

工学系モデリング言語としての
次世代解析システムの開発 (IV)

— 境界要素法に基づく中性子拡散ソルバーの開発 —
(研究報告)

2004年10月

核燃料サイクル開発機構
大洗工学センター

本資料の全部または一部を複写・複製・転載する場合は、下記にお問い合わせください。

〒319-1184 茨城県那珂郡東海村村松4番地49

核燃料サイクル開発機構

技術展開部 技術協力課

電話：029-282-1122（代表）

ファックス：029-282-7980

電子メール：jserv@jnc.go.jp

Inquiries about copyright and reproduction should be addressed to :

Technical Cooperation Section,

Technology Management Division,

Japan Nuclear Cycle Development Institute

4-49 Muramatsu, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki, 319-1184

Japan

© 核燃料サイクル開発機構 (Japan Nuclear Cycle Development Institute)

2004

工学系モデリング言語としての 次世代解析システムの開発 (IV)

— 境界要素法に基づく中性子拡散ソルバーの開発 —

(研究報告)

千葉 豪¹

要旨

高速炉サイクル内でのマイナーアクチノイド (MA) の燃焼が重要視されており、MA の中性子反応断面積の精度向上が望まれている。「常陽」で照射された MA サンプルの照射後試験 (PIE) 解析は、MA 断面積の精度向上を図るうえで有力なアプローチといえる。PIE 解析には燃料集合体内の詳細な中性子束分布を計算するツールが必要となるが、従来の計算コードを用いた場合には手続きが複雑となる。一方、境界要素法は境界上の中性子束、カレントが決まれば、集合体内の任意の位置の中性子束を計算することができる。そこで、多領域中性子拡散方程式を解く手法として提案されている階層領域分割型境界要素法 (HDD-BEM) に基づく計算コード ABEMIE を開発した。近年、解析コードには計算精度や計算速度に加えて、柔軟性、再利用性、拡張性といった性能が強く求められている。そのような観点から、ABEMIE コードは従来の FORTRAN 言語ではなく、オブジェクト指向言語 C++ を用いて記述した。

ABEMIE コードは二次元平面上で、任意の線分で構成される体系の中性子拡散方程式を解くことができる。

また、HDD-BEM の計算効率を向上させるためにいくつかの手法を提案し、ABEMIE コードに実装した。それらをベンチマーク問題へ適用したところ、従来の HDD-BEM に対して計算精度を維持しつつ、計算時間を約半減させることができた。

¹大洗工学センター システム技術開発部 中性子工学グループ

Development of the Next Generation Code System As an Engineering Modelling Language(IV) — Development of Neutron Diffusion Solver Based on Boundary Element Method —

Go Chiba¹

Abstract

Improvement of neutron-reaction cross sections of minor actinides(MA) is needed because burnup of MA in fast reactor cycle becomes more important. Analysis of the post irradiation examination(PIE) of the MA sample irradiated in the experimental fast reactor "JOYO" is the most promising approach to improve the MA cross sections. Detail flux distribution in the core is necessary to carry out the PIE analysis, however, usage of conventional calculation methods needs very complicated manners. On the other hand, the boundary element method can calculate neutron flux at an arbitrary position in the fuel subassembly when neutron flux and current on boundary are determined. The ABEMIE code has been developed based on a hierarchical domain decomposition boundary element method(HDD-BEM) to solve multiregion neutron diffusion equations. Recently, not only calculation efficiency but also flexibility, reusability and extendibility are required for calculation codes. Therefore, ABEMIE has been developed with not the conventional computer language, FORTRAN, but the object-oriented language, C++.

ABEMIE can solve neutron diffusion equations of a two-dimensional system composed of arbitrary lines.

In addition, several methods are proposed to improve the calculation efficiency of HDD-BEM and are implemented to ABEMIE. Calculation time can be reduced to about 50% without degradation of calculation accuracy when a benchmark problem is solved with the proposed methods.

¹Reactor Physics Research Gr., System Engineering Technology Div., OEC, JNC

目次

第1章	緒言	1
第2章	中性子拡散方程式への境界要素法の適用	2
2.1	境界要素法とは	2
2.2	境界要素法の中性子拡散方程式への適用の歩み	2
2.3	階層領域分割型境界要素法の開発	3
2.4	その後の階層領域分割型境界要素法の進歩	4
第3章	階層領域分割型境界要素法の概要	6
3.1	中性子拡散方程式の解法	6
3.2	階層領域分割型境界要素法の概要	8
第4章	境界積分方程式の導出	11
4.1	重み付き残差法による境界積分方程式の導出	11
4.2	その他の方法による境界積分方程式の導出	14
第5章	二次元問題における境界積分方程式の離散化	17
5.1	はじめに	17
5.2	一定要素による境界積分方程式の離散化	17
5.3	二次要素による境界積分方程式の離散化	19
5.4	境界積分の計算	20
5.5	境界上と内部点の計算	21
5.6	かど点での非適合要素の導入	22
第6章	中性子増倍率と内部境界条件の修正	24
6.1	はじめに	24
6.2	ニュートン法による中性子増倍率と内部境界条件の決定	25
6.3	反復解法の導入	27
第7章	オブジェクト指向言語 C++ を用いたコードの開発	30
7.1	ABEMIE コードの開発	30
7.2	テスト計算	34
7.3	計算効率の向上	35
7.3.1	SOR 法	35
7.3.2	一定要素を用いた初期値推定法	36

7.3.3	展開次数ハイブリッド法	37
7.3.4	微係数修正法	37
7.3.5	相互比較とまとめ	38
第8章	結言	41
参考文献	43
付録 A	ヤコビアン行列の計算	付-A(1)
A.1	$\left(\frac{\partial F^{I_p}}{\partial \varphi^{I_q}}\right)$ の計算手法	付-A(1)
A.2	$\left(\frac{\partial F^{I_p}}{\partial k}\right)$ の計算手法	付-A(3)
A.3	$\left(\frac{\partial F^c}{\partial \varphi^{I_q}}\right)$ の計算手法	付-A(4)

表目次

表 7.2.1	IAEA ベンチマークの群定数	34
表 7.2.2	2D-IAEA ベンチマークの計算結果	35
表 7.3.1	SOR 法を適用した解析結果	36
表 7.3.2	初期値推定法を適用した解析結果	36
表 7.3.3	展開次数ハイブリッド法を適用した解析結果	37
表 7.3.4	微係数修正法を適用した解析結果	38
表 7.3.5	加速法適用のまとめ	38

図目次

図 3.2.1	階層領域分割型境界要素法の概要 (n : 反復回数)	9
図 3.2.2	階層領域分割型境界要素法の流れ図 (n : 反復回数)	10
図 4.1.1	領域と境界の定義	11
図 4.1.2	積分計算のための半円を付加した境界面	13
図 5.2.1	一定要素による離散化	17
図 5.3.1	直線境界における二次要素	19
図 5.6.1	非適合要素における節点の移動 (二次要素の場合)	22
図 6.1.1	内部境界 I_p と領域 r_p^- 、 r_p^+ との関係	24
図 7.1.1	ABEMIE コードのクラス図	39
図 7.2.1	IAEA ベンチマーク問題の明細	40

第1章 緒言

将来の高速炉サイクル像が多様化するなか、高速炉サイクル内でマイナーアクチニド (MA) を効率的に燃焼させることが考えられている。ウランやプルトニウムといった主要な重核種とは異なり、MA の中性子反応断面積の精度はそれほど良いものではないため、MA の燃焼特性を精度良く予測するためには MA の中性子反応断面積の精度向上が重要と考えられている。

MA の中性子反応断面積の微分データ測定と同時に、高速実験炉「常陽」で照射された MA サンプルの照射後試験 (PIE) データの活用が、MA の中性子反応断面積の精度を向上させるうえで非常に重要である [1]。

PIE データの解析ではサンプルの照射位置での中性子束履歴が必要となり、これを有限差分法やノード法といった手法で計算することになる。有限差分法で計算する場合には、燃料集合体内での照射位置での中性子束を計算するために燃料集合体を細かいメッシュで分割する必要があるが、そのような詳細メッシュ分割は計算負荷が非常に大きい。一方、ノード法で計算する場合には、ノードパラメータを用いて燃料集合体内の中性子束分布を内挿する必要があり、その手続きは複雑である [2]。

境界要素法はそれらとは異なり、境界上の変数が既知であれば任意の位置での中性子束を計算することが可能であり、照射位置の中性子束を求めるためには強力なツールとなり得る。中性子拡散方程式を解くための境界要素法として、これまでいくつかの方法が提案されているが、そのなかでも、Mohammad Dhandhang と Tsuji^[3] によって 1996 年に開発された階層領域分割型境界要素法 (HDD-BEM: Hierarchical Domain Decomposition Boundary Element Method) は、Chiba と Tsuji^[4] によってすでに三次元問題への適用が行われていることから、最も先行していると考えられる。そこで、HDD-BEM を用いた中性子拡散方程式を解くコードを開発することとした。

一方、近年、解析システム (コード) には、計算精度や計算速度といったものに加えて、柔軟性、再利用性、拡張性、保守性といった性能が強く求められるようになってきている。その流れを受けて、核燃料サイクル開発機構では、主に原子力に関連する様々な専門分野で開発されてきた解析コードを、ニーズにあわせてより柔軟にかつ迅速に組み合わせて利用できるような新しいタイプの解析システム (次世代解析システム) の開発を進めている [5]。

本研究では、従来から用いられてきた FORTRAN 言語ではなくオブジェクト指向言語 C++ を用いて、次世代解析システムの一部として HDD-BEM に基づく解析コードを開発する。

第2章 中性子拡散方程式への境界要素法の適用

2.1 境界要素法とは

理工学問題に対する微分方程式の数値解析法には多数の方法があるが、その中でも有限差分法、有限要素法及び境界要素法が主なものとして挙げられる。有限差分法は、微分方程式を差分近似し、差分格子点上の関数値に関する連立一次代数方程式に帰着させて解く方法である。有限要素法は、対象とする領域を有限要素と呼ばれる多数の小領域に分割し、決定すべき諸量を既知の関数で展開して展開係数に関する連立一次代数方程式を解くという方法である。これらはともに極めて強力な数値解析法であるが、対象領域全体を差分格子や有限要素に分割する必要があるため、これによって取り扱う方程式の元数が大きなものとなる。特に三次元問題では、このことが計算コストと計算機記憶容量の点において大きな問題になる。これに対して、境界要素法は対象領域の物質組成が均質であれば、支配微分方程式をこれと等価な境界上の積分として定義される境界積分方程式に変換でき、境界表面を境界要素で離散化することによって数値解を求めることができる。境界要素法では例えばもとの方程式が三次元であれば、境界積分方程式は対象領域表面での積分（すなわち二次元）で記述できることになる。このため、先の領域型解法とは対照的に、取り扱う方程式の未知数が少なく済み、必要な計算機記憶容量を節約できるとともに入力データの数や計算時間を大幅に減少できる可能性がある。また境界要素法では、微分方程式から境界積分方程式を導出する際にいかなる近似も使用しないため、導かれる境界積分方程式は原式と厳密に等価な式となり、たとえ複雑な境界形状を持つ問題であっても領域型解法などの手法に比べて比較的厳密に取り扱うことができる。

これらの優れた特徴をもつ境界要素法であるが、いくつかの欠点も有している。

有限差分法や有限要素法においては、取り扱う行列は帯行列のような構造をもつ大型疎行列となるのに対して、境界要素法では単一領域の問題に対して、取り扱う行列は疎行列とはならず非対称密行列となる。大型疎行列を係数行列とする連立一次代数方程式は、その分野の研究が発達しているため効率良く解くことができるが、密行列を係数行列とする連立一次代数方程式の解法においては有効な手法が存在せず、必然的に古典的な計算手法で解かざるを得ず、計算量が大きくなってしまふ。従って、密行列を扱わなければならない境界要素法は、有限差分法や有限要素法に比べて未知数が少なく計算時間を短縮できるという利点を損ねる可能性がある。

2.2 境界要素法の中性子拡散方程式への適用の歩み

境界要素法に近い解法の中性子拡散問題の分野への適用については、最も古いものとしては、1964年に行われた第3回ジュネーブ原子力平和利用国際会議の報文集に記載された Koskinen^[6]の論文を挙げる事が出来る。この論文では、中性子拡散方程式に対応する境界積分方程式が導

かかれているが、その境界積分方程式の具体的な数値解法については述べられていなかった。1976年には、SuzukiとKatsuragi^[7]が、高速増殖炉の六角形燃料集合体内部の出力分布を求めるために、中性子エネルギー1群近似の波動方程式に対する境界積分方程式を離散化して解く手法を発表した。これらの方法はいずれも、一般の中性子拡散問題に適用された境界型数値解法ではなく、単一領域である、非斉次中性子源項がない、固有値問題ではない、などの制限を持つ特別な問題に適用されたものである。

1985年にItagaki^[8]は、境界要素法を一般の中性子拡散問題に初めて適用した。Itagakiはこの問題に対して、零行列式探索法と中性子源反復法の2つの方法を報告している。

零行列式探索法では、変換された境界積分方程式は領域積分が残っておらず完全に境界積分のみで記述される。この変換によって境界積分方程式は $\mathbf{A}(k_{eff})\mathbf{x}=\mathbf{0}$ （これ以後、中性子実効増倍率 k_{eff} は k と表記するものとする）と与えられる連立一次代数方程式で表せる。 \mathbf{x} は決定すべき中性子束分布を表す固有ベクトルであり、 $\mathbf{x}=\mathbf{0}$ という自明な解を持つことはないので $|\mathbf{A}(k)|\neq 0$ が要求される。零行列式探索法ではこのような条件式を満たすような固有値 k を探索し、これに対応する固有ベクトル \mathbf{x} を決定する。しかしながら、この方法には物理的に意味のある固有値に必ずしも収束するとは限らないという欠点があった。このことは、零行列式探索法の中性子拡散問題への適用を困難にしている。

もう一つの方法である中性子源反復法は、中性子拡散方程式を境界積分方程式に変換し、固有値計算の繰り返し解法である「べき乗法」の一種の中性子源反復法^[8]で解くというものである。しかし、この方法では中性子拡散方程式を境界積分方程式に変換しても、核分裂中性子源項が境界積分に変換されずに領域積分のまま残ってしまい、境界要素法の本来の利点が十分に生かされないという欠点が生じた。この問題はその後、ItagakiとBrebbia^{[9][10]}により、その中性子源項を二重相反法または多重相反法によって等価な境界積分に変換する手法が開発され、解決することができた。このことにより、他の工学分野と同様に境界要素法の利点を原子炉物理分野においても利用できるようになった。しかし、これらの開発された手法には、領域積分項の境界積分への変換に煩雑な手続きが必要となるという欠点があった。

2.3 階層領域分割型境界要素法の開発

多領域問題への境界要素法の適用は、すでに定式化はなされているものの、境界面の接合に煩雑な処理が必要となること、導かれる係数行列が密小行列からなるブロック対角行列成分と領域間の結合を表す帯行列の非対角行列成分から構成され、その有効な解法も未だ提案されていないことなどの問題があり、扱う領域数に限度があった。そのため商業用規模の原子炉炉心のような非常に多くの領域からなる中性子拡散問題に対しては、境界要素法の適用は不可能であった。

階層領域分割型境界要素法(HDD-BEM:Hierarchical Domain Decomposition Boundary Element Method)は、零行列式探索法の枠組みから導かれた斉次方程式において、領域間の接合面における中性子束(または中性子流)と中性子増倍率を仮定するならば、解くべき方程式は非斉

次方程式になる、という点に着想を得ている。このことにより、Koskinen の提案した手法を多領域中性子拡散問題に適用できる。すなわち、外部境界条件に加えて領域間の接合面上における境界条件（内部境界条件）が仮定により与えられるため、多領域中性子拡散問題は各領域の中性子拡散方程式に対して定義される特性方程式のそれぞれの特性根に対して与えられるヘルムホルツ方程式を解く問題となる。このため、零行列式探索法の場合のように炉心全体に関する方程式を一括して解く必要がなく、各領域、各特性根に対するヘルムホルツ方程式を、仮定された境界条件の下で、各領域、各特性根に関して独立に解くことができる。このことによって、問題がそれぞれ小規模化されるため、係数行列の次元が大幅に低減し、計算に必要な計算機記憶容量を従来の境界要素法に比べて大きく減少させることができる。

また、この方法では、仮定された内部境界条件と中性子増倍率をどのような方法で修正するかという点が問題となるが、領域間の共通境界面上（接合面上）で中性子流（または中性子束）の連続条件が満たされるように、ニュートン法によって修正するという手法が用いられた。このニュートン法の適用では、中性子増倍率と内部境界条件を未知数とし、それらの未知数を境界上の連続条件を表す方程式を満たす根として決定する問題となる。このためには連続条件を表す方程式に対して、未知数に関するヤコビアン行列を計算する必要がある。HDD-BEM では、ヤコビアン行列の計算に必要な微係数のすべてを解析的に求めることが可能なため、精度の低下や計算時間の増大の原因となる数値微分法を用いる必要がない。

HDD-BEM では多群多領域中性子拡散方程式を2つの階層に分けて解く。下位層では、分割された均質な小領域において定義される中性子拡散方程式を境界要素法によって解き、上位層では、下位層で求められた各小領域についての計算結果を収集し、仮定された内部境界条件と中性子増倍率をニュートン法によって修正する。この修正値が収束するまで、上下の階層の連携した計算を繰り返し行う。解析対象の領域を均質な小領域に分割してそれぞれの小領域で独立して計算すること、また計算を階層的に行うことから、“階層領域分割型境界要素法”と名付けられた。

2.4 その後の階層領域分割型境界要素法の進歩

Mohammad Dhandhang P. と Tsuji によって開発された HDD-BEM のその後の進歩を以下に述べる。

1998年、Tsuji と Shirahama^[11] は HDD-BEM が並列計算に適したアルゴリズム構造をもつことに着目し、並列演算手法の適用を行った。並列計算は近年の科学計算の進歩が可能にした、複数の PE(Processing Element) を同時に使用して計算を行うという計算方法である。従来の HDD-BEM では、下位層計算は各領域、各特性根に関して独立に演算するため、計算すべき体系が小さくなり計算負荷は比較的小さくなるものの、上位層での計算は、体系全体に関わるヤコビアン行列についての連立一次代数方程式をガウス消去法などの直接解法で解いていたため、計算体系が大きくなると、全体の計算負荷において上位層の計算負荷が占める割合がかなり大きくなっていった。そこで彼らは上位層における連立一次代数方程式の解法に、反復解法であるブロックヤコビ法と

ニュートン法を組み合わせた方法を導入した。この並列化手法の導入は、並列計算ばかりでなく逐次計算法においても大きな恩恵をもたらすこととなった。ブロック反復法の導入により体系全体に関わっていた計算は、分割されたより小さな計算単位の集合となり、逐次計算においても計算時間が従来の直接解法を用いた場合に比べて飛躍的に短縮されたのである。

2000年、ChibaとTsuji^[12]は境界要素の離散化精度を向上させ、計算負荷の低減を試みた。従来のHDD-BEMでは境界要素として、変数が境界要素上で一定値であると仮定する一定要素を用いていた。そこで、境界要素上の変数を二次多項式で近似する二次要素を導入し、計算効率の向上を図った。その結果、計算精度を維持しつつ計算時間を大幅に短縮することができ、三次元問題への適用の見通しを得た。

2001年にChibaとTsuji^[4]がIAEA三次元ベンチマーク問題へ適用した結果、現実的な計算時間で良好な解を得ることができた。現在、いくつかの研究チームが境界要素法の多領域中性子拡散問題への適用を試みている^{[13] [14]}が、三次元の実炉規模の問題へ適用できているのは、いまだHDD-BEMのみである。

第3章 階層領域分割型境界要素法の概要

3.1 中性子拡散方程式の解法

以下の議論では、行列記号の表現方法として、記号 \mathbf{A} が要素 $a_{ij}(i=1, \dots, n; j=1, \dots, m)$ からなる行列を意味する場合は $\mathbf{A} := (a_{ij})_{n,m}$ と表すことにする。また $n=1$ (または $m=1$) のとき行列は横 (または縦) ベクトルを表すものとする。

R 個の均質領域からなる原子炉に対して、任意の r 番目の均質領域の多群中性子拡散方程式は次式のような行列形式で表現できる。

$$[\nabla^2 \mathbf{I} + \mathbf{A}^r(k)] \phi^r = 0 \quad (r=1, 2, \dots, R) \quad (3.1)$$

ただし、 \mathbf{I} は単位行列であり、肩添字の r は領域番号を意味する。ベクトル $\phi^r := (\phi_g^r)_{G,1}$ は群中性子束で、係数行列 $\mathbf{A}^r(k)$ は、

$$\mathbf{A}^r(k) = \begin{pmatrix} \frac{\chi_1^r}{D_1^r} \\ \frac{\chi_2^r}{D_2^r} \\ \vdots \\ \frac{\chi_g^r}{D_g^r} \\ \vdots \\ \frac{\chi_G^r}{D_G^r} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \frac{\nu_1^r}{k} \Sigma_{f,1}^r \\ \frac{\nu_2^r}{k} \Sigma_{f,2}^r \\ \vdots \\ \frac{\nu_g^r}{k} \Sigma_{f,g'}^r \\ \vdots \\ \frac{\nu_G^r}{k} \Sigma_{f,G}^r \end{pmatrix}^T + \begin{pmatrix} \frac{-\Sigma_{R,1}^r}{D_1^r} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\Sigma_{s,1 \rightarrow 2}^r}{D_2^r} & \frac{-\Sigma_{R,2}^r}{D_2^r} & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\Sigma_{s,1 \rightarrow g}^r}{D_g^r} & \frac{\Sigma_{s,2 \rightarrow g}^r}{D_g^r} & \dots & \frac{-\Sigma_{R,g}^r}{D_g^r} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\Sigma_{s,1 \rightarrow G}^r}{D_G^r} & \frac{\Sigma_{s,2 \rightarrow G}^r}{D_G^r} & \dots & \frac{\Sigma_{s,g \rightarrow G}^r}{D_G^r} & \dots & \frac{-\Sigma_{R,G}^r}{D_G^r} \end{pmatrix} \quad (r=1, 2, \dots, R) \quad (3.2)$$

のように定義される。

ここで、行列の肩添え字 T は転置行列であることを示し、添字 g (または g') は中性子エネルギー群を表す。群定数 D_g^r 、 $\Sigma_{a,g}^r$ 、 $\Sigma_{s,g \rightarrow g'}^r$ 、 $\Sigma_{f,g}^r$ 、 ν_g^r そして χ_g^r はそれぞれ拡散係数、吸収断面積、 g から g' への群移動断面積、核分裂断面積、核分裂あたりに放出される中性子の平均数、そしてエネルギー群 g の核分裂収率である。 $\Sigma_{R,g}^r$ は除去断面積で $\Sigma_{R,g}^r = \Sigma_{a,g}^r + \sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq g}}^G \Sigma_{s,g \rightarrow g'}^r$ で定義される。 $\phi_g^r(\mathbf{r})$ は領域 r における点 \mathbf{r} の g 群の中性子束、 k は原子炉全体の中性子増倍率である。後の議論のために、 \mathbf{A}^r の k に対する依存性を明記するため $\mathbf{A}^r(k)$ と表記しておく。

(3.1) 式の解は、炉心外側の境界条件と、領域間の境界上（内部境界上）の中性子束と中性子流に関する連続条件を満たさなければならない。

ところで、Koskinen によると (3.1) 式は次のように変形できる。

$$(\nabla^2 + B_1^{r2}) \dots (\nabla^2 + B_j^{r2}) \dots (\nabla^2 + B_G^{r2}) \phi_g^r(\mathbf{r}) = 0$$

$$(g=1, 2, \dots, G : r=1, 2, \dots, R) \quad (3.3)$$

ここで、 $B_1^{r2}, B_2^{r2}, \dots, B_G^{r2}$ は、

$$\det[\nabla^2 \mathbf{I} + \mathbf{A}^r(k)] = 0 \quad (3.4)$$

を満足する次式の G 次代数方程式の根である。

$$(B^2)^G - p_1(B^2)^{G-1} - p_2(B^2)^{G-2} \dots - p_{G-1}(B^2) - p_G = 0 \quad (3.5)$$

スカラー係数 p は Faddeev の方法^[15] によって次のように計算できる。

$$\begin{array}{lll} \mathbf{A}_1 = \mathbf{A} & p_1 = \text{tr} \mathbf{A}_1 & \mathbf{B}_1 = \mathbf{A}_1 - p_1 \mathbf{I} \\ \mathbf{A}_2 = \mathbf{A} \mathbf{B}_1 & p_2 = \frac{1}{2} \text{tr} \mathbf{A}_2 & \mathbf{B}_2 = \mathbf{A}_2 - p_2 \mathbf{I} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \mathbf{A}_{G-1} = \mathbf{A} \mathbf{B}_{G-2} & p_{G-1} = \frac{1}{G-1} \text{tr} \mathbf{A}_{G-1} & \mathbf{B}_{G-1} = \mathbf{A}_{G-1} - p_{G-1} \mathbf{I} \\ \mathbf{A}_G = \mathbf{A} \mathbf{B}_{G-1} & p_G = \frac{1}{G} \text{tr} \mathbf{A}_G & \mathbf{B}_G = \mathbf{A}_G - p_G \mathbf{I} = 0 \end{array} \quad (3.6)$$

ここで $\text{tr} \mathbf{A} = \sum_{i=1}^G a_{ii}$ であり、 a_{ii} は \mathbf{A} 行列の対角要素である。

B_j^{r2} は正または負の値をもつ。単一領域では $B_1^{r2}, B_2^{r2}, \dots, B_j^{r2}, \dots, B_G^{r2}$ のうち実数でその絶対値が最小のものが空間基本モード形成に寄与し、バックリングに相当する。

B_j^{r2} が重根でないとき、中性子束 $\phi_g^r(\mathbf{r})$ と中性子流 $J_g^r(\mathbf{r})$ は次のような線形結合で表すことができる。

$$\phi_g^r(\mathbf{r}) = \sum_{j=1}^G C_{gj}^r \varphi_j^r(\mathbf{r})$$

$$J_g^r(\mathbf{r}) = -D_g^r \sum_{j=1}^G C_{gj}^r \nabla \varphi_j^r(\mathbf{r})$$

$$(g=1, 2, \dots, G : r=1, 2, \dots, R) \quad (3.7)$$

ただし、関数 $\varphi_j^r(\mathbf{r})$ は

$$(\nabla^2 + B_j^{r2}) \varphi_j^r(\mathbf{r}) = 0 \quad (j=1, 2, \dots, G : r=1, 2, \dots, R) \quad (3.8)$$

を満たす。以後、特性根 B_j^{r2} に関する (3.8) 式を“モード j に関するヘルムホルツ方程式”とよぶこととする。結合係数 C_{gj}^r は次式から求められる。

$$\mathbf{C}^r \mathbf{B}^r = \mathbf{A}^r \mathbf{C}^r \quad (r=1, 2, \dots, R) \quad (3.9)$$

ここで、 $\mathbf{B}^r = \text{diag}\{B_1^{r2}, B_2^{r2}, \dots, B_G^{r2}\}$, $\mathbf{C}^r = (C_{gj}^r)_{G,G}$ である。

多群多領域中性子拡散問題は、与えられた境界条件の下で各領域と各特性根 B_j^{r2} に関する式 (3.8) を解く問題に帰着する。

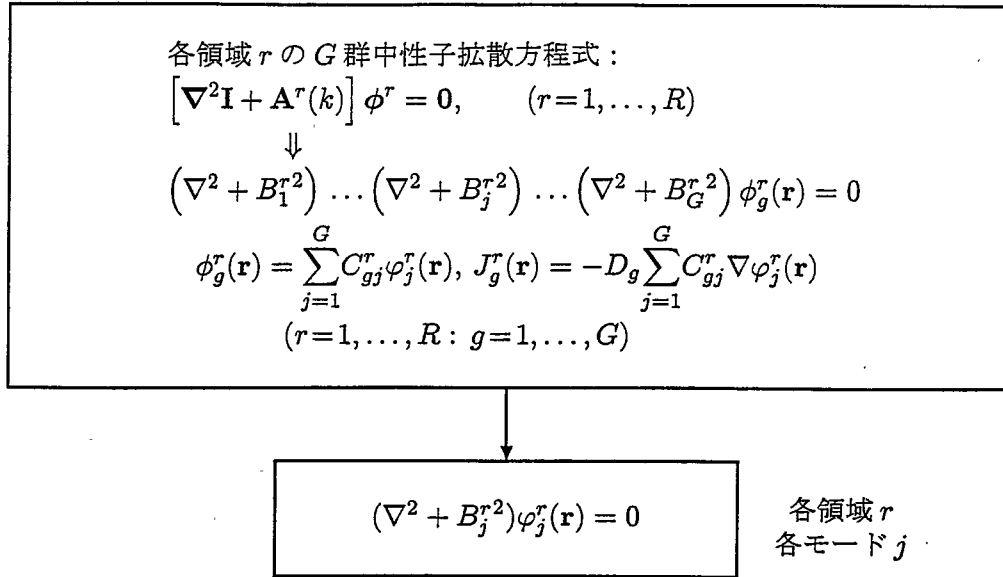
3.2 階層領域分割型境界要素法の概要

以上の議論から、領域分割法と Koskinen の提案する手法の導入によって、多領域中性子拡散問題はそれぞれの領域とそれぞれの特性根に対して定義されるヘルムホルツ方程式を解く問題となることが分かった。このような問題に対しては、中性子増倍率と領域間の共通境界面の境界条件が既知であれば（すなわち一時的に仮定されるならば）、それぞれのヘルムホルツ方程式を独立に解ける。そして、それを解くための手法として境界要素法を採用することにより、効率的に解くことができる。

階層領域分割型境界要素法はそのような考えに基づいて定式化されている。まず最初に中性子増倍率と内部境界面の境界条件を仮定し、各領域の各特性根に関するヘルムホルツ方程式を境界要素法によって解く。この部分が下位層にあたる。上位層では、下位層の結果を持ち寄って、領域間の内部境界上での中性子流（または中性子束）を(3.7)式に従って合成し、境界上での中性子流（または中性子束）の連続条件が満たされるかを調べる。満足されていない場合には、仮定した中性子増倍率と内部境界条件をニュートン法によって修正する。このような上位層と下位層の連携した計算をニュートン法の収束条件が満足されるまで繰り返す。以上の計算手順を図 3.2.1、3.2.2 に示す。以下に階層領域分割型境界要素法の特徴をまとめる。(1) 中性子拡散問題を、ヘルムホルツ方程式を解くという小規模な問題の集まりとして取り扱うことができるため、問題を一括して解く必要がなく計算に必要な記憶容量を大幅に減少させることができる。(2) 下位層、上位層ともに並列演算に適したアルゴリズム構造をもち、他手法に比べて高い並列化効率を実現できる。(3) 中性子拡散方程式の最大固有値である中性子増倍率以外の固有値（高次モードの固有値）も直接求めることができるので、高次モード解析に用いることができる。(4) 希望の中性子増倍率を持つような原子炉を、中性子源反復法のように中性子増倍率を調節するための繰り返し計算ループを必要とすることなく直接設計できる。

以降の章では、階層領域分割型境界要素法の骨格となっている、境界要素法による、ヘルムホルツ方程式と数学的等価な意味を持つ境界積分方程式の導出法、境界要素によって境界積分方程式を離散化する方法、ニュートン法によって仮定された領域の共通境界面上の境界条件を修正する方法の詳細を説明する。

多領域多群中性子拡散方程式



階層領域分割法

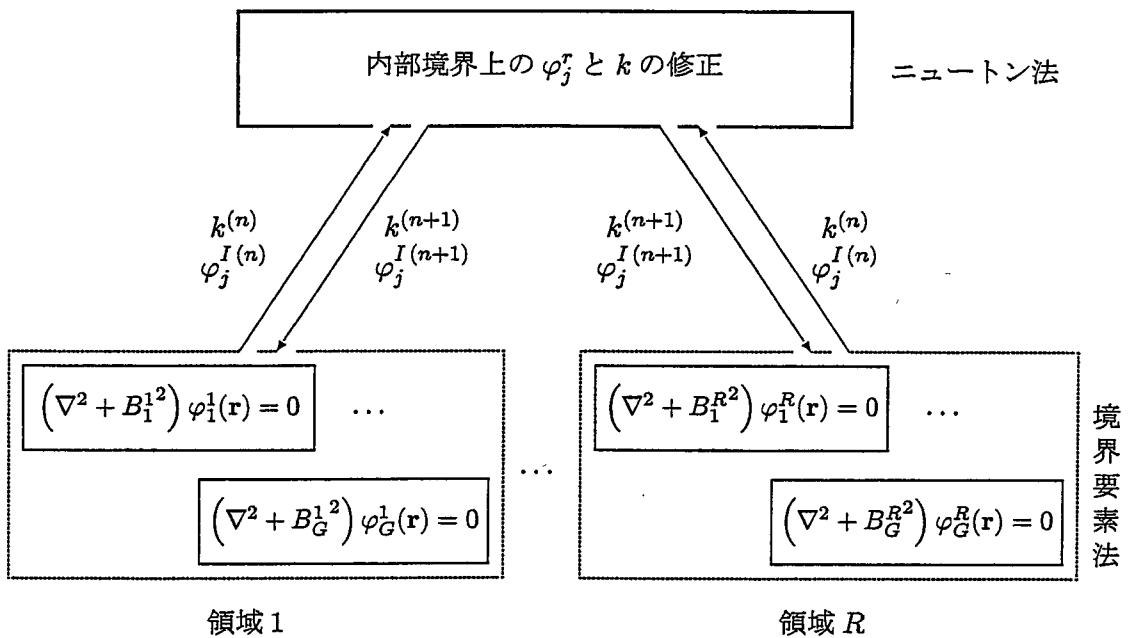


図 3.2.1 階層領域分割型境界要素法の概要 (n : 反復回数)

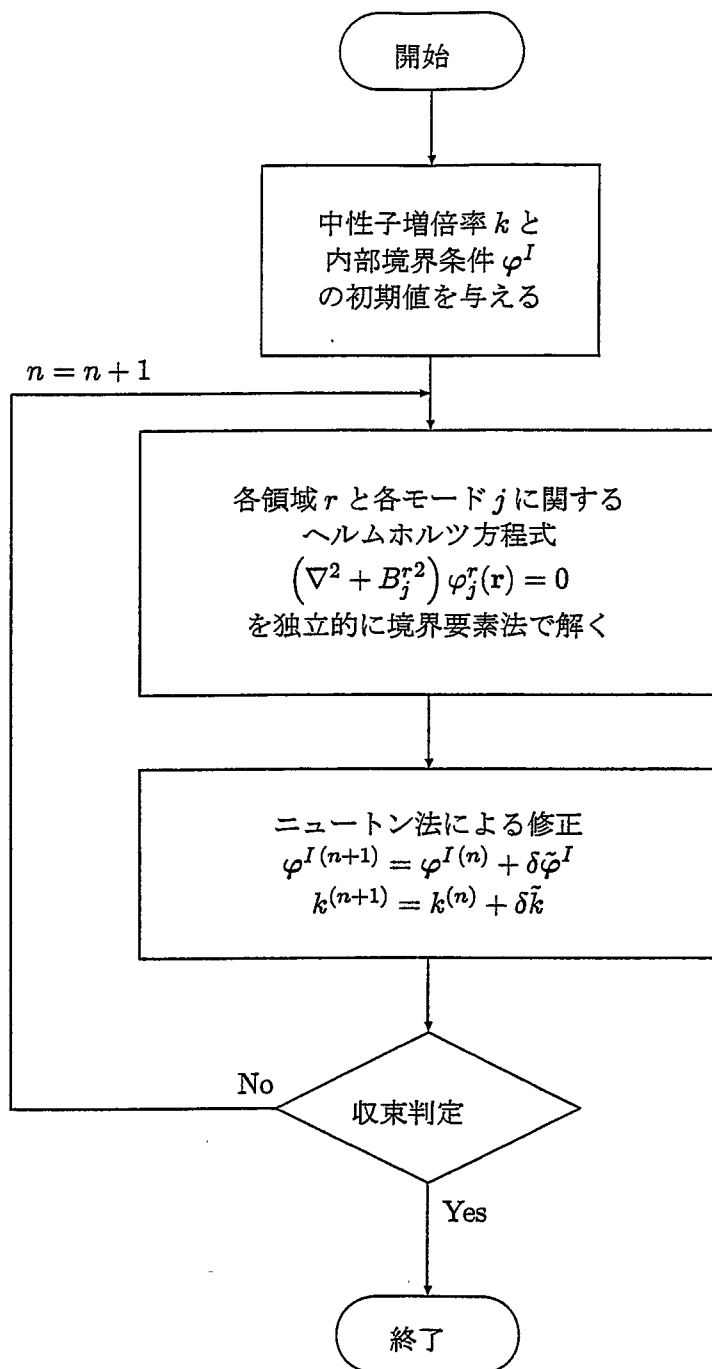


図 3.2.2 階層領域分割型境界要素法の流れ図 (n : 反復回数)

第4章 境界積分方程式の導出

4.1 重み付き残差法による境界積分方程式の導出

境界要素法では、領域の中性子拡散方程式に対応する境界積分方程式を導出する際には、支配方程式の重み付き残差表現から導くのが通例である。これに従い、ヘルムホルツ方程式の基本解を重み関数として用いた重み付き残差法による中性子拡散方程式の境界積分方程式の導出法について簡単に述べる。詳細な導出法については境界要素法の文献^[16]に詳しく述べられているのでそちらを参考にしてもらいたい。

多領域系中の一つの領域に着目することとし、均質な閉じた領域 Ω^r とその境界 Γ^r を考える。境界 Γ^r は図 4.1.1 のように異なる型の境界条件を持つ Γ_1^r と Γ_2^r の二つの境界から構成されているとする。それぞれの境界条件は、

$$\begin{aligned} \varphi_j^r(\mathbf{r}) &= \bar{\varphi} \quad (\mathbf{r} \in \Gamma_1^r) \\ \varphi_j^{r'}(\mathbf{r}) &= \bar{q} \quad (\mathbf{r} \in \Gamma_2^r) \end{aligned} \quad (4.1)$$

である。ここで、添字 j は (3.5) 式に関する j 番目の特性根を示し、 $\bar{\varphi}$ 、 \bar{q} はともにある定数であるとする。また、 $\varphi_j^{r'}$ は φ_j^r の境界上の法線方向の微分である。重み関数 $\varphi_j^{r*}(\mathbf{r})$ を使って (3.8) 式の重み付き残差表示を求めると次のようになる。なお、添字 j 、 r は以降省略して記述する。

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} [(\nabla^2 + B^2)\varphi(\mathbf{r})]\varphi^*(\mathbf{r})d\Omega = \\ \int_{\Gamma_2} (\varphi'(\mathbf{r}) - \bar{q})\varphi^*(\mathbf{r})d\Gamma - \int_{\Gamma_1} (\varphi(\mathbf{r}) - \bar{\varphi})\varphi^{*'}(\mathbf{r})d\Gamma \end{aligned} \quad (4.2)$$

ここで $\int_{\Omega} \cdot d\Omega$ は領域 Ω における領域積分を表し、 $\int_{\Gamma} \cdot d\Gamma$ は境界 Γ 上の境界積分を表す。式 (4.2) の左辺を 2 回部分積分し、整理すると式 (4.2) は次のように与えられる。

$$\int_{\Omega} [(\nabla^2 + B^2)\varphi^*(\mathbf{r})]\varphi(\mathbf{r})d\Omega = - \int_{\Gamma} \varphi'(\mathbf{r})\varphi^*(\mathbf{r})d\Gamma + \int_{\Gamma} \varphi(\mathbf{r})\varphi^{*'}(\mathbf{r})d\Gamma \quad (4.3)$$

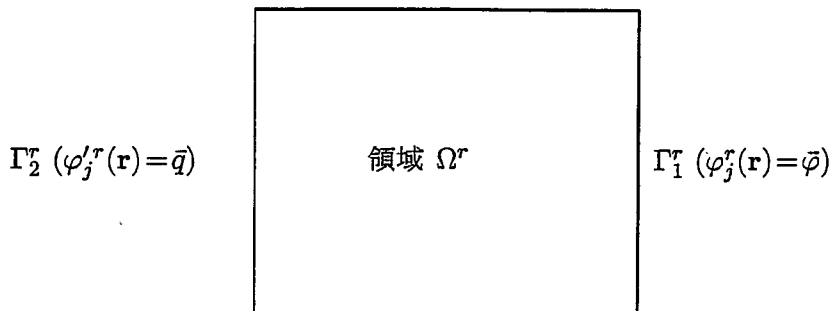


図 4.1.1 領域と境界の定義

ここで、無限体系中の点 \mathbf{r}_i に点線源が置かれた場合の、次式で定義されるグリーン関数 $\varphi^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i)$ を導入する。

$$\nabla^2 \varphi^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i) + B^2 \varphi^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i) + \delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i) = 0 \quad (4.4)$$

ここで、 $\delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i)$ は Dirac のデルタ関数であり、(4.4) 式の解 $\varphi^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i)$ は基本解と呼ばれる。

境界積分方程式を解くにはこの基本解の具体的な形を知っておかなければならない。具体的な基本解とその法線方向微分 ($\varphi^{*'}$) は二次元では次の関数となる。

$$B^2 = -\chi^2 < 0 :$$

$$\varphi^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i) = \frac{1}{2\pi} K_0(\chi|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|) \quad (4.5)$$

$$\varphi^{*'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i) = -\frac{\chi}{2\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|} (dist) K_1(\chi|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|) \quad (4.6)$$

$$B^2 > 0 :$$

$$\varphi^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i) = -\frac{i}{4} H_0^{(2)}(B|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|) \quad (4.7)$$

$$\varphi^{*'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i) = \frac{iB}{4|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|} (dist) H_1^{(2)}(B|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|) \quad (4.8)$$

ここで、 $(dist)$ は \mathbf{r}_i と境界 Γ との最短距離であり、境界 Γ の領域外側へ向かう法線ベクトルと、 \mathbf{r}_i から Γ へ引かれる垂線ベクトルとが同一方向であるならば正、逆方向であるならば負となる。 $H_\nu^{(2)}$ ($\nu=0, 1$)、 K_ν ($\nu=0, 1$) はそれぞれ第二種ハンケル関数、変形ベッセル関数である。 i は虚数単位で ($i^2=1$)、 $B^2 > 0$ の場合の基本解は複素関数であるが、本研究ではその実数部のみを重み関数として使用する。

(4.3) 式の重み関数 $\varphi^*(\mathbf{r})$ を基本解 $\varphi^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i)$ で置き換え、デルタ関数の性質を用いると

$$\varphi(\mathbf{r}_i) = -\int_{\Gamma} \varphi(\mathbf{r}) \varphi^{*'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i) d\Gamma + \int_{\Gamma} \varphi'(\mathbf{r}) \varphi^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i) d\Gamma \quad (4.9)$$

を得る。

(4.9) 式を境界上の諸量によって表すためには点線源を境界上に置かねばならない。しかしこの場合には、境界上の積分において $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}_i$ となる点で特異性が生じるため、これに対する特別な処理が必要になる。以下、その処理法について説明する。

図 4.1.2 に示すように、任意のソース点 Y を中心として半径 ϵ の円を描く。領域から外側に張り出した円弧境界を Γ_ϵ 、円弧境界以外の境界 Γ の部分を Γ' として、領域 Ω 、境界 $\Gamma' + \Gamma_\epsilon$ で (4.9) 式を考える。ただしソース点 Y を原点とする極座標 (ϵ, θ) を考え、点 Y における 2 つの境界線のなす角を θ' とする。

(4.9) 式において、 Y 点における位置ベクトルを \mathbf{r}_i とする。そして $\epsilon \rightarrow 0$ とすると、各項は特異性のある部分とない部分とに分けて表現することができる。以降右辺第 1 項のみについて記述する。すなわち、

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{\Gamma_\epsilon + \Gamma'} \varphi(\mathbf{r}) \varphi^{*'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i) d\Gamma = \int_{\Gamma'} \varphi(\mathbf{r}) \varphi^{*'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i) d\Gamma + \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{\Gamma_\epsilon} \varphi(\mathbf{r}) \varphi^{*'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i) d\Gamma \quad (4.10)$$

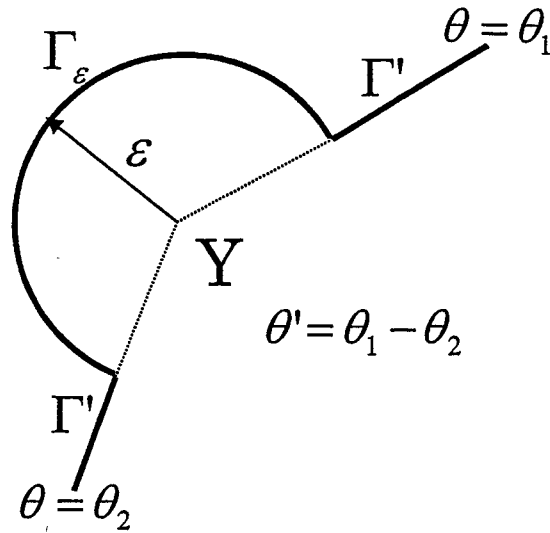


図 4.1.2 積分計算のための半円を付加した境界面

従って、極限操作における各項の値の評価は、 Γ_ϵ 上の積分を評価することにより行うことができる。

ここで例として基本解に (4.7) 式の実数部を選ぶ。すると基本解は

$$\varphi^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i) = -\frac{1}{4}Y_0(B|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|) \quad (4.11)$$

のような第2種ベッセル関数である。このとき (4.10) 式の右辺第2項は $\int_{\Gamma_\epsilon} d\Gamma = (2\pi - \theta')\epsilon$ であることに注意すると

$$\begin{aligned} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{\Gamma_\epsilon} \varphi(\mathbf{r}) \varphi^{*'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i) d\Gamma &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left\{ -\frac{1}{4} \int_{\Gamma_\epsilon} \varphi(\mathbf{r}_i) \frac{\partial Y_0(B\epsilon)}{\partial \epsilon} d\Gamma \right\} \\ &= -\frac{2\pi - \theta'}{2\pi} \varphi(\mathbf{r}_i) \end{aligned} \quad (4.12)$$

となる¹。また、基本解として別なものを用いても同じ結果が得られる。 $\epsilon \rightarrow 0$ のとき、境界 $\Gamma' + \Gamma_\epsilon$ はもとの境界 Γ と一致するので、式 (4.9) の右辺第1項は

$$\int_{\Gamma} \varphi(\mathbf{r}) \varphi^{*'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i) d\Gamma \rightarrow \int_{\Gamma} \varphi(\mathbf{r}) \varphi^{*'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i) d\Gamma - \frac{2\pi - \theta'}{2\pi} \varphi(\mathbf{r}_i) \quad (4.13)$$

と修正が施される。式 (4.13) の右辺の $\frac{\theta'}{2\pi}$ ($\equiv \tilde{c}_i$) なる量は特異点パラメータと呼ばれる。

一方、同一の手続きを (4.9) 式の右辺第2項に施しても新しい項は派生しない。結局、以上の補正を加えることによって、領域内部と境界上の両方に対して成り立つ境界積分方程式を次のように得ることができる。

$$\tilde{c}_i \varphi(\mathbf{r}_i) = - \int_{\Gamma} \varphi(\mathbf{r}) \varphi^{*'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i) d\Gamma + \int_{\Gamma} \varphi'(\mathbf{r}) \varphi^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i) d\Gamma \quad (4.14)$$

¹ここではベッセル関数の0付近の級数展開表現を用いて処理が行われている。

ここで、境界の法線微分が連続的に変化するような場合を滑らかな境界と呼び、不連続点がある場合には滑らかでない境界と呼ぶことにする。特異点パラメータ \tilde{c}_i は \mathbf{r}_i が置かれている位置でとる値は変わり、領域内部に対して $\tilde{c}_i = 1$ で、滑らかな境界上では $\theta' \approx \pi$ であるので $\tilde{c}_i = 1$ となる。滑らかでない境界上では、 \tilde{c}_i の値は、 \mathbf{r}_i の置かれている境界点を持つ角度を θ' とするとき、 $\tilde{c}_i = \frac{\theta'}{2\pi}$ で与えられる。以上より領域 Ω の内部あるいは境界上の任意の点 \mathbf{r}_i での $\varphi(\mathbf{r})$ の値はグリーン関数 $\varphi^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i)$ を用いて (4.14) 式に従って求めることができる。この方程式は他の工学分野から導出される境界積分方程式と同一の形式をしており、今後の議論の出発点となる式である。

4.2 その他の方法による境界積分方程式の導出

前節では、中性子拡散方程式から重み付き残差法によって境界積分方程式を導出する手法について述べた。従って、境界要素法は有限差分法や有限要素法などと同様に重み付き残差法の一つとして考えられる。しかしながら、そこから出発せずに境界積分方程式を導出する方法がある。それにはグリーン関数の第2公式を用いるものやガウスの発散公式を用いるものなどが挙げられる。これらは重み付き残差法から導く方法と比べてより直接的に導くことが出来る。この節ではその導出法について詳説する。

まずは、グリーン関数の第2公式を用いた導出法について述べる。(3.8) 式に $\varphi^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i)$ を、(4.4) 式に $\varphi(\mathbf{r})$ をそれぞれ乗じれば

$$\varphi^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i) \nabla^2 \varphi(\mathbf{r}) + B^2 \varphi^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i) \varphi(\mathbf{r}) = 0 \quad (4.15)$$

$$\varphi(\mathbf{r}) \nabla^2 \varphi^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i) + B^2 \varphi(\mathbf{r}) \varphi^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i) + \varphi(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i) = 0 \quad (4.16)$$

となる。(4.15) 式から (4.16) 式を差し引いたものに領域積分を施せば

$$\int_{\Omega} \varphi(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i) d\Omega = \int_{\Omega} [\varphi^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i) \nabla^2 \varphi(\mathbf{r}) - \varphi(\mathbf{r}) \nabla^2 \varphi^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i)] d\Omega \quad (4.17)$$

が得られる。(4.17) 式の左辺についてはデルタ関数の性質を用いると

$$\int_{\Omega} \varphi(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i) d\Omega = \varphi(\mathbf{r}_i) \quad (4.18)$$

となる。(4.18) 式の右辺についてはグリーン関数の第2公式¹を用いて

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} [\varphi^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i) \nabla^2 \varphi(\mathbf{r}) - \varphi(\mathbf{r}) \nabla^2 \varphi^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i)] d\Omega \\ = \int_{\Gamma} [\varphi^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i) \varphi'(\mathbf{r}) - \varphi(\mathbf{r}) \varphi^{*'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i)] d\Gamma \end{aligned} \quad (4.19)$$

¹境界 Γ によって閉じられた系 Ω において、関数 $f(\mathbf{r}), g(\mathbf{r})$ とその導関数が連続であるならば、次の公式が成り立つ。

$$\int_{\Omega} [g(\mathbf{r}) \nabla^2 f(\mathbf{r}) - f(\mathbf{r}) \nabla^2 g(\mathbf{r})] d\Omega = \int_{\Gamma} [g(\mathbf{r}) \nabla f(\mathbf{r}) - f(\mathbf{r}) \nabla g(\mathbf{r})] d\Gamma$$

ただし、境界積分は反時計回りの方向である。

となり、(4.17) 式は (4.9) 式と同一の表現になる。

次にガウスの発散公式を用いた導出法について述べる。(2.8) 式に $\varphi^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i)$ を乗じて領域積分を施すと

$$\int_{\Omega} \left[\varphi^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i) \nabla^2 \varphi(\mathbf{r}) + B^2 \varphi^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i) \varphi(\mathbf{r}) \right] d\Omega = 0 \quad (4.20)$$

となり、この左辺についてナブラに関する変換公式² を適用すると (4.20) 式は次のように変形される。

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \nabla \cdot \{ \{ \nabla \varphi(\mathbf{r}) \} \varphi^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i) \} d\Omega - \int_{\Omega} [\nabla \varphi(\mathbf{r}) \cdot \nabla \varphi^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i)] d\Omega \\ + B^2 \int_{\Omega} \varphi^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i) \varphi(\mathbf{r}) d\Omega = 0 \end{aligned} \quad (4.21)$$

さらに (4.21) 式の左辺第 2 項に変形を加えると次のようになる。

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \nabla \cdot \{ \{ \nabla \varphi(\mathbf{r}) \} \varphi^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i) \} d\Omega - \int_{\Omega} \nabla \cdot [\varphi(\mathbf{r}) \nabla \varphi^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i)] d\Omega \\ + \int_{\Omega} \varphi(\mathbf{r}) \nabla^2 \varphi^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i) d\Omega + B^2 \int_{\Omega} \varphi^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i) \varphi(\mathbf{r}) d\Omega = 0 \end{aligned} \quad (4.22)$$

そして (4.22) 式において、左辺第 1 項、第 2 項についてガウスの発散公式¹を用いると、

$$\begin{aligned} \int_{\Gamma} \{ \nabla \varphi(\mathbf{r}) \} \varphi^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i) d\Gamma - \int_{\Gamma} \varphi(\mathbf{r}) \nabla \varphi^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i) d\Gamma \\ + \int_{\Omega} \varphi(\mathbf{r}) \nabla^2 \varphi^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i) d\Omega + B^2 \int_{\Omega} \varphi^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i) \varphi(\mathbf{r}) d\Omega = 0 \end{aligned} \quad (4.23)$$

となる。重み関数 $\varphi^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i)$ は、領域 Ω の内部の任意点における位置ベクトルを \mathbf{r}_i とすると、Dirac のデルタ関数を用いて

$$\nabla^2 \varphi^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i) + B^2 \varphi^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i) + \delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i) = 0 \quad (4.24)$$

と表せるような無限体系に対するグリーン関数である。(4.24) 式を (4.23) 式に適用し、デルタ関数の性質を用いると、

$$\begin{aligned} \int_{\Gamma} \{ \nabla \varphi(\mathbf{r}) \} \varphi^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i) d\Gamma - \int_{\Gamma} \varphi(\mathbf{r}) \nabla \varphi^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i) d\Gamma \\ + \int_{\Omega} \varphi(\mathbf{r}) \nabla^2 \varphi^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i) d\Omega + B^2 \int_{\Omega} \varphi^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i) \varphi(\mathbf{r}) d\Omega \end{aligned}$$

²ナブラに関する変換公式は以下である。

$$\begin{aligned} (\nabla \cdot \nabla \phi) \psi &= \nabla \cdot \{ (\nabla \phi) \psi \} - (\nabla \phi) \cdot (\nabla \psi) \\ (\nabla \phi) \cdot (\nabla \psi) &= \nabla \cdot (\phi \nabla \psi) - \phi \nabla^2 \psi \end{aligned}$$

¹ベクトル場 \mathbf{a} とその偏導関数が連続であれば、区分的になめらかな閉曲線を S 、それを境界とするなめらかな曲線を V とするとき、次式が成り立つ。

$$\int_S \mathbf{a} \cdot d\mathbf{S} = \int_V \nabla \cdot \mathbf{a} dV$$

$$\begin{aligned}
&= \int_{\Gamma} \{\nabla\varphi(\mathbf{r})\} \varphi^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i) d\Gamma - \int_{\Gamma} \varphi(\mathbf{r}) \nabla\varphi^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i) d\Gamma \\
&\quad + \int_{\Omega} \varphi(\mathbf{r}) [-B^2\varphi^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i) - \delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i)] d\Omega + B^2 \int_{\Omega} \varphi^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i) \varphi(\mathbf{r}) d\Omega \\
&= \int_{\Gamma} \{\nabla\varphi(\mathbf{r})\} \varphi^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i) d\Gamma - \int_{\Gamma} \varphi(\mathbf{r}) \nabla\varphi^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i) d\Gamma - \int_{\Omega} \varphi(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i) d\Omega \\
&= \int_{\Gamma} \{\nabla\varphi(\mathbf{r})\} \varphi^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i) d\Gamma - \int_{\Gamma} \varphi(\mathbf{r}) \nabla\varphi^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i) d\Gamma - \varphi(\mathbf{r}_i) = 0 \tag{4.25}
\end{aligned}$$

となり、(4.29) 式は (4.9) 式と同一の表現になる。

第5章 二次元問題における境界積分方程式の離散化

5.1 はじめに

前章では、各領域の中性子拡散方程式のそれぞれの特性根に対して定義されるヘルムホルツ方程式の境界積分方程式を導出した。この方程式は領域体系が複雑である場合には電子計算機の数値解析が必要となり、境界積分方程式を離散化しなければならない。

境界要素法における離散化については、幾つかの手法がある。境界要素上の変数の値が一定であると仮定する一定要素は、その取り扱いが簡単であり、計算アルゴリズムの構築が容易になるという利点がある。一定要素のほかには線形要素（一次要素）、二次要素といった高次要素が用いられる。これらはより詳細に変数分布を近似するため、一定要素と比べてより高い精度での計算が可能となる。

本章では、まず離散化に関する概要を得るために一定要素による離散化について説明する。加えて二次要素による離散化手法と、それに伴って生じる問題とその対処法について述べる。

5.2 一定要素による境界積分方程式の離散化

本節では、境界要素法における離散化近似でもっとも簡単な一定要素を用いた二次元問題の離散化について説明し、高次要素の理解の前段階とする。

図 5.2.1 に示すように、境界 Γ^r を K 個の境界要素、 $\Gamma_1^r, \dots, \Gamma_K^r$ に分割する。このようにしたとき、領域 r 、モード j に関するヘルムホルツ方程式に対する境界積分方程式は次のように有限個の積分の和として表される。

$$\tilde{c}_i \varphi_j^r(\mathbf{r}_i) = \sum_{k=1}^K \int_{\Gamma_k^r} \varphi_j^r(\mathbf{r}) \varphi_j^{*r}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i) d\Gamma - \sum_{k=1}^K \int_{\Gamma_k^r} \varphi_j^r(\mathbf{r}) \varphi_j^{*r}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i) d\Gamma \quad (5.1)$$

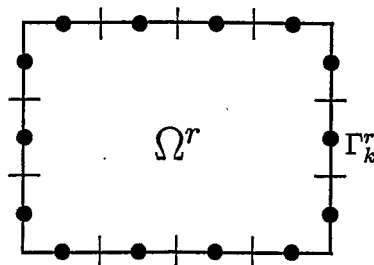


図 5.2.1 一定要素による離散化

ただし、 Γ_k^r は領域 r における k 番目の境界要素を示すものとする。一定要素近似の場合には、関数 $\varphi_j^r(\mathbf{r})$ 、 $\varphi_j'^r(\mathbf{r})$ の値は要素内で一定であると仮定され、要素の中心点での値で示す。すなわち、

$$\left. \begin{aligned} \varphi_j^r(\mathbf{r}) &\approx \varphi_j^r(\mathbf{r}_k) = \varphi_{j,k}^r \\ \varphi_j'^r(\mathbf{r}) &\approx \varphi_j'^r(\mathbf{r}_k) = \varphi_{j,k}'^r \end{aligned} \right\} (\mathbf{r} \in \Gamma_k^r) \quad (5.2)$$

である。(5.2) 式を (5.1) 式に用いれば次式を得る。

$$\tilde{c}_i \varphi_j^r(\mathbf{r}_i) = \sum_{k=1}^K \varphi_{j,k}'^r \int_{\Gamma_k^r} \varphi_j^{*r}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i) d\Gamma - \sum_{k=1}^K \varphi_{j,k}^r \int_{\Gamma_k^r} \varphi_j^{*r}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i) d\Gamma \quad (5.3)$$

この式は、任意の点 \mathbf{r}_i に対して成り立つ。(5.3) 式から任意の点 \mathbf{r}_i での $\varphi_j^r(\mathbf{r}_i)$ を計算するためには、境界要素上の $\varphi_{j,k}^r$ 、 $\varphi_{j,k}'^r$ が既知でなければならないことがわかる。そこで次に、境界要素上の $\varphi_{j,k}^r$ と $\varphi_{j,k}'^r$ を決定することを考える。

境界要素上の節点 $\mathbf{r}_{k'}$ に点線源を置いた場合のグリーン関数を使用すると、(5.3) 式は次のように書き改めることができる。

$$\tilde{c}_{k'} \varphi_{j,k'}^r = \sum_{k=1}^K \varphi_{j,k}'^r G_{j,k'/k}^r - \sum_{k=1}^K \varphi_{j,k}^r \hat{H}_{j,k'/k}^r \quad (5.4)$$

ここで、境界要素上の節点は境界要素中点にあるため $\tilde{c}_{k'} = \frac{1}{2}$ であり、係数 $G_{j,k'/k}^r$ と $\hat{H}_{j,k'/k}^r$ は次のように定義される。

$$G_{j,k'/k}^r = \int_{\Gamma_k^r} \varphi_j^{*r}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_{k'}) d\Gamma \quad (5.5)$$

$$\hat{H}_{j,k'/k}^r = \int_{\Gamma_k^r} \varphi_j^{*r}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_{k'}) d\Gamma \quad (5.6)$$

以上により (5.4) 式は、境界上の変数のみによって表すことができた。上の手順を境界上のすべての境界要素に適用すれば、すなわち境界要素上の節点に点線源を置くという処理をすべての境界要素に施せば、次の連立一次代数方程式が導かれる。

$$\mathbf{G}_j^r \varphi_j'^r = \mathbf{H}_j^r \varphi_j^r \quad (5.7)$$

ただし、 $\varphi_j^r := (\varphi_{j,k}^r)_{K,1}$ 、 $\varphi_j'^r := (\varphi_{j,k}'^r)_{K,1}$ 、 $\mathbf{G}_j^r := (G_{j,k'/k}^r)_{K,K}$ 、 $\mathbf{H}_j^r := (H_{j,k'/k}^r)_{K,K}$ である。また、 $H_{j,k'/k}^r$ は

$$H_{j,k'/k}^r = \begin{cases} \hat{H}_{j,k'/k}^r, & k' \neq k \\ \hat{H}_{j,k'/k}^r + \tilde{c}_{k'}, & k' = k \end{cases} \quad (5.8)$$

のように定義される。全境界要素上で境界条件として $\varphi_{j,k}^r$ もしくは $\varphi_{j,k}'^r$ がそれぞれ与えられている場合は、未知数が K 個に対し、行列方程式の次数も K となり、(5.7) 式を解くことにより残りの $\varphi_{j,k}^r$ と $\varphi_{j,k}'^r$ の値を求めることができる。

5.3 二次要素による境界積分方程式の離散化

本節では一定要素よりも高精度な離散化を可能とする高次要素について、二次要素を例として述べる。

二次要素による離散化の方法は、各境界要素上の2つの端点と中点に節点を置き、その節点上での変数の値を用いて要素上の変数分布を二次関数で内挿するというものである。従って二次要素を用いた場合は境界 Γ が K 個の境界要素に分割されたときに境界 Γ 上の総節点数は $L(=2K)$ となる。

まず、図5.3.1に示されているような直線境界に対する二次要素の適用を考える。境界要素 Γ_k^r 上の $\varphi_j^r(\mathbf{r})$ (または $\varphi_j^{*r}(\mathbf{r})$) の値は、 Γ_k^r 上に設けられた3つの節点上での値を用いて、無次元座標 ξ に関する二次関数により、次のように補間することができる。

$$\varphi_j^r(\xi) = \phi^1(\xi)\varphi_{j,k}^{1r} + \phi^2(\xi)\varphi_{j,k}^{2r} + \phi^3(\xi)\varphi_{j,k}^{3r} \quad (5.9)$$

ここで、 Γ_k^r の長さを \mathcal{L} とするととき無次元座標 ξ は、

$$\xi = \frac{2x}{\mathcal{L}} \quad \left(-\frac{\mathcal{L}}{2} < x < \frac{\mathcal{L}}{2} \rightarrow -1 < \xi < 1\right) \quad (5.10)$$

で表せる。また $\phi^1 \sim \phi^3$ は内挿関数と呼ばれ、次式のように与えられる。

$$\phi^1(\xi) = \frac{1}{2}\xi(1-\xi), \quad \phi^2(\xi) = (1-\xi)(1+\xi), \quad \phi^3(\xi) = \frac{1}{2}\xi(1+\xi) \quad (5.11)$$

二次要素を用いた場合の、境界積分方程式(5.1)式の境界 Γ_k^r における境界積分は $dx = \frac{\mathcal{L}}{2}d\xi$ により、

$$\begin{aligned} \int_{-\frac{\mathcal{L}}{2}}^{\frac{\mathcal{L}}{2}} \varphi_j^{\prime r}(\mathbf{r})\varphi_j^{*r}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i)dx &= \int_{-1}^1 \sum_{m=1}^3 \phi^m(\xi)\varphi_{j,k}^{\prime m r} \varphi_j^{*r}(\xi) \frac{\mathcal{L}}{2}d\xi \\ &= \sum_{m=1}^3 \left\{ \frac{\mathcal{L}}{2} \int_{-1}^1 \phi^m(\xi)\varphi_j^{*r}(\xi)d\xi \right\} \varphi_{j,k}^{\prime m r} \end{aligned}$$

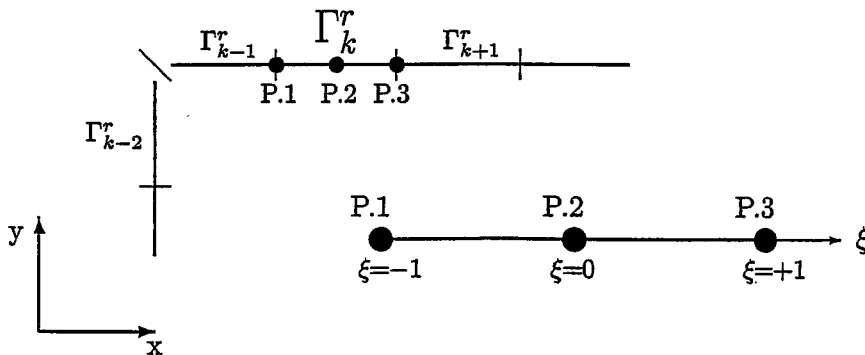


図 5.3.1 直線境界における二次要素

$$\begin{aligned}
 &= \sum_{m=1}^3 h_{j,k}^{m,r} \varphi_{j,k}'^{m,r} & (5.12) \\
 \int_{-\frac{\mathcal{L}}{2}}^{\frac{\mathcal{L}}{2}} \varphi_j^r(\mathbf{r}) \varphi_j^{*r}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i) d\mathbf{x} &= \int_{-1}^1 \sum_{m=1}^3 \phi^m(\xi) \varphi_{j,k}^{m,r} \varphi_j^{*r}(\xi) \frac{\mathcal{L}}{2} d\xi \\
 &= \sum_{m=1}^3 \left\{ \frac{\mathcal{L}}{2} \int_{-1}^1 \phi^m(\xi) \varphi_j^{*r}(\xi) d\xi \right\} \varphi_{j,k}^{m,r} \\
 &= \sum_{m=1}^3 g_{j,k}^{m,r} \varphi_{j,k}^{m,r} & (5.13)
 \end{aligned}$$

と書ける。従って、一定要素の場合と同様に点線源を境界要素上の節点 \mathbf{r}_ν に置いた場合の離散化された境界積分方程式は、

$$\tilde{c}_\nu \varphi_j^r(\mathbf{r}_\nu) = \sum_{k=1}^K \sum_{m=1}^3 \varphi_{j,k}^{m,r} g_{j,k}^{m,r} - \sum_{k=1}^K \sum_{m=1}^3 \varphi_{j,k}'^{m,r} h_{j,k}^{m,r} \quad (5.14)$$

と書ける。ここで、 $\varphi_{j,k}^{1,r} = \varphi_{j,k-1}^{3,r}$ 、 $\varphi_{j,1}^{1,r} = \varphi_{j,K}^{3,r}$ であることを考えて、新たに φ_j^r の添え字をつけ直し、 $\varphi_{j,l}^r$ が領域 r における l 番目の節点上での φ_j^r を示すように変更する (φ_j^{*r} についても同様)。これにより (5.14) 式の右辺は整理され、

$$\tilde{c}_\nu \varphi_{j,\nu}^r = \sum_{l=1}^L \varphi_{j,l}'^{r} G_{j,\nu}^{r} - \sum_{l=1}^L \varphi_{j,l}^r \hat{H}_{j,\nu}^r \quad (5.15)$$

となる。そして一定要素の場合と同様に L 個のすべての節点上に点線源を置くという処理を行えば (5.7) 式と同一の表現形式をもつ式が導かれる。

5.4 境界積分の計算

境界積分の計算には、少ない積分点で効率よく計算できる方法として知られているガウス数値積分公式を用いる。ガウス数値積分公式では、関数 $f(x)$ の積分 $\int_{x_1}^{x_2} f(x) dx$ を無次元座標 ξ の区間 $-1 < \xi < 1$ での関数 $f(\xi)$ の積分として変換して

$$I = \frac{x_2 - x_1}{2} \int_{-1}^1 f(\xi) d\xi \approx \frac{x_2 - x_1}{2} \sum_{i=1}^n \omega_i f(\xi_i) \quad (5.16)$$

と計算する。重み関数 ω_i と座標 ξ_i の組み合わせは、積分点 (内挿点) の数 n に応じて文献に与えられている [17]。

二次元問題の境界積分では、ベッセル関数と変形ベッセル関数で与えられる基本解の $\varphi_j^{*r}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i)$ と $\varphi_j^{*r}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i)$ の値を数値的に計算する必要がある。これらの関数は多項式近似によって高い精度で計算でき、主要なものは文献にまとめられている [7]。

種々の境界積分のうち、点線源が置かれる節点 (位置ベクトルを \mathbf{r}_ν とする) が、積分される境界要素 Γ_k^r 上に重なる場合では、積分範囲内で $(\mathbf{r} - \mathbf{r}_\nu)$ がゼロになってしまう。この場合は、ソー

ス点と境界要素までの最短距離がゼロ、すなわち $(dist) = 0$ になるため H_j^r に関する境界積分計算に特異性は生じない。しかし、(4.5)、(4.7) 式に見るように G_j^r に関しては単純な数値積分では発散が生じてしまうため、特異積分の処理が必要となる。二次元問題ではこのような特異積分の計算は一般形として $\int_0^\alpha x^n H_0^{(2)}(Bx) dx$ (もしくは、 $\int_0^\alpha x^n K_0(Bx) dx$) と表すことができる。これらの積分は部分積分を用いて x の次数を下げるのが可能で、かつ、 $n = 0$ のときには Struve 関数や変形 Struve 関数を用いて解析的に計算することができる¹。

5.5 境界上と内部点の計算

境界要素法による計算は二段階からなっている。一段目の計算では、境界上の節点における変数の値を決定し、二段目では境界上の節点での情報を用いて領域内部の任意点における変数の値を求める。これらの計算手順について以下に説明する。

前節までの議論から、離散化された境界積分方程式は次のように与えられた。

$$G_j^r \varphi_j'^r = H_j^r \varphi_j^r \tag{5.17}$$

ここで、この (5.17) 式を用いて境界上の未知の変数を決定する問題を考える (境界上の総節点数を K 個とする)。ベクトル φ_j^r と $\varphi_j'^r$ の中には、既知数と未知数の合計 $2K$ 個の要素が含まれている。(5.17) 式は K 次の代数方程式であり、この式を解くためには合計 $2K$ 個の $\varphi_{j,k}^r$ 、 $\varphi_{j,k}'^r$ の中で、少なくとも K 個が既知数でなければならない。階層領域分割型境界要素法では、 $\varphi_{j,k}^r$ と $\varphi_{j,k}'^r$ のうちの K 個の既知数は、炉心体系の外部境界条件と、仮定される内部境界条件によって与えられる。

(5.17) 式に対して、未知数を左辺に、既知数を右辺にくるように書き改めると

$$Ax = b \tag{5.18}$$

と表すことができる。 A 行列の次元は用いた境界上の節点数と等しく、内部領域内のメッシュ点や要素節点が未知数となる有限差分法や有限要素法に比べて大幅に小さくなる。しかしながら、有限差分法や有限要素法の係数行列が大型疎行列になるのに対して、境界要素法における A 行列は非対称密行列となる。(5.18) 式のような連立一次代数方程式を解くための手法は、大きく直接解法と反復解法とに分類することができる。大型疎行列の場合は、反復解法によって効率的に解く解法がいくつか開発されているが、境界要素法における A 行列のように非対称密行列である場合には反復解法は適用できず、直接解法であるガウス消去法といった方法に頼らざるを得ない。ガ

¹Struve 関数や変形 Struve 関数に関する公式は以下の通り。

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \zeta_0(t) dt &= x\zeta_0(x) + \frac{\pi x}{2} \{H_0(x)\zeta_1(x) - H_1(x)\zeta_0(x)\} \\ \int_0^\infty Z_0(t) dt &= xZ_0(x) + \frac{\pi x}{2} \{-L_0(x)Z_1(x) + L_1(x)Z_0(x)\} \end{aligned}$$

(ただし、 $\zeta_\nu(x) = AJ_\nu(x) + BY_\nu(x)$ ($\nu = 0, 1$)、 $Z_\nu(x) = AI_\nu(x) + Be^{i\nu\pi}K_\nu(x)$ ($\nu = 0, 1$)、 H_0 、 H_1 、 L_0 、 L_1 は Struve 関数)

ウス消去法を用いた解法は、行列が大型化するに従い必要とする計算量が増大し数値誤差も無視できなくなるという問題を内包している。この点が第1章で述べた境界要素法の欠点である。

(5.18) 式を解くことにより、境界上の $\varphi_{j,k}^r$ と $\varphi'_{j,k}^r$ はすべて既知となる。境界内部の任意の点 \mathbf{r}_i の $\varphi_j^r(\mathbf{r}_i)$ を決定するためには、以上で決定された境界上の $\varphi_{j,k}^r$ と $\varphi'_{j,k}^r$ を用いて、一定要素ならば (5.3) 式の積分から、二次要素ならば (5.14) 式の積分から求めることができる。

5.6 かど点での非適合要素の導入

隣接する境界要素においてその接合部がなめらかではない場合には、接合点では2つの法線ベクトルが存在することになる。一定要素では節点を境界要素の midpoint に設けるためそのような問題への配慮は必要ないが、高次要素の場合には境界要素間の接合点に節点を設けるため以下のような問題が生じる。

なめらかでない境界要素間の接合点では（以下、かど点とよぶことにする）、 φ の値を1つ、そして φ' の値を2つ、合計3つの変数を考えなければならない。境界要素法で境界上に合計 K 個の節点をもつ体系を解く際には、点線源を各節点上に置いて合計 K 個の境界積分方程式を導く。かど点をもたず、全境界がなめらかであるような体系では各節点は φ と φ' についてそれぞれ一つの値しか持たず、全節点でそのどちらかが境界条件として与えられていれば、未知数の数は代数方程式の本数と等しくなり、解を求めることができる。しかし、かど点をもつ体系で、かど点において境界条件が φ もしくは一方の φ' のみが与えられている場合には、その点における未知数が2つとなり、体系全体で未知数の数が代数方程式の本数を上回るようになってしまい、解を求めることが不可能となる。

このような場合、境界要素法ではかど点上の節点を図 5.6.1 に示すように少し内側にずらした「非適合要素」を用いることが多い。これによって、点線源を内側へずらした節点に置くことができるので、代数方程式の本数が足りなくなるということはない。ただしこの場合、かど点での境界要素間の φ の連続性は保証されない。

非適合要素における $\varphi_j^r(\mathbf{r})$ 、 $\varphi'_{j,k}^r(\mathbf{r})$ の変数分布を表すための内挿関数は3つの節点の位置が無

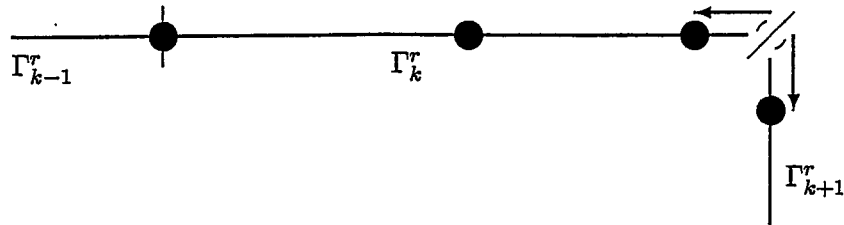


図 5.6.1 非適合要素における節点の移動（二次要素の場合）

次元座標で $\xi = \alpha_1, 0, \alpha_3$ ($\alpha_1 < 0 < \alpha_3$) と表せるとき、

$$\begin{cases} \phi^1(\xi) = \frac{1}{\alpha_1(\alpha_3 - \alpha_1)} \xi(\alpha_3 - \xi) \\ \phi^2(\xi) = \frac{1}{\alpha_1\alpha_3} (\alpha_3 - \xi)(\alpha_1 - \xi) \\ \phi^3(\xi) = \frac{1}{\alpha_3(\alpha_1 - \alpha_3)} \xi(\alpha_1 - \xi) \end{cases} \quad (5.19)$$

となる。

非適合要素を用いた場合、非適合要素上での節点のとり方が大きく計算精度を左右する。これまでの研究により、二次要素を用いた場合は非適合要素の位置は $\xi = 0.8, -0.8$ が適切であることが示されている [12]。

第6章 中性子増倍率と内部境界条件の修正

6.1 はじめに

階層領域分割型境界要素法では、多領域中性子拡散方程式を上下の2つの層において階層的に解く。これまでは、均質領域に分割された各領域において定義された中性子拡散方程式を境界要素法で解くための、下位層における計算手法について述べてきた。一方上位層では、下位層での計算結果を持ち寄って各領域の境界面上の中性子束または中性子流を構成し、領域間の内部境界上での中性子束（または中性子流）の連続性を調べる。結果が満足でなければ、仮定された内部境界条件と中性子増倍率を修正し、それぞれの領域に関して更新された内部境界条件と中性子増倍率の情報を、下位層の関係する計算部位に分配する。以下に、その上位層における計算手法について説明する。

図 6.1.1 のような、多数の均質な小領域で構成される体系の一部を考える。

この体系における全内部共通境界面数は P であるとする。図の中心に示されている内部共通境界を I_p 、その境界で区切られている小領域をそれぞれ r_p^- 、 r_p^+ とし、 r_p^- 側に属していると考え I_p を I_p^- 、 r_p^+ 側を I_p^+ とする。そして I_p 上には L_p 個の節点があるとする。このとき、 I_p 上のそれぞれの節点上で中性子束と中性子流の連続条件を満足する必要がある。それらの連続条件は I_p 上の $\varphi_{j,l}$ と $\varphi'_{j,l}$ に対して (3.7) 式から次の方程式を満足することを必要とする。

・中性子束の連続性に関しては、

$$\sum_{j=1}^G C_{gj}^{r_p^-} \varphi_{j,l}^{I_p^-} = \sum_{j=1}^G C_{gj}^{r_p^+} \varphi_{j,l}^{I_p^+} \quad (p=1, 2, \dots, P; g=1, 2, \dots, G; l=1, 2, \dots, L_p) \quad (6.1)$$

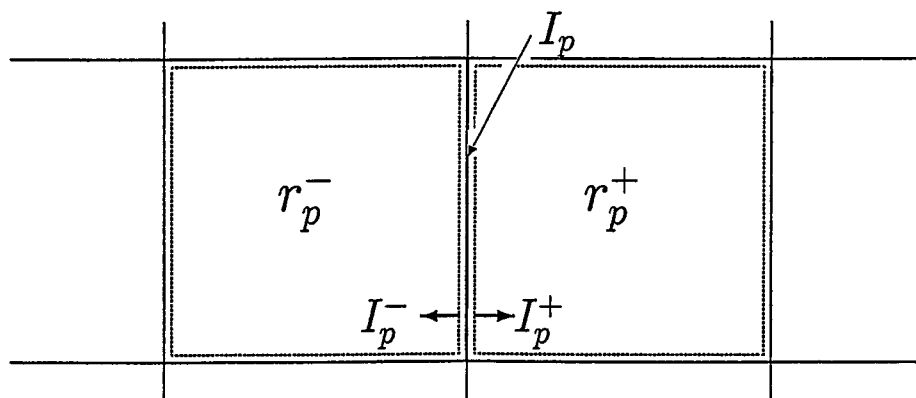


図 6.1.1 内部境界 I_p と領域 r_p^- 、 r_p^+ との関係

・中性子流の連続性に関しては、

$$\left\{ -D_g^{r_p^-} \sum_{j=1}^G C_{gj}^{r_p^-} \varphi'_{j,l}{}^{I_p^-} \right\} = - \left\{ -D_g^{r_p^+} \sum_{j=1}^G C_{gj}^{r_p^+} \varphi'_{j,l}{}^{I_p^+} \right\} \quad (p=1, 2, \dots, P : g=1, 2, \dots, G : l=1, 2, \dots, L_p) \quad (6.2)$$

ここで、 $\varphi_{j,l}^{I_p^-}$ (または $\varphi_{j,l}^{I_p^+}$) と $\varphi'_{j,l}{}^{I_p^-}$ (または $\varphi'_{j,l}{}^{I_p^+}$) はヘルムホルツ方程式 (3.8) 式を満たす解と、その共通面 I_p 上の領域 r_p^- (または r_p^+) 側の法線微分である。

仮に $\varphi_{j,l}^{I_p^-}$ の値を仮定するものとする。これにより、連続条件 (6.1) 式から自動的に $\varphi_{j,l}^{I_p^+}$ の値が決まる。 $\varphi_{j,l}^{I_p^-}$ と中性子増倍率 k の仮定値を用いた、領域 r_p^- における (3.8) 式の計算は、共通境界面上の微分、すなわち $\varphi'_{j,l}{}^{I_p^-}$ を与える。また領域 r_p^+ についても $\varphi_{j,l}^{I_p^+}$ が与えられているため同様の計算を行うことが可能で、 $\varphi'_{j,l}{}^{I_p^+}$ を得る。もし、 $\varphi_{j,l}^{I_p^-}$ と k の仮定値が正しいものであれば、 $\varphi_{j,l}^{I_p^-}$ と $\varphi'_{j,l}{}^{I_p^+}$ は、中性子流の連続性から次式を満たさなければならない。

$$F_{g,l}^{I_p}(\varphi^{I_p}, k) = D_g^{r_p^-} \sum_{j=1}^G C_{gj}^{r_p^-} \varphi'_{j,l}{}^{I_p^-} + D_g^{r_p^+} \sum_{j=1}^G C_{gj}^{r_p^+} \varphi'_{j,l}{}^{I_p^+} = 0 \quad (p=1, 2, \dots, P : g=1, 2, \dots, G : l=1, 2, \dots, L_p) \quad (6.3)$$

ここで、 $\varphi^{I_p} := (\varphi_{j,l}^{I_p^-})_{G,1}$ 、また $\varphi_j^{I_p} := (\varphi_{j,l}^{I_p^-})_{L_p,1}$ である。

以上より、 $\varphi_{j,l}^{I_p^-}$ と k の正しい値を与える問題は、上の方程式 (6.3) 式の解 $\varphi_{j,l}^{I_p^-}$ と k を決定する問題となる。しかし、(6.3) 式は $(\sum_{p=1}^P GL_p) + 1$ 個の未知数を持つ $(\sum_{p=1}^P GL_p)$ 個の方程式であり、これらの未知数を求めるにはもう一本の方程式が必要である。その補助方程式は $\varphi_{j,l}^{I_p^-}$ の規格化条件から与えられ、次のように表すことができる。

$$F^c(\varphi^I, k) = 1 - \sum_{j=1}^G \sum_{p=1}^P \sum_{l=1}^{L_p} \varphi_{j,l}^{I_p^-} = 0 \quad (6.4)$$

ここで、 $\varphi^I := (\varphi_{j,l}^{I_p^-})_{P,1}$ である。

これにより、中性子増倍率と、内部境界面上での中性子束と中性子流の連続条件を満足する内部境界条件を与える問題は、(6.3) 式と (6.4) 式を満足する解を決定する問題に帰着される。階層領域分割型境界要素法では、この問題に対してニュートン法を適用している。

6.2 ニュートン法による中性子増倍率と内部境界条件の決定

(6.3) 式と (6.4) 式にニュートン法を適用すれば、解を次のような反復的な修正から決定することができる。

$$J^{(n)} \begin{bmatrix} \delta \tilde{\varphi}^I \\ \delta \tilde{k} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} F^I(\varphi^{I^{(n)}}, k^{(n)}) \\ F^c(\varphi^{I^{(n)}}, k^{(n)}) \end{bmatrix} \quad (6.5)$$

$$\begin{bmatrix} \varphi^{I(n+1)} \\ k^{(n+1)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \varphi^{I(n)} \\ k^{(n)} \end{bmatrix} + \omega_a \begin{bmatrix} \delta\bar{\varphi}^I \\ \delta\bar{k} \end{bmatrix} \quad (6.6)$$

ここで n は繰り返しの回数を意味し、 ω_a は緩和係数または加速係数を表す。 F^I は縦ベクトルで、 $F^I := (F^{I_p})_{P,1}$ 、 $F^{I_p} := (F^{I_p})_{G,1}$ 、 $F^{I_p} := (F^{I_p})_{L_p,1}$ と定義される。ヤコビアン行列 $J^{(n)}$ は $(GL+1 \times GL+1)$ の次元を持った行列で ($L = \sum_{p=1}^P L_p$)、

$$J^{(n)} = \begin{bmatrix} J_\varphi^I & J_k^I \\ J_\varphi^I & 0 \end{bmatrix} \Big|_{\varphi^{I(n),k^{(n)}}} \quad (6.7)$$

のように定義される。ここで、 $J_\varphi^I = \left(\frac{\partial F^I}{\partial \varphi^I} \right)$ 、 $J_k^I = \left(\frac{\partial F^I}{\partial k} \right)$ 、 $J_\varphi^c = \left(\frac{\partial F^c}{\partial \varphi^I} \right)$ はそれぞれ $(GL \times GL)$ 、 $(GL \times 1)$ 、そして $(1 \times GL)$ の次元を持った部分行列である。これらの部分行列は

$$\frac{\partial F^I}{\partial \varphi^I} = \begin{pmatrix} \frac{\partial F^{I_1}}{\partial \varphi^{I_1}} & \cdots & \frac{\partial F^{I_1}}{\partial \varphi^{I_{p'}}} & \cdots & \frac{\partial F^{I_1}}{\partial \varphi^{I_P}} \\ \vdots & & \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial F^{I_p}}{\partial \varphi^{I_1}} & \cdots & \frac{\partial F^{I_p}}{\partial \varphi^{I_{p'}}} & \cdots & \frac{\partial F^{I_p}}{\partial \varphi^{I_P}} \\ \vdots & & \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial F^{I_P}}{\partial \varphi^{I_1}} & \cdots & \frac{\partial F^{I_P}}{\partial \varphi^{I_{p'}}} & \cdots & \frac{\partial F^{I_P}}{\partial \varphi^{I_P}} \end{pmatrix} \quad (6.8)$$

$$\frac{\partial F^{I_p}}{\partial \varphi^{I_q}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial F^{I_p}}{\partial \varphi_1^{I_q}} & \cdots & \frac{\partial F^{I_p}}{\partial \varphi_{g'}^{I_q}} & \cdots & \frac{\partial F^{I_p}}{\partial \varphi_G^{I_q}} \\ \vdots & & \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial F^{I_p}}{\partial \varphi_1^{I_q}} & \cdots & \frac{\partial F^{I_p}}{\partial \varphi_{g'}^{I_q}} & \cdots & \frac{\partial F^{I_p}}{\partial \varphi_G^{I_q}} \\ \vdots & & \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial F^{I_p}}{\partial \varphi_1^{I_q}} & \cdots & \frac{\partial F^{I_p}}{\partial \varphi_{g'}^{I_q}} & \cdots & \frac{\partial F^{I_p}}{\partial \varphi_G^{I_q}} \end{pmatrix} \quad (6.9)$$

$$\frac{\partial F^{I_p}}{\partial \varphi_j^{I_q}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial F_{g,1}^{I_p}}{\partial \varphi_{j,1}^{I_q}} & \cdots & \frac{\partial F_{g,1}^{I_p}}{\partial \varphi_{j,l'}^{I_q}} & \cdots & \frac{\partial F_{g,1}^{I_p}}{\partial \varphi_{j,L_q}^{I_q}} \\ \vdots & & \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial F_{g,1}^{I_p}}{\partial \varphi_{j,1}^{I_q}} & \cdots & \frac{\partial F_{g,1}^{I_p}}{\partial \varphi_{j,l'}^{I_q}} & \cdots & \frac{\partial F_{g,1}^{I_p}}{\partial \varphi_{j,L_q}^{I_q}} \\ \vdots & & \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial F_{g,L_p}^{I_p}}{\partial \varphi_{j,1}^{I_q}} & \cdots & \frac{\partial F_{g,L_p}^{I_p}}{\partial \varphi_{j,l'}^{I_q}} & \cdots & \frac{\partial F_{g,L_p}^{I_p}}{\partial \varphi_{j,L_q}^{I_q}} \end{pmatrix} \quad (6.10)$$

$$\frac{\partial F^I}{\partial k} = \left(\frac{\partial F^{I_p}}{\partial k} \right)_{P,1}, \quad \frac{\partial F^{I_p}}{\partial k} = \left(\frac{\partial F_g^{I_p}}{\partial k} \right)_{G,1}, \quad \frac{\partial F_g^{I_p}}{\partial k} = \left(\frac{\partial F_{g,l}^{I_p}}{\partial k} \right)_{L_p,1} \quad (6.11)$$

$$\frac{\partial F^c}{\partial \varphi^I} = \left(\frac{\partial F^c}{\partial \varphi^{I_p}} \right)_{1,P}, \quad \frac{\partial F^c}{\partial \varphi^{I_p}} = \left(\frac{\partial F^c}{\partial \varphi_g^{I_p}} \right)_{1,G}, \quad \frac{\partial F^c}{\partial \varphi_g^{I_p}} = \left(\frac{\partial F^c}{\partial \varphi_{g,l}^{I_p}} \right)_{1,L_p} \quad (6.12)$$

のように定義される。

ヤコビアン行列 $J^{(n)}$ はニュートン法において方程式の根を探索する上での羅針盤的な役割を果たすものであり、この行列の精度、効率の良い計算が階層領域分割型境界要素法の有効性を左右する。(6.3)、(6.4)式に対する中性子増倍率と φ^I の依存性が複雑であるため、ヤコビアン行列の解析的表現が得られない場合には数値微分によって計算する必要がある。この場合には数値微分に伴う誤差や、計算に時間がかかるという問題が生じる。しかし幸いにも、(6.3)、(6.4)式の解析からヤコビアン行列に含まれるすべての微係数の解析表現を求めることができることが明らかにされている。その微係数の解析的表現とその決定法については、付録として紹介する。

6.3 反復解法の導入

上位層の計算は繰り返し毎に (6.5) 式により仮定値である内部境界条件と中性子増倍率の修正値 $\delta\tilde{\varphi}^I$ と $\delta\tilde{k}$ を決定し、(6.6) 式により修正を加えていく、というプロセスで行われる。(6.5) 式は (5.14) 式と同様に、

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b} \quad (6.13)$$

という形の連立一次代数方程式であり、これを何らかの手法を用いて解くことになる。第 5.5 節で述べたように、このような連立一次代数方程式を解く手法は大きく分けて直接解法、反復解法の 2 種類がある。開発された当初の階層領域分割型境界要素法では、上位層におけるこの計算に、直接解法であるガウス消去法を採用していた。しかしこの方法では、(6.5) 式における \mathbf{A} 行列 (すなわち $J^{(n)}$) が次数が $(GL + 1)$ と体系の全内部境界面に関わる行列であるため、体系が多くの小領域に分割され内部境界面数が増加するとそれに従い行列の次数も増加する。ガウス消去法は、扱う行列の次数の増加とともに、計算機容量、計算時間、計算誤差など、多くの面でその計算手法としての有効性を顕著に低下させていく。また、領域分割により体系に対しての境界要素法の計算負荷を分散させているにも関わらず、上位層における計算が体系全体に関わってしまうため、この階層領域分割型境界要素法の有効性も大きく低下することになる。

(6.5) 式における \mathbf{A} 行列、すなわちヤコビアン行列 $J^{(n)}$ の要素 $\frac{\partial F^{I_p}}{\partial \varphi^{I_q}}$ は、 I_p と I_q が同一の小領域を囲んでいる場合のみ値を持ち、その他の場合はゼロになる。従って、体系が多くの小領域に分割されるほど、 \mathbf{A} 行列は疎になっていく。このような特徴に着目し、その後この連立一次代数方程式解法に反復解法が導入され、上位層の計算負荷も分散されることになった^[11]。以下にその方法について述べる。

上位層計算には 2 つの反復法が用いられている。 $\delta\tilde{k}$ をニュートン法を用いて決定し、その反復

の内側で $\delta\tilde{\varphi}^I$ を決定するためにブロックヤコビ法を用いる、という複合手法である。

$\delta\tilde{k}$ を求めるためのニュートン法が m 回目の繰り返しであるとする。そのときの $\delta\tilde{k}$ の値は $\delta\tilde{k}^{(m)}$ として与えられる。(6.5) 式に含まれている、内部境界面 I_p における中性子流の連続条件 F^{I_p} についての関係式をそれぞれ分離すると、(6.5) 式は次のように書ける。

$$J_{\varphi_p}^{I_p} \delta\tilde{\varphi}^{I_p} + \sum_{\substack{q=1 \\ q \neq p}}^P J_{\varphi_q}^{I_p} \delta\tilde{\varphi}^{I_q} = F^{I_p} - J_k^{I_p} \delta\tilde{k}^{(m)} \quad (p=1, 2, \dots, P) \quad (6.14)$$

ここで、 $J_{\varphi_q}^{I_p} = \left(\frac{\partial F^{I_p}}{\partial \varphi_q} \right)$ 、 $J_k^{I_p} = \left(\frac{\partial F^{I_p}}{\partial k} \right)$ である。ブロックヤコビ法では、各内部境界面 I_p での $\delta\tilde{\varphi}^{I_p}$ の値は前回の繰り返し計算の結果を用いて反復的に修正される。例えば、 $(l+1)$ 回目の繰り返しにおける修正値の計算は l 回目の結果を用いて、

$$\delta\tilde{\varphi}^{I_p(m, l+1)} = J_{\varphi_p}^{I_p}{}^{-1} \left(- \sum_{\substack{q=1 \\ q \neq p}}^P J_{\varphi_q}^{I_p} \delta\tilde{\varphi}^{I_q(m, l)} + F^{I_p} - J_k^{I_p} \delta\tilde{k}^{(m)} \right) \quad (6.15)$$

$$\delta\tilde{\varphi}^{I_p(m, l+1)} = \omega_b \delta\tilde{\varphi}^{I_p(m, l+1)} + (1-\omega_b) \delta\tilde{\varphi}^{I_p(m, l)} \quad (p=1, 2, \dots, P) \quad (6.16)$$

となる。 ω_b は緩和係数を示す。この手続きは $\delta\tilde{\varphi}^I$ に関する収束条件が満たされるまで繰り返される。

(6.15) 式から分かるように、ある特定の内部境界上の $\delta\tilde{\varphi}^{I_p}$ の計算は、他の境界面については前回の繰り返し計算の結果を用いるため、全ての内部境界面において独立に行うことができる。これは階層領域分割型境界要素法の上位層にも並列演算処理が可能であることを示している。また、 $J_{\varphi_q}^{I_p}$ は I_q と I_p が特定の関係の場合のみ値を持つため、計算に必要な $\delta\tilde{\varphi}^{I_q}$ の値は全内部境界面のごく一部（二次元問題では当該面を囲む6面）にしか過ぎない。このことは、全面の境界条件の修正をガウス消去法などによって一括して行う従来の手法では一面の修正計算に全面の情報が必要であったことに対して、関係する面のみ情報でよいことから計算負荷を大きく低減でき、逐次計算における計算時間の短縮化の要因の一つとなっている。

なお、(6.15) 式右辺に用いられる $\delta\tilde{\varphi}^{I_q(m, l)}$ の一部の値として、すでに $(l+1)$ 回目の繰り返しで求まっている値 $\delta\tilde{\varphi}^{I_q(m, l+1)}$ を用いることが、逐次計算処理では可能である。これはいわゆるブロックガウスザイデル法であり、収束が加速されて効率的である。

ブロックヤコビ法の反復が終了したあとは、 $\delta\tilde{k}^{(m)}$ の値が修正される。(6.5) 式から、規格化に関する補助方程式についての部分を抽出する。

$$J_{\varphi}^c \delta\tilde{\varphi}^{I(m, *)} + F^c = g(\delta\tilde{k}^{(m)}) = 0 \quad (6.17)$$

ここで、 $\delta\tilde{\varphi}^{I(m, *)}$ はニュートン法 m 回目の繰り返しでのブロックヤコビ法の収束値である。 $g(\delta\tilde{k}^{(m)})$ の $\tilde{k}^{(m)}$ についての微係数は次式で表される。

$$\frac{dg(\delta\tilde{k}^{(m)})}{d\delta\tilde{k}^{(m)}} = \frac{\left(J_{\varphi}^c \delta\tilde{\varphi}^{I(m, *)} + F^c \right) - \left(J_{\varphi}^c \delta\tilde{\varphi}^{I(m-1, *)} + F^c \right)}{\delta\tilde{k}^{(m)} - \delta\tilde{k}^{(m-1)}} \quad (6.18)$$

これより、ニュートン法によって $\delta\tilde{k}^{(m)}$ の値が次のように修正される。

$$\delta\tilde{k}^{(m+1)} = \delta\tilde{k}^{(m)} - \omega_c \frac{\delta\tilde{k}^{(m)} - \delta\tilde{k}^{(m-1)}}{\mathbf{J}_\varphi^c \delta\tilde{\varphi}^{I(m,*)} - \mathbf{J}_\varphi^c \delta\tilde{\varphi}^{I(m-1,*)}} \left\{ \mathbf{J}_\varphi^c \delta\tilde{\varphi}^{I(m,*)} + F^c \right\} \quad (6.19)$$

ここで、 ω_c は加速（緩和）係数である。

第7章 オブジェクト指向言語C++を用いたコードの開発

7.1 ABEMIE コードの開発

階層領域分割型境界要素法によって二次元中性子拡散方程式を解くコード ABEMIE (A Boundary Element Method code with Improved Efficiency) を、オブジェクト指向言語 C++を用いて開発した。

C++では、データメンバとメソッドで構成される「クラス」という概念が用いられ、プログラミングの際にはその定義が重要となる。ABEMIE コードで定義した主なクラスは以下の通りである。

- groupdata1d クラス
- groupdata2d クラス
- vector クラス
- plane クラス
- region クラス
- core クラス
- makesample クラス
- medium クラス

クラス図を図 7.1.1 に示す。

groupdata1d(2d) クラスは一次元 (二次元) 配列のデータを示すクラスであり、群定数や中性子束などがこのクラスのインスタンスとして定義される。クラス同士もしくは定数との加減乗除は、C++の演算子オーバーロード機能を用いて以下のように記述される。例えばマトリクス **A** と **B** の積 **C** は、

$$C=A*B$$

と簡潔に記述できる。また、行列方程式 $Ax = b$ の解 x を求める場合の記述は、

```
groupdata1d x(5),b(5);
groupdata2d A(5,5);
x=A.solve_axb(b);
```

となる。

vector クラスはベクトルを示すクラスであり、加減は演算子オーバーロード機能で記述される。
plane クラスは二次元平面上の線分を示すクラスである。線分上の φ 、 φ' の展開次数は各インスタンスでそれぞれ決められる。ABEMIE コードは任意の plane クラス、すなわち線分で構成される体系を解くことが可能である。

region クラスはいくつかの線分により囲まれた領域を示すクラスであり、下位層計算を行う。
G、H、 φ から φ' などを計算するメソッド cal_matrix での処理を以下に示す。

```
for(int i=0;i<group;i++){ //エネルギー群に関する反復
    *ginv=gmat2->inverse(); //G-1 を計算
    *res=*ginv>(*hmat2**fl2); //φ' を計算
    put_rcur(i,*res); //φ' を plane クラスのインスタンスに代入
    dfdf[i]=*ginv**hmat2; //dφ'/dφ を計算
    *res=*ginv*(dhmat[i]*get_rfc(i,"flx")-dgmata[i]*get_rfc(i,"cur"));
    //dF/dk を計算
    put_rfdf(i,*res,"dfdk"); //dF/dk を plane クラスのインスタンスに代入
};
```

core クラスはいくつかの領域により構成された炉心を示すクラスであり、上位層計算を行う。
上位層の反復計算を行うメソッド cal_df_p での処理を以下に示す。

```
for(int it=0;it<itnew;it++){ //ニュートン法の反復
    for(int i=0;i<numib;i++){ //内部境界面の反復
        dp[i]=jselfi[i]*(ff[i]-jk[i]*dk); //δφ の初期値を計算
    };
    for(int it2=0;it2<itjcb;it2++){ //ブロックヤコビ法の反復
        for(int i=0;i<numib;i++){
            groupdata1d *temp=new groupdata1d(get_pnt(i)*imax);
            temp->set_zero();
            for(int j=0;j<numib;j++){
                index=jinfo[i*numib+j];
                if(index!=0){
                    *temp=*temp-jotheri[index-1]*dp[j];
                };
            };
        };
    };
};
```

```

        *temp=*temp+ff[i]-jk[i]*dk;
        dp[i]=jselfi[i]**temp;
        delete temp;
    };
};
if(it==0)psum=0;
psum0=psum;
psum=0;
for(int i=0;i<numib;i++){
    psum+=dp[i].get_sum();
};
dk00=dk0;
dk0=dk;
dk=dk0-(dk0-dk00)/(-psum+psum0)*(-psum-f.get_dat(numibp*imax));
if(it==0)dk=0.01;
};

```

medium クラスは媒質を示すクラスであり、核定数に関わる計算のメソッドを持つ。

makesample クラスは実際の問題のデータを与えるクラスである。medium クラスのインスタンスを返すメソッド、region クラスのインスタンスを返すメソッドを持つ。作成可能な region クラスのインスタンスは、長方形、直角三角形、正八角形がある。付け加えたい形状、媒質データがある場合には、このクラスに新たなメソッドを加える。

ABEMIE コードにはインプットファイルは存在せず、メインプログラムを解析したい体系に応じて書き換える。体系を記述する例として、正方形の裸の原子炉を4領域に分割した体系を解析する場合のメインプログラムの一部を以下に示す。

```

imax=2; //エネルギー群数の指定
core test(imax); //core クラスのインスタンスを生成
makesample ms(imax); // makesample クラスのインスタンスを生成
test.add_reg(ms.square(0,0,50,50,1,1));
    //(x,y)=(0,0) に一辺 50cm の正方形を設置し、test のデータメンバとして定義
test.add_reg(ms.square(50,0,50,50,1,1));
test.add_reg(ms.square(0,50,50,50,1,1));
test.add_reg(ms.square(50,50,50,50,1,1));

```


また、反復計算はメインプログラムで以下のように記述される。

```
float keffold,keff,erff,errk;
for(int iter=0;iter<100;iter++){
    test.cal_lower_layer(iter); //下位層の計算
    test.cal_upper_layer(); //上位層の計算
    if(iter!=0)keffold=keff;
    keff=test.get_keff(); //上位層で計算された次の反復での k を取得
    erff=test.cal_real_flg(); //φ から φ を計算、φ の収束誤差を取得
    errk=fabs((keff-keffold)/keffold); //k の収束誤差を計算
    if(errk<1e-5&&erff<1e-4)break; //収束判定
}
```

ABEMIE コードにおける計算方法の詳細を以下に示す。

- 取り扱えるエネルギー群数は 2 群までとする。
- 上位層におけるニュートン法とブロックヤコビ法を用いた反復計算では、収束を得る必要がないことがこれまでの研究により明らかとなっている。従って、上位層反復計算において収束判定部分を削除して計算効率の向上を図った。ニュートン法の繰り返し回数は 3、ブロックヤコビ法の繰り返し回数は 15 と固定した。
- 境界要素上の変数の最大展開次数は 3 とした。
- 非適合要素の位置は、一次要素では $\xi = -0.8, +0.8$ 、二次要素では $\xi = -0.8, 0, +0.8$ 、三次要素では $\xi = -0.8, -0.3, +0.3, +0.8$ と固定した。
- 初期値として、モードフラックスには平坦分布を、実効増倍率には 1.0 を与える。
- 外側のニュートン法における収束条件は次式の相対誤差によって評価する。

$$\epsilon_k = \frac{|k^{(n+1)} - k^{(n)}|}{k^{(n+1)}}, \quad \epsilon_f = \max_{g,l} \left| \frac{\phi_{g,l}^{I(n+1)} - \phi_{g,l}^{I(n)}}{\phi_{g,l}^{I(n+1)}} \right| \quad (7.1)$$

ここで、肩添字 n は繰り返し回数を示す。なお、これまでの HDD-BEM では中性子束の収束条件をモードフラックスが最大値をとる位置での相対誤差で評価していた。この条件では中性子束が完全に収束しないうちに反復計算が打ち切られており、中性子束の計算精度が悪化していたことが分かった。(7.1) 式により収束判定を行うことで、中性子束の計算精度は以前の HDD-BEM に基づく計算コードよりも向上したが、収束までの反復回数が増加した。

7.2 テスト計算

ABEMIE コードの妥当性を検証するため、2次元 IAEA ベンチマーク問題^[19]に適用した。IAEA ベンチマーク問題の炉心形状を図 7.2.1 に示す。この炉心は x 軸、 y 軸及び $y = x$ 直線、 $y = -x$ 直線に対して対称形状をもつため、その 1/8 炉心のみを計算すれば全炉心の中性子拡散方程式を解くことができる。炉心は幾つかの均質領域から構成されており、各領域の群定数は表 7.2.1 に与えられる。今回の解析では図 7.2 に示されるように反射体領域は一領域、それ以外は矩形もしくは三角形の小領域に領域分割を行い、全 29 領域で解析を行った。実効増倍率の参照解は外挿有限差分法による解、平均領域出力の参照解はノード展開法で得られた解とした^[19]。

このベンチマーク問題では境界条件に真空境界条件（外挿境界条件）が使われているが、HDD-BEM は (3.7) 式にあるようにモード展開によって中性子束、中性子流を決定しているため、少々扱いが煩雑となる。真空境界条件は、

$$\frac{\partial \phi_g}{\partial x} = -\frac{0.4692}{D_g} \phi_g \quad (7.2)$$

と表されるが、これをモード展開で表示すると、

$$\sum_{j=1}^G C_{gj} \phi_j' = -\frac{0.4692}{D_g} \sum_{j=1}^G C_{gj} \phi_j \quad (7.3)$$

となる。従ってあるモード j に関する境界積分方程式に、別のモード j' の $\phi_{j'}$ 、 $\phi_{j'}'$ が表れることになり、境界積分方程式がモード間で結合することになってしまう。そこで、あるモード j に関する境界積分方程式に現れる別のモード j' の $\phi_{j'}$ 、 $\phi_{j'}'$ は、前回の繰り返しでの結果を引用することとする。これによって、境界積分方程式の各モードの独立性は保たれる。

各小領域の各辺に 1 境界要素（反射体領域では 20cm もしくは 10cm あたりに 1 境界要素）を設置し、境界要素上の変数の展開次数をパラメータとして計算を行った。収束条件は $\epsilon_k < 10^{-5}$ 、 $\epsilon_f < 10^{-4}$ とした。表 7.2.2 に、収束までに要した（外側ニュートン法の）反復回数、計算時間、

表 7.2.1 IAEA ベンチマークの群定数

領域 種	群 (g)	D_g (cm)	$\Sigma_{a,g}$ (cm^{-1})	$\Sigma_{s,g \rightarrow g'}$ (cm^{-1})	$\nu_g \Sigma_{f,g}$ (cm^{-1})	χ_g
1	1	1.5	0.01012	0.02	0.000	1.0
	2	0.4	0.08003	0.00	0.135	0.0
2	1	1.5	0.01012	0.02	0.000	1.0
	2	0.4	0.08503	0.00	0.135	0.0
3	1	1.5	0.01012	0.02	0.000	1.0
	2	0.4	0.13003	0.00	0.135	0.0
4	1	2.0	0.00016	0.04	0.000	1.0
	2	0.3	0.01002	0.00	0.000	0.0

表 7.2.2 2D-IAEA ベンチマークの計算結果

展開次数	k_{eff}	繰り返し回数	計算時間 (s)	$\epsilon_{\phi,Max.}(\%)$	$\epsilon_{\phi,Mean.}(\%)$
0	1.02813	53	2.10	16.92	5.26
1	1.02840	62	5.34	14.19	3.37
2	1.02962	61	9.48	0.62	0.15
3	1.02964	77	19.89	0.50	0.16
(Reference)	1.02958				

領域平均出力の平均誤差とその最大誤差を示す。展開次数が0もしくは1のケースでは、実効増倍率および領域平均出力ともに精度が悪いが、展開次数を2とすることで計算精度は大きく向上した。また、展開次数を3としたケースは、展開次数を2としたケースと比較して計算精度の向上は見られなかった。

以上より、ABEMIE コードが良好な精度で中性子拡散方程式を解くことができることが示された。

7.3 計算効率の向上

IAEA ベンチマーク問題での収束に要する反復回数は二次要素を用いた場合で61であり、実効増倍率の収束性は良好であったが中性子束の収束が遅かった。開発の歴史が古い有限差分法やノード法においては、多くの研究者が計算効率を向上させてきたが、HDD-BEMではそのような研究は皆無であり、計算効率向上の余地はあると考えられる。これまでのHDD-BEMの開発では、加速法としてSOR法を適用しているが、SOR法では最適な加速因子 ω を求めることが困難であり、 ω の設定によっては加速どころか解が発散してしまう可能性もある。本節ではHDD-BEMの計算効率の向上のためいくつかの手法を提案し、それらをIAEAベンチマーク問題に適用して、その計算効率の向上度合いについて評価する。なお、評価により一般性を持たせる観点から、IAEAベンチマーク問題で制御棒が引き抜かれたモデルも構築し、2つの体系に対して解析を実施した。また、境界要素上の変数の展開次数は2と設定した。

7.3.1 SOR法

SOR法は(6.6)式で示されるように、外側反復計算の実効増倍率およびモードフラックスの更新にSOR法を用いた。 ω をパラメータとして、 ω と収束性の関係性を評価した。計算結果を表7.3.1に示す。計算時間を示す欄の括弧内は、基準計算(加速法を適用しないケース)に対する比を示す。 $\omega = 1.2$ のときにもっとも効果的な加速が行われており、計算時間が約8割程度まで低減した。ところが、 $\omega = 1.3$ のときには加速法を適用しないケースよりも収束性が悪化し、 $\omega = 1.4$ のときには解が発散した。

表 7.3.1 SOR 法を適用した解析結果

解析体系	ω	k_{eff}	繰り返し回数	計算時間 (s)
挿入	1.0	1.02962	61	9.60
	1.1	1.02962	56	8.77(0.91)
	1.2	1.02962	52	8.11(0.84)
	1.3	1.02962	70	10.90(1.14)
	1.4	Div.		
引き抜き	1.0	1.04683	58	8.97
	1.1	1.04683	54	8.37(0.93)
	1.2	1.04683	50	7.80(0.87)
	1.3	1.04683	71	10.92(1.22)
	1.4	Div.		

7.3.2 一定要素を用いた初期値推定法

ABEMIE コードでは初期値として、モードフラックスに対しては平坦分布を、実効増倍率に対しては 1.0 をそれぞれ与えているが、これがより解に近いものであれば収束に要する反復回数を低減できると考えられる。そこで、計算負荷の小さい一定要素を用いた計算により初期値を推定する方法を考えた。初期値推定のための計算での収束条件 ϵ_f をパラメータとして計算を実施した。結果を表 7.3.2 に示す。初期値推定計算の収束条件を厳密にするに従い反復回数が減少する

表 7.3.2 初期値推定法を適用した解析結果

解析体系	ϵ_f	k_{eff}	繰り返し回数	全計算時間 (s)	初期値推定時間 (s)
挿入	(推定なし)	1.02962	61	9.60	
	10^{-1}	1.02962	58	9.38(0.98)	0.15
	10^{-2}	1.02962	52	8.90(0.93)	0.65
	10^{-3}	1.02962	50	9.29(0.97)	1.33
引き抜き	(推定なし)	1.04683	58	8.97	
	10^{-1}	1.04683	55	8.83(0.98)	0.16
	10^{-2}	1.04683	48	8.33(0.93)	0.76
	10^{-3}	1.04683	47	8.86(0.99)	1.40

が、その分、初期値推定計算に時間を要することになる。もっとも効率的な加速が行えたのは初期値推定計算の収束条件が $\epsilon_f < 10^{-2}$ のケースであったが、計算時間の短縮は 1 割弱であり、ほとんど効果はなかった。

7.3.3 展開次数ハイブリッド法

これまでの解析では、体系のすべての境界要素に対して変数の多項式展開次数を同一と設定していたが、中性子束、中性子流の分布がそれほど急峻ではない位置、もしくは体系の特性に対して感度が小さい位置では境界要素の展開次数を小さくとっても計算精度をそれほど低下させないものと考えられる。そこで、炉心外周で外挿境界条件が仮定されている境界要素に対して、線形要素、一定要素として扱うこととした。この方法では解析精度が損なわれる可能性があるため、実効増倍率とともに領域平均出力の誤差も評価した。結果を表 7.3.3 に示す。当該境界要素の展

表 7.3.3 展開次数ハイブリッド法を適用した解析結果

展開次数	k_{eff}	繰り返し回数	計算時間 (s)	$\epsilon_{\phi,Max.}$	$\epsilon_{\phi,Mean.}$
2	1.02962	61	9.60	0.62	0.15
1	1.02962	61	8.57(0.89)	0.62	0.15
0	1.02963	61	7.80(0.81)	0.65	0.19

開次数を 1 としたときには、計算精度を維持しつつ約 1 割の計算時間の短縮が実現した。また、展開次数を 0 としたときには、ごく僅かに計算精度が悪化したものの約 2 割の計算時間が短縮された。

7.3.4 微係数修正法

外側ニュートン法における反復で、微係数が正確に求まり、かつ真値ベクトルに近い位置での拘束条件を示す関数（拘束条件関数と記述）を、真値ベクトルのテーラー展開の 1 次までで良好に評価できるとした場合、真値ベクトルは 1 回の反復で求まる。HDD-BEM では、微係数は解析的に求めることができるが、真値ベクトルに近い位置での拘束条件関数を 1 次近似で評価しているため、収束までに反復を要することになる。そこで、 n 回目の反復での微係数 $\left(\frac{\partial F_i}{\partial \phi_j}\right)^n$ と変数の修正量 $d\phi_j^n$ から計算される拘束条件関数 F_i の変化量 dF_i^n と、実際の n 回目の反復での拘束条件関数の変化量 ΔF_i^n とのずれを $n+1$ 回目の反復で用いられる微係数に反映することを考える。すなわち、

$$\left(\frac{\partial F_i}{\partial \phi_j}\right)_{Mod.}^{n+1} = \left(\frac{\partial F_i}{\partial \phi_j}\right)_{Cal.}^{n+1} \times \frac{\Delta F_i^n}{dF_i^n} \quad (7.4)$$

$$dF_i^n = \sum_j \left(\frac{\partial F_i}{\partial \phi_j}\right)^n \times d\phi_j^n \quad (7.5)$$

により、 $n+1$ 回目の反復で計算された微係数を修正する。

実際の問題への適用にあたって、微係数修正を行う条件は次のようにした。

- 修正因子 $m = \frac{\Delta F_i^n}{dF_i^n}$ が $0.1 < m < 10$

- $\epsilon_f < 1$

計算では、展開次数ハイブリッド法（該当境界要素の展開次数を0と設定）と組み合わせたケースも行った。計算結果を表 7.3.4 に示す。微係数修正法の適用により反復回数が大幅に低減し、計

表 7.3.4 微係数修正法を適用した解析結果

解析体系	微係数修正	k_{eff}	繰り返し回数	計算時間 (s)
挿入	なし	1.02962	61	9.60
	あり	1.02962	39	6.23(0.65)
	あり (+hybrid)	1.02963	37	5.44(0.57)
引き抜き	なし	1.04683	58	8.97
	あり	1.04683	34	5.34(0.60)
	あり (+hybrid)	1.04684	35	4.64(0.52)

算時間が6割程度まで短縮した。また、展開次数ハイブリッド法と組み合わせることによりさらに計算時間が短縮され基準計算のおよそ半分となった。

7.3.5 相互比較とまとめ

これまでの検討結果を表 7.3.5 にまとめる。本検討で提案した微係数修正法と展開次数ハイブリッド法を組み合わせることで、計算時間を5割から6割低減することができた。

表 7.3.5 加速法適用のまとめ

解析体系	加速法	k_{eff}	繰り返し回数	計算時間 (s)
挿入	なし	1.02962	61	9.60
	SOR 法 ($\omega = 1.2$)	1.02962	52	8.11(0.84)
	初期値推定法	1.02962	48	8.90(0.93)
	ハイブリッド法	1.02963	61	7.80(0.81)
	微係数修正法	1.02962	39	6.23(0.65)
	微係数修正法 (+hybrid)	1.02963	37	5.44(0.57)
	引き抜き	なし	1.04683	58
SOR 法 ($\omega = 1.2$)		1.04683	50	7.80(0.87)
初期値推定法		1.04683	48	8.33(0.93)
微係数修正法		1.04683	34	5.34(0.60)
微係数修正法 (+hybrid)		1.04684	35	4.64(0.52)

なお、以上の計算効率向上のための手法をコードに導入するにあたっては、コードをオブジェクト指向言語を用いて記述したことにより効率的に行えたことを付記しておく。

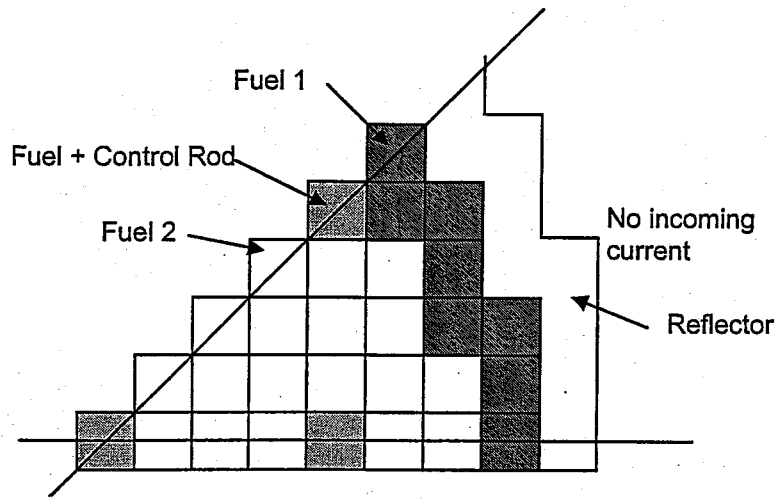


図 7.2.1 IAEA ベンチマーク問題の明細

第8章 結言

二次元中性子拡散方程式を階層領域分割型境界要素法 (HDD-BEM) で解くコード ABEMIE をオブジェクト指向言語 C++ を用いて開発した。ABEMIE コードは二次元平面上で任意の線分から構成される体系の中性子拡散方程式を解くことが可能である。検証のため ABEMIE コードを IAEA ベンチマーク問題に適用し、良好な解が得られることを確認した。

加えて、HDD-BEM の中性子束の収束性を向上させるため、いくつかの手法を提案した。そのうち、境界要素上の変数の多項式展開次数を位置によって決める展開次数ハイブリッド法と、ニュートン法での微係数を前回のくりかえし計算の情報を用いて修正する微係数修正法とを組み合わせることで、計算時間を5割程度短縮した。

今後は本コードを「常陽」の PIE 解析に適用するため、取り扱えるエネルギー群数を増加させる必要がある。

参考文献

- [1] 大木繁夫: "高速実験炉「常陽」を用いたサンプル照射試験による MA 核データの検証 (1)," JNC TN9400 2004-002 (2004).
- [2] Yang, W. S., *et al.*: "Reconstruction of Pin Power and Burnup Characteristics from Nodal Calculations in Hexagonal-Z Geometry," *Nucl. Sci. Eng.*, **111**, 21(1992).
- [3] Mohammad Dhandhang P. and Tsuji, M., *et al.*: "A Hierarchical Domain Decomposition Boundary Element Method Applied to the Multiregion Problems of Neutron Diffusion Equations," *Nucl. Sci. Eng.*, **129**[1], 88 (1998).
- [4] Chiba, G. and Tsuji, M., *et al.*: "Development of the Hierarchical Domain Decomposition Boundary Element Method for Solving the Three-Dimensional Multiregion Neutron Diffusion Equations," *J. Nucl. Sci. Technol.*, **38**[8], 664 (2001).
- [5] 横山賢治、他: "工学系モデリング言語としての次世代解析システムの開発 (III)," JNC TN9400 2004-022(2004).
- [6] Koskinen, H.: "Generalized Potential Theory for Multi-Group Diffusion in General Multi-Region Reactor," *Proc. of The Third Int. Conf. of the Peaceful Uses of Atomic Energy*, Vol.4. 67 (1965).
- [7] Suzuki, T. and Katsuragi, S.: "A Method of Calculation of Detailed Power Distribution in Fuel Assemblies," *J. Nucl. Sci. Technol.*, **13**[7], 348 (1976).
- [8] Itagaki, M.: "Boundary Element Method Applied to Two-Dimensional Neutron Diffusion Problems," *J. Nucl. Sci. Technol.*, **22**[6], 565 (1985).
- [9] Itagaki, M. and Brebbia, C.A.: "Boundary Element Formulation of Fission Source Neutron Source Using Only Boundary Integrals," *Engineering Analysis with Boundary Elements*, **8**[5], 239 (1991).
- [10] Itagaki, M. and Brebbia, C.A.: "Multiple Reciprocity Boundary Element Formulation for One-Group Fission Neutron Source Iteration Problems," *Engineering Analysis with Boundary Elements*, **10**[4], 345 (1992).
- [11] Tsuji, M. and Shirahama, H.: "Parallelization of the Hierarchical Domain Decomposition Boundary Element Method Applied to Multiregion Problem of Neutron Diffusion Equations," *J. Nucl. Sci. Technol.*, **36**[5], 403 (1999).

- [12] Chiba, G. and Tsuji, M., *et al.*: "A Hierarchical Domain Decomposition Boundary Element Method with a Higher Order Polynomial Expansion for Solving 2-D Multiregion Neutron Equations," *Ann. Nucl. Energy*, **28**,895 (2001).
- [13] Maiani, M. and Montagnini, B.: "A Galerkin Approach to the Boundary Element-Response Matrix Method for the Multigroup Neutron Diffusion Equations," *Ann. Nucl. Energy*, **31**,1447 (2004).
- [14] Cavdar, S. and Ozgener, H.A.: "A Finite Element/Boundary Element Hybrid Method for 2-D Neutron Diffusion Calculations," *Ann. Nucl. Energy*, **31**,1555 (2004).
- [15] Gantmacher, F.R.: "The Theory of Matrices," Chelsea Publishing Company, (1960).
- [16] Brebbia, C.A.: "The Boundary Element Method for Engineer," Pence Press, London (1978).
- [17] Stroud, A.H. and Secrest, D.: "Gaussian Quadrature Formulas," Prentice-Hall, New York (1966).
- [18] Abramowitz, M. and Stegun, I.A.: "Handbook of Mathematical Functions," Dover (1965).
- [19] Argonne Code Center: "Benchmark Problem Book," ANL-7416, Suppl.2, Argonne National Laboratory (1977).

付録A ヤコビアン行列の計算

以下の説明では、図 6.1 のような体系を考える。そして、内部境界 I_p についての微係数について説明していく。内部境界 I_p は分割小領域 r_p^- と r_p^+ の両方に属することになるが、 φ の仮定値が与えられる内部境界は I_p^- 、中性子束の I_p 上の連続条件を用いて I_p^- 上の値から自動的に φ が決定されるのが I_p^+ であることを予め確認しておく。

A.1 $\left(\frac{\partial F^{I_p}}{\partial \varphi^{I_q}}\right)$ の計算手法

$\left(\frac{\partial F^{I_p}}{\partial \varphi^{I_q}}\right)$ は (6.9) 式で定義されるヤコビアン行列の部分行列である。この行列の要素 $\left(\frac{\partial F_{g,l}^{I_p}}{\partial \varphi_{j,l'}^{I_q}}\right)$ は、(6.3) 式の微分から次のように表すことができる。

$$\left(\frac{\partial F_{g,l}^{I_p}}{\partial \varphi_{j,l'}^{I_q}}\right) = D_g^{r_p^-} \sum_{j'=1}^G C_{gj'}^{r_p^-} \left(\frac{\partial \varphi_{j',l}^{I_p^-}}{\partial \varphi_{j,l'}^{I_q}}\right) + D_g^{r_p^+} \sum_{j'=1}^G C_{gj'}^{r_p^+} \left(\frac{\partial \varphi_{j',l}^{I_p^+}}{\partial \varphi_{j,l'}^{I_q}}\right) \quad (\text{A.1})$$

$(g=1, \dots, G, \quad j=1, \dots, G, \quad l=1, \dots, L_p, \quad l'=1, \dots, L_q)$

ここで、右辺第 1 項における偏微分の項 $\left(\frac{\partial \varphi_{j',l}^{I_p^-}}{\partial \varphi_{j,l'}^{I_q}}\right)$ は次の場合のときのみ値を持つ。

(1) I_p^- と I_q^- が同じ領域 r に属している場合

領域 r における行列方程式 (5.7) 式を $\varphi_{j,l'}^{I_q}$ に対して微分すると次式を得る (領域 r における総節点数は K とする)。

$$\sum_{k=1}^K G_{j',k'}^r \left(\frac{\partial \varphi_{j',k}^{I_q^r}}{\partial \varphi_{j,l'}^{I_q}}\right) = \sum_{k=1}^K H_{j',k'}^r \left(\frac{\partial \varphi_{j',k}^{I_q^r}}{\partial \varphi_{j,l'}^{I_q}}\right) \quad (\text{A.2})$$

$(g=1, \dots, G, \quad j=1, \dots, G, \quad k'=1, \dots, K, \quad l'=1, \dots, L_q)$

上式の右辺の微係数の項は、 $j=j'$ 、 $k=l'$ の時のみ値 1 をもつので、

$$\sum_{k=1}^K G_{j',k'}^r \left(\frac{\partial \varphi_{j',k}^{I_q^r}}{\partial \varphi_{j,l'}^{I_q}}\right) = \begin{cases} H_{j',k'}^r & (j=j') \\ 0 & (j \neq j') \end{cases} \quad (\text{A.3})$$

$(g=1, \dots, G, \quad j=1, \dots, G, \quad k'=1, \dots, K, \quad l'=1, \dots, L_q)$

となる。この方程式について、 G_j^r は正則であることから、 $j \neq j'$ に対する $\left(\frac{\partial \varphi_{j',k}^{I_q^r}}{\partial \varphi_{j,l'}^{I_q}}\right)$ の微係数は

ゼロでなければならない。また $j=j'$ の場合には、 $\left(\frac{\partial \varphi_{j',k}^{I_q^r}}{\partial \varphi_{j,l'}^{I_q}}\right)$ の微係数を次の行列方程式から計算

できる。

$$G_j^r \begin{pmatrix} \frac{\partial \varphi_j^{r'}}{\partial \varphi_j^{I_q^-}} \end{pmatrix} = H_j^{I_q^-} \quad (\text{A.4})$$

ここで、 $H_j^{I_q^-} = \left(H_{j,k'l}^{I_q^-} \right)_{K,L_q}$ は、内部境界 I_q^- に関する要素のみを含む H_j^r の部分行列であり、次元は $(K \times L_q)$ とする。

(2) I_p^- と I_q^+ が同じ領域 r に属している場合

$\begin{pmatrix} \frac{\partial \varphi_{j,l}^{I_p^-}}{\partial \varphi_{j,l'}^{I_q^+}} \end{pmatrix}$ を次のように変形する。

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial \varphi_{j,l}^{I_p^-}}{\partial \varphi_{j,l'}^{I_q^+}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \varphi_{j,l'}^{I_q^+}}{\partial \varphi_{j,l'}^{I_q^+}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial \varphi_{j,l}^{I_p^-}}{\partial \varphi_{j,l'}^{I_q^+}} \end{pmatrix} \quad (\text{A.5})$$

$$(g=1, \dots, G, \quad j=1, \dots, G, \quad l=1, \dots, L_p, \quad l'=1, \dots, L_q)$$

上式における $\begin{pmatrix} \frac{\partial \varphi_{j,l}^{I_p^-}}{\partial \varphi_{j,l'}^{I_q^+}} \end{pmatrix}$ については(1)と同様の処理により値を求めることができる。また $\begin{pmatrix} \frac{\partial \varphi_{j,l'}^{I_q^+}}{\partial \varphi_{j,l'}^{I_q^+}} \end{pmatrix}$ については、次のようにして値を求めることができる。

内部境界 I_q における中性子束の連続条件の式(6.1)を行列形式に表現すると、

$$C^{r_q^-} \varphi_l^{I_q^-} = C^{r_q^+} \varphi_l^{I_q^+} \quad (l=1, 2, \dots, L_q) \quad (\text{A.6})$$

となる。ここで、 $C^{r_q^-} = \left(C_{g,j}^{r_q^-} \right)_{G,G}$ 、 $C^{r_q^+} = \left(C_{g,j}^{r_q^+} \right)_{G,G}$ 、 $\varphi_l^{I_q^-} = \left(\varphi_{j,l}^{I_q^-} \right)_{G,1}$ 、 $\varphi_l^{I_q^+} = \left(\varphi_{j,l}^{I_q^+} \right)_{G,1}$ である。(A.6)式を変形すると、

$$\varphi_l^{I_q^+} = \left(C^{r_q^+} \right)^{-1} C^{r_q^-} \varphi_l^{I_q^-} = \hat{C}^{I_q} \varphi_l^{I_q^-} \quad (l=1, 2, \dots, L_q) \quad (\text{A.7})$$

となる。ここで、 $\hat{C}^{I_q} = \left(C^{r_q^+} \right)^{-1} C^{r_q^-} = \left(\hat{C}_{jj}^{I_q} \right)_{G,G}$ である。(A.7)式の両辺を $\varphi_{j,l}^{I_q^-}$ で微分すると、

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial \varphi_{j,l}^{I_q^+}}{\partial \varphi_{j,l}^{I_q^-}} \end{pmatrix} = \hat{C}_{jj}^{I_q} \quad (j=1, 2, \dots, G, \quad l=1, 2, \dots, L_q) \quad (\text{A.8})$$

となり、 $l \rightarrow l'$ とすれば $\begin{pmatrix} \frac{\partial \varphi_{j,l'}^{I_q^+}}{\partial \varphi_{j,l}^{I_q^-}} \end{pmatrix}$ の値が求まる。

(3) I_p^+ と I_q^- が同じ領域 r に属している場合

(4) I_p^- と I_q^+ が同じ領域 r に属している場合

これらの場合は、式を変形して(1)および(2)と同様の処理を施せばよい。

右辺第2項の $\begin{pmatrix} \frac{\partial \varphi_{j,l}^{I_p^+}}{\partial \varphi_{j,l'}^{I_q^+}} \end{pmatrix}$ についても同様にして値を得ることができる。

A.2 $\left(\frac{\partial F^{I_p}}{\partial k}\right)$ の計算手法

$\left(\frac{\partial F^{I_p}}{\partial k}\right)$ は (6.11) 式で定義される縦ベクトルである。このベクトルの要素 $\left(\frac{\partial F_{g,l}^{I_p}}{\partial k}\right)$ は、(6.3) 式の中性子増倍率 k に関する微分から次のように求めることができる。

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_{g,l}^{I_p}}{\partial k} = & \left\{ D_g^{r_p^-} \sum_{j=1}^G \left(\frac{\partial C_{gj}^{r_p^-}}{\partial k} \right) \varphi_{j,l}^{I_p^-} + D_g^{r_p^-} \sum_{j=1}^G C_{gj}^{r_p^-} \left(\frac{\partial \varphi_{j,l}^{I_p^-}}{\partial k} \right) \right\} \\ & + \left\{ D_g^{r_p^+} \sum_{j=1}^G \left(\frac{\partial C_{gj}^{r_p^+}}{\partial k} \right) \varphi_{j,l}^{I_p^+} + D_g^{r_p^+} \sum_{j=1}^G C_{gj}^{r_p^+} \left(\frac{\partial \varphi_{j,l}^{I_p^+}}{\partial k} \right) \right\} \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

($g=1, 2, \dots, G, l=1, 2, \dots, L_p$)

(A.9) 式右辺第 1 項目の $\left(\frac{\partial C_{gj}^{r_p^-}}{\partial k}\right)$ は解析的に求めることができるが、その計算は代数的に複雑な計算を必要とするので、本手法では次の数値微分で求められている。

$$\frac{\partial C_{gj}^{r_p^-}}{\partial k} \approx \frac{C_{gj}^{r_p^-}(k + \Delta k) - C_{gj}^{r_p^-}(k)}{\Delta k} \quad (g=1, 2, \dots, G, j=1, 2, \dots, G) \quad (\text{A.10})$$

次は、(A.9) 式の右辺第 2 項目の $\left(\frac{\partial \varphi_{j,l}^{I_p^-}}{\partial k}\right)$ の計算手法を説明する。 $\left(\frac{\partial \varphi_{j,l}^{I_p^-}}{\partial k}\right)$ の微係数は、(5.7) 式の中性子増倍率 k に対する微分から次のように表すことができる。

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^K G_{j,k'}^{r_p^-} \left(\frac{\partial \varphi_{j,k}^{I_p^-}}{\partial k} \right) &= \sum_{k=1}^K \left(\frac{\partial H_{j,k',k}^{r_p^-}}{\partial k} \right) \varphi_{j,k}^{r_p^-} - \sum_{k=1}^K \left(\frac{\partial G_{j,k',k}^{r_p^-}}{\partial k} \right) \varphi_{j,k}^{r_p^-} \\ &= \sum_{k=1}^K \bar{H}_{j,k',k}^{r_p^-} \varphi_{j,k}^{r_p^-} - \sum_{k=1}^K \bar{G}_{j,k',k}^{r_p^-} \varphi_{j,k}^{r_p^-} \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

なお、異なる媒質が接する内部境界面では、 k に \mathbf{C} が依存するため、内部境界面のうち片面のモードフラックスは k に依存することになるが、ここではそれを無視している。 $\bar{H}_{j,k',k}^{r_p^-}$ 及び $\bar{G}_{j,k',k}^{r_p^-}$ は、 $H_{j,k',k}^{r_p^-}$ 、 $G_{j,k',k}^{r_p^-}$ を求めるプロセスにおいて、グリーン関数 $\varphi_j^{*r_p^-}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_{k'})$ をその k に対する微分 $\frac{\partial \varphi_j^{*r_p^-}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_{k'})}{\partial k}$ で置き換えた方法で求めることができる。以下に $\frac{\partial \varphi_j^{*r_p^-}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_{k'})}{\partial k}$ の具体的な関数形を示す。

$$B^2 = -\chi^2 < 0 :$$

$$\frac{\partial \varphi^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i)}{\partial k} = -\frac{1}{2\pi} \left(\frac{\partial \chi}{\partial k} \right) |\mathbf{r} - \mathbf{r}_i| K_1(\chi|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|) \quad (\text{A.12})$$

$$\frac{\partial \varphi^{*l}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i)}{\partial k} = \frac{1}{2\pi} (\text{dist}) \chi \left(\frac{\partial \chi}{\partial k} \right) K_0(\chi|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|) \quad (\text{A.13})$$

$B^2 > 0$:

$$\frac{\partial \varphi^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i)}{\partial k} = \frac{i}{4} \left(\frac{\partial B}{\partial k} \right) |\mathbf{r} - \mathbf{r}_i| H_1^{(2)}(B|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|) \quad (\text{A.14})$$

$$\frac{\partial \varphi^{*'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i)}{\partial k} = \frac{i}{4} B(\text{dist}) \left(\frac{\partial B}{\partial k} \right) H_0^{(2)}(B|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|) \quad (\text{A.15})$$

なお、 $\left(\frac{\partial B}{\partial k} \right)$ 、 $\left(\frac{\partial \chi}{\partial k} \right)$ は解析的にも求まるが簡単のため数値微分で求めている。

(A.11) 式を行列形式で表すと次のようになる。

$$\mathbf{G}_j^{r\bar{p}} \left(\frac{\partial \varphi_j^{r\bar{p}}}{\partial k} \right) = \bar{\mathbf{H}}_j^{r\bar{p}} \varphi_j^{r\bar{p}} - \bar{\mathbf{G}}_j^{r\bar{p}} \varphi_j^{r\bar{p}} \quad (\text{A.16})$$

ここで、 $\mathbf{G}_j^{r\bar{p}} = (G_{j,k'k}^{r\bar{p}})_{K,K}$ 、 $\bar{\mathbf{H}}_j^{r\bar{p}} = (\bar{H}_{j,k'k}^{r\bar{p}})_{K,K}$ 、また $\bar{\mathbf{G}}_j^{r\bar{p}} = (\bar{G}_{j,k'k}^{r\bar{p}})_{K,K}$ である。従って、 $\left(\frac{\partial \varphi_j^{r\bar{p}}}{\partial k} \right)$ は (A.16) 式の解から与えることができる。

A.3 $\left(\frac{\partial F^c}{\partial \varphi^{I_q}} \right)$ の計算手法

$(G \times L_q)$ 次元を持った横ベクトル $\left(\frac{\partial F^c}{\partial \varphi^{I_q}} \right)$ は (6.4) 式より、すべての q において値 -1 をとる。