

多群中性子拡散方程式の時間領域境界要素法

Time-Domain Boundary Element Method for Multi-Group Neutron Diffusion Equation

山口潤*・福井卓雄**

Jun YAMAGUCHI and Takuo FUKUI

*学生会員 工修 福井大学大学院 工学研究科 (〒 910-8507 福井県福井市文京 3-9-1)

**正会員 工博 福井大学大学院教授 工学研究科 (〒 910-8507 福井県福井市文京 3-9-1)

This paper is concerned with the formulation of the time-domain operational quadrature boundary element method (TOQBEM) for the multi-group neutron diffusion problems. An simple form of the Laplace transform of the fundamental solutions of the system of diffusion equations, that plays the main role in TOQBEM analysis, is derived here. The derivation method is based on Hörmander's method, and the fundamental solution is expressed by the eigenvalues and the eigenvectors of the coefficient matrix of the Laplace transformed diffusion equations. Some numerical examples show the validity and the applicability of the present method.

Key Words : operational quadrature boundary element method, multi-group neutron diffusion problems, fundamental solution

1. はじめに

本論文は、多群中性子拡散問題を演算子積分時間領域境界要素法で解析する場合の要点である、Laplace 変換域における多群中性子拡散問題の基本解を導くための一般的な方法を提案するものである。本論文で提案する方法によれば、群の数に関係なく基本解を実際に計算することが可能であると同時に得られる基本解はきわめて見通しの良い表現となっており、この表現をもとにした新しい計算法の開発も可能である。

著者らは、多群中性子拡散問題の高精度解析を目的として、演算子積分時間領域境界要素法の開発を進めてきた^{1),2)}。この解析方法は、Lubich により提案された演算子積分法³⁾を用いて、対象となる微分方程式の Laplace 変換域における基本解だけを用いて時間領域における問題の境界要素解析を行おうとする方法であって、数値計算の安定性が良いこと、Laplace 変換域における基本解だけを用いるので、時間領域の基本解が閉じたかたちで得られない場合にも境界要素法の定式化が可能なのが特徴である。

本論文では、多群中性子拡散問題の Laplace 変換域における基本解の具体的な導出法を提案する。これまでの研究²⁾では、Laplace 変換した多群中性子拡散方程式について、Hörmander の方法⁴⁾を直接に適用し、微分作用素の Fourier 変換について、解析的にその逆行列を計算して基本解を求めていた。しかしながら、この場合でも、群の数が 5 以上の場合には、現れる固有方程式の根は数値的に求めなければならず、すべてを

解析的に表現できるわけではない。また、群の数が増加すると、逆行列を計算する作業は数式処理ソフトを使っても困難を極め、實際上、10 群をこえる群拡散問題への適用は不可能であった。

一方、この研究を進める過程で、基本解が、方程式の係数行列の固有値から導かれる波数により決定される単一の Helmholtz 型方程式の基本解の線形結合として表現できることが明らかとなり、係数行列の固有値問題との関連について予想を得ていた。また、線形結合を構成するために、逆行列の部分分数分解という方法を用いていたが、この部分分数分解がきわめて規則的に実行可能なことから、基本解の構成における単純な形式化という予想も得ていた。本論文で提案する基本解の導出法はこのような背景から生まれたもので、微分方程式の解の場を固有波数 (固有値に対応する波数) を持つ基底場に分解し、固有ベクトルをもちいて再構成するという手続きを行う。基本解は群数がどのように大きいても数値計算を行って構成可能である。また、得られる基本解は極めて単純な形式を持ち、数値解析上のさまざまな展開が可能であると考えられる。

本論文においては、第 2 節で中性子拡散問題について概説し、第 3 節で群中性子拡散問題の時間領域境界要素法の定式化を示す。第 4 節においては、固有値 (波数) に対応する (左右) 固有ベクトルを利用して基本解を表現する方法について述べる。第 5 節において、数値解析例を挙げ、従来の境界要素法による解析結果と比較して、本手法の妥当性を確認し、実際のパラメー

タを用いて一様中性子源をもつ正方形領域での数値解析を行う。

2. 多群中性子拡散問題

中性子の挙動は輸送方程式で表されるが、輸送方程式は中性子の運動方向に依存しており、これを正確に解くことは一般に極めて難しい。そこで、輸送方程式を全方向について積分し、拡散に対する近似を導入した拡散方程式を用いて中性子の挙動を追跡することとする。また、中性子の挙動はそれぞれの中性子が持つエネルギー（運動エネルギーと考えて良い）に依存するので、全中性子をエネルギー群に分けてその挙動を追跡する多群中性子拡散問題を扱う。

N 群中性子拡散方程式について考える。 i 群の中性子束を ϕ_i とするとき、 i 群の群拡散方程式は

$$(\delta_{ij}\nabla^2 - A_{ij} + B_{ij})\phi_j + s_i = C_{ij}\frac{\partial\phi_j}{\partial t} \quad (1)$$

のように表わされる^{6),7)}。ここに、 ϕ_i は群中性子束であり、群 $i = 1, \dots, N$ は中性子のエネルギーの大きい方から順に番号付けされている。以下では、添字については総和規約を適用するものとする。すなわち、繰り返される添字については $1, \dots, N$ の和を取る。 s_i は中性子源の i 群への寄与分である。定数 A_{ij} 、 B_{ij} 、 C_{ij} の物理的な意味は、次の通りである。 A_{ij} は、群から i の中性子の減少を表す対角行列であり、 i 群の巨視的吸収断面積 Σ_{ai} 、 i 群から j 群への巨視的群遷移散乱断面積 $\Sigma_{i \rightarrow j}$ および群拡散係数 D_i により与えられる。 B_{ij} は群間の相互作用に関する係数で、巨視的群遷移散乱断面積 $\Sigma_{j \rightarrow i}$ 、 i 群の群平均巨視的核分裂断面積 Σ_f^i 、 i 群にエネルギーを持って発生する核分裂中性子の平均個数 χ_i および群拡散係数 D_i により与えられる。 C_{ij} は、群中性子の拡散を表す対角行列であり、群拡散係数 D_i および i 群の中性子の速度 v_i で与えられる²⁾。

初期条件および境界条件は

$$\phi_i(\mathbf{x}, 0) = \phi_i^0(\mathbf{x}) \quad \mathbf{x} \in B \quad (2)$$

$$\phi_i(\mathbf{x}, t) = \hat{\phi}_i(\mathbf{x}, t) \quad \mathbf{x} \in \partial B_1 \quad (3)$$

$$\frac{\partial\phi_i}{\partial n}(\mathbf{x}, t) = \hat{J}_i(\mathbf{x}, t) \quad \mathbf{x} \in \partial B_2 \quad (4)$$

と書くことができる。ここに、 B および ∂B は与えられた領域およびその境界であり、 ϕ_i^0 は領域で与えられた初期の群中性子束、 $\hat{\phi}_i$ および $\hat{J}_i$ はそれぞれ境界上で与えられた群中性子束および群中性子流密度である。実際には、群中性子束、群中性子流密度をエネルギーレベルごとに決定することは困難であり、吸収壁において $\phi_i(\mathbf{x}, t) = 0$ 、反射壁において $\partial\phi_i/\partial n = 0$ をすべてのエネルギー群について与える。

3. 時間領域境界要素法

3.1 境界積分方程式

N 元連立偏微分方程式 (1) の初期値境界値問題の解 ϕ_i は、もし、方程式 (1) の基本解 $G_{ij}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t)$ の存在を仮定することができれば、一般化 Green 公式

$$\begin{aligned} C(\mathbf{x})\phi_i(\mathbf{x}, t) &= \int_B G_{ij}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \cdot) * s_j(\mathbf{y}, t) dV_y \\ &+ C_{jk} \int_B G_{ij}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t) \phi_k(\mathbf{y}, 0) dV_y \\ &+ \int_{\partial B} G_{ij}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \cdot) * \frac{\partial\phi_j(\mathbf{y}, t)}{\partial n} dS_y \\ &- \int_{\partial B} S_{ij}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \cdot) * \phi_j(\mathbf{y}, t) dS_y \end{aligned} \quad (5)$$

により表すことができる。ここに、 $f * g(t)$ は時間に関する繰り込み積である。上式では、いくぶん変則的な記法ではあるが、繰り込み積が時刻 t の関数であることを明示するような表記法をとっている。 $C(\mathbf{x})$ は自由項であり、 $\mathbf{x}$ が領域内部にあるとき 1、滑らかな境界上にあるとき $1/2$ 、境界外部にあるとき 0 の値をとる。また、体積素分および面積素分の添字 y は点 $\mathbf{y}$ についての積分であることを示す。

$S_{ij}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t)$ は二重層核であり、基本解 G_{ij} より

$$S_{ij}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t) = \frac{\partial G_{ij}(\mathbf{y}, \mathbf{x}, t)}{\partial n_y} \quad (6)$$

で与えられる。

(5) において、右辺第 1 項は中性子源による項、第 2 項は初期値による項、第 3 項は境界値 $\partial\phi_i/\partial n$ による項、第 4 項は境界値 ϕ_i による項である。(5) は点 $\mathbf{x}$ が境界上にあるとき、未知の境界値に関する境界積分方程式である。

3.2 演算子積分法による時間域の離散化

境界積分方程式 (5) は、基本解 G_{ij} が閉じた形で与えられれば、適切な離散化により近似的に解くことができる。しかしながら、方程式 (1) の基本解を閉じた形で得ることは一般には困難である。そこで、基本解決定の問題と時間域における積分方程式 (5) の離散近似とを同時に解決する手段として、Lubich による演算子積分法³⁾を積分方程式 (5) に適用する。

Lubich の方法に基づいて方程式 (5) の時間に関する繰り込み積を離散化すると、

$$\begin{aligned} C(\mathbf{x})\phi_i(\mathbf{x}, n\Delta t) &= \sum_{k=0}^{n-1} \int_B G_{ij}^\omega(\mathbf{x}, \mathbf{y}, (n-k)\Delta t) s_j(\mathbf{y}, k\Delta t) dV_y \\ &+ C_{jk} \int_B G_{ij}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, n\Delta t) \phi_k(\mathbf{y}, 0) dV_y \\ &+ \sum_{k=1}^n \int_{\partial B} G_{ij}^\omega(\mathbf{x}, \mathbf{y}, (n-k)\Delta t) \frac{\partial\phi_j(\mathbf{y}, k\Delta t)}{\partial n} dS_y \end{aligned}$$

$$-\sum_{k=1}^n \int_{\partial B} S_{ij}^\omega(\mathbf{x}, \mathbf{y}, (n-k)\Delta t) \phi_j(\mathbf{y}, k\Delta t) dS_y \quad (7)$$

となる。この式において、 $\phi_i(\mathbf{y}, n\Delta t)$ および $\partial\phi_i/\partial n(\mathbf{y}, n\Delta t)$ に関する項を左辺に移項すれば、左辺は通常の境界積分項、右辺は、初期値、中性子源による影響および境界値による遅延ポテンシャル項となる。とくに、中性子源による項が $k = 0, \dots, n-1$ の和になっていることに注意されたい。

(7) の $G_{ij}^\omega(\mathbf{x}, \mathbf{y}, m\Delta t)$ および $S_{ij}^\omega(\mathbf{x}, \mathbf{y}, m\Delta t)$ を Lubich の演算子積分法の重みとして表現すると、

$$G_{ij}^\omega(\mathbf{x}, \mathbf{y}, m\Delta t) = \frac{\rho^{-m}}{L} \sum_{l=0}^{L-1} \hat{G}_{ij}\left(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \frac{\delta(\zeta_l)}{\Delta t}\right) e^{-2\pi i(ml/L)} \quad (8)$$

$$S_{ij}^\omega(\mathbf{x}, \mathbf{y}, m\Delta t) = \frac{\rho^{-m}}{L} \sum_{l=0}^{L-1} \hat{S}_{ij}\left(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \frac{\delta(\zeta_l)}{\Delta t}\right) e^{-2\pi i(ml/L)} \quad (9)$$

となる。ここに、 $\hat{G}_{ij}$ および $\hat{S}_{ij}$ は基本解および二重層核の Laplace 変換である。変換パラメータは $p = \delta(\zeta_l)/\Delta t$ であるが、 $\delta(\zeta_l) = \sum_{j=0}^{\infty} \delta_j \zeta^j$ は離散表現を誘導するとき用いた線形多段階法における生成多項式の商であり、2次の前進差分の場合には $\delta(\zeta) = (1 - \zeta) + (1 - \zeta)^2/2$ である。複素数 ζ_l は半径 $\rho < 1$ の円周上の点で、 $\zeta_l = \rho e^{2\pi i(l/L)}$ である。 ρ は要求される精度により決定される。Lubich は、繰り込み積の誤差を $O(\epsilon)$ とするとき、展開項数 L に対して、 $\rho^L = \sqrt{\epsilon}$ とすることを提案している。

(7) においては初期値項だけに基本解の直接積分が現れる。これを近似する方法として、基本解を

$$G_{ij}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, n\Delta t) = \frac{1}{\Delta t} G_{ij}^\omega(\mathbf{x}, \mathbf{y}, n\Delta t) \quad (10)$$

により置きかえることにすれば、基本解の Laplace 変換 $\hat{G}_{ij}$ を用いることによって、境界積分方程式 (5) を時間域において離散化することができる。しかしながら、この近似では、初期値を Δt だけ維持する中性子源として評価していることになる。

3.3 時間領域境界要素法

境界および領域を要素に分割し、境界関数および領域関数について近似を導入すると境界要素法を構成することができる。

離散化後の境界積分方程式 (5) は

$$\begin{aligned} C(\mathbf{x})\phi_i(\mathbf{x}, n\Delta t) &\simeq \sum_J \sum_{k=1}^n \bar{A}_{ij,J}^{n-k}(\mathbf{x}) s_{j,J}(k\Delta t) \\ &+ \frac{C_{jk}}{\Delta t} \sum_J \bar{A}_{ij,J}^n(\mathbf{x}) \phi_{k,J}(0) \\ &+ \sum_J \sum_{k=1}^n A_{ij,J}^{n-k}(\mathbf{x}) J_{j,J}(k\Delta t) \end{aligned}$$

$$-\sum_J \sum_{k=1}^n B_{ij,J}^{n-k}(\mathbf{x}) \phi_{j,J}(k\Delta t) \quad (11)$$

となる。ここに、 M, M_B はそれぞれ、境界の要素分割数および領域内の要素分割数である。ここで、一定要素を用い、境界要素および領域関数についての近似関数を

$$\beta_i = \begin{cases} 1 & \mathbf{x} \in E_i \\ 0 & \text{other} \end{cases}, \quad \bar{\beta}_i(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1 & \mathbf{x} \in \bar{E}_i \\ 0 & \text{other} \end{cases} \quad (12)$$

とする。ここに、 $E_i, \bar{E}_i$ はそれぞれ、 i 番目の境界要素および領域要素である。このとき、影響関数 $A_{ij,J}^m(\mathbf{x})$ 、 $B_{ij,J}^m(\mathbf{x})$ および $\bar{A}_{ij,J}^m(\mathbf{x})$ は

$$A_{ij,J}^m(\mathbf{x}) = \frac{\rho^{-m}}{L} \sum_{l=0}^{L-1} \left[\int_{E_J} \hat{G}_{ij}\left(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \frac{\delta(\zeta_l)}{\Delta t}\right) dS_y \right] e^{-2\pi i(ml/L)}$$

$$B_{ij,J}^m(\mathbf{x}) = \frac{\rho^{-m}}{L} \sum_{l=0}^{L-1} \left[\int_{E_J} \hat{S}_{ij}\left(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \frac{\delta(\zeta_l)}{\Delta t}\right) dS_y \right] e^{-2\pi i(ml/L)}$$

$$\bar{A}_{ij,J}^m(\mathbf{x}) = \frac{\rho^{-m}}{L} \sum_{l=0}^{L-1} \left[\int_{\bar{E}_J} \hat{G}_{ij}\left(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \frac{\delta(\zeta_l)}{\Delta t}\right) dV_y \right] e^{-2\pi i(ml/L)}$$

となる。

4. 多群拡散方程式の基本解

境界積分方程式 (5) は、基本解 G_{ij} を求めなくても、演算子積分法を適用することにより、基本解の Laplace 変換 $\hat{G}_{ij}$ を求めることができれば、適切に離散化して近似的に解くことができる。

基本解の Laplace 変換は群拡散方程式 (1) の Laplace 変換の基本解として決定できる。これは、Hörmander の方法⁴⁾により解決できる問題であり、文献²⁾ではこれを直接に適用して少数群の拡散方程式の基本解を求めた。しかしながら、直接的な方法では数式処理ソフトを用いたとしても一般的な群拡散方程式の基本解を求めることは困難である。ここでは、基本解を求める一般的な方法を提案する。

4.1 Laplace 像空間における群拡散方程式

群拡散方程式 (1) の基本解の Laplace 変換を求めるために、群拡散方程式の Laplace 変換

$$\begin{aligned} L_{ij} \hat{\phi}_j &= [\delta_{ij} \nabla^2 - (A_{ij} + pC_{ij}) + B_{ij}] \hat{\phi}_j \\ &= (\delta_{ij} \nabla^2 - \bar{A}_{ij} + B_{ij}) \hat{\phi}_j = 0 \end{aligned} \quad (13)$$

について考える。ここに、 p は Laplace 変換のパラメータである。基本解を求めるのには微分作用素だけを考えればよいので、中性子源の項は省略している。係数行列 $\bar{A}_{ij} = A_{ij} + pC_{ij}$ は対角行列であるが、Laplace 変換パラメータ p を含んでいるため複素行列となる。

4.2 Laplace 像空間における基本解

(1) 基本解誘導の方針

(13) から明らかなように、対象とする微分作用素の特徴は、対角項にだけ Laplace 作用素を含み、非対角項は微分作用素を含まず定数であることである。この結果として、文献²⁾で示したように、基本解は異なる波数をもつ Helmholtz 型方程式の基本解の線形結合となる。また、これらの波数は係数行列の固有方程式の根から得られる。したがって、残る課題は線形結合の係数を決定することである。

基本解誘導の方針は、まず、連立微分方程式に対して、係数行列の固有値問題を解き固有波数を決定する。つぎに、固有ベクトルから形成される変換行列を用いて、基本解を固有基本解の線形結合として表現する方法を求める。ここで扱う係数行列は非対称複素行列であるので、左右の固有ベクトルが存在するが、それらと基本解の表現との関係についても明らかにする。

以下で述べる基本解の誘導は本質的には Hörmander の方法の適用である。ここでは、微分作用素の特殊性を考慮して、係数行列の固有ベクトル空間における基本解をまず求め、それを元の空間に戻すという手順をふんでいる。

(2) 基本解の誘導

時間項を含まない方程式 (13) の基本解は

$$L_{ij} \hat{G}_{jk}(\mathbf{x}) = -\delta_{ik} \delta(\mathbf{x}) \quad (14)$$

の解として与えられる。

空間座標に関する Fourier 変換

$$\tilde{\phi}(\boldsymbol{\xi}) = \int_{-\infty}^{\infty} \phi(\mathbf{x}) e^{i\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{x}} d\mathbf{x} \quad (15)$$

を (14) に適用すれば、

$$\begin{aligned} \tilde{L}_{ij} \tilde{G}_{jk}(\boldsymbol{\xi}) &= \left(-\delta_{ij} \xi_k \xi_k - \tilde{A}_{ij} + B_{ij} \right) \tilde{G}_{jk}(\boldsymbol{\xi}) \\ &= -\delta_{ik} \end{aligned} \quad (16)$$

となる。以下の誘導に便利のように、この式を次のように表現する。

$$(M_{ij} - \delta_{ij} \lambda) \tilde{G}_{jk} = -\delta_{ik} \quad (17)$$

ここで、係数行列を $M_{ij} = -\tilde{A}_{ij} + B_{ij}$ で、Fourier 変換パラメータを $\lambda = \xi_k \xi_k$ で置きかえた。これを行列表現すると

$$(\mathbf{M} - \lambda \mathbf{I}) \tilde{\mathbf{G}} = -\mathbf{I} \quad (18)$$

となる。

行列 $\mathbf{M}$ の固有方程式は

$$|\mathbf{M} - \lambda \mathbf{I}| = 0 \quad (19)$$

である。この方程式は、代数学の基本定理により、 N 個の根 (固有値) $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N$ を持つ。それぞれの固有値に対して、同次方程式

$$\mathbf{M} \mathbf{p}_i = \lambda_i \mathbf{p}_i, \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (20)$$

$$\mathbf{q}_i^H \mathbf{M} = \lambda_i \mathbf{q}_i^H, \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (21)$$

により、右固有ベクトル $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_N$ および左固有ベクトル $\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \dots, \mathbf{q}_N$ を得ることができる。ここで、 $\mathbf{q}_i^H$ は $\mathbf{q}_i$ の共役転置を示す。固有ベクトルは方向だけが決まる不定ベクトルであるが、これを正規化しておけば、後の計算に都合が良い。ここで、これらの固有ベクトルを列ベクトルとする行列 $\mathbf{P} = \{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_N\}$ および $\mathbf{Q} = \{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \dots, \mathbf{q}_N\}$ を導入すると、同次方程式 (20)、(21) を

$$\mathbf{M} \mathbf{P} = \mathbf{P} \text{diag}(\lambda_*) \quad (22)$$

$$\mathbf{Q}^H \mathbf{M} = \text{diag}(\lambda_*) \mathbf{Q}^H \quad (23)$$

と書くことができる。ここに、 $\text{diag}(\lambda_*)$ は固有値を成分とする対角行列

$$\text{diag}(\lambda_*) = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_N \end{pmatrix} \quad (24)$$

を表す。(22)、(23) を変形すれば

$$\mathbf{P}^{-1} \mathbf{M} \mathbf{P} = \text{diag}(\lambda_*) \quad (25)$$

$$\mathbf{Q}^H \mathbf{M} \mathbf{Q}^{-H} = \text{diag}(\lambda_*) \quad (26)$$

が得られる。すなわち、行列 $\mathbf{P}$ 、 $\mathbf{Q}^H$ は行列 $\mathbf{M}$ をその固有空間に変換する。ただし、(26) では $(\mathbf{Q}^H)^{-1}$ を簡略化して $\mathbf{Q}^{-H}$ と表した。

変換 $\mathbf{P}$ 、 $\mathbf{Q}$ を (18) に適用すると

$$\begin{aligned} \mathbf{P}^{-1} (\mathbf{M} - \lambda \mathbf{I}) \tilde{\mathbf{G}} \mathbf{P} &= (\mathbf{P}^{-1} \mathbf{M} \mathbf{P} - \lambda \mathbf{I}) \mathbf{P}^{-1} \tilde{\mathbf{G}} \mathbf{P} \\ &= \text{diag}(\lambda_* - \lambda) \mathbf{P}^{-1} \tilde{\mathbf{G}} \mathbf{P} = -\mathbf{I} \end{aligned} \quad (27)$$

あるいは

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}^H (\mathbf{M} - \lambda \mathbf{I}) \tilde{\mathbf{G}} \mathbf{Q}^{-H} &= \text{diag}(\lambda_* - \lambda) \mathbf{Q}^H \tilde{\mathbf{G}} \mathbf{Q}^{-H} = -\mathbf{I} \end{aligned}$$

が得られる。したがって、固有空間における基本解の Fourier 変換は

$$\begin{aligned} \mathbf{P}^{-1} \tilde{\mathbf{G}} \mathbf{P} &= \mathbf{Q}^H \tilde{\mathbf{G}} \mathbf{Q}^{-H} \\ &= -\text{diag} \left(\frac{1}{\lambda_* - \lambda} \right) = -\text{diag} \left(\frac{1}{\kappa_*^2 - \xi_k \xi_k} \right) \end{aligned} \quad (28)$$

となる。ここで、固有波数 κ_i は一般には複素数であり、固有値を用いて $\kappa_i^2 = \lambda_i$ の関係から与えられる。

結局、 $\tilde{\mathbf{G}}$ は

$$\tilde{\mathbf{G}} = -\mathbf{P} \text{diag} \left(\frac{1}{\kappa_*^2 - \xi_k \xi_k} \right) \mathbf{P}^{-1} \quad (29)$$

$$= -\mathbf{Q}^{-H} \text{diag} \left(\frac{1}{\kappa_*^2 - \xi_k \xi_k} \right) \mathbf{Q}^H \quad (30)$$

により決定される。さらに、上式を逆 Fourier 変換することにより、Laplace 変換域での基本解

$$\hat{\mathbf{G}} = \mathbf{P} \text{diag} [g(\kappa_* | \mathbf{x})] \mathbf{P}^{-1} \quad (31)$$

$$\hat{G} = \mathbf{Q}^{-H} \text{diag}[g(\kappa_*|\mathbf{x})] \mathbf{Q}^H \quad (32)$$

を得る。ここに、 $g(\kappa_i|\mathbf{x})$ は Helmholtz 型方程式

$$(\nabla^2 - \kappa_i^2) \phi = 0 \quad (33)$$

の基本解であり、

$$g(\kappa_i|\mathbf{x}) = \frac{1}{2\pi} K_0(\kappa_i|\mathbf{x}) \quad (2 \text{ 次元}) \quad (34)$$

$$g(\kappa_i|\mathbf{x}) = \frac{e^{\kappa_i|\mathbf{x}|}}{4\pi|\mathbf{x}|} \quad (3 \text{ 次元}) \quad (35)$$

となる。

基本解は、 $g(\kappa_i|\mathbf{x}), \dots, g(\kappa_N|\mathbf{x})$ の線形結合となっている。この線形結合の係数は変換行列 $\mathbf{P}$ または $\mathbf{Q}^H$ により決定されるが、どちらの行列を使っても結果は同じである。

(3) 影響関数の表現

時間域で離散化したあとの影響関数 G_{ij}^ω の表現について簡単に確認しておこう。(13) の係数は Laplace 変換パラメータ p に依存するから、上で求めた基本解は同じく p に依存する。 G_{ij}^ω の定義式 (8) においては、 L 個の複素パラメータ ζ_l に対して $p = \delta(\zeta_l)/\Delta t$ であるから、上で述べた固有波数は L 組、すなわち、 $L \times N$ 個必要である。すなわち、(8) は、行列表現の形で

$$\begin{aligned} G^\omega(\mathbf{x}, \mathbf{y}, m\Delta t) \\ = \frac{\rho^{-m}}{L} \sum_{l=0}^{L-1} \mathbf{P}_l \text{diag}(g(\kappa_*^l|\mathbf{x} - \mathbf{y})) \mathbf{P}_l^{-1} \\ \times e^{-2\pi i(ml/L)} \end{aligned} \quad (36)$$

と書くことができる。すなわち、 l に関する和と可換な演算であれば、和の内側で実行できる。たとえば、境界上の積分のような計算は $g(\kappa_*^l|\mathbf{x} - \mathbf{y})$ の計算だけで済むので、 $\hat{G}_{ij}$ を直接に積分するよりもはるかに効率がよくなる。

5. 数値解析例

本手法の妥当性を確認するために数値解析を行った。基本解を求める際には、右固有ベクトルを用いて基本解を構成している。また、2次の前進差分を用いた時間域の離散化を行っている。また、固有値計算には LAPACK⁽⁸⁾ のライブラリを用いた。

5.1 手法の妥当性の確認

まず、基本解が正しく計算されていることを確認するために、文献²⁾の方法による解析結果と比較を行った。

解析対象領域および境界条件を図-1に示す。解析領域は1辺の長さが1の正方形領域とし、 x_2 -軸に対称な問題として、図に示すように境界条件を与えた。ただし、群ごとの境界値を与えることは一般に困難であるので、すべての群において、境界値を0としている。解析は3群拡散問題で行い、中性子源 $s_1 = 1$ を全領域

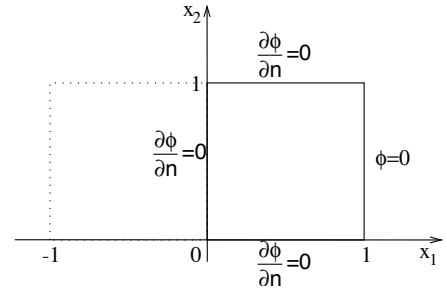


図-1 確認計算のための解析領域

で与えている。初期値はすべての群において $\phi_i = 0$ である。

解析に用いた定数を表-1に示す。境界の各辺は10分

表-1 3群拡散解析の材料定数

	1	2	3
A	3.2	1.3	1.8
B	0.0	1.2	0.8
	1.4	0.0	0.5
	2.2	1.3	0.0
C	1.0	1.5	1.0

割して要素とし、全部で40要素とした。時間増分は単位時間 T に対して、 $\Delta t = T/64$ とした。解析期間は $(0, 4T]$ である。単位時間は、拡散に関する係数 C_i の最小値によって決定している。解析結果を図-2に示す。計算時間は、京都大学学術情報メディアセンターの HX600 を非並列で用いて、163.11 秒であった。

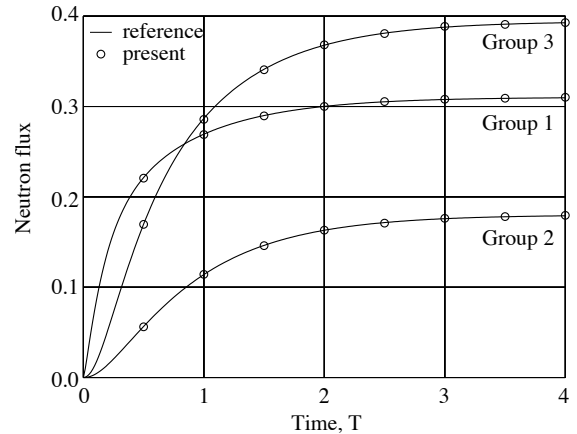


図-2 3群拡散解析における従来の BEM と本手法の解析結果の比較

図中では、文献²⁾の方法による結果を実線、本手法による結果を丸印でプロットして表している。解析結果は両手法で一致しているといえる。解析結果は13桁まで一致しており、本手法の妥当性が確認できた。

5.2 群の数を増やした場合の計算

本研究の目的は、任意のエネルギーレベル数の群拡散方程式の解析法を与えることにある。そこで、前問と同じ条件の問題を、20 群として解析を実行した。ただし、材料定数については、3 群問題とは異なる系統のものを用いている。

解析領域、境界条件は前の解析と同様とし、時間増分は単位時間 T に対して、 $\Delta t = T/64$ とした。解析期間は $(0, 4T]$ である。ここで、前問で述べたように、単位時間については、係数 C_i の最小値により決めているので、前問の単位時間とはことなっていることに注意してほしい。計算時間は、前問と同じ条件で、1488.80 秒であった。

図-3 は、対称軸 (x_2 -軸) 上の中央点における代表群の中性子束の時間変化を示したものである。各群中性子束とも、安定にその時間変化が追跡されており、群の数を増やした場合にも問題なく解析を行うことができることが確認できた。

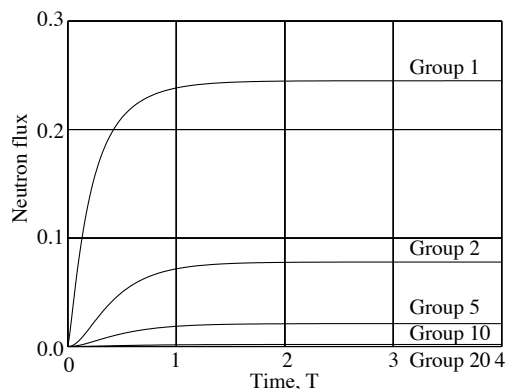


図-3 20 群拡散解析における代表群の中性子束の時間変化

ここで、本手法による計算時間についてコメントしておく。表-2 は、2 群拡散計算を基準として、3 群～7 群の計算時間について、計算ステップ数をパラメータとしてまとめたものである。計算ステップ数が増加す

表-2 本手法による計算時間

分割	2 群	3 群	4 群	5 群	6 群	7 群
32	1.0	1.532	2.034	2.564	3.131	3.699
64	1.0	1.555	2.066	2.617	3.172	3.782
128	1.0	1.552	2.116	2.733	3.332	3.992
256	1.0	1.663	2.230	2.896	3.620	4.464
512	1.0	1.732	2.427	3.326	4.410	5.544

るほど、群数の増加による計算負荷が大きくなっていることがわかる。

5.3 一様中性子源をもつ正方形炉心

中性子拡散解析がもっともよく利用されているのは、原子炉内の中性子の挙動の解析である。実際には、中

性子の輸送解析が多く使われているが、モンテカルロ法などの確率シミュレーション (たとえば、MVP⁹⁾) による場合には、内部の詳細な中性子束分布を計算することは非常に困難であり、また、決定論的な方法 (たとえば、MOC¹¹⁾) にしても、膨大な反復計算を必要とするので炉内の状況の時間変化を詳細に計算することは實際上難しい。したがって、原子炉の全体的な挙動を把握するために中性子拡散解析が用いられる (たとえば、差分法汎用コード CITATION¹⁰⁾)。

ここでは、実炉心の材料定数を用いた、均一の正方形炉心の解析を 7 群問題として行った。理想的にはもっと多くの群に分割するのがよいが、7 群であればあまり大きな誤差を含まずに解析できるので、技術的にも多くの予備計算で用いられているものである。

図-4 に解析領域を示す。一辺が 2m の正方形炉心を仮定している。ここでは、境界条件を、一対の隣り合う 2 辺がすべての群において $\partial\phi/\partial n = 0$ 、他の辺で $\phi = 0$ として、対称軸が x_1, x_2 -軸と一致するような解析領域とし、2m 四方の正方形原子炉の 4 分の 1 の領域を模擬している。

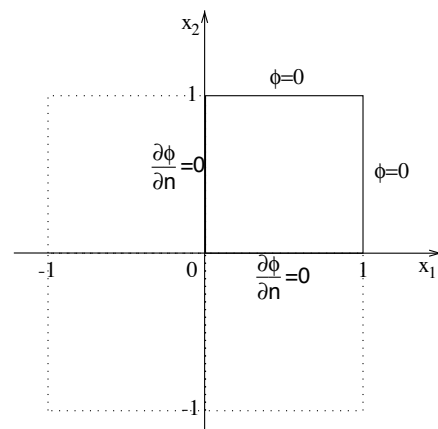


図-4 解析領域 2

中性子源として $s_1 = 1.40 \times 10^6 \text{ n}/(\text{cm}^2 \cdot \text{sec})$ を全領域で与えている。初期値はすべての群において $\phi_i = 0$ である。境界の各辺は 10 分割して要素とし、全部で 40 要素とした。単位時間は、拡散に関する係数 $C_i/10$ の最小値によって決定し、 $T = 2.59448 \times 10^{-10} \text{ sec}$ としている。時間増分 Δt は単位時間 T に対して $\Delta t = T/32$ とした。解析期間は $(0, 32T]$ である。この計算にかかった時間は 1339.01 秒であった。

解析に用いた定数は、高速炉炉心の核定数を用いた。巨視的散乱断面積は表-3 に、拡散係数と巨視的吸収断面積、巨視的核分裂断面積は表-4 に、中性子エネルギーと中性子スペクトルは表-5 に示したものをを用いて計算する。表-3 において、各行は群を、列は、左から 1 つ下の (番号の大きい) 群への遷移、2 つ下の群への遷移を表すように並べている。すなわち、行を i 、列を j と

表-3 7 群拡散解析の散乱断面積 (cm^{-1})

Group	1 ↓	2 ↓	3 ↓	4 ↓	5 ↓	6 ↓	7 ↓
1	0.1258	2.835×10^{-2}	5.742×10^{-3}	7.658×10^{-4}	1.260×10^{-5}	0.0	0.0
2	0.1976	1.858×10^{-2}	4.871×10^{-4}	2.519×10^{-5}	2.123×10^{-7}	0.0	—
3	0.2312	9.478×10^{-3}	8.409×10^{-7}	9.027×10^{-9}	2.883×10^{-11}	—	—
4	0.3165	4.812×10^{-3}	7.249×10^{-7}	1.005×10^{-8}	—	—	—
5	0.5375	5.757×10^{-3}	5.526×10^{-8}	—	—	—	—
6	0.3958	4.113×10^{-4}	—	—	—	—	—
7	0.3825	—	—	—	—	—	—

すると、それぞれの欄は $\Sigma_{i \rightarrow i+j}$ の値を示している。

表-4 7 群拡散解析の断面積

Group	Diffusion coef. (cm)	Absorption coef. (cm^{-1})	Fission coef. (cm^{-1})
1	2.897	4.169×10^{-2}	5.248×10^{-3}
2	2.014	2.293×10^{-2}	2.002×10^{-3}
3	1.520	1.371×10^{-2}	1.618×10^{-3}
4	1.151	1.361×10^{-2}	1.915×10^{-3}
5	0.6816	2.998×10^{-2}	3.928×10^{-3}
6	0.8482	5.170×10^{-2}	9.748×10^{-3}
7	0.7742	1.395×10^{-1}	3.982×10^{-2}

表-5 7 群拡散解析のエネルギー構造

Group	Energy range (eV)		Fission Spectrum
	Upper	Lower	
1	1.0000×10^7	3.6788×10^6	6.051×10^{-1}
2	3.6788×10^6	1.3534×10^6	3.138×10^{-1}
3	1.3534×10^6	8.6517×10^3	7.199×10^{-2}
4	8.6517×10^3	9.1188×10^2	8.763×10^{-3}
5	9.1188×10^2	9.6112×10^2	3.033×10^{-4}
6	9.6112×10^2	1.0130×10^2	0.0
7	1.0130×10^2	1.0000×10^{-5}	0.0

計算結果はすべて対称軸 x_1 -軸上の値で示した。これらは計算によって得られた境界値であり、境界要素法の利用の上でもっとも有用な値であるからである。代表点は要素中点とし、正方形領域中心近くの $A = (0.05, 0)$ および境界近くの $B = (0.95, 0)$ とした。図-5 に、1、3、5 群の中性子束の時間変化を示す。中性子束の増加は1 群中性子束から始まっており、時間経過とともに下群へ拡がっていき、すべての群で定常状態に近づく様子が見てとれる。この解析では、中性子源を1 群においたため、1 群中性子束の値が大きくなっている。1 群から下群へと散乱してエネルギーを下げっていくため、エネルギーの小さな群ほど中性子束の増加が遅くなっている様子がわかる。各エネルギー群によって中性子束の増加の様子に違いがあり、ナノオーダーの非常に短時間の時間変化を表現できている。

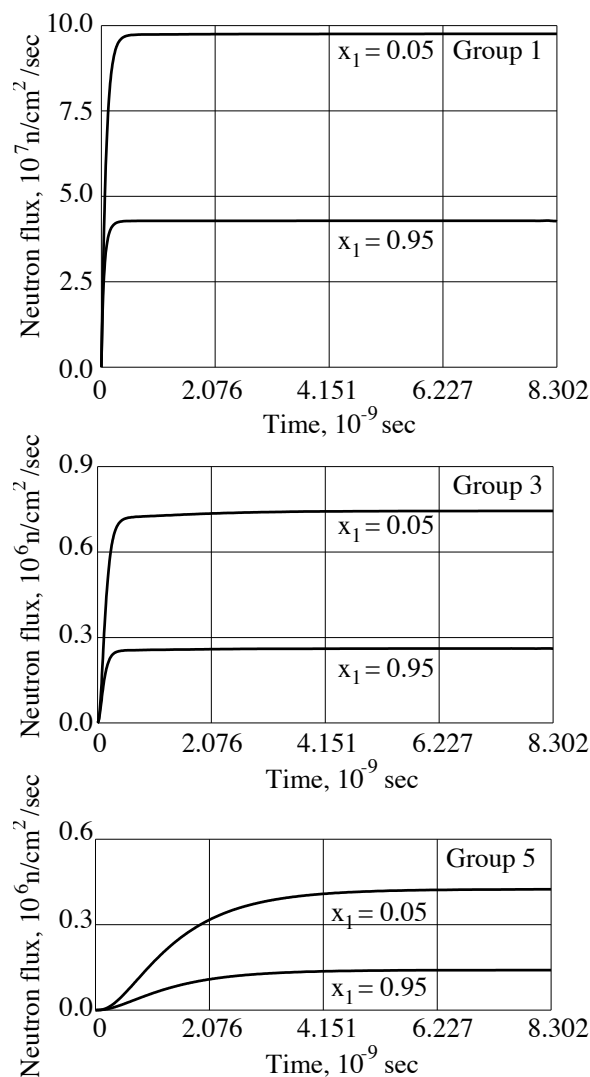


図-5 7 群拡散解析の対称軸上の代表点における1、3、5 群の中性子束の時間変化

図-6 は、1、3、5 群中性子束の与えられた時刻における対称軸上の分布を表す。1 群は極めて早く定常状態に近づくが、5 群では定常状態に近づくのが遅いことがわかる。また、対称軸上の分布は中心から約 70%程度の領域ではほぼ一定であり、境界付近で急激に値が下がっているのがわかる。炉の構成材料の組成によって炉内に均等に中性子がまわるように工夫されている

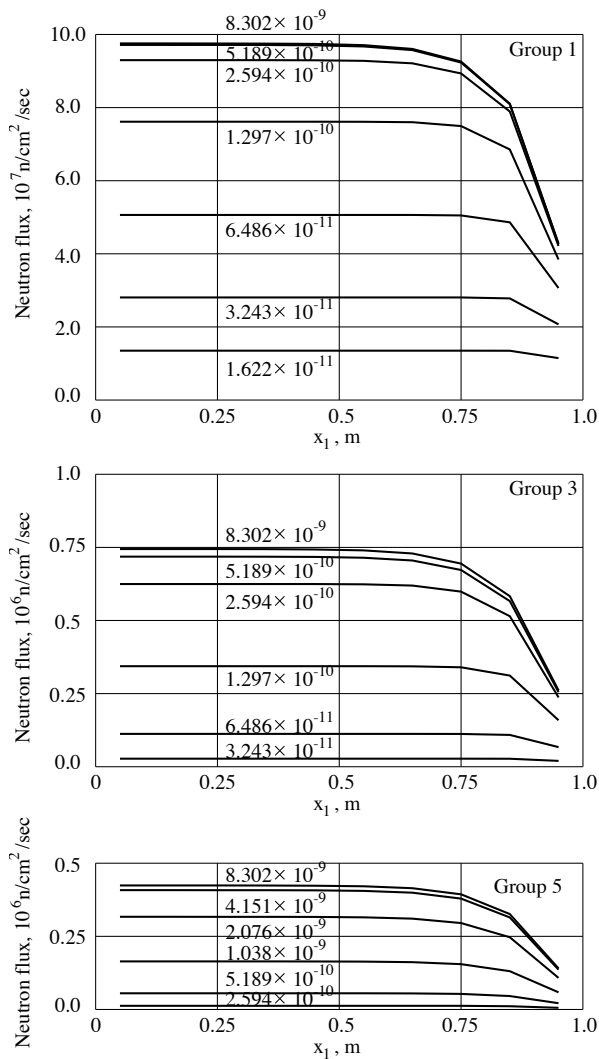


図-6 7 群拡散解析の x_1 -軸上の 1、3、5 群中性子束の指定時刻における分布

ことがよくわかる。

6. おわりに

多群中性子拡散方程式の時間領域境界要素法を演算子積分法を用いて定式化した際に必要となる Laplace 変換域での基本解の具体的な導出法を示した。ここで提案した方法は一般的な方法であり、計算機的能力による制約を受けるほかはどのように細分された群拡散問題にでも適用可能である。

本論文では、まず、演算子積分時間領域境界要素法の定式化について概説し、つぎに、解法の要である Laplace 変換域における基本解の導出法について述べた。導出法は Hörmander の方法を基軸とし、多群拡散方程式の特性に着目して、係数行列の固有値により導かれる固有波数が支配する場が与えられた連立拡散方程式の解の場の基底となっているということを利用して、固有波数の支配場の基本解の線形結合として多群

拡散方程式の基本解を決定した。この形の基本解の特徴は、連立拡散方程式の係数行列の固有値と固有ベクトルだけで記述されており単純で見通しの良い形であることおよび群の数によらずに実際に計算できることである。

本論文では、これまでの研究の成果と比較し、ここで導かれた基本解が Hörmander の方法を直接に用いて得られた基本解と一致することを確認し、いくつかの数値解析例を挙げて本手法の適用性を示した。ここでは、解析できる群の数を増やすことと時間域における解析の精密化に焦点をあてているが、今後は空間域における解析の精密化と数値計算の高速化が必要な課題となるだろう。

今後の課題としては、まず、高速多重極法の導入による解析の高速化である。距離減衰の大きい基本解の特性を生かしたアルゴリズムについて、現在検討中である。

参考文献

- 1) 福井卓雄：演算子積分法による中性子拡散問題の時間領域境界要素法，計算工学講演会論文集，12，pp.861-864，2007.
- 2) 山口潤，福井卓雄：低次群中性子拡散方程式の時間領域境界要素法，応用力学論文集，12，pp.179-186，2009.
- 3) Lubich, C. : Convolution quadrature and discretized operational calculus I and II, *Numer. Math.*, 52, pp. 129-145, pp. 413-425, 1988.
- 4) Hörmander, L. : On the theory of general partial differential operators, *Acta Math.*, 94, pp. 161-248, 1955.
- 5) Bell, G.I. and S. Glasstone : *Nuclear Reactor Theory*, Van Nostrand, 1970.
- 6) Lamarsh, J.R. and A.J. Baratta, *Introduction to Nuclear Engineering*, 3rd ed., Pearson Education Inc., 2001.
- 7) Stacey, W.M., *Nuclear Reactor Physics*, 2nd ed., Wiley-VHC, 2007.
- 8) Anderson, E., Z. Bai, C. Bisschof, J. Demmel, J. Dongarra, Du Croz, A. Greembaum, S. Hammarling, A. Mckenney, S. Ostrouchov, and D. Sorensen *LA-PACK Users' Guide*, Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, 1992.
- 9) 長家康展，奥村啓介，森貴正，中川正幸：MVP/GMVP Version 2 連続エネルギー法及び多群法に基づく汎用中性子・光子輸送計算モンテカルロコード，日本原子力研究開発機構，2006.
- 10) Kosaka, S., E. Saji : Transport theory calculation for a heterogeneous multi-assembly problems by characteristics method with direct neutron path linking technique, *J. Nucl. Sci. Tech.*, 37, pp.1015-1023, 2000.
- 11) Fowler, T. B., D. R. Vondy, G. W. Cunningham : Nuclear reactor core analysis code: CITATION, ORNL-TM-2496, Rev. 2, with Supplements 1, 2, and 3 1971.

(2010 年 3 月 9 日 受付)