I]_{ij} = \sum_{r \in F_{ij}} d^r [\mathbf{Q}]_{ij}^r \quad (3.8)$$

また $[\mathbf{B}]_{ij}^r$ および $[\mathbf{Q}]_{ij}^r$ は、(2.2)式で述べた2次元要素 Ω_r 上の積分値 B_{ij}^r および Q_{ij}^r を使って次のように計算される。

$$\begin{aligned} [\mathbf{P}]_{ij}^r &= \frac{1}{6} \Delta Z Q_{ij}^r - \frac{1}{\Delta Z} B_{ij}^r, \quad [\mathbf{Q}]_{ij}^r = \frac{1}{3} \Delta Z Q_{ij}^r + \frac{1}{\Delta Z} B_{ij}^r \\ [\mathbf{B}]_{ij}^r &= 2 [\mathbf{D}]_{ij}^r, \quad [\mathbf{D}]_{ij}^r = \frac{1}{6} \Delta Z B_{ij}^r \end{aligned} \quad (3.9)$$

以上のことから(3.4)式の係数行列 $[\mathbf{H}]^g$ は、Z軸上の各段の $[\mathbf{H}]$ を対角上に重ね合わせることにより、Fig.10に示す行列となる。 $[\mathbf{F}]^g$, $[\mathbf{K}]^{g'g}$ についても同じ。

B_{ij}^r , Q_{ij}^r の具体的な値については、3角形および4辺形要素関数については文献(3)に、6角形要素関数については次章で述べられる。

Fig. 10 Structure of the global matrix, $[H]^g$

内部反復計算は、(3.4)式で S_g を既知な値として、

$$[H]^g \phi^{g,(n)} = S^{g,(n-1)}, \quad n \text{ は反復数} \quad (3.10)$$

によって計算される。2.3で述べたように、係数行列 $[H]^g$ は、差分の場合に較べて複雑なものとなっている。

一方、外部反復計算における中性子源の計算は、

$$\sum_{g=1}^G (\nu \Sigma_f)_g [B]^r \phi^g$$

により行われる。3次元計算では、 $(\nu \Sigma_f)_g [B]^r$ は Fig. 10 で示されたものと同形の行列となる。

4. 6 角形要素関数

4.1 3角座標の取扱い

取扱いの便利さから、Fig.11で示す3角座標（ $\xi - \eta$ 座標）を考える。

4.1.1 座標変換

(x_c, y_c) を $x - y$ 座標における正6角形の中心の座標、 (x_i, y_i) を $x - y$ 座標における*i*番目の節点の座標とする。 $x - y$ 座標と $\xi - \eta$ 座標の関係を決めるために、任意の点 $P(x, y) = P(\xi, \eta)$ を考えてみる。このとき、

$$\begin{cases} x = x_c + (x_1 - x_c)\xi + (x_2 - x_c)\eta \\ y = y_c + (y_1 - y_c)\xi + (y_2 - y_c)\eta \end{cases} \quad (4.1)$$

となる。 a を正6角形の1辺の長さとすると、

$$\begin{cases} x = x_c + a\xi + \frac{1}{2}a\eta \\ y = y_c + \frac{\sqrt{3}}{2}a\xi \end{cases} \quad (4.2)$$

これを、 ξ 、 η について求めると、

$$\begin{cases} \xi = \frac{1}{a}(x - x_c) - \frac{1}{\sqrt{3}a}(y - y_c) = a/J \left\{ \frac{\sqrt{3}}{2}(x - x_c) - \frac{1}{2}(y - y_c) \right\} \\ \eta = \frac{2}{\sqrt{3}a}(y - y_c) = a(y - y_c)/J \end{cases} \quad (4.3)$$

ここで J は Jacobian で次のように与えられる。

$$J = \begin{vmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi}, & \frac{\partial x}{\partial \eta} \\ \frac{\partial y}{\partial \xi}, & \frac{\partial y}{\partial \eta} \end{vmatrix} = \frac{\sqrt{3}}{2}a^2 \quad (4.4)$$

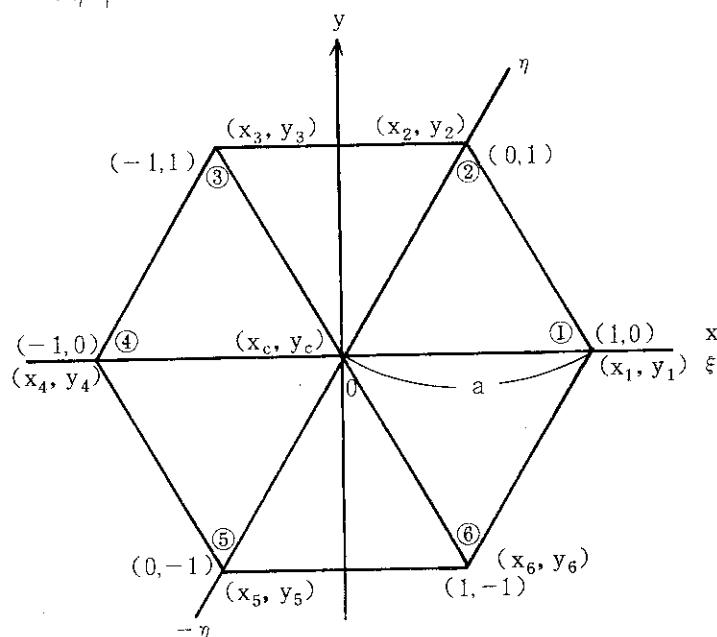


Fig.11 Hexagon on the $\xi - \eta$ coordinate

4.1.2 3角座標上での積分

被積分関数 $g(x, y)$ を、6角形要素 Ω_r で面積分する場合を考える。6角形を6つの正3角形に分割し、Fig.12で示す積分区間を考慮し、正3角形上で各々積分したものを加算する。

$$\begin{aligned}
 \int_{\Omega_r} g(x, y) d\Omega_r &= \int_{\Omega'_r} g(\xi, \eta) |J| d\xi d\eta \\
 &= \sum_{i=1}^6 \int_{T_i} g(\xi, \eta) |J| d\xi d\eta \\
 &= \int_0^1 d\xi \int_0^{1-\xi} g(\xi, \eta) |J| d\eta + \int_{-1}^0 d\xi \int_{-\xi}^1 g(\xi, \eta) |J| d\eta \\
 &\quad + \int_{-1}^0 d\xi \int_0^{-\xi} g(\xi, \eta) |J| d\eta + \int_{-1}^0 d\xi \int_{-1-\xi}^0 g(\xi, \eta) |J| d\eta \\
 &\quad + \int_0^1 d\xi \int_{-1}^{-\xi} g(\xi, \eta) |J| d\eta + \int_0^1 d\xi \int_{-(1+\xi)}^1 g(\xi, \eta) |J| d\eta \\
 &= |J| \left\{ \int_0^1 d\xi \int_{-1}^{1-\xi} g(\xi, \eta) d\eta + \int_{-1}^0 d\xi \int_{-(1+\xi)}^1 g(\xi, \eta) d\eta \right\} \quad (4.5)
 \end{aligned}$$

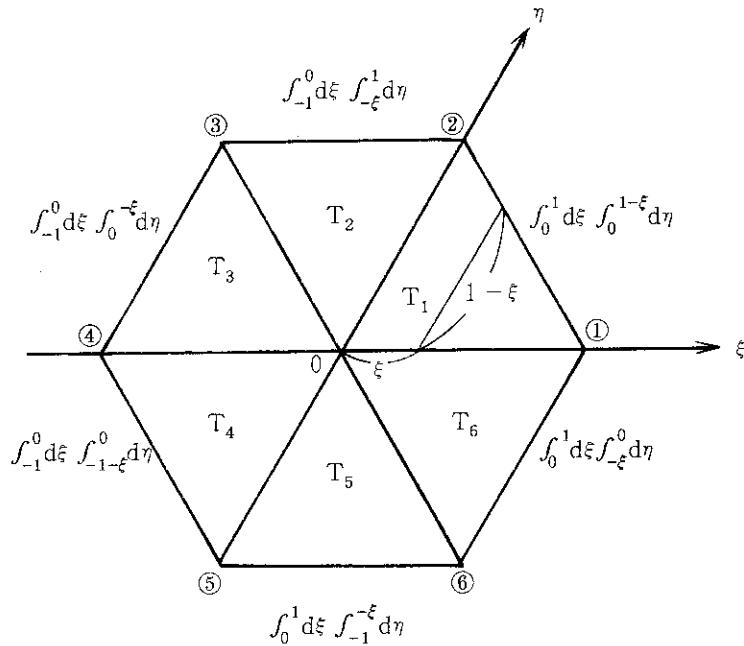


Fig.12 Space integration on a hexagon

4.2 要素関数の作り方

要素関数としては、Lagrange型またはHermite型の補間式がよく用いられている。ここでは、⁽¹⁰⁾ Lagrange型補間の考え方を2次元の関数に適用させて要素関数を作成する。

4.2.1 Lagrangeの補間式

1次元の場合における関数 $f(x)$ に対する近似多項式 $P(x)$ を考える。

$(n+1)$ 個の実数 $x_0 < x_1 < \dots < x_n$ において、既定の値を取る唯一の多項式 $P_n(x)$ が存在する。⁽¹⁰⁾

次のように $P_n(x)$ を定義する。

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^n f(x_i) \ell_i(x) \quad (4.6)$$

ここで

$$\ell_i(x) = \frac{(x - x_0) \cdots (x - x_{i-1})(x - x_{i+1}) \cdots (x - x_n)}{(x_i - x_0) \cdots (x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1}) \cdots (x_i - x_n)} \quad (4.7)$$

$\ell_i(x)$ は次の性質を持ち、3.2で示した要素関数の性質(1), (2)を満たす。

$$\ell_i(x) = \delta_{ij} \quad (4.8)$$

1次元要素関数を例にとれば、Fig. 13で示すように、点 x_i に対応する基底関数は線分 $[x_{i-1}, x_i]$, $[x_i, x_{i+1}]$ の2つの要素の上で0でなく、それ以外の要素上では0を取る関数 $u_i(x)$ となる。つまり、

$$u_i(x) = \begin{cases} \frac{x - x_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} & \text{要素 } [x_{i-1}, x_i] \\ \frac{x - x_{i+1}}{x_i - x_{i+1}} & \text{要素 } [x_i, x_{i+1}] \\ 0 & \text{その他の要素} \end{cases} \quad (4.9)$$

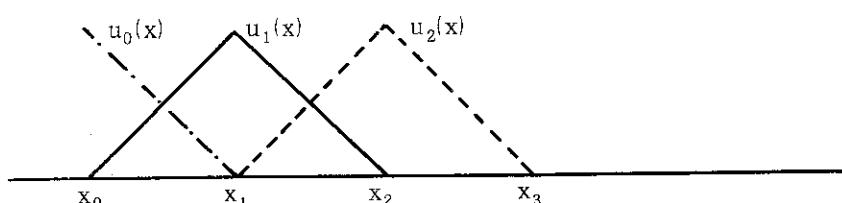


Fig. 13 One-dimensional basis functions

4.2.2 6角形要素関数の定義

3角形要素および4角形要素上の基底関数(要素関数)の形はFig.8で示された。6角形要素関数にあたっては、3角形および4角形要素関数の作成法を応用する。すなわち、Fig.8(b)において、節点1(ローカルインデックス)に対する要素関数 $u_1(x, y)$ は、節点1が属さない辺上、ここでは辺[2, 3], 辺[3, 4], で0の値を持つ。

6角形要素を構成する各辺を表現する方程式、

$$a_i \xi + b_i \eta + c_i = 0 \quad (i = 1, 2, \dots, 6) \quad (4.10)$$

を考えよう(Fig.14)。

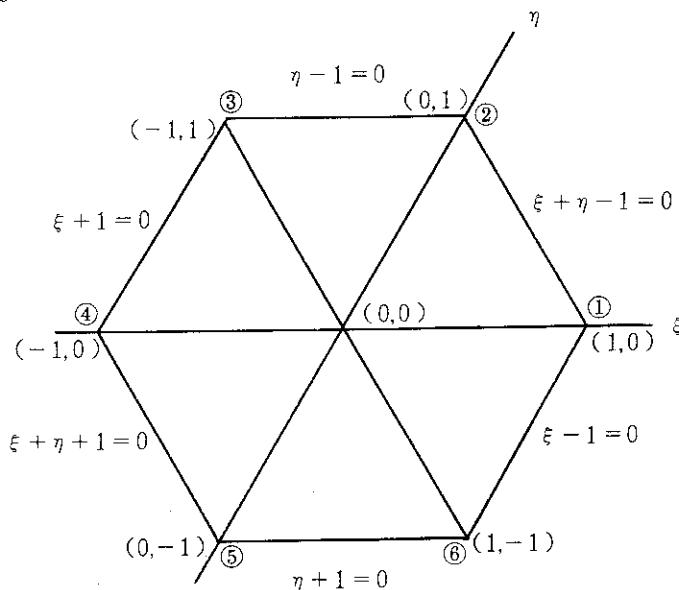


Fig.14 Edge equations on a hexagon

(4.7), (4.8)のLagrange補間式を次のように適用する。

$$P_n(\xi, \eta) = \sum_{i=1}^6 \phi_i(\xi_i, \eta_i) \ell_i(\xi, \eta) \quad (4.11)$$

とおき、(4.8)式で $(x - x_i)$ の代りに、 $(a_i \xi + b_i \eta + c_i)$ を代入する($i = 1, 2, \dots, 6$)。つまり、節点*i*に対応する要素関数 $u_i(\xi, \eta)$ は、節点*i*が属さない辺上では0となるように作成する。その結果、次のような6角要素関数を得る。

6角形要素関数(1)

節 点	要 素 関 数
(1, 0)	$u_1(\xi, \eta) = (1 + \xi + \eta)(1 + \xi)(1 - \eta^2)/4$
(0, 1)	$u_2(\xi, \eta) = (1 + \eta)(1 + \xi + \eta)(1 - \xi^2)/4$
(-1, 1)	$u_3(\xi, \eta) = (1 - \xi)(1 + \eta)\{1 - (\xi + \eta)^2\}/4$
(-1, 0)	$u_4(\xi, \eta) = (1 - \xi - \eta)(1 - \xi)(1 - \eta^2)/4$
(0, -1)	$u_5(\xi, \eta) = (1 - \eta)(1 - \xi - \eta)(1 - \xi^2)/4$
(1, -1)	$u_6(\xi, \eta) = (1 + \xi)(1 - \eta)\{1 - (\xi + \eta)^2\}/4$

(4.12)

上記の要素関数 $u_i(\xi, \eta)$ は節点 i で 1, その他の節点で 0 となる。Fig. 15 に $u_1(\xi, \eta)$ の図形を示す(以下, 6角要素関数の図形表示では, ξ, η の意味で x, y が用いられている)。 $u_2(\xi, \eta), \dots, u_6(\xi, \eta)$ は, $u_1(\xi, \eta)$ を次々と 60 度回転して得られたものとなっており, 同一の形を取る。

$$U1 : (1+X+Y)(1+X)(1-Y^{**2})/4$$

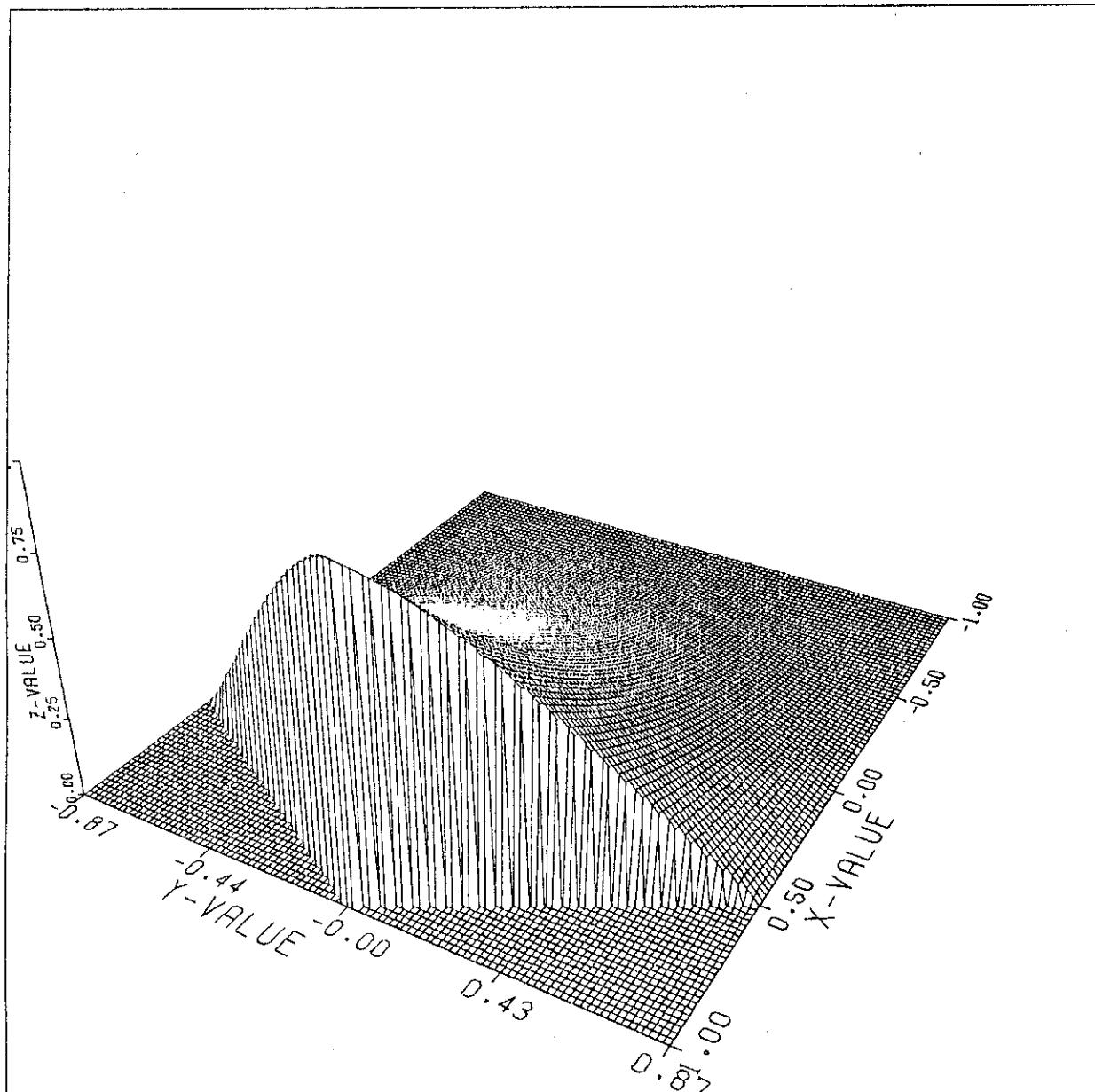


Fig.15 Shape of an original hexagonal function

例えば、 $u_1(\xi, \eta)$ と $u_2(\xi', \eta')$ の関係は、点 $P(\xi, \eta)$ を 60 度回転させた点 $P'(\xi', \eta')$ との座標によって得ることができる (Fig. 16)。

$$\begin{aligned} u_2(\xi, \eta) &= u_1(\xi + \eta, -\xi) \\ u_3(\xi, \eta) &= u_1(\eta, -\xi - \eta) \\ u_4(\xi, \eta) &= u_1(-\xi, -\eta) \\ u_5(\xi, \eta) &= u_1(-\xi - \eta, \xi) \\ u_6(\xi, \eta) &= u_1(-\eta, \xi + \eta) \end{aligned} \quad (4.13)$$

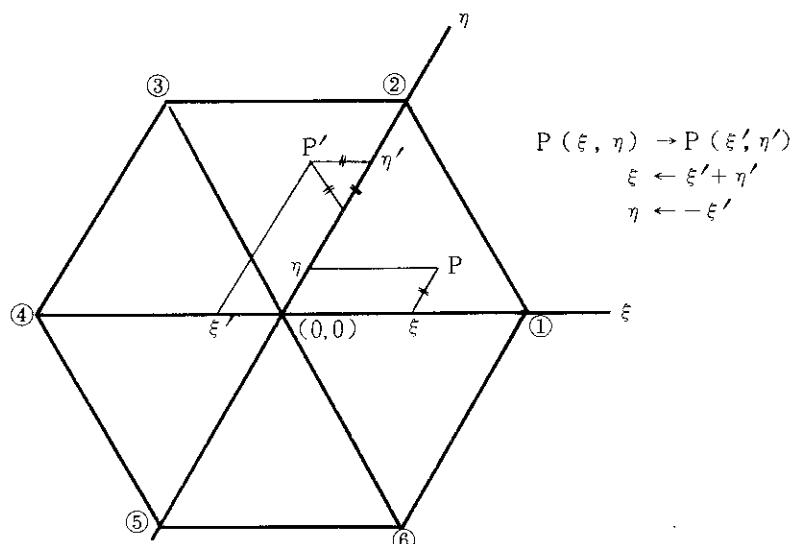
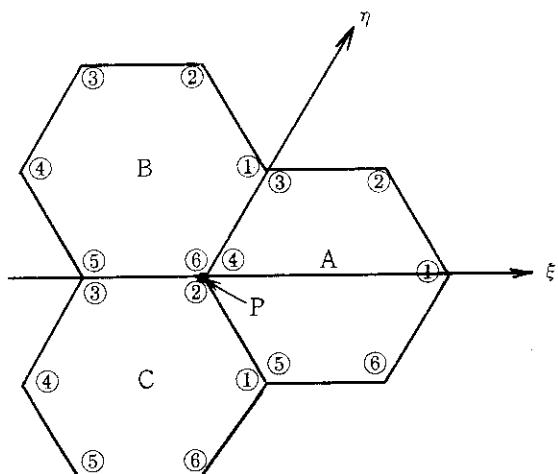


Fig. 16 60°-rotation from point P to P'

(4.12)式で定義した 6 角形要素関数から構成される基底関数が、3.2 で述べた特性を保持しているかを確めてみる必要がある。点 P に対応する基底関数は、点 P が属する要素の要素関数を合成したもので得られる (Fig. 17)。



Basis function at P consists of three element functions at the local indeces ②, ④ and ⑥
 $u_4(\xi, \eta)|_{\text{④} \rightarrow \text{③}} = u_6(\xi, \eta)|_{\text{⑥} \rightarrow \text{①}}$

Fig. 17 Elements to which a node p is pertaining

関数の連続性については、 $u_1(\xi, \eta)$ を例にとれば、 ξ 軸について対称となっているから、要素A上の辺①→②と辺①→⑥の関数の値は重なり合う。これを次のように表示する。

$$u_1(\xi, \eta) |^{\stackrel{A}{\overrightarrow{1 \rightarrow 2}}} = u_1(\xi, \eta) |^{\stackrel{A}{\overrightarrow{1 \rightarrow 6}}}$$

さてP点に関するAの要素関数 $u_4(\xi, \eta)$ を辺④→③上で、Bの要素関数 $u_6(\xi, \eta)$ を辺⑥→①上で調べてみる(Fig.17)。明らかに、

$$u_4(\xi, \eta) |^{\stackrel{A}{\overrightarrow{4 \rightarrow 3}}} = u_6(\xi, \eta) |^{\stackrel{B}{\overrightarrow{6 \rightarrow 1}}} \quad (4.14)$$

要素関数は、中性子束の有限要素法近似(3.3)式でわかるように、重み関数をなすことから、 $\sum_{i=1}^6 u_i(\xi, \eta)$ は、要素内のすべての点で1となることが望しい。ところが(4.12)式で得られた要素関数の和は、Fig.18に示すように、中央部分が高い食パン型をしている。そこで、(4.12)式の要素関数をノーマライズする。

$$\sum_{i=1}^6 u_i(\xi, \eta) = \frac{1}{2} (3 - \xi^2 - \eta^2 - \xi\eta) \quad (4.15)$$

各要素関数を(4.15)式で割ることにより、新しい要素関数を次のような有理式として得る。

6角形要素関数(2)

節 点	要 素 関 数
(1, 0)	$u_1(\xi, \eta) = (1 + \xi + \eta)(1 + \xi)(1 - \eta^2) / \{ 2(3 - \xi^2 - \eta^2 - \xi\eta) \}$
(0, 1)	$u_2(\xi, \eta) = (1 + \eta)(1 + \xi + \eta)(1 - \xi^2) / \{ 2(3 - \xi^2 - \eta^2 - \xi\eta) \}$
(-1, 1)	$u_3(\xi, \eta) = (1 - \xi)(1 + \eta) \{ 1 - (\xi + \eta)^2 \} / \{ 2(3 - \xi^2 - \eta^2 - \xi\eta) \}$
(-1, 0)	$u_4(\xi, \eta) = (1 - \xi - \eta)(1 - \xi)(1 - \eta^2) / \{ 2(3 - \xi^2 - \eta^2 - \xi\eta) \}$
(0, -1)	$u_5(\xi, \eta) = (1 - \eta)(1 - \xi - \eta)(1 - \xi^2) / \{ 2(3 - \xi^2 - \eta^2 - \xi\eta) \}$
(1, -1)	$u_6(\xi, \eta) = (1 + \xi)(1 - \eta) \{ 1 - (\xi + \eta)^2 \} / \{ 2(3 - \xi^2 - \eta^2 - \xi\eta) \}$

(4.16)

(4.16)式で得られた要素関数の図形は、Fig.19に示されるノーマライズしないもの(Fig.15)に較べて、6角形の中心に向っての勾配がきつくなっているのがわかる。

FEMコードにおいては、(4.16)式で得られた要素関数を用いることにする。

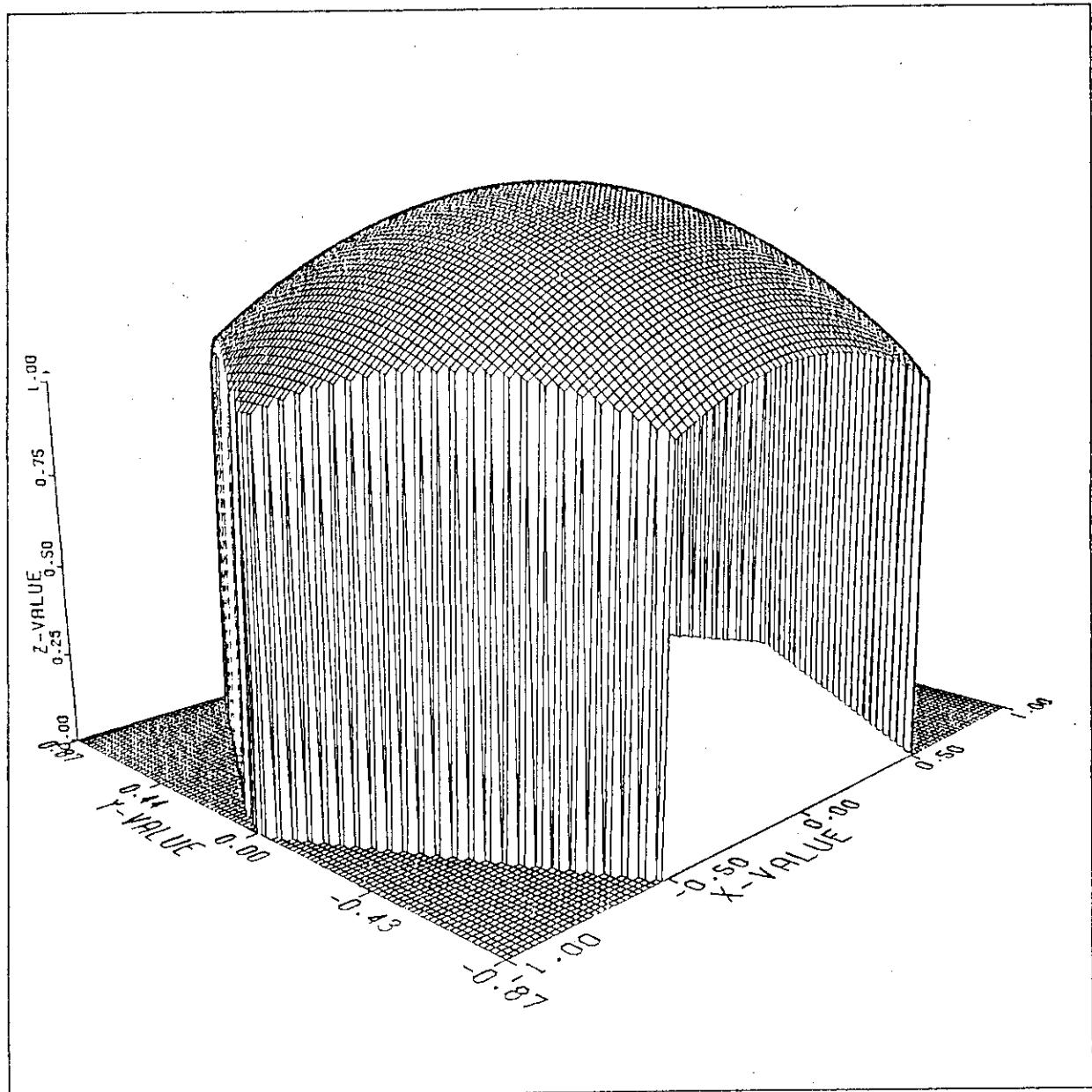


Fig.18 Shape of the sum of the six element functions

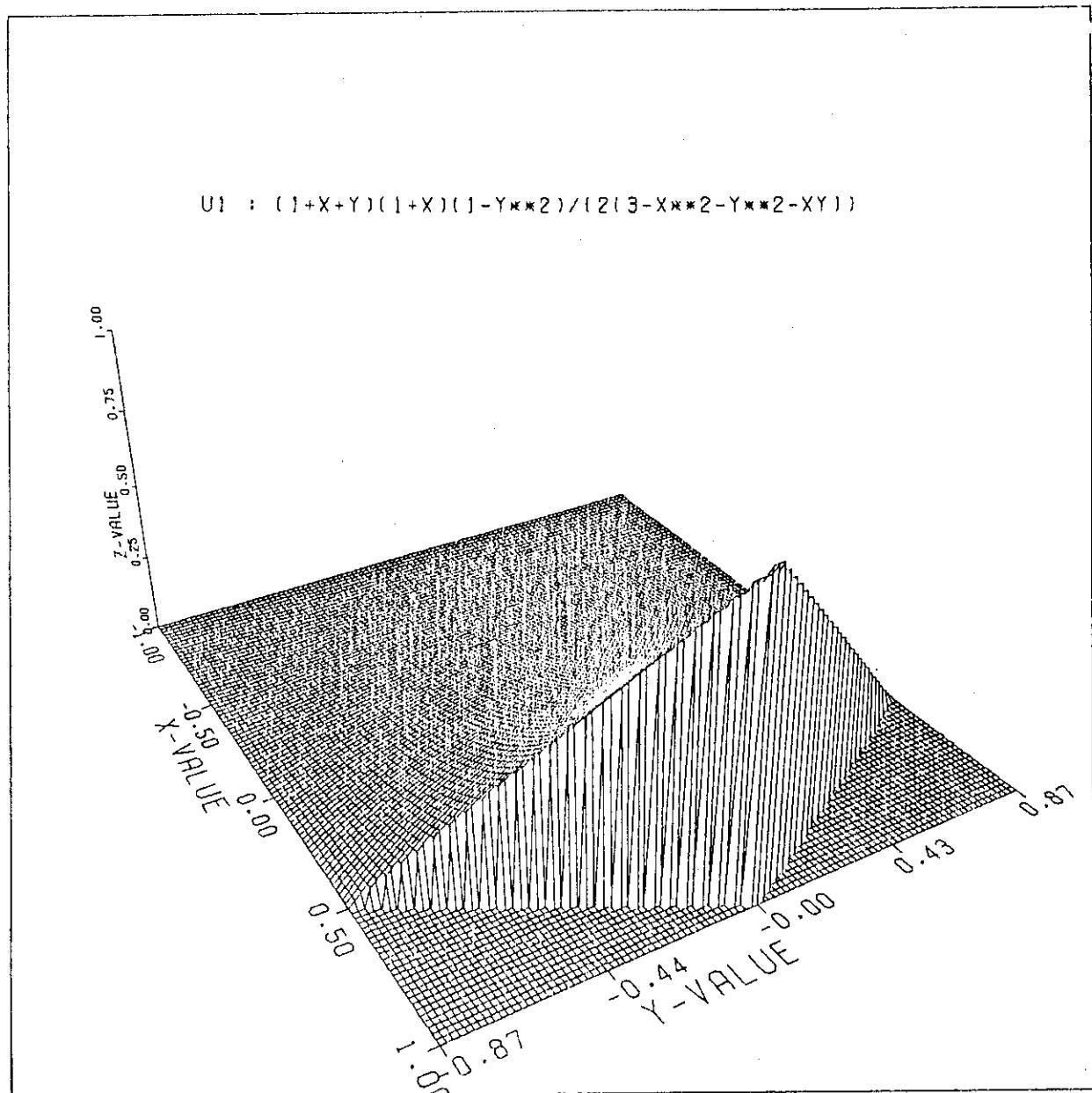


Fig.19 Shape of a normalized hexagonal element function

4.3 B_{ij} , Q_{ij} の計算

(3.6) 式で示した、3次元要素 E_r (Fig. 7) 上の積分値 $[B]^r, [Q]^r$ の具体的な値をここで提示しよう。

4.3.1 2次元要素上の B_{ij}^r, Q_{ij}^r

3次元要素上の $[B]_{ij}^r, [Q]_{ij}^r$ を計算するのに先立って2次元平面 Ω_r 上の値 B_{ij}^r, Q_{ij}^r を求める。

$$\begin{aligned} B_{ij}^r &= \int_{\Omega_r} u_i(x, y) u_j(x, y) dx dy, \quad Q_{ij}^r = \int_{\Omega_r} \nabla u_i(x, y) \nabla u_j(x, y) dx dy \\ \text{ここで, } \nabla u_i(x, y) \nabla u_j(x, y) &= \frac{\partial u_i(x, y)}{\partial x} \frac{\partial u_j(x, y)}{\partial x} + \frac{\partial u_i(x, y)}{\partial y} \frac{\partial u_j(x, y)}{\partial y} \\ &= a^2 / J^2 \left\{ \frac{\partial u_i}{\partial \xi} \frac{\partial u_j}{\partial \xi} + \frac{\partial u_i}{\partial \eta} \frac{\partial u_j}{\partial \eta} - \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial \xi} \frac{\partial u_j}{\partial \eta} + \frac{\partial u_i}{\partial \eta} \frac{\partial u_j}{\partial \xi} \right) \right\} \end{aligned} \quad (4.17)$$

高速炉の断面図は、Fig. 1 で示したように、1つ1つのサブアセンブリは同形であり、同一の平面要素（正6角形） Ω により分割され得る。

正6角形の1辺を a とおき、1辺が1の正6角形 Ω_1 を考える。明らかに次式が成立する。

$$B_{ij} = a^2 \int_{\Omega_1} u_i(x, y) u_j(x, y) dx dy = a^2 B'_{ij} \quad (4.18)$$

$$Q_{ij} = \int_{\Omega_1} \nabla u_i(x, y) \nabla u_j(x, y) dx dy = Q'_{ij} \quad (4.19)$$

$$B'_{ij} = \int_{\Omega_1} u_i(x, y) u_j(x, y) dx dy \quad (4.20)$$

B_{ij}, Q_{ij} の値は、(3.5)～(3.10)式で示す有限要素法近似で重要な値であり、正確な値でなければならない。要素関数が多項式などの取扱い易い関数の場合は、解析的に求めることができる。ところが、ここで提示された6角要素関数の場合には、手計算で解析的に求めるのは困難である。そこで計算機を使用して行う方法が用いられる。次の2種の方法が試された。

- (1) ユタ大学で開発整備された数式処理言語 REDUCE⁽¹¹⁾を使って計算機で解析的に定積分を求める。積分法は(4.5)式で示すミーリ座標による定積分による。
- (2) ロンベルク積分⁽¹²⁾により数値的に定積分を求める。ロンベルク積分は、許容の誤差の範囲で定積分が求まる点で特徴がある。

REDUCEの数式処理による積分機能では、被積分関数が少し複雑な場合には面積分は不可能である。(4.12)式で与えられた6角形要素関数(1)に対する B_{ij}, Q_{ij} は REDUCEで解析的に求めることができた。ところが、ノーマライズを施した(4.16)式の6角形要素関数(2)は、有理式となりREDUCEで数式処理するには複雑過ぎる。そこで6角形要素関数(2)に対する B_{ij}, Q_{ij} の計算はロンベルクの数値積分により求めた。こうして求めた B_{ij}, Q_{ij} の値を Table 4 に示す。2種の要素関数により得た B_{ij}, Q_{ij} の値は、当然のことながら、もとの関数の違いから異なる値となる。

Table 4 B_{kl} and Q_{kl} of hexagonal basis functions

index k, l	Basis function (1) obtained by REDUCE		Basis function (2) obtained by Romberg integration	
	$B_{kl} (\times \sqrt{3}/2 a^2)$	$Q_{kl} (\times 2/\sqrt{3})$	$B_{kl} (\times a^2)$	Q_{kl}
1, 1	9587/33600	10819/13440	0.15847	0.76064
1, 2	7527/44800	-951/8960	0.086577	-0.16199
1, 3	10651/134400	-4477/26880	0.036757	-0.16931
1, 4	2077/33600	-1389/13440	0.027872	-0.098057
1, 5	10651/134400	-4477/26880	0.036757	-0.16931
1, 6	7527/44800	-951/8960	0.086557	-0.16199
2, 2	9587/33600	10819/13440	0.15847	0.76064
2, 3	7527/44800	-951/8960	0.086577	-0.16199
2, 4	10651/134400	-4477/26880	0.036757	-0.16931
2, 5	2077/33600	-1389/13440	0.027872	-0.098057
2, 6	10651/134400	-4477/26880	0.036757	-0.16931
3, 3	9587/33600	10819/13440	0.15847	0.76064
3, 4	7527/44800	-951/8960	0.086577	-0.16199
3, 5	10651/134400	-4477/26880	0.036757	-0.16931
3, 6	2077/33600	-1389/13440	0.027872	-0.098057
4, 4	9587/33600	10819/13440	0.15847	0.76064
4, 5	10651/134400	-951/8960	0.036757	-0.16199
4, 6	10651/134400	-4477/26880	0.036757	-0.16931
5, 5	9587/33600	10819/13440	0.15847	0.76046
5, 6	7527/44800	-951/8960	0.086477	-0.16199
6, 6	9587/33600	10819/13440	0.15847	0.76064

** a; side length of a hexagon

4.3.2 3次元要素上の $[B]_{ij}^r$, $[Q]_{ij}^r$

Fig. 7(b)の6角柱要素を考える。6角柱要素上の要素関数を6角形要素関数を使用して次のように定義する。

$$\begin{aligned} u_i(x, y, z) &= f_i(z) u_i(x, y) \\ u_{i+6}(x, y, z) &= f_{i+6}(z) u_i(x, y), \quad (i = 1, 2, \dots, 6) \end{aligned} \quad (4.21)$$

ここで

$$f_i(z) = \begin{cases} (z - z_2) / (z_1 - z_2) & \text{for } i = 1, 2, \dots, 6 \text{ (I面)} \\ (z_1 - z) / (z_1 - z_2) & \text{for } i = 7, 8, \dots, 12 \text{ (II面)} \end{cases} \quad (4.22)$$

(1) $[B]_{ij}^r$ の計算

$$\begin{aligned} [B]_{ij}^r &= \int_{z_1}^{z_2} \int_Q u_i(x, y, z) u_j(x, y, z) dx dy dz \\ &= \int_{z_1}^{z_2} f_i(z) f_j(z) dz \int_Q u_i(x, y) u_j(x, y) dx dy \\ &= |J| \int_{z_1}^{z_2} f_i(z) f_j(z) dz \int_{Q'} u_i(\xi, \eta) u_j(\xi, \eta) d\eta d\xi \end{aligned} \quad (4.23)$$

一方、

$$\int_{z_1}^{z_2} f_i(z) f_j(z) dz = \begin{cases} \frac{1}{3} (z_2 - z_1) & \text{for } 1 \leq i, j \leq 6 \text{ or } 7 \leq i, j \leq 12 \\ \frac{1}{6} (z_2 - z_1) & \text{for } (1 \leq i \leq 6, 7 \leq j \leq 12) \text{ or } (1 \leq j \leq 6, 7 \leq i \leq 12) \end{cases} \quad (4.24)$$

故に

$$[B]^r = \frac{1}{6} (z_2 - z_1) \begin{bmatrix} 2B^{(2)} & B^{(2)} \\ B^{(2)} & 2B^{(2)} \end{bmatrix} \quad (4.25)$$

$B^{(2)} = [B_{ij}]$ は Table 4 で与えられた 2 次元の B_{ij} を要素を持つ行列を示す。

(2) $[Q]_{ij}^r$ の計算

同様に

$$[Q]_{ij}^r = Q_{ij} \int_{z_1}^{z_2} f_i(z) f_j'(z) dz + B_{ij} \int_{z_1}^{z_2} f_i'(z) f_j(z) dz \quad (4.26)$$

$$\int_{z_1}^{z_2} f_i(z) f_j'(z) dz = \begin{cases} \frac{1}{z_1 - z_2} & \text{for } 1 \leq i, j \leq 6 \text{ or } 7 \leq i, j \leq 12 \\ \frac{-1}{z_1 - z_2} & \text{for } (1 \leq i \leq 6, 7 \leq j \leq 12) \text{ or } (1 \leq j \leq 6, 7 \leq i \leq 12) \end{cases} \quad (4.27)$$

(4.21)～(4.27) 式により、前章 (3.9) 式を得る。

5. 非均質燃料集合体の取扱い

Fig. 4(b)で示すように2次元要素内が材質が異なり、6角形の中心を軸にA, B, Cの3層に分割されている場合を考える。

(4.5) 式を利用し $\sum (x, y) u_i(x, y) u_j(x, y)$ の積分を求める。

$$\begin{aligned} & \int_Q \sum_r (x, y) u_i(x, y) u_j(x, y) dx dy \\ &= |J| \left\{ \left(\sum_A \int_0^{r_1} d\xi + \sum_B \int_{r_1}^{r_2} d\xi + \sum_C \int_{r_2}^{r_3} d\xi \right) \int_{-1}^{1-\xi} u_i(\xi, \eta) u_j(\xi, \eta) d\xi d\eta \right. \\ & \quad \left. + \left(\sum_A \int_{-1}^{-r_2} d\xi + \sum_B \int_{-r_2}^{-r_3} d\xi + \sum_C \int_{-r_3}^0 d\xi \right) \int_{-(1+\xi)}^1 u_i(\xi, \eta) u_j(\xi, \eta) d\xi d\eta \right\} \end{aligned} \quad (5.1)$$

6. 6角格子形状メッシュゼネレーション

Fig. 1で示すような6角格子形状を持つ高速炉の断面をメッシュ分割する際は、CITATIONのように無理に方形化しても(Fig. 5)メッシュ点の番号づけが複雑過ぎ、計算コードの利用者にとって不便さを感じさせる。

ここでは、6角形状のx-y平面にそのまま番号づける方法を採用し、図形表示を付すこととした。

既成のFEMコードには、方形の形状を対象とした3角形或いは4角形要素を使う自動メッシュゼネレータが整備されていた。我々は、これとは別に、6角格子形状を対象としたメッシュゼネレータを作成した。

メッシュゼネレータとしては、6角形要素を用いるもの、3角形要素を用いるものの2種を作成し、それぞれに対し、体系の対称性をメッシュ点の節約を考慮し、

- (1) 全形状
- (2) 1/3形状 (120度回転)
- (3) 1/6形状 (60度回転)

3種のオプションを準備した。6角形要素分割で、1/6形状で計算が可能なら節点数が最も少なくて済む。

Fig. 20に6角形要素分割、1/6形状のメッシュゼネレーションの例を示す。点線部は内部境界にまたがる要素を示す。計算の対称となる節点は境界の内側のみであり、係数行列(全体行列)を求める際に、対称性が考慮される。節点番号、要素番号は内部境界内を先に付し、境界外の節点、境界にまたがる要素には後の番号が付される。

Fig. 21は3角形要素分割で1/6形状の場合を示す。6角形要素の場合と異なり、境界となる要素は正3角形の半分から成る。

有限要素法におけるメッシュゼネレーションの最大の留意点は、係数行列のバンド幅を最小

5. 非均質燃料集合体の取扱い

Fig. 4(b)で示すように2次元要素内が材質が異なり、6角形の中心を軸にA, B, Cの3層に分割されている場合を考える。

(4.5) 式を利用し $\sum_r \Sigma_r(x, y) u_i(x, y) u_j(x, y)$ の積分を求める。

$$\begin{aligned} & \int_Q \sum_r \Sigma_r(x, y) u_i(x, y) u_j(x, y) dx dy \\ &= |J| \left\{ \left(\sum_A \int_0^{r_1} d\xi + \sum_B \int_{r_1}^{r_2} d\xi + \sum_C \int_{r_2}^{r_3} \right) \int_{-1}^{1-\xi} u_i(\xi, \eta) u_j(\xi, \eta) d\xi d\eta \right. \\ & \quad \left. + \left(\sum_A \int_{-1}^{-r_2} d\xi + \sum_B \int_{-r_2}^{-r_3} d\xi + \sum_C \int_{-r_3}^0 d\xi \right) \int_{-(1+\xi)}^1 u_i(\xi, \eta) u_j(\xi, \eta) d\xi d\eta \right\} \end{aligned} \quad (5.1)$$

6. 6角格子形状メッシュゼネレーション

Fig. 1で示すような6角格子形状を持つ高速炉の断面をメッシュ分割する際は、CITATIONのように無理に方形化しても(Fig. 5)メッシュ点の番号づけが複雑過ぎ、計算コードの利用者にとって不便さを感じさせる。

ここでは、6角形状のx-y平面にそのまま番号づける方法を採用し、図形表示を付すこととした。

既成のFEMコードには、方形の形状を対象とした3角形或いは4角形要素を使う自動メッシュゼネレータが整備されていた。我々は、これとは別に、6角格子形状を対象としたメッシュゼネレータを作成した。

メッシュゼネレータとしては、6角形要素を用いるもの、3角形要素を用いるものの2種を作成し、それぞれに対し、体系の対称性をメッシュ点の節約を考慮し、

- (1) 全形状
- (2) 1/3形状 (120度回転)
- (3) 1/6形状 (60度回転)

3種のオプションを準備した。6角形要素分割で、1/6形状で計算が可能なら節点数が最も少なくて済む。

Fig. 20に6角形要素分割、1/6形状のメッシュゼネレーションの例を示す。点線部は内部境界にまたがる要素を示す。計算の対称となる節点は境界の内側のみであり、係数行列(全体行列)を求める際に、対称性が考慮される。節点番号、要素番号は内部境界内を先に付し、境界外の節点、境界にまたがる要素には後の番号が付される。

Fig. 21は3角形要素分割で1/6形状の場合を示す。6角形要素の場合と異なり、境界となる要素は正3角形の半分から成る。

有限要素法におけるメッシュゼネレーションの最大の留意点は、係数行列のバンド幅を最小

にするように節点番号を付すことである。つまり、隣接する節点との番号差の最大値を最小化することが必要である。

Table 5 に、 $1/6$ 形状の場合の 3 角形要素分割および 6 角形要素分割における要素数、節点数、中性子束の値が 0 となる節点数（自然境界をなす節点）、係数行列のバンド巾を示す。バンド巾は比較的大きくなることが分かる。

Table 5 Number of elements, etc., in the case of 60° -rotation
on the hexagonal geometry

Meshes	Number of elements	Number of node points	Band width	Number of zero-flux nodes
Triangular elements	$3\ell^2 - \ell - 8$	$(3\ell-4)(\ell+3)/2$	$\frac{3}{2}(\ell+1)$	$2\ell + 1$
Hexagonal elements	$\ell^2 - 2$	$\ell(\ell+1)/2 - 2$	2ℓ	$2(\ell-1) + 1$

ℓ ; number of layers on a hexagonal geometry

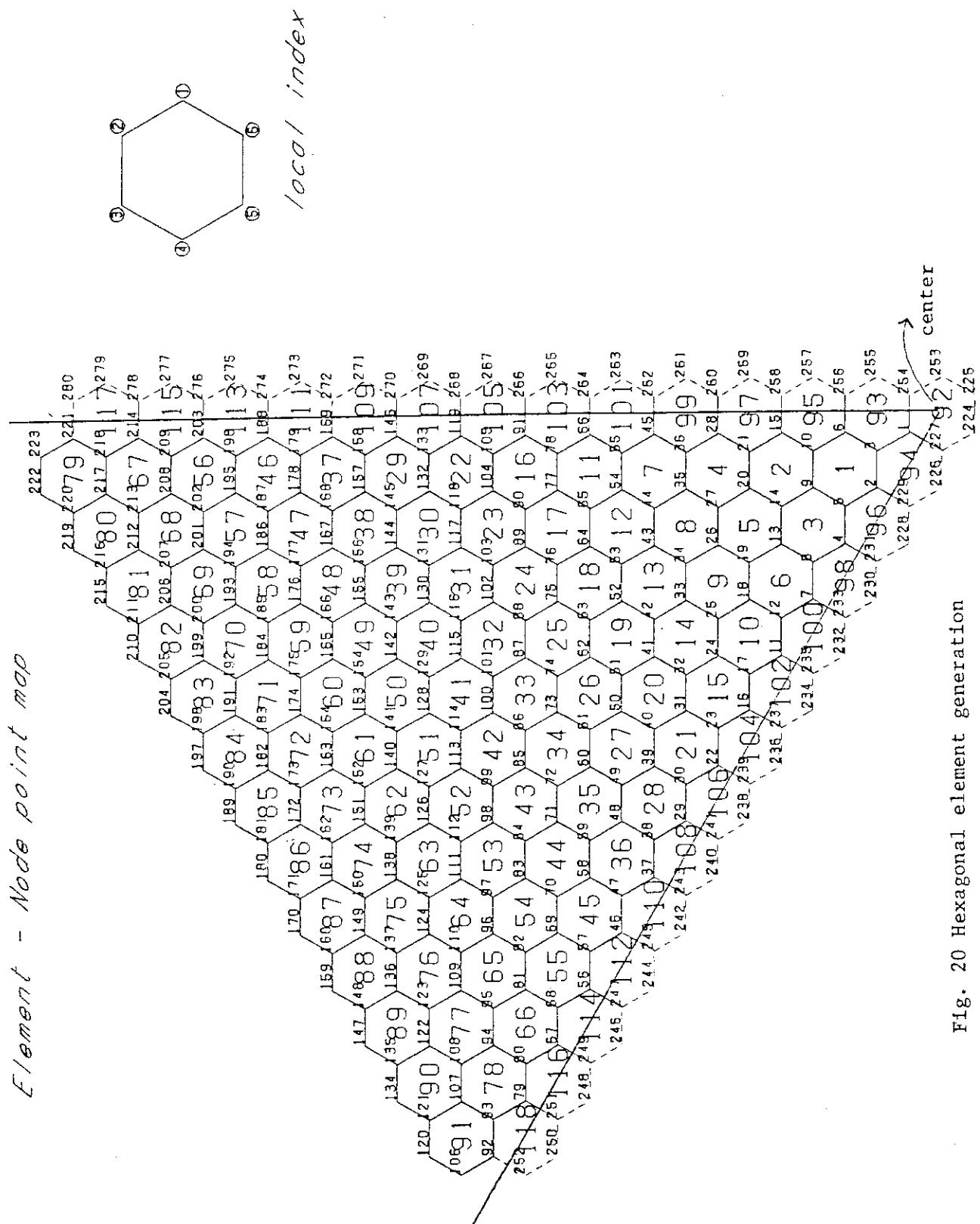


Fig. 20 Hexagonal element generation

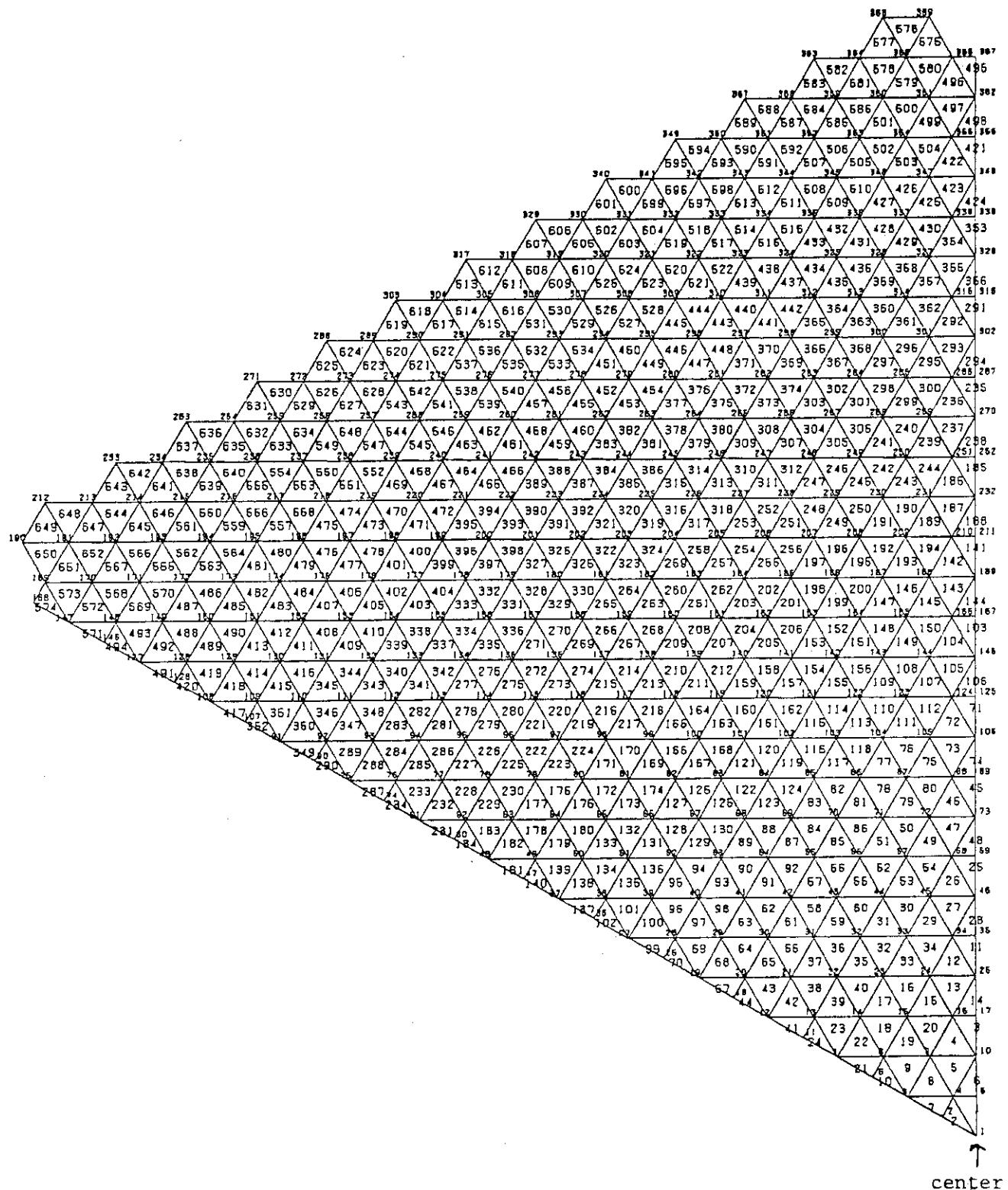


Fig.21 Triangular element generation

7. 計算結果の評価

解析解との対比が可能な基本問題と、高速炉物理研究室で評価の対象となったGCFRの計算モデルの2種について評価した。⁽⁵⁾

7.1 基本問題

1群、1領域、サブアセンブリが6角格子状に配列された裸の原子炉を取り上げる。原子炉の全体形状は、径方向が約75cm、軸方向が100cmである。断面図はFig.22で示されるように、4層の正6角形サブアセンブリから成り、6角形の1辺の長さは11.55cmである。クロスセクションは次の値が使用される。

$$D = 3.0, \quad \nu \Sigma_f = 0.021, \quad \Sigma_a = 0.015, \quad \Sigma_f = 0.1$$

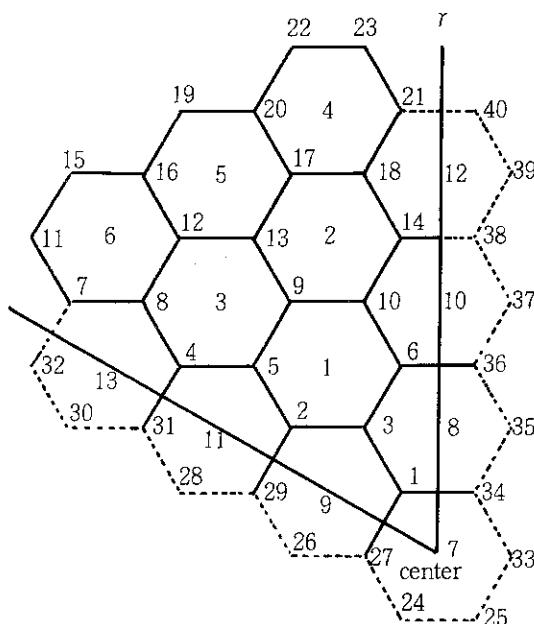


Fig.22 Basic problem
(60°-rotation)

(1) 解析解

一般の有限円筒、裸の原子炉に対する中性子分布は、次式で与えられる。⁽¹³⁾

$$\phi(z, r) = J_0(2.405r/R) \cos(\pi z/H) \quad (7.1)$$

同じく、実効増倍係数 K_{eff} は次式で与えられる。

$$K_{eff} = \nu \Sigma_f / (DB^2 + \Sigma_a) \quad (7.2)$$

ここで B^2 は形状パックリングで有限円筒の場合は次式となる。

$$B^2 = (2.405/R)^2 + (\pi/H)^2 \quad (7.3)$$

Rは原子炉の半径、Hは高さである。Rに関しては、Fig.22で示したとおりデコボコしているが、ここでは平均値として $R = 75$ (cm) で計算される。

(2) FEMによる計算解

計算は、軸方向は上下対称、径方向は60度対称として行われた。x-y断面は、Fig.22で示されたような6角形要素分割を行い、z軸方向は、 $H/2$ を5分割することによりなされた。

(3) 比較

Fig.23には、原子炉の中心面における径方向の中性子束の分布を、Fig.24には、炉の中心の軸方向の中性子束の分布を示す。 K_{eff} についてはTable 6で示される。

実行増倍係数および径方向の中性子束分布の解析解との差は、6角形状の外面がスムーズでないことによるものと考えられる。

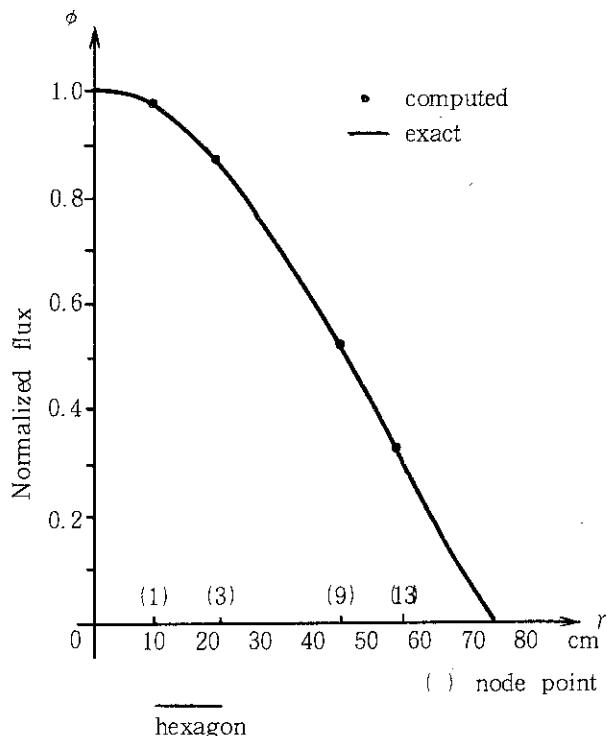


Fig.23 Comparison of radial flux on the basic problem
(at the bottom)

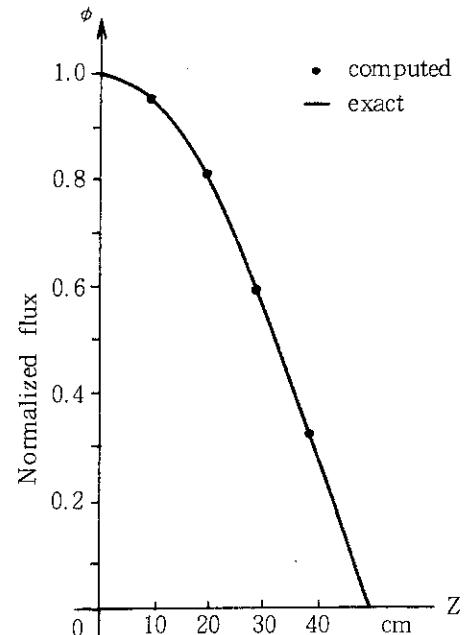


Fig.24 Comparison of axial flux on the basic problem
(at the center)

Table 6 Comparison of K-effective on the basic problem

exact	by FEM
0. 9978	0. 9936

7.2 GCFR モデル

GCFR モデルの初期負荷状態 (BOL) を計算の対象とする。ここで計算では、文献(5)で取り上げられた炉と材料構成が多少異なる。制御棒を挿入した時の炉心中心断面を Fig.25 で示す。また RZ モデルは Fig.26 で示す。核データに関しては、高速炉設計班所有のライブラリを使用する。

(1) CITATION の結果との比較

計算結果の比較は、2.3 の Table 2 で述べたように、

- ① 差分 6 角メッシュ法 (FD1)
- ② 差分 3 角メッシュ法 (FD6)
- ③ 有限要素法 6 角形要素法 (FEM6)
- ④ 有限要素法 3 角形要素法 (FEM7)

の 4 種の計算法についてなされた。差分法は CITATION コード、有限要素法は FEM コードが使用された。

計算結果の評価に関する総括は 2.3 で与えたとおりである。

Fig.27 は、Fig.28 で画かれる中性子束の表示位置について示す。炉の中心断面 (A) と、中間断面 (B) で、Fig.25 で示した 1/6 平面扇型の両側の中性子束が径方向に示される。

Fig.28(a), (b), (c), (d) は、第 1 群の表示点 A, B, 第 3 群の表示点 A, B における中性子束の分布を示す。

加速因子と反復回数の関係は、Table 3 で示された。

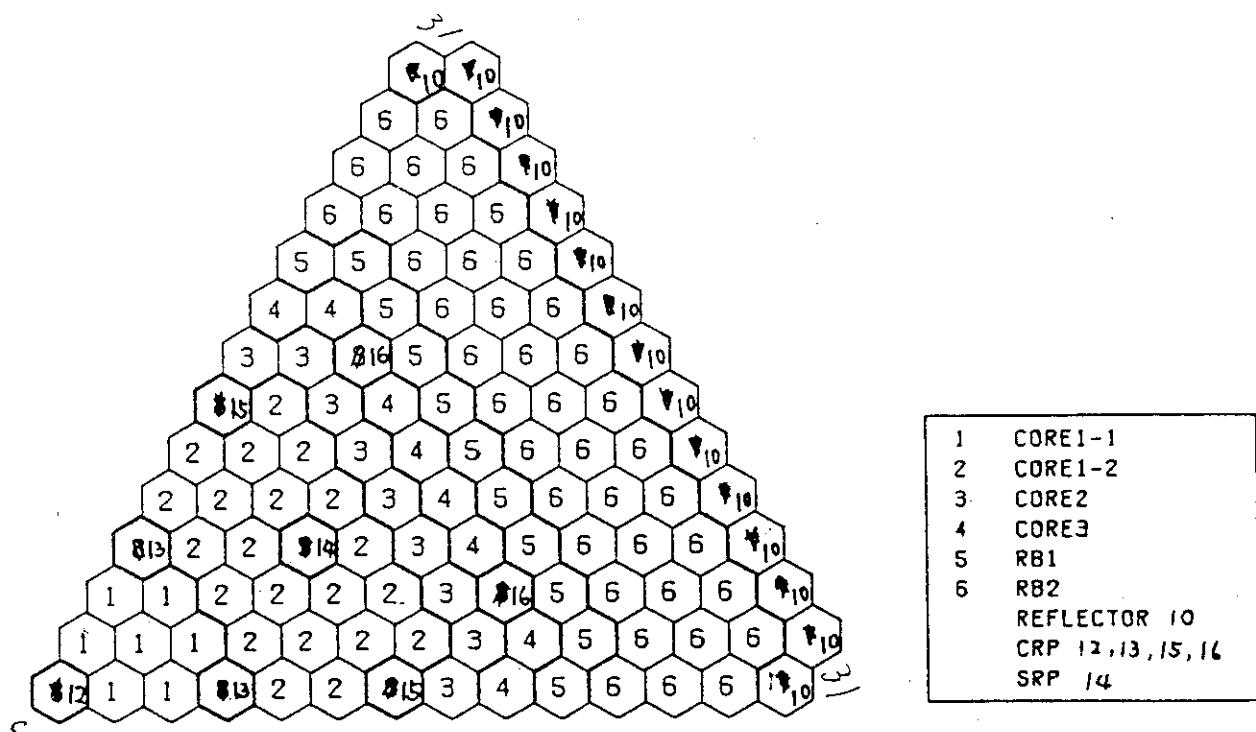


Fig. 25 GCFR configuration at bol

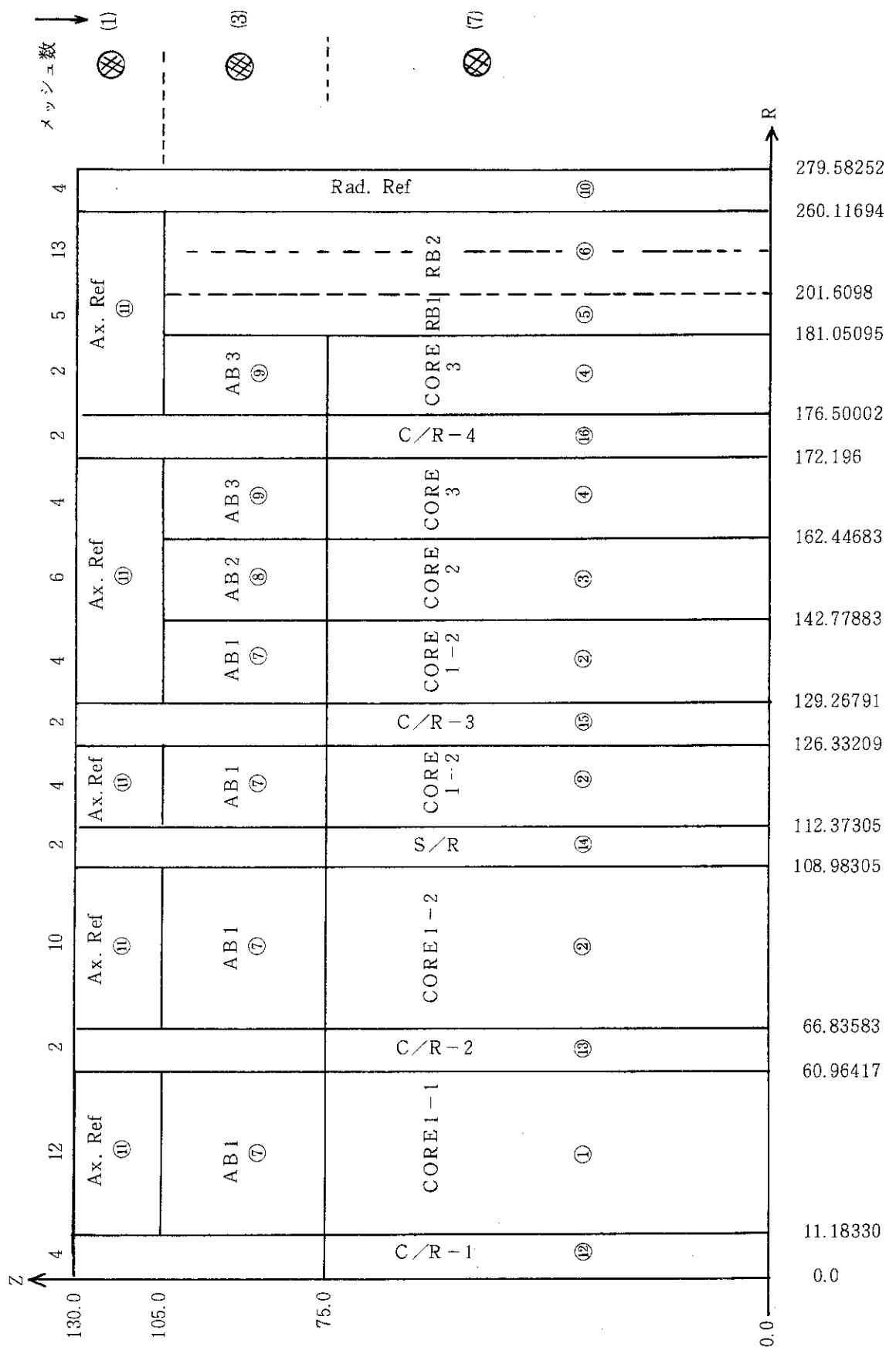


Fig.26 GCFR R-Z model

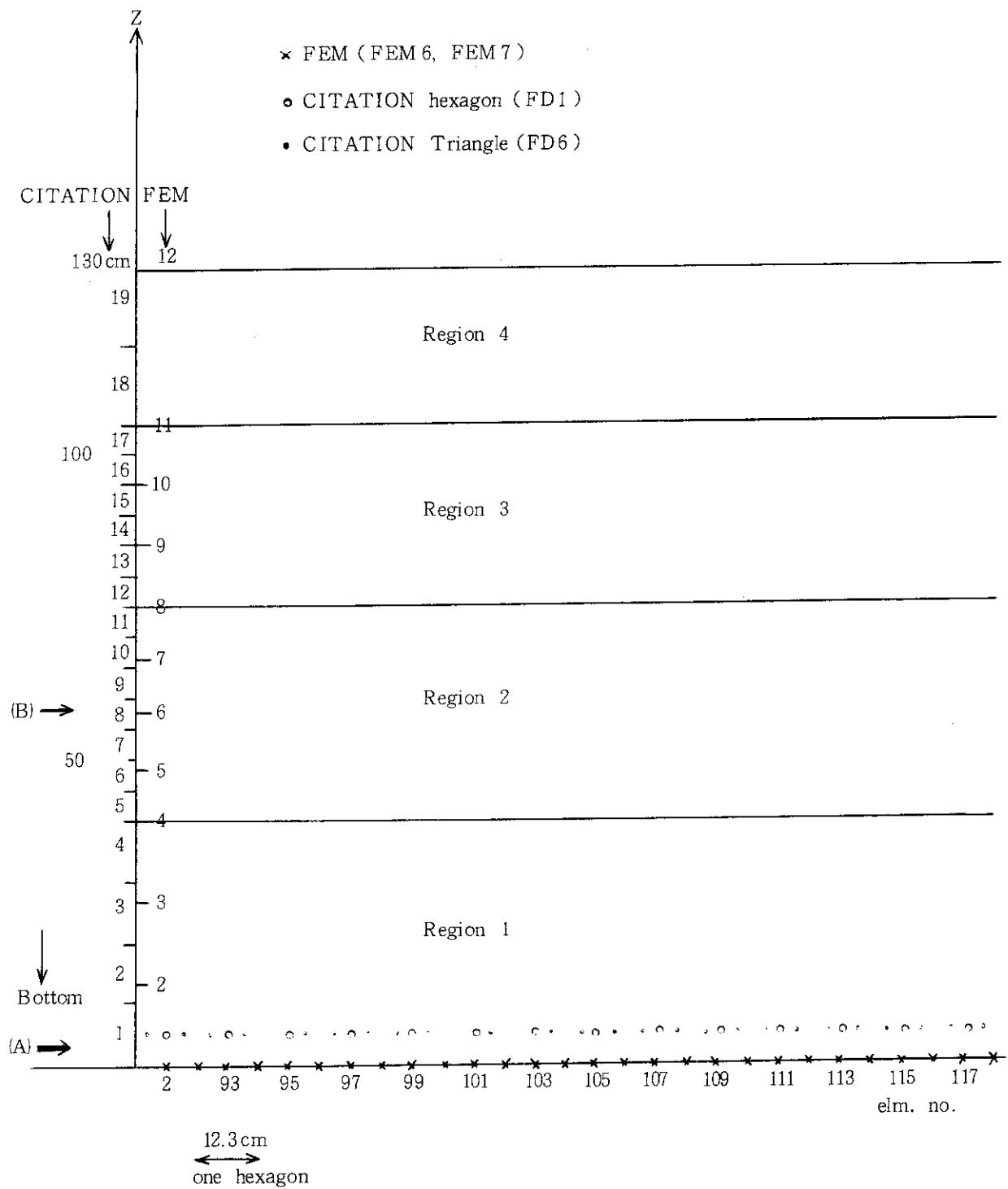


Fig.27 Figured position of flux
(position (A) and (B))

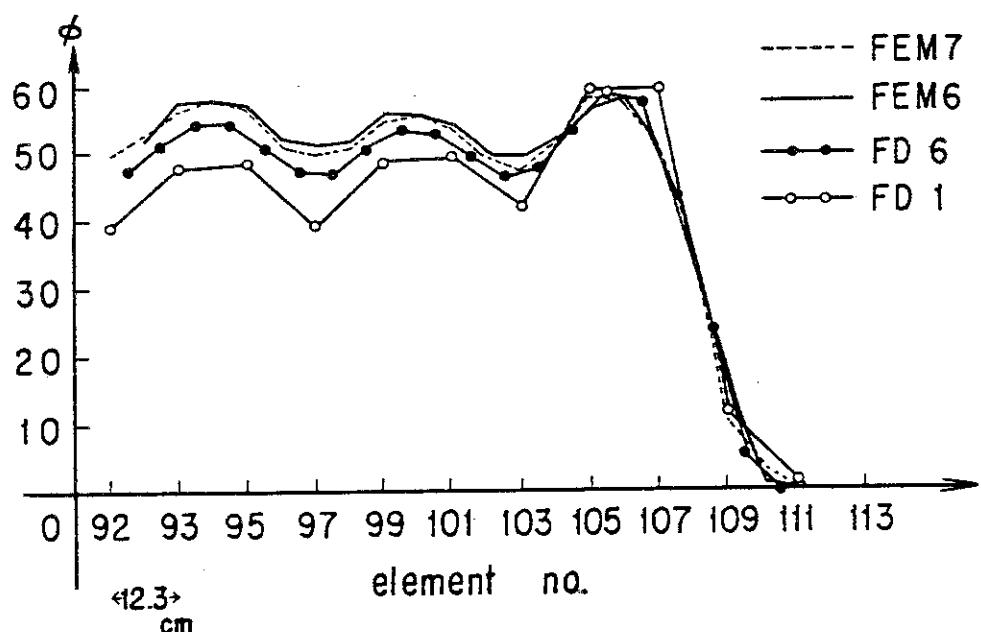


Fig. 28(a) Radial flux distribution in GCFR
(group 1, midplane)

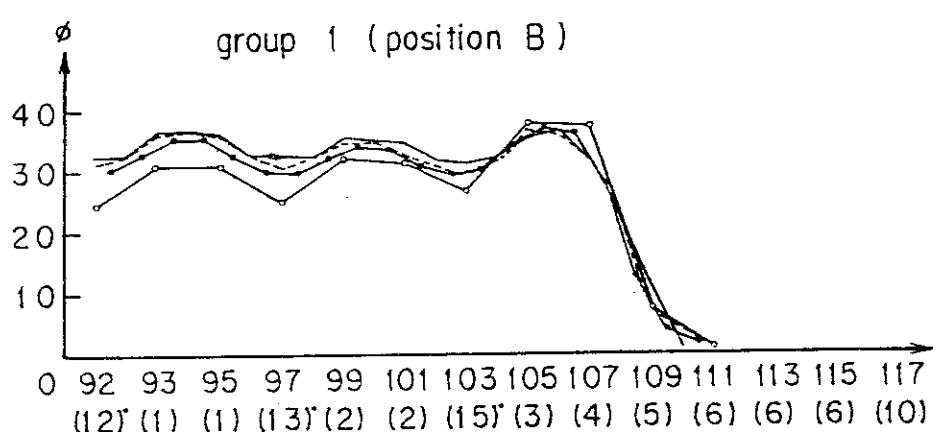


Fig. 28 (b) Radial flux distribution in GCFR

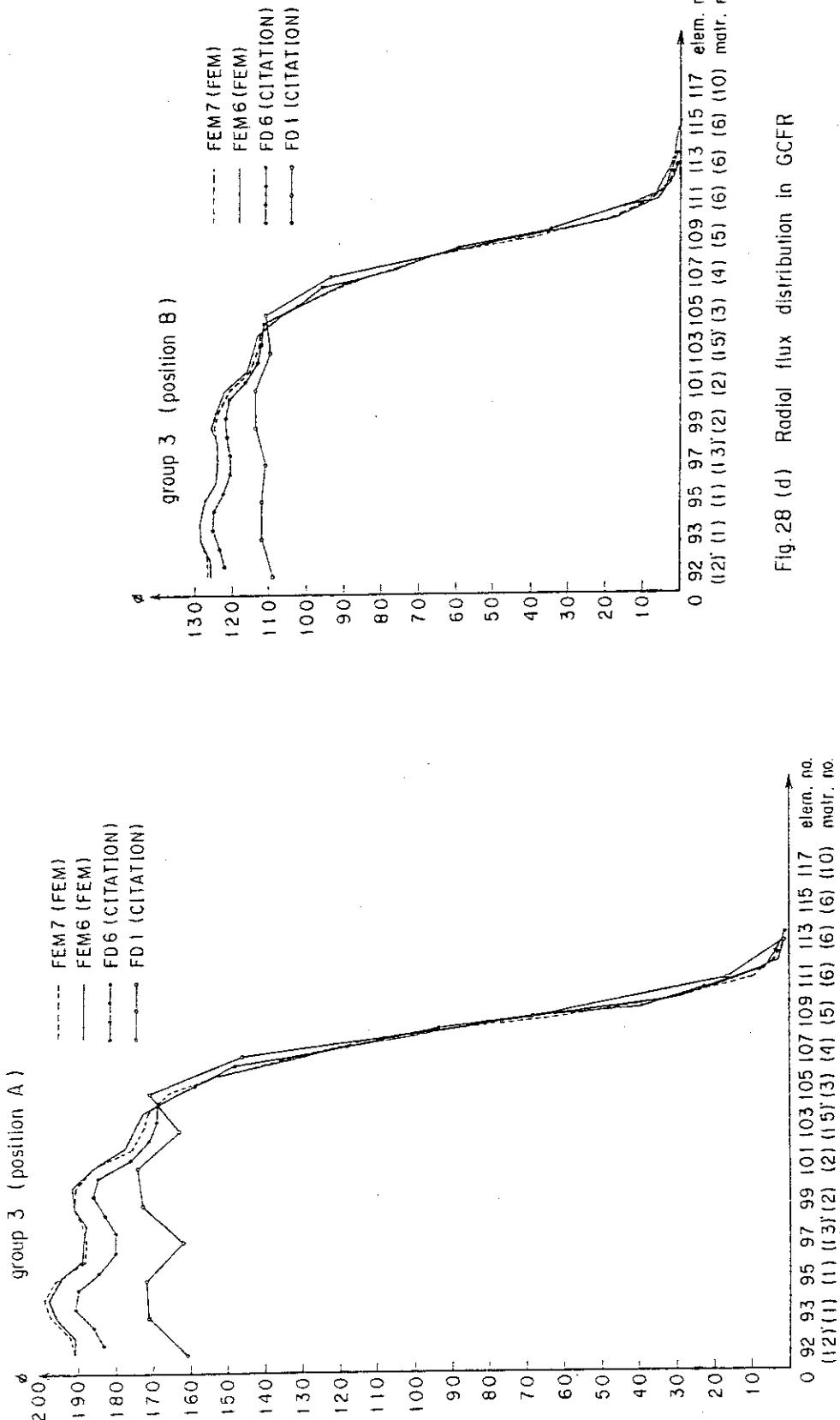


Fig. 28 (c) Radial flux distribution in GCFR

Fig. 28 (d) Radial flux distribution in GCFR

8. 計算コードと入力データの修正

伊勢氏らにより作成された F E M • B A B E L コードは、⁽³⁾ 6 角格子形状を取扱うために、本体の $1/3$ 程度が追加され、既成部分の $1/2$ のサブルーチンが部分的に修正された。ここでは、追加、修正点をまとめて述べる。

8.1 計算できるモデルの拡張

- (1) 6 角形状（外観）の取扱いの追加
- (2) 6 角形要素分割の導入

上記は、いずれも入力データ N H E X , W H E X , I H G (後述) の指定により記述され、自動メッシュゼネレータ（5.で記述）によって要素分割がなされる。

8.2 入力データの追加と修正

F I D O 入力方式により既成の F E M コードは、1 ~ 19種の入力データを既定することになっている。6 角形状を取扱うために追加・修正が行われたのは、計算モデル、計算条件を規定する第 1 と第 2 のデータに関するものである。6 角形状を取扱う場合には、必ず自動メッシュ作成が行われるので、第 3 ~ 第 7 のデータは不要である。

追加修正後の入力データ一覧は Table 7 で示される。 ϑ についてには、追加、修正されたものを示す。

主な追加、修正点は次のとおりである。

N C S O P 2 クロスセクションデータをディスクから読む。データ形式は高速炉物理研究室 G C F R グループのものとする。

N A U T O 4 6 角形要素分割のための自動メッシュゼネレーションの指定、6 角格子形状（外観）を 3 角形要素に分割するときは 2 でよい。

N H E X 6 角格子の層の数、6 角形状以外のときは必ず 0 でなければならない。6 角格子形状を 3 角形要素に分割する場合も同様の扱いとなる。例えば、Fig. 20, 21 では 15, Fig. 22 では 5

I H G Reflective 条件の指定

- | | |
|---|-----------------------------|
| 0 | 6 角格子状以外 |
| 1 | 6 角格子状の $1/6$ (60 度回転) |
| 2 | 同 上 $1/3$ (120 度回転) |
| 3 | 同 上 全形状
(3 角形要素分割の場合も同じ) |

W H E X 正 6 角形または正 3 角形の 1 辺の長さ (cm)

8.3 追加したサブルーチン (Table 8)

Table 7 Input Specifications

A. Title card

one card ; formal (18A4)

B. Integer data

1\$ [33 parameters]

- 1. NGRP NUMBER OF ENERGY GROUPS
- 2. NDW maximum number of groups for down-scatterings
- 3. NPOINT number of node points on $x-y$ plane
- 4. NZMAX number of node points along z direction
- 5. NELEM number of elements on $x-y$ plane
- 6. NXYSRN number of geometrical regions on $x-y$ plane
- 7. NZRN number of geometrical regions along z direction
- 8. MTT number of materials
- 9. NBCON number of node points with the zero flux boundary condition on $x-y$ plane
- 10. NBOTOM bottom boundary condition;
0: zero flux,
1: reflective
- 11. NTOP top boundary condition;
0: zero flux,
1: reflective
- 12. NIMAX inner iteration maximum allowed for energy group
- 13. NOMAX outer iteration maximum for execution stop
- 14. NBAND half bandwidth in the global matrix (see Section 3.2)
- 15. NKXY number of coarse mesh rebalancing regions on $x-y$ plane
- 16. NKZ number of coarse mesh rebalancing regions along z direction
- 17. NSTART starting option for initial guess for flux;
0: flat,
1: guess read from the external tape (file unit 9),
2: guess read from the dump tape (file unit 12),
3: complete restarting from the dump tape (file unit 12),
4: modified restarting from the dump tape (file unit 12)
- 18. NMTRX option for matrix calculation;
1: calculate all the matrices for a new case,
2: read the geometrical matrix on $x-y$ plane from the dump tape (file unit 12),

19. NPRNI print option for the material cross sections;
 0: no print,
 1: print
20. NPRN2 print option for regional data;
 0: no print,
 1: print
21. NPRN3 print option for elements and coordinates;
 0: no print,
 1: print
22. NXYP input option for regional data on $x-y$ plane;
 0: by cards,
 1: from the dump tape
23. NMOPT input option for material number data;
 0: by cards,
 1: from the dump tape
24. NCSOP input option for nuclear cross section data;
 0: by cards
 1: from the dump tape
 2: from disk
25. NFISOP input option for x data;
 0: by cards,
 1: from the dump tape
26. NBCOP input option for zero flux boundary condition data;
 0: by cards,
 1: from the dump tape
27. NKOPT input option for the coarse mesh rebalancing region data;
 0: by cards,
 1: from the dump tape
28. NAUTO option for auto-mesh generating routine (on x-y plant);
 0: not used (input by cards),
 1: generate grid meshes all composed of right angle
 triangles,
 2: generate grid meshes all composed of rectangles,
 3: read from the external tape (file unit 14)
 4: generate hexagonal meshes
29. NXPL number of node points along x direction for auto-mesh
 routine

30. NYP1 number of node points along y direction for auto-mesh generating routine
 31. NEDOP edit option for flux;
 0: edit the point-wise fluxes on $x-y$ planes,
 1: edit the element-averaged fluxes on $x-y$ planes,
 2: edit the element-averaged fluxes on z meshes
 32. NEDNO number of edit fluxes for $x-y$ planes or z meshes; the number of z meshes with $x-y$ planes for edit $x-y$ plane fluxes, or the number of $x-y$ points with z meshes for edit z mesh fluxes
 33. NEDPT input option for parameter 32, NEDNO;
 0: by cards,
 1: from the dump tape
 ∂ 34. NHEX number of layers of hexagonal geometry. If other geometries NHEX=0
 ∂ 35. IHG specify the reflective condition
 1: 1/6 of hexagonal geometry (60°-rotation)
 2: 1/3 of hexagonal geometry (120°-rotation)
 3: full of hexagonal geometry
 0: other geometries
 "T" terminator

C. Floating point data

2* [8 parameters] (input for NSTART=3 in "1\$ card")

- 1. EPS1 criterion for outer iteration convergence (K_{eff})
- 2. EPS2 criterion for inner iteration convergence (point-wise flux)
- 3. SORF over-relaxation factor β due to SOR method; $1.0 \leq SORF \leq 2.0$
- 4. POWER operating power level in megawatts for normalizing fluxes
- 5. TIME CPU execution time limit in minutes
- 6. FA1 coefficient on geometrical symmetry of a nuclear reactor for power-normalized fluxes (such as $1/FA1$ -reactor core)
- 7. FA2 number of nuclear fissions per watt-sec ($1/K_f$)
- ∂ 8. WHEX length of one-side of a hexagon if hexagonal geometry is used

"T" terminator

D. Geometrical data

point data on x-y plane (input for NMTRX=1 and NAUTO=0 "1\$" card)
 3\$ NELNO (4, NELEM)

input the number of the node points which compose an element in anticlockwise, put NELNO (3,NE)=NELNO (4,NE) for a triangular element

4* PX (NPOINT)

input *x*-coordinate on each node point

5* PY (NPOINT)

input *y*-coordinate on each node point

"T" terminator

data for auto-mesh generating routine (input for NMTRX=1 and NAUTO>0)

6* XNODE (NXPL)

distance from center to each mesh-division in *x*-coordinate

7* YNODE (NYPL)

distance from center to each mesh-division in *y*-coordinate

"T" terminator

z mesh data (input for NMTRX \leq 2)

8\$ NDZR (NZRN)

number of divisions in each region in *z*-direction (from bottom)

9* ZNODE (NZRN)

region width in each region in *z*-direction (from bottom)

"T" terminator

regional data on x-y plane (input for NZYOP=0 and NMTRX \leq 3)

10\$ NZYGN (NELEM)

assign the region number on each element

"T" terminator

E. Material data

material table (input for NMOP=0 and NMTRX \leq 3 in "1\$" card)

11\$ NMRGN (NXYRN, NZRN)

assign the material number on each region (from bottom)

"T" terminator

cross section data (input for NCSOP=0 and NMTRX \leq 3)

12\$ CS (LHM, NGRP, MTT)

input macroscopic cross sections on each energy group for every material; within a group, the order of data in cross section tables is:

Position	Entry
1	Σ_f^g
2	D^g
3	$v\Sigma_f^g$
4	Σ_a^g
5	$\Sigma_s^{g \rightarrow g+1}$
6	$\Sigma_s^{g \rightarrow g+2}$
.	.
.	.
.	.
IHM	$\Sigma_s^{g \rightarrow g+NDW}$

where NDW is the number of down-scatterings
 "T" terminator

F. Fission spectrum (input for NFISOP=0 in "1\$" card)

13\$ AKAI (NGRP)

input the energy-wise x^g in order of $g=1, 2, \dots, NGRP$

"T" terminator

G. Data for the zero flux boundary condition on $x-y$ plane (input for NBCOP=0 and NBCON>0 in "1\$" card)

15\$ NBPOT (NBCON)

input all the numbers of node points with the zero flux boundary condition

"T" terminator

H. Data for coarse mesh rebalancing region (input for NKOPT=0 in "1\$" card)

x-y plane data

17\$ KRPNT (NPOINT)

assign the coarse mesh rebalancing region number to each node point

"T" terminator

z mesh data

18\$ KZRN (NZRN)

assign the coarse mesh rebalancing region number to each region (from bottom)

"T" terminator

I. Edit data (input for NEDNO>0 and NEDPT=0 in "1\$" card)

10\$ NEDTB (NEDNO)

position table of edited fluxes or powers for specifying;
 the node point numbers in the z direction for NEDOP=0
 (from bottom), or the mesh (element) numbers in z
 direction for NEDOP=1 (from bottom), or the element
 numbers on $x-y$ plane for NEDOP=2.

It is noted that the power in z meshes is edited even
 for NEDOP=0 at power edit.

"T"

terminator

Table 8 Added Subroutines

Hexagonal mesh generation

HAUTO1	Numbers of nodes, elements, zero-flux positions, and band width are given.
HAUTO2	Node-element map is made and pictured.
HAUTO3	Zero-flux positions are given.
PRINTH	Region-element and material-element maps are pictured.

Triangular mesh generation

TAUT01	correspond to	HAUT01
TAUT02		HAUT02
TAUT03		HAUT03
PRINTT		PRINTH

Cross section reading

CROSS	cross sections are read from the cross section table of FBR group.
-------	--

Specification of hexagonal element function

XY6	B_{ij} and Q_{ij} values are given for a hexagonal element function.
-----	--

Note: If triangular element specification is used to hexagonal geometries,
 NAUTO=2, and NMEX, IHG and WHEX are to be specified.

8.4 既成のサブルーチンに対する修正

(1) I N P U T

8.1～8.3の追加を行うための入力作成フローの変更

(2) M P Y M 1 → M P Y M 11

中性子源と固有値計算を高速化するために、また将来のベクトル計算化に備えて

M P Y M 1 → M T P Y S → L I N E S

と階層化されていたものを1つのサブルーチンM P Y M 11にまとめる。これにより約5%の計算時間の削減となる。

(3) I N N E R

内側反復計算を高速化するために、次の2点が改良された。

① 収束判定の改良

原子炉の側面（上下、左右）で中性子束が0に近い値を取る場合に、従来の相対誤差を一律に判定する方式では、無意味な誤差判定となる場合がある。

$$E_i^g = |(\phi_i^{g,(n-1)} - \phi_i^{g,(n)}) / \phi_i^{g,(n)}| \quad (8.1)$$

これを次のように変更することにした。

$$E_i^g = \begin{cases} \phi_i^g \geq \bar{\phi}_g \epsilon \text{ のとき} & \text{従来どおり} \\ \phi_i^g < \bar{\phi}_g \epsilon \text{ のとき} & |\phi_i^g / \bar{\phi}_g| \end{cases} \quad (8.2)$$

ここで、nは反復回数、gはエネルギー群、εは内側反復計算の許容誤差、 $\bar{\phi}_g$ はグループg内の平均値を表す。

内側反復計算の誤差判定は、計算時間に非常に効いてくるので、CITATIONやTWOTRANコードでも独自の改良がなされている。

② 係数データの主記憶常駐化

内側反復計算に用いられる係数行列A、C、(3.8)式参照、を従来z-メッシュ方向にディスクのデータを読んで置えていたのを常駐化した。これにより、入出力回数の半減と計算時間の25%短縮となる。

③ D O型並びによる入出力の廃止

作業用領域へのデータの掃出しをD O型並び仕様によって行われていたのを配列名で行うことにした。これにより40～50%計算時間が減少した。

(4) その他

その他のサブルーチンに対しても修正点が数々あるが修正箇所にC**が挿入されているので判明はつく。

9. 入力データの例

9.1 基本問題の入力データ

```

-----1-----2-----3-----4-----5-----6-----
3301 6GROUPS,3DIM,HEXAGONAL GEOMETRY.TEST
3302 1¥
3303     1       0       0       6       0
3304     1       1       0       1       0
3305    100      0       1       1       0
3306     1       1       1       0       0
3307     0       0       0       4       0
3308     0       6       0       5       1   T
3309 2*
3310     1.0 - 4   1.0 - 4   1.2      1.0      1.0
3311           1.0          11.55   T
3312 8¥
3313     5
3314 9*
3315     50.   T
3316 10¥
3317 F      1   T
3318 11¥
3319     1   T
3320 12*
3321     0.1      3.0      0.021     0.015   T
3322 13*
3323     1.0   T
3324 17¥
3325 F      1   T
3326 18¥
3327 F      1   T
3328 19¥
3329     1       2       3       4       5
3339   T
3429 ++
3529 //**
*** END OF DATA SET ***

```

Fig. 29 Basic problem

9.2 GCFR モデル (6 角形要素)

	1	2	3	4	5	6	7
0100	6GROUPS,3DIM,HEXAGONAL GEOMETRY.TEST						
0200	1*						
0300	6	5	0	12	0	17	
0400	4	31	0	1	0	15	
0500	100	0	1	1	0	1	
0600	0	1	1	0	0	0	
0700	0	0	0	4	0	0	
0800	1	4	0	15	1	T	
0900	2*						
1000	1.0 - 4	1.0 - 4	1.1	1.0	9.5	1.0	
1100	1.0	12.3	T				
1200	8*						
1300	3	4	3	1			
1400	9*						
1500	40.0	35.0	30.0	25.0	T		
1600	10*						
1700	2						
1800	2R	2					
1900	3R	5					
2000	4R	5					
2100	2R	5	7 2R	5			
2200	6R	5					
2300	7R	9					
2400		10	11 4R	12	13	14	
2500	9R	15					
2600	10R	16					
2700	11R	16					
2800	12R	16					
2900	13R	17					
3000		1					
3100	2R	2					
3200	2R	2					
3300		3	4				
3400	2R	5					
3500	2R	5					
3600		6	8				
3700	2R	9					
3800		10	14				
3900	2R	15					
4000	2R	16					
4100	2R	16					
4200	2R	16					
4300	2R	17	T				
4400	11*						
4500		12	1	13	13	2	15
4600		14	15	3	4	16	4
4700		16	4	5	6	10	
4800		12	1	13	13	2	15
4900		14	15	3	4	16	4
5000		16	4	5	6	10	
5100		12	7	13	13	7	15
5200		14	15	8	0	16	9
5300		16	9	5	6	10	
5400		12	11	13	13	11	15
5500		14	15	11	11	16	11
5600		16	11	11	11	10	
5700	13*						
5800		0.5692	0.3328	0.0841	0.0135	0.004	0.0
5900		T					
6000	17*						
6100	F	1	T				
6200	18*						
6300	F	1	T				
6400	19*						
6500		1	4	6	11		
6600			T				
*** END OF DATA SET ***							

Fig. 30 GCFR model (hexagonal elements)

9.3 GCFR モデル(3角形要素)

0100 6GROUPS,3DIM,HEXAGONAL GEOMETRY.TEST						
0200	1*					
0300	6	5	0	12	0	1
0400	4	31	0	1	0	1
0500	100	0	1	1	0	0
0600	0	1	1	0	0	0
0700	0	0	0	2	0	0
0800	0	4	0	15	1	T
0900	2*					
1000	1.0 - 4	1.0 - 4	1.2	1.0	29.5	1.
1100	1.0	12.3	T			
1200	8*					
1300	3	4	3	1		
1400	9*					
1500	40.0	35.0	30.0	25.0	T	
1600	10*					
1700	2R	1				
1800	8R	2				
1900	14R	2				
2000	4R	312R	2 4R	4		
2100	26R	5				
2200	32R	5				
2300	4R	612R	5 6R	712R	5 4R	8
2400	4R	936R	5 4R	9		
2500	4R	1042R	9 4R	14		
2600	4R	15 6R	10 6R	1124R	12 6R	13 6R
2700	4R	15				
2800	4R	1654R	15 4R	16		
2900	68P	16				
3000	74R	16				
3100	4R	1772R	16 4R	17		
3200	78R	17 T				
3300	11*					
3400	12	1	13	13	2	1
3500	14	15	3	4	16	1
3600	16	4	5	6	10	1
3700	12	1	13	13	2	1
3800	14	15	3	4	16	1
3900	16	4	5	6	10	1
4000	12	7	13	13	7	1

以 下 Fig. 30 に 同じ

Fig. 31 GCFR model (triangular elements)

10. まとめ

(1) 有限要素法は多少計算時間が多くかかるものの、差分法における粗メッシュ(FD1)と密メッシュ法(FD6)の間の K_{eff} の差、中性子束分布の差は全く見られず、両計算(FEM6, FEM7)はほぼ一致した値を取る。

特に差分法の粗メッシュ法(FD1)は誤差が大きく、中性子束分布では20%にも達し目安を得るために計算にも使用できない。

有限要素法の6角形要素法(FEM6)は3角形要素法に比して、制御棒要素の中心の中性子束の値が正確に出ない(4%程度の誤差)がその他の点では3角形要素(FEM7)とほぼ同じ値を取る。

(2) 反復計算に要する時間は、差分法に比して有限要素法は外側反復計算に時間がかかるので、内側反復を多く行う方が良い。GCFRモデルでは、6角形要素(節点数223)で15~20回、3角形要素(節点数369)では20~30回が最適であった。加速因子は1.0~1.2と小さい方が良かった。

(3) もし、6角格子形状専用に取扱うようなオプションを追加し、CITATION方式のように方形化した要素分割(Fig.6)を行うなら、計算時間は1/3程度となる。このためには、コードに熟知した者が当たるとして1年人の入手が必要である。

(4) 非均質サブアセンブリの取扱いについては、ここでは計算の指針を述べるに留めている。これをコードで実現するためには、0.5年人程度の人手が必要である。

(5) 最近のCRAY-1などのスーパーコンピュータを利用してベクトル処理する場合においては、差分法より有限要素法の方がベクトル計算への適応性は大きい。⁽¹⁴⁾

(6) コードが広く利用されるためには、単に計算時間が短いというのみならず、計算結果を图形化するなどサービスルーチンを揃える必要がある。6角格子形状については、今回、要素分割図、要素と領域との対応図、領域と材料物質の対応図など入力データの图形化がなされた。出力結果の图形化などさらに必要である。

(7) 従来のFEMコードに計算速度向上を目的とした改良を行った。外部反復計算における下位のサブルーチンのインライン展開、内部反復計算における係数行列の主記憶常駐化と収束判定の多様化、内部反復計算および外部反復計算時の作業用フィルムへの入出力並びをDOS型仕様から、配列要素名のみで指定する方式に改めるなどにより、計算時間は1/3に減少した。

(8) 6角格子形状を取扱うために、ここでは、FEM6とFEM7(Fig.2)の形式の要素分割とそれに対応した要素関数を用いたに過ぎない。6角形の中心に節点を置く方が中性子束の値が正確に得られるので、6角形要素分割のままで中心に節点を1つ置くスキーム7'も試して見る価値がある。計算時間はFEM7と同程度となるであろうが、異なった要素関数を用いることから計算精度に変化があるであろう。

(9) 2.3および7で述べた、FEMコードとCITATIONの間で起こる K_{eff} の値と中性子束の

値の差は、定性的なものかどうかを、もっと多くのデータで確かめて見る必要がある。また、真の値が F E M の計算値に近いのか CITATION の密メッシュによる計算値に近いのか興味がある。従来、CITATION の密メッシュによる計算を最善のものとして信じてきたが、F E M で別の傾向を持つ値が出る場合もあることを知り、精密計算の意味を問い合わせ直す必要があろう。

謝　　辞

今回の F E M コードの整備は、従来、原子炉システム研究室の中原氏のグループが中心で行われているものである。

我々は、有限要素法コードの理解を深め、並列計算処理の適用に役立てるために、中原グループで開発した F E M コードを基に高速炉用改良版を作成することになった。

F E M コード利用に便宜を計って頂き、また有限要素法の理解を得るために、我々に力を貸して頂きました中原氏に感謝します。また、高速炉の計算に有限要素法を適用するきっかけを与え、また計算結果の評価に助言を頂きました原子炉システム研究室石黒氏に感謝します。

G C F R モデルの計算のためにデータを提供頂き、また CITATION コードの利用に際し助力頂きました高速炉物理研究室の飯島氏と(株) I S L の堀田氏に感謝します。

コード開発の過程で F E M コードの理解を得るために、また計算精度などの問題で討議下さいました原子炉システム研究室の藤村氏に感謝します。

また 6 角形要素関数の適用に際し、ロンベルクの数値積分を担当下さいました東京工業大学(当時計算センタ)の田部井氏に感謝致します。

参考文献

- (1) Greenspan, H. et al. : Computing methods in Reactor Pyisics, Gordon and Breach Science Publishers (1968).
- (2) Estiot, J. C. et al. : Comparison of Finite-Differences and Finite-Elements in the case of a Large Fast Power Reactor, Annals of Nuclear Energy, Vol. 8, PP 609-620 (1981).
- (3) Ishe, T. et al. : A Computer Program for Solving Three-Dimensional Neutron Diffusion Equation by the Finite Element Method, JAERI 1256 (1978).
- (4) Fowler, T. B. et al. : Nuclear Reactor Analysis Code: CITATION, ORNL-TM-2496, Rev. 2 (1969).
- (5) 堀田雅一, 他: 粗メッシュ法に基く 3 次元拡散コードの高速炉核特性評価への適用性, JAERI-M 9638 (1981).
- (6) コナー, J J, ブレビア, C. A. (奥村敏恵監訳) : 有限要素法の応用, サイエンスライブ

値の差は、定性的なものかどうかを、もっと多くのデータで確かめて見る必要がある。また、真の値が F E M の計算値に近いのか CITATION の密メッシュによる計算値に近いのか興味がある。従来、CITATION の密メッシュによる計算を最善のものとして信じてきたが、F E M で別の傾向を持つ値が出る場合もあることを知り、精密計算の意味を問い合わせ直す必要があろう。

謝　　辞

今回の F E M コードの整備は、従来、原子炉システム研究室の中原氏のグループが中心で行われているものである。

我々は、有限要素法コードの理解を深め、並列計算処理の適用に役立てるために、中原グループで開発した F E M コードを基に高速炉用改良版を作成することになった。

F E M コード利用に便宜を計って頂き、また有限要素法の理解を得るために、我々に力を貸して頂きました中原氏に感謝します。また、高速炉の計算に有限要素法を適用するきっかけを与え、また計算結果の評価に助言を頂きました原子炉システム研究室石黒氏に感謝します。

G C F R モデルの計算のためにデータを提供頂き、また CITATION コードの利用に際し助力頂きました高速炉物理研究室の飯島氏と(株) I S L の堀田氏に感謝します。

コード開発の過程で F E M コードの理解を得るために、また計算精度などの問題で討議下さいました原子炉システム研究室の藤村氏に感謝します。

また 6 角形要素関数の適用に際し、ロンベルクの数値積分を担当下さいました東京工業大学(当時計算センタ)の田部井氏に感謝致します。

参考文献

- (1) Greenspan, H. et al. : Computing methods in Reactor Pyisics, Gordon and Breach Science Publishers (1968).
- (2) Estiot, J. C. et al. : Comparison of Finite-Differences and Finite-Elements in the case of a Large Fast Power Reactor, Annals of Nuclear Energy, Vol. 8, PP 609-620 (1981).
- (3) Ishe, T. et al. : A Computer Program for Solving Three-Dimensional Neutron Diffusion Equation by the Finite Element Method, JAERI 1256 (1978).
- (4) Fowler, T. B. et al. : Nuclear Reactor Analysis Code: CITATION, ORNL-TM-2496, Rev. 2 (1969).
- (5) 堀田雅一, 他: 粗メッシュ法に基く 3 次元拡散コードの高速炉核特性評価への適用性, JAERI-M 9638 (1981).
- (6) コナー, J.J., ブレビア, C. A. (奥村敏恵監訳) : 有限要素法の応用, サイエンスライブ

値の差は、定性的なものかどうかを、もっと多くのデータで確かめて見る必要がある。また、真の値が F E M の計算値に近いのか CITATION の密メッシュによる計算値に近いのか興味がある。従来、CITATION の密メッシュによる計算を最善のものとして信じてきたが、F E M で別の傾向を持つ値が出る場合もあることを知り、精密計算の意味を問い合わせ直す必要があろう。

謝 辞

今回の F E M コードの整備は、従来、原子炉システム研究室の中原氏のグループが中心で行われているものである。

我々は、有限要素法コードの理解を深め、並列計算処理の適用に役立てるために、中原グループで開発した F E M コードを基に高速炉用改良版を作成することになった。

F E M コード利用に便宜を計って頂き、また有限要素法の理解を得るために、我々に力を貸して頂きました中原氏に感謝します。また、高速炉の計算に有限要素法を適用するきっかけを与え、また計算結果の評価に助言を頂きました原子炉システム研究室石黒氏に感謝します。

G C F R モデルの計算のためにデータを提供頂き、また CITATION コードの利用に際し助力頂きました高速炉物理研究室の飯島氏と(株) I S L の堀田氏に感謝します。

コード開発の過程で F E M コードの理解を得るために、また計算精度などの問題で討議下さいました原子炉システム研究室の藤村氏に感謝します。

また 6 角形要素関数の適用に際し、ロンベルクの数値積分を担当下さいました東京工業大学(当時計算センタ)の田部井氏に感謝致します。

参考文献

- (1) Greenspan, H. et al. : Computing methods in Reactor Pyisics, Gordon and Breach Science Publishers (1968).
- (2) Estiot, J. C. et al. : Comparison of Finite-Differences and Finite-Elements in the case of a Large Fast Power Reactor, Annals of Nuclear Energy, Vol. 8, PP 609-620 (1981).
- (3) Ishe, T. et al. : A Computer Program for Solving Three-Dimensional Neutron Diffusion Equation by the Finite Element Method, JAERI 1256 (1978).
- (4) Fowler, T. B. et al. : Nuclear Reactor Analysis Code: CITATION, ORNL-TM-2496, Rev. 2 (1969).
- (5) 堀田雅一, 他: 粗メッシュ法に基く 3 次元拡散コードの高速炉核特性評価への適用性, JAERI-M 9638 (1981).
- (6) コナー, J J, ブレビア, C. A. (奥村敏恵監訳) : 有限要素法の応用, サイエンスライブ

ラリ, 情報電算機 37 (1978).

- (7) Halpern P.: Approximation d'un Probleme Elliptique d'Order 2 sur un Ouvert Composé d' Hexagone par Element finis Rationnels de Type Wachspress. Rapport interne SERMA/CEA (1979).
- (8) Ackroyd, R. T.: The why and How to Finite Elements, Annals of Nuclear Energy, Vol. 9, PP 539-566 (1981).
- (9) 中川正幸, 他: 「もんじゅ」炉心における燃料ピンおよびサブアセンブリの非均質効果, 内部資料 (1981).
- (10) Prenter, P. M.: Splines and Variational Methods, John Wiley & Sons (1975).
- (11) Hearn, C.: REDUCE 2, UCP-19, University of Utah (1973).
- (12) 吉沢正: 数値解析 I, 岩波講座 基礎工学 4, PP 57-60 (1973).
- (13) 石森富太郎編: 原子炉物理, 原子炉工学講座 3, 培風館 (1971).
- (14) 石黒美佐子, 他: ベクトル計算処理の大型原子力コードへの適応性, JAERI-M 82-018 (1982).