

(r, θ) 座標系のための離散座標法の実装¹

2024/2/12 千葉 豪

1 (r, θ) 座標系での輸送方程式の移流項

輸送方程式の移流項は二次元直交座標系で記述すると以下となる。

$$\vec{\Omega} \cdot \nabla \psi(r, \theta, \vec{\Omega}) = (\Omega_x, \Omega_y) \cdot \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y} \right) \psi(r, \theta, \vec{\Omega}) \quad (1)$$

これを (r, θ) 座標系に変換することを考える。

Fig. 1 が示すように、 $\vec{\Omega}$ と r 方向がなす角を w とし、 $\vec{\Omega}$ の r 方向成分を μ 、 r 方向と直交する成分を η とすると以下が成り立つ。

$$\mu = \cos w, \quad (2)$$

$$\eta = \sin w \quad (3)$$

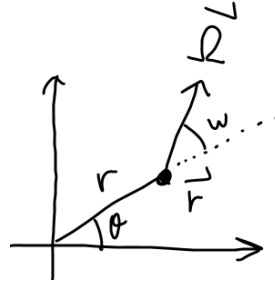


Fig. 1: Coordinate system of (r, θ) and (x, y)

また、 Ω_x 、 Ω_y はそれぞれ以下のように書ける。

$$\Omega_x = \cos(\theta + w) = \cos \theta \cos w - \sin \theta \sin w = \mu \cos \theta - \eta \sin \theta, \quad (4)$$

$$\Omega_y = \sin(\theta + w) = \cos \theta \sin w + \sin \theta \cos w = \eta \cos \theta + \mu \sin \theta \quad (5)$$

r の x に対する偏微分は $r = (x^2 + y^2)^{1/2}$ より以下のように書ける。

$$\frac{\partial r}{\partial x} = \frac{1}{2} (x^2 + y^2)^{-1/2} \cdot 2x = x/r \quad (6)$$

同様にして以下が得られる。

$$\frac{\partial r}{\partial y} = y/r \quad (7)$$

また、 θ の x に対する偏微分は $\tan \theta = y/x$ の両辺を x で微分して以下のように得られる。

$$\frac{1}{\cos^2 \theta} \frac{\partial \theta}{\partial x} = -\frac{y}{x^2}, \quad (8)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial x} = -\frac{y}{r^2} \quad (9)$$

¹ /Document/Study/Activation_JSPS/R-THETA/Implementation。詳細はノートの 2023/9/10、9/15 にもあり。

同様にして以下が得られる。

$$\frac{\partial \theta}{\partial y} = \frac{x}{r^2} \quad (10)$$

さらに、 x 、 y の変動に対して $\theta + w$ が一定であることから、以下が得られる。

$$\frac{\partial \theta}{\partial x} = -\frac{\partial w}{\partial x}, \quad (11)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial y} = -\frac{\partial w}{\partial y} \quad (12)$$

Fig. 2 に示すように、 x が微小に変動した場合、 r 、 θ に加えて w も変動することから、偏微分 $\frac{\partial}{\partial x}$ は以下のように書ける。

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial w} \frac{\partial w}{\partial x} = \frac{x}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{y}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{y}{r^2} \frac{\partial}{\partial w} \quad (13)$$

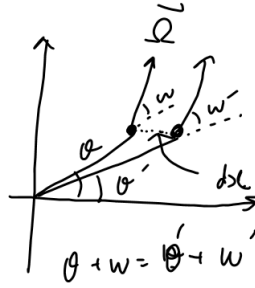


Fig. 2: Coordinate system of (r, θ) and (x, y) (2)

同様にして以下が得られる。

$$\frac{\partial}{\partial y} = \frac{y}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{x}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{x}{r^2} \frac{\partial}{\partial w} \quad (14)$$

以上より、以下が得られる。

$$\begin{aligned} & (\Omega_x, \Omega_y) \cdot \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y} \right) \\ &= (\mu \cos \theta - \eta \sin \theta, \eta \cos \theta + \mu \sin \theta) \cdot \left(\frac{x}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{y}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{y}{r^2} \frac{\partial}{\partial w}, \frac{y}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{x}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{x}{r^2} \frac{\partial}{\partial w} \right) \end{aligned} \quad (15)$$

$x/r = \cos \theta$ 、 $y/r = \sin \theta$ 等を用いることで、この式は以下のように簡略化される。

$$\mu \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\eta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\eta}{r} \frac{\partial}{\partial w} \quad (16)$$

一方、移流項は (r, θ) 座標系では以下のように記述されることが分かっている。

$$\frac{\mu}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r\psi) + \frac{\eta}{r} \frac{\partial \psi}{\partial \theta} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial w} (\eta\psi) \quad (17)$$

これを展開すると以下が得られる。

$$\frac{\mu}{r} \psi + \mu \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{\eta}{r} \frac{\partial \psi}{\partial \theta} - \frac{1}{r} \frac{\partial \eta}{\partial w} \psi - \frac{\eta}{r} \frac{\partial \psi}{\partial w} \quad (18)$$

これに対して、 $\eta = \sin w$ より、 $\frac{\partial \eta}{\partial w} = \cos w = \mu$ なので、 $\vec{\Omega} \cdot \nabla$ が式 (16) に一致することが分かる。

2 実装

輸送方程式の移流項 $\vec{\Omega}_m \cdot \nabla \psi_m$ は、 (r, z) 座標系と (r, θ) 座標系ではそれぞれ以下のように記述される。

$$\frac{\mu_m}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \psi_m) + \xi_m \frac{\partial \psi_m}{\partial z} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial w} (\eta_m \psi_m), \quad (19)$$

$$\frac{\mu_m}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \psi_m) + \frac{\eta_m}{r} \frac{\partial \psi_m}{\partial \theta} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial w} (\eta_m \psi_m) \quad (20)$$

第二項に差異があるが、これら第二項それぞれを空間メッシュで積分すると、以下のように同一の形式のものが得られる。

$$\xi_m B (\bar{\psi}_m(z_+) - \bar{\psi}_m(z_-)), \quad (21)$$

$$\eta_m B (\bar{\psi}_m(\theta_+) - \bar{\psi}_m(\theta_-)) \quad (22)$$

ここで、 B は空間メッシュにおける z もしくは θ 方向の表面積を、 $\bar{\psi}_m$ はその表面におけるメッシュ平均角度中性子束を示す。 $\bar{\psi}_m(z_-)$ は z 方向について負側、 $\bar{\psi}_m(z_+)$ は z 方向について正側の表面であることを示す。

上で示したように、角度と空間について離散化した後の式は、 (r, z) 座標系と (r, θ) 座標系で同一の形式となり、異なるのは (r, z) 座標系での ξ_m が (r, θ) 座標系で η_m になる点のみである。従って、離散角度 $\vec{\Omega}_m$ として、 (r, z) 座標系で (μ_m, η_m, ξ_m) として定義されているものを、 (r, θ) 座標系では便宜的に (μ_m, ξ_m, η_m) と定義されているものと見做すことで、 (r, z) 座標系用のソルバーをほぼそのまま流用できるものと当初は考えた。ところが後述する計算結果が示すように、参照解となるモンテカルロコードの結果に対して有意な差異が観察されたことから、改めて定式化を見直したところ、以下のことが分かった。

- 円筒座標系では、移流項の第3項に現れる角度 $\vec{\Omega}$ についての r 方向に対する方位角 w に関する微分項を扱うため、 $\vec{\Omega}$ について ξ の値が同一となる離散角度群に対して starting direction method を用いる。
- そのため、 (r, z) 座標系で (μ_m, η_m, ξ_m) として定義されているものを、 (r, θ) 座標系で (μ_m, ξ_m, η_m) と見做した場合には、 η_m が同一となる離散角度群に対して starting direction method が適用されてしまうことになり、この扱いは理論的に明らかに不適切である。

以上を受けて、改めて実装を行った。方針は以下の通りとした。

- (r, θ) 座標系を対象としたときの離散角度点が並ぶ順序は、 (μ, ξ) について (r, z) 座標系の場合と同一となるようにした。ただし、 (r, θ) 座標系では z 方向は無限と見做し ξ については対称性が利用できることから、正側のみ考慮するものとした。
- (r, θ) 座標系を対象としたときには η の値を ξ として保持させることとした。 (r, z) で $\xi < 0$ となる点では $\eta < 0$ となる点を、 $\xi > 0$ となる点では $\eta > 0$ となる点を保持させた。
- (r, θ) 座標系を対象としたときには、 ξ の値が陽には定義されず、 μ と η から計算する必要があるため、starting direction method での μ に関する計算を行う際に注意が必要となる。

以上の方針に基づくと、離散角度点を定義する際に η の値を ξ の配列に代入することと、starting direction method での μ の計算のみに変更が必要となる（いずれも SNRZ_system、SNRZ_quadrature に実装済みである）。この考え方を S4 セットに適用した場合の例を Fig. 3 に示す。なお、球面調和関数 $R_{lm}(\vec{\Omega})$ の定義においては、座標軸を (μ, η, ξ) ではなく (μ, ξ, η) と見做すことにより、 (r, z) 体系を対象とした場合と同様の扱いのままとした（具体的に述べると、SNRZ_quadrature.cxx における CalValue メソッドには変更を加えなかった）。

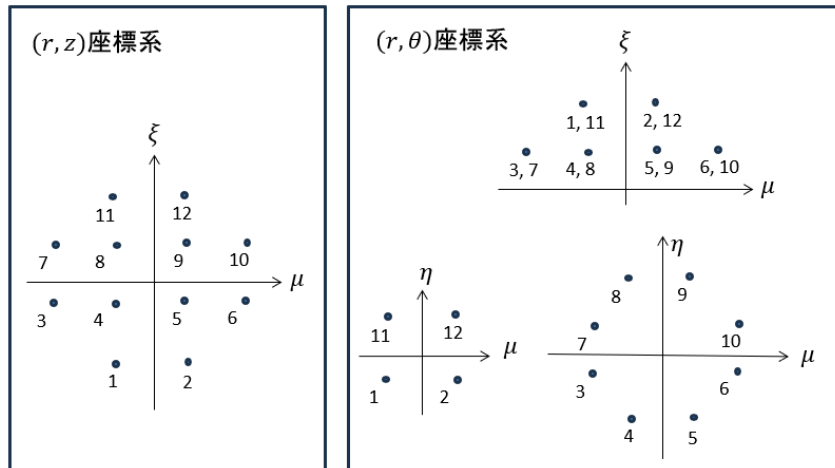


Fig. 3: Concept of the actual implementation for (r, θ) geometry treatment

3 検証計算

3.1 Fletcher ベンチマーク

Fletcher のベンチマーク問題を (r, θ) 座標系用に変更したものを対象として行った²。半径 4.0 cm の無限円筒を考え、単一の媒質で構成されているものとする。媒質の吸収断面積は 1.0 /cm、散乱断面積は 0.0 から 5.0 /cm で可変とした。中心に単位強度の外部源があり、第 1、3 象限では中心から 1.6 cm まで、それ以外では 0.8 cm まで存在するものとした。半径方向について中心から 3.8 から 4.0 cm、方位角については各象限を 1/9 に等分割したときの中心分割領域における平均中性子束に着目した。

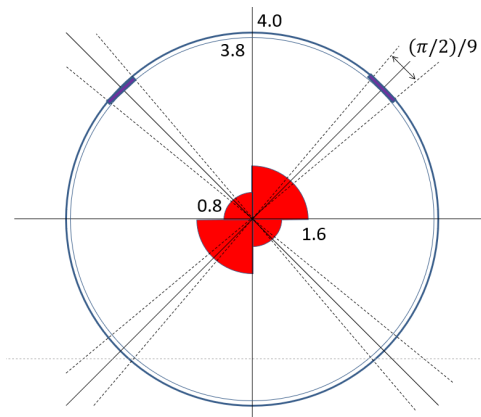


Fig. 4: Benchmark problem specification

計算では径方向を 100 メッシュ、方位角方向を π に対して 54 メッシュに分割し、S20 の Level symmetric セットを用いた。計算結果をまとめたものを Table 1 に示す。表中の「改訂前」が当初の実装に基づく結果、「改訂後」が実装の見直しを行った後の結果を示す。改訂前は散乱断面積が 0.0、1.0、2.0 /cm のケースで 14 番目の方位各領域の中性子束を数%程度過小評価していたが、改訂後はすべてのケースについて 2%以内で参照解を再現した。なお、散乱断面積を 5.0 /cm としたケースでは、5 番目の方位角領域の中性子束の参照解に対する比として 0.983 が得られているが、径方向を 140 メッシュ、方位角方向を 90 メッシュに分

²入力ファイルは/CEGAL/Fletcher/main_r_theta2.cxx.

割した場合はこの比が 0.992 となり、離散化を詳細にすることで、参照解に近づくことを確認した。各ケースの中性子束分布を Fig. 5 に示す。

Table 1: Benchmark results

Case	angle	GMVP	(Stat. unc. [%])	改訂前		改訂後	
sigs=0.0	5th	4.597E-03	0.3	4.706E-03	1.02	4.549E-03	0.99
	14th	2.496E-03	0.4	2.317E-03	0.93	2.475E-03	0.99
sigs=1.0	5th	1.243E-03	0.4	1.261E-03	1.01	1.235E-03	0.99
	14th	4.063E-04	0.6	3.758E-04	0.93	4.016E-04	0.99
sigs=2.0	5th	3.903E-04	0.2	3.892E-04	1.00	3.852E-04	0.99
	14th	8.096E-05	0.3	7.550E-05	0.93	7.933E-05	0.98
sigs=3.0	5th	1.378E-04	0.2	1.368E-04	0.99	1.361E-04	0.99
	14th	1.950E-05	0.5	1.842E-05	0.94	1.903E-05	0.98
sigs=4.0	5th	5.431E-05	0.3	5.347E-05	0.98	5.331E-05	0.98
	14th	5.363E-06	0.7	5.248E-06	0.98	5.359E-06	1.00
sigs=5.0	5th	2.307E-05	0.4	2.272E-05	0.98	2.267E-05	0.98
	14th	1.714E-06	1.0	1.686E-06	0.98	1.708E-06	1.00

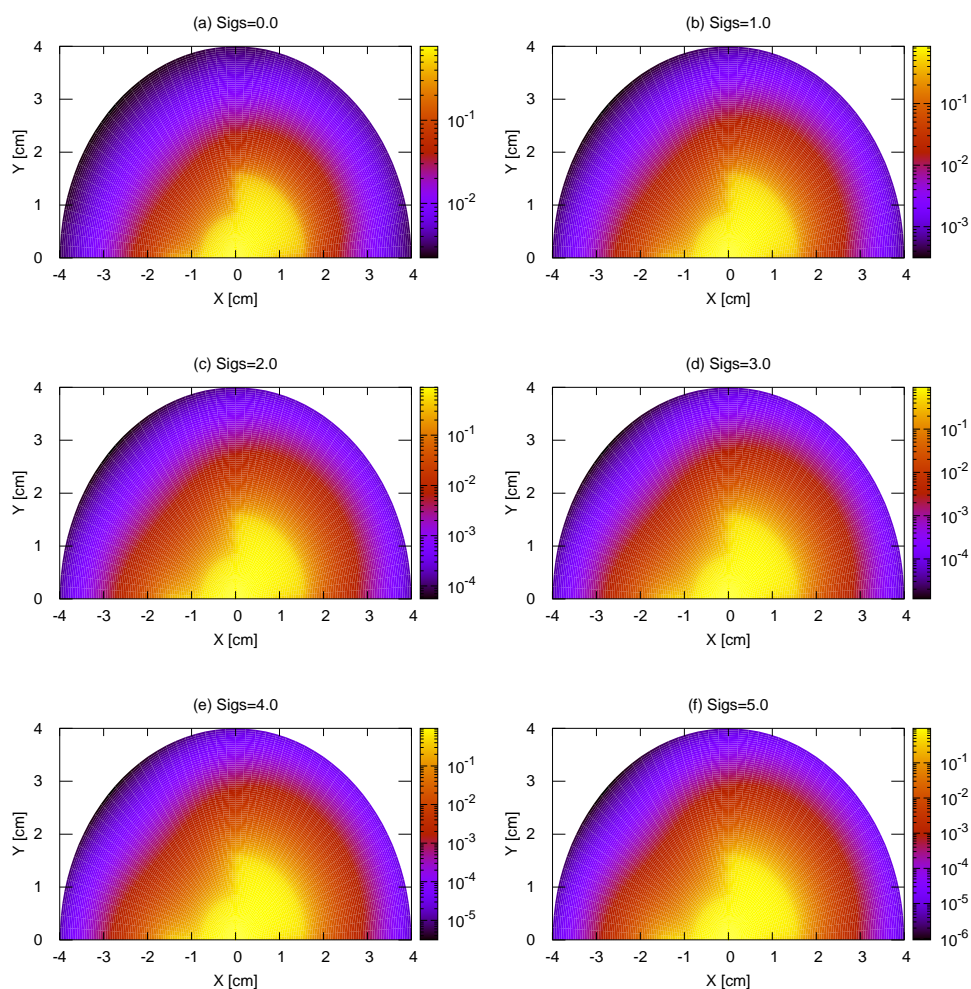


Fig. 5: Neutron flux spatial distribution in the Fletcher benchmark

3.2 Flattop-U

球体系の Flattop-U を無限円筒体系に置き換えた体系を対象とした。

はじめに、SMRZ モジュールで無限円筒として計算した場合と (r, θ) 座標系で計算した場合とで比較を行った。結果を Table 2 に示す (エネルギー群数は 175)。なお、連続エネルギーモンテカルロコード MVP-3 による解は $1.39731 \pm 0.015\%$ であった。全体として良好な一致を示しているが、Pn 次数が偶数であるときに両者の差異が拡大しており、現時点ではその原因は明らかではない。

Table 2: k_{eff} of the Flattop-U infinite cylinder model

Pn order	Cylinder	(r, θ)
P1	1.38859	1.38911
P2	1.39897	1.40040
P3	1.39727	1.39780
P4	1.39758	1.39903
P5	1.39752	1.39805

次に、第 1、3 象限と、第 2、4 象限とで燃料領域の半径を変えた条件で計算を行った。前者の半径を r_1 、後者の半径を r_2 としたときの結果を Table 3 に示す ($r_1 = 4.0$ とした場合は収束が悪化)。なお、参照解は MVP-3 により得て、CBZ は 175 群 P5 計算とした。CBZ は参照解を良好に再現していることが分かる。

Table 3: k_{eff} of the Flattop-U model

r_1	r_2	k_{err} of MVP	k_{err} of CBZ
1.0	9.0	$1.35112 \pm 0.015 \%$	1.35083
2.0	8.0	$1.30614 \pm 0.016 \%$	1.30624
3.0	7.0	$1.27742 \pm 0.017 \%$	1.27759
4.0	6.0	$1.26334 \pm 0.016 \%$	1.26443

本検討は、京都大学の千葉研助氏と共同で行ったものである。ここに氏に深い謝意を表する。