応答行列法を用いた中性子拡散方程式の解法

北海道大学工学研究院
千葉　豪[1]

1　角度中性子束、スカラー中性子束、中性子流などなど

位置 $\mathbf{r}$ において、単位時間あたりに単位面積を通過する、$\mathbf{\Omega}$ の周りの単位立体角を向く中性子数 $\psi(\mathbf{r},\mathbf{\Omega})$ を**角度中性子束**（Angular neutron flux）と呼ぶ。ベクトル $\mathbf{\Omega}$ を三次元直交座標系で $(\Omega_x,\Omega_y,\Omega_z)$ と記述すると、角度中性子束は $\psi(\mathbf{r},\Omega_x,\Omega_y,\Omega_z)$ とも書ける。なお、Ω_i は $\mathbf{\Omega}$ と i 軸のなす角の余弦とも言い換えることが出来る。

角度中性子束を全ての角度について積分すると、位置 $\mathbf{r}$ において、全ての方向について単位時間あたりに単位面積を通過する中性子数が得られる。これを**（スカラー）中性子束**（Scalar neutron flux）と呼び、ここでは ϕ と記述する。中性子束は角度中性子束を用いて

$$\phi(\mathbf{r})=\int_{4\pi}\psi(\mathbf{r},\mathbf{\Omega})d\mathbf{\Omega} \tag{1}$$

と記述される。

角度中性子束に $\mathbf{\Omega}$ を乗じたベクトル量 $\mathbf{\Omega}\psi(\mathbf{r},\mathbf{\Omega})$ は**角度中性子流**（Angular neutron current）と呼ばれ、$\mathbf{j}(\mathbf{r},\mathbf{\Omega})$ と記述する。定義より、$\mathbf{j}=(\Omega_x\psi,\Omega_y\psi,\Omega_z\psi)$ である。また、角度中性子流を全角度について積分した量は**（全）中性子流**（Total neutron current）と呼ばれ、

$$\mathbf{J}(\mathbf{r})=\int_{4\pi}\mathbf{j}(\mathbf{r},\mathbf{\Omega})d\mathbf{\Omega} \tag{2}$$

と定義される。従って、位置 $\mathbf{r}$ において、中性子は「全体として」ベクトル $\mathbf{J}$ に対して垂直な面を単位時間、単位面積あたり $|\mathbf{J}|$ だけ通過していることになる。中性子流は、位置 $\mathbf{r}$ における中性子の正味の流れの方向とその大きさを示しており、**正味中性子流** (Net neutron current）と呼ばれることもある。位置 $\mathbf{r}$ において中性子は様々な方向を向いて運動しているわけであるが、巨視的に（もしくは全体として）見た場合にベクトル $\mathbf{J}$ に沿った流れとなっている、とイメージすればよいであろう。

ここまでに説明した、角度中性子束、スカラー中性子束、中性子流の概念を**図 1** に示す。スカラー中性子束については「中性子の流れに対して単位大きさの断面をもつ微小球を全ての方向から単位時間に通過する中性子数」と考えてもよいであろう。

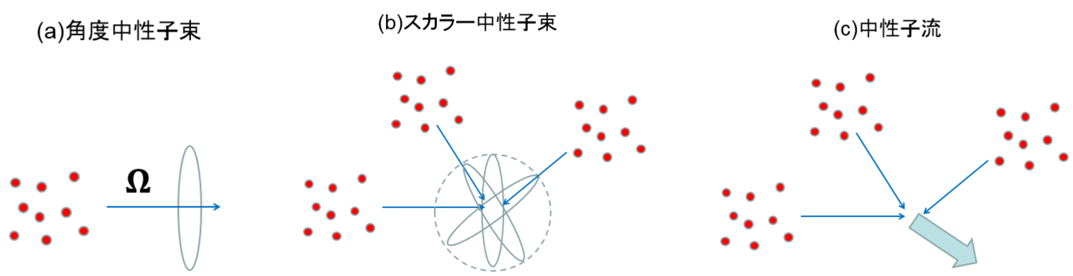

図 1: 中性子に関するさまざまな物理量の概念

ある体積における中性子と原子核の反応を考えるときには中性子束を考えればよいことが直感的に分かるであろう。一方、異なる領域間の中性子の流れ、やりとりを考えるときには、中性子流を考えることにな

[1] go_chiba@eng.hokudai.ac.jp

る。例えば三次元直交座標系の x 方向に垂直な面において、単位時間、単位面積あたりに通過する中性子数を考えよう。これは中性子流 $\mathbf{J}$ と x の正方向を示すベクトル $\mathbf{n}_x$ を用いて以下のように記述される。

$$\mathbf{n}_x \cdot \mathbf{J} = \int_{4\pi} \mathbf{n}_x \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r},\mathbf{\Omega})d\mathbf{\Omega} = \int_{4\pi} (\mathbf{n}_x \cdot \mathbf{\Omega})\,\psi(\mathbf{r},\mathbf{\Omega})d\mathbf{\Omega} = \int_{4\pi} \Omega_x \psi(\mathbf{r},\mathbf{\Omega})d\mathbf{\Omega} = \int_{4\pi} j_x(\mathbf{r},\mathbf{\Omega})d\mathbf{\Omega} \tag{3}$$

式 (3) で定義される物理量を x **の正方向についての（全）中性子流**と呼び、ここでは J_x と記述する。中性子流がベクトル量であるのに対して、特定方向についての中性子流はスカラー量となる。

また、特定方向についての中性子流は、その方向のみを向いた角度中性子束のみで考える場合がある。例えば、x 方向について正の方向のみを向いた成分は

$$J_{x+} = \int_{(\mathbf{n}_x\cdot\mathbf{\Omega})>0} \mathbf{n}_x \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r},\mathbf{\Omega})d\mathbf{\Omega} = \int_{(\mathbf{n}_x\cdot\mathbf{\Omega})>0} (\mathbf{n}_x \cdot \mathbf{\Omega})\,\psi(\mathbf{r},\mathbf{\Omega})d\mathbf{\Omega} \tag{4}$$

と記述され、負の方向のみを向いた成分は

$$J_{x-} = \int_{(-\mathbf{n}_x\cdot\mathbf{\Omega})>0} (-\mathbf{n}_x) \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r},\mathbf{\Omega})d\mathbf{\Omega} = -\int_{(\mathbf{n}_x\cdot\mathbf{\Omega})<0} (\mathbf{n}_x \cdot \mathbf{\Omega})\,\psi(\mathbf{r},\mathbf{\Omega})d\mathbf{\Omega} \tag{5}$$

と記述される。J_{x+}、J_{x-} のように着目方向のみについて定義する中性子流を**部分中性子流**（Partial neutron current）と呼ぶ。本稿では、ある領域の境界面について、領域から流出していく方向の部分中性子流を**流出中性子流**として J^+ で記述し、逆に領域に境界から流入してくる方向の部分中性子流を**流入中性子流**として J^- で記述する。２つの領域の境界面では角度中性子束は連続であるため、例えば領域 A、B を考えたとき、境界面における領域 A の流出中性子流は領域 B の流入中性子流と等しくならなければならない。これは境界面での領域 B から領域 A への中性子の流れについても同様のことが言える。

x の正方向に着目した場合、この方向の全中性子流は、流出方向が x の正方向を向いているとしたとき、部分中性子流と以下の関係を満たすことは自明であろう。

$$J = J_x^+ - J_x^- \tag{6}$$

全中性子流と部分中性子流の関係を**図 2** に示す。

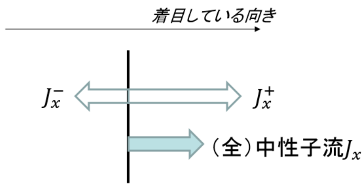

図 2: 全中性子流と部分中性子流の関係

次に、x の正方向についての中性子流 $J_x = \int_{4\pi} \Omega_x \psi(\mathbf{r},\mathbf{\Omega})d\mathbf{\Omega}$ の定義における角度に関する積分について考えよう。$\mathbf{n}_x$ と $\mathbf{\Omega}$ のなす角を θ とし、**図 3** に示すような座標系を考えると、$\mathbf{\Omega}$ に関する積分は以下のように書ける。

$$\int_{4\pi} d\mathbf{\Omega} = \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \tag{7}$$

ここで、φ は方位角を示す。$\Omega_x = \cos\theta$、$d\Omega_x = -\sin\theta d\theta$ を用いると、式 (7) は以下のように書き換えられる。

$$\int_{4\pi} d\mathbf{\Omega} = \int_{-1}^{1} d\Omega_x \int_0^{2\pi} d\varphi \tag{8}$$

ここでは簡単のため、x 方向についてのみ空間的な構造を持つ１次元平板体系を想定するものとすると、$\psi(\mathbf{r},\mathbf{\Omega})$ は Ω_y、Ω_z に依存しないことから

$$\psi(\mathbf{r},\mathbf{\Omega}) = \psi(\mathbf{r},\Omega_x) \tag{9}$$

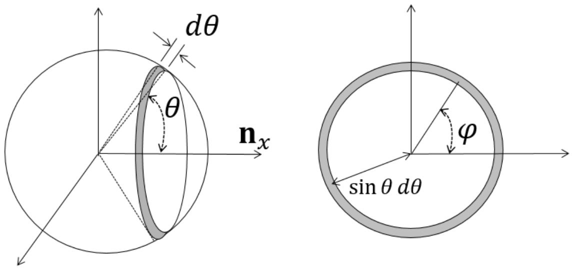

図 3: 積分計算で考えている座標系

と書ける。従って、J_x は

$$J_x = \int_{4\pi} \Omega_x \psi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) d\mathbf{\Omega} = \int_{-1}^{1} d\Omega_x \int_{0}^{2\pi} \Omega_x \psi(\mathbf{r}, \Omega_x) d\varphi = 2\pi \int_{-1}^{1} d\Omega_x \Omega_x \psi(\mathbf{r}, \Omega_x) \tag{10}$$

と書ける。

また、スカラー中性子束 ϕ の積分計算も同様にして

$$\phi = 2\pi \int_{-1}^{1} d\Omega_x \psi(\mathbf{r}, \Omega_x) \tag{11}$$

と書ける。

ここで、角度中性子束 ψ の Ω_x に対する依存性が、以下のように一次関数で記述できるものと仮定する。

$$\psi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) = a + b\Omega_x \tag{12}$$

この式を J_x に関する式 (10) に代入すると以下を得る。

$$J_x = 2\pi \int_{-1}^{1} d\Omega_x \left(a\Omega_x + b\Omega_x^2 \right) = 2\pi \left[\frac{1}{3} b\Omega_x^3 \right]_{-1}^{1} = 2\pi \cdot \frac{2b}{3} \tag{13}$$

同様に式 (11) に代入すると以下を得る。

$$\phi = 2\pi \int_{-1}^{1} d\Omega_x \left(a + b\Omega_x \right) = 2\pi \left[a\Omega_x \right]_{-1}^{1} = 2\pi \cdot 2a \tag{14}$$

従って、ψ は ϕ、J_x を用いて以下のように記述できることになる。

$$\psi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{1}{2}\phi + \frac{3}{2} J_x \Omega_x \right) \tag{15}$$

式 (15) を用いて部分中性子流 J_x^+ を計算すると、以下の式が得られる。

$$J_x^+ = 2\pi \int_{0}^{1} \Omega_x \psi d\Omega_x = \int_{0}^{1} \Omega_x \left(\frac{1}{2}\phi + \frac{3}{2} J_x \Omega_x \right) d\Omega_x = \left[\frac{1}{4}\phi\Omega_x^2 + \frac{1}{2} J_x \Omega_x^3 \right]_{0}^{1} = \frac{1}{4}\phi + \frac{1}{2} J_x \tag{16}$$

同様にして J_x^- も以下のように得られる。

$$J_x^- = \frac{1}{4}\phi - \frac{1}{2} J_x \tag{17}$$

さらにこれらの式を辺々足すことにより、以下の式が得られる。

$$J_x^+ + J_x^- = \frac{1}{2}\phi \tag{18}$$

以上より、式 (12) を仮定することで、スカラー中性子束 ϕ が部分中性子流によって表現できることが分かる。

以上の議論を以下にまとめる。

ある着目方向を考え、角度ベクトル $\mathbf{\Omega}$ の着目方向成分を Ω_x と記述したとき、角度中性子束 $\psi(\mathbf{\Omega})$ が Ω_x のみに依存し、かつその依存性が Ω_x の一次関数で記述できるならば、中性子流の着目方向成分に関する部分中性子流 J_x^+、J_x^- は、中性子束 ϕ と中性子流の着目方向成分 J_x を用いて以下のように記述される。

$$J_x^+ = \frac{1}{4}\phi + \frac{1}{2}J_x, \tag{19}$$

$$J_x^- = \frac{1}{4}\phi - \frac{1}{2}J_x \tag{20}$$

同様に、中性子束と中性子流の着目方向成分は、部分中性子流を用いて以下のように記述される。

$$\phi = 2\left(J_x^+ + J_x^-\right), \tag{21}$$

$$J_x = J_x^+ - J_x^- \tag{22}$$

また、今回扱う中性子拡散方程式は、以下の**拡散近似**が仮定されているものと考えることができる。

$$\mathbf{J} = -D\nabla\phi \tag{23}$$

ここで D は**拡散係数**を示す。三次元体系における全中性子流の i 方向成分 J_i は

$$J_i = -D\frac{d\phi}{di} \tag{24}$$

と記述することができる。

2　応答行列法を用いた中性子拡散方程式の解法

ここでは一次元平板体系について考え、空間を I 個のメッシュに分割するものとする。i 番目の空間メッシュに着目したとき、メッシュ平均中性子束 ϕ_i と、境界上での全中性子流 $J_{i+1/2}$、$J_{i-1/2}$ 及び中性子束 $\phi_{i+1/2}$、$\phi_{i-1/2}$ の計 5 つのパラメータが未知であることになる。前章で導入した近似に基づいた場合にはある位置における中性子束と全中性子流はいずれも部分中性子流で記述されることから、ϕ_i と境界上の 4 つの部分中性子流の計 5 つのパラメータが未知であるとも言い換えることが出来る。i 番目のメッシュに関する種々のパラメータを**図 4** にまとめて示す。

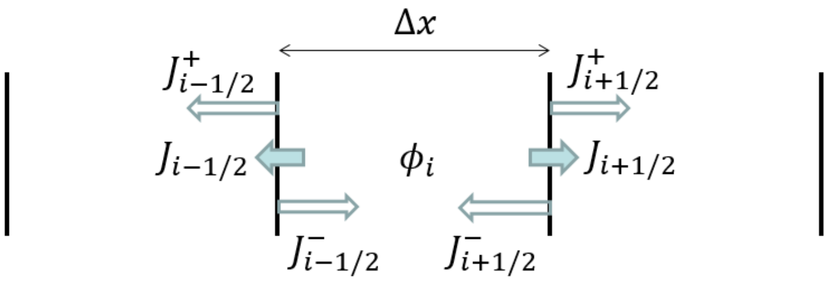

図 4: i 番目の空間メッシュに関する種々のパラメータ

空間メッシュi についての中性子のバランス式として以下が得られる。

$$J_{i+1/2} + J_{i-1/2} + \Sigma_{a,i}\Delta x\phi_i = \Delta x S_i \tag{25}$$

ここで、$J_{i+1/2}$、$J_{i-1/2}$ はメッシュ i の右側及び左側境界面での領域から流出する方向を正とした中性子流を示し、ϕ_i、$\Sigma_{a,i}$、S_i はそれぞれメッシュ i の平均中性子束、吸収断面積、平均中性子源を示す。メッシュ境界面での中性子流に対して拡散近似を適用し、さらに有限差分近似を導入すると、以下の式を得る。

$$J_{i+1/2} = -D\left.\frac{d\phi}{dx}\right|_{x=x_{i+1/2}} \approx -D\frac{\phi_{i+1/2}-\phi_i}{\Delta x/2} = -\frac{2D}{\Delta x}\left(\phi_{i+1/2}-\phi_i\right), \tag{26}$$

$$J_{i-1/2} = -D\cdot -\left.\frac{d\phi}{dx}\right|_{x=x_{i-1/2}} \approx D\frac{\phi_i-\phi_{i-1/2}}{\Delta x/2} = -\frac{2D}{\Delta x}\left(\phi_{i-1/2}-\phi_i\right) \tag{27}$$

以上より、ϕ_i、$J_{i+1/2}$、$J_{i-1/2}$、$\phi_{i+1/2}$、$\phi_{i-1/2}$ に関する 3 つの方程式が得られていることから、これら 5 つの未知のパラメータのうち 2 つが既知であれば、残りの 3 つのパラメータを決めることが出来ることになる。応答行列法とは、未知のパラメータとして ϕ_i と境界面での部分中性子流を考え、境界面から着目メッシュに流入する部分中性子流の値を仮定する（一次元平板の場合は 2 つのパラメータを既知とする）ことで、そのメッシュでの平均中性子束及び境界面からの流出中性子流を計算し、その流出中性子流を隣接するメッシュの流入中性子流として用いて繰り返し計算を行い、最終的に数値解を求める、という方法である。

それでは、バランス式 (25) に対して、式 (26)、(27) 及び部分中性子流と中性子束、全中性子流の関係を用いることにより、ϕ_i と流入中性子流のみからなる式を導出しよう。これによって流入中性子流が与えられると ϕ_i が求まり、最終的に流出中性子流が決められることになる。

式 (26) および (27) に対して、式 (20) を用いて境界表面中性子束 $\phi_{i+1/2}$ を中性子流と流入中性子流に置き換えることにより、以下の式が得られる。

$$J_{i\pm1/2} = -\frac{2D}{\Delta x}\left(4J^-_{i\pm1/2}+2J_{i\pm1/2}-\phi_i\right) \tag{28}$$

これらより、境界における全中性子流は流入中性子流と ϕ_i を用いて以下のように記述できる。

$$J_{i\pm1/2} = \frac{-\dfrac{2D}{\Delta x}\left(4J^-_{i\pm1/2}-\phi_i\right)}{\left(1+\dfrac{4D}{\Delta x}\right)} \tag{29}$$

これをバランス式 (25) に代入することで以下を得る。

$$\left\{\frac{4D}{\Delta x}+\left(1+\frac{4D}{\Delta x}\right)\Sigma_{a,i}\Delta x\right\}\phi_i = \frac{2D}{\Delta x}\left(4J^-_{i+1/2}+4J^-_{i-1/2}\right)+\left(1+\frac{4D}{\Delta x}\right)\Delta x S_i \tag{30}$$

この式より、流入中性子流から ϕ_i を計算することが出来、さらには式 (29) より全中性子流を計算することが出来る。境界上での全中性子流と流入中性子流が既知となったので、式 (22) より流出中性子流が求められる。

上記の手続きは行列形式で

$$\begin{pmatrix} J^+_{i-1/2} \\ J^+_{i+1/2} \end{pmatrix} = \boldsymbol{R}\cdot\begin{pmatrix} J^-_{i-1/2} \\ J^-_{i+1/2} \end{pmatrix} \tag{31}$$

と記述することが出来、この式における $\boldsymbol{R}$ が**応答行列**に対応する。

以下に、応答行列法を用いた中性子拡散方程式の解法をまとめる。

1. 着目メッシュiに対する流入中性子流 $J^-_{i\pm1/2}$ を既知とする。

2. 以下の式を用いてメッシュiにおける平均中性子束 ϕ_i を計算する。

$$\left\{\frac{4D}{\Delta x}+\left(1+\frac{4D}{\Delta x}\right)\Sigma_{a,i}\Delta x\right\}\phi_i=\frac{2D}{\Delta x}\left(4J^-_{i+1/2}+4J^-_{i-1/2}\right)+\left(1+\frac{4D}{\Delta x}\right)\Delta x S_i \tag{32}$$

3. 流入中性子流 $J^-_{i\pm1/2}$ とメッシュ平均中性子束 ϕ_i から、境界における中性子流 $J_{i\pm1/2}$ を以下の式で計算する。

$$J_{i\pm1/2}=\frac{-\frac{2D}{\Delta x}\left(4J^-_{i\pm1/2}-\phi_i\right)}{\left(1+\frac{4D}{\Delta x}\right)} \tag{33}$$

4. 流入中性子流 $J^-_{i\pm1/2}$ と中性子流 $J_{i\pm1/2}$ から、流出中性子流 $J^+_{i\pm1/2}$ を以下の式で計算する。

$$J^+_{i\pm1/2}=J_{i\pm1/2}+J^-_{i\pm1/2} \tag{34}$$