

修士論文

Characteristics 法に基づいた
輸送計算手法の高精度化の検討

名古屋大学大学院

工学研究科博士課程

マテリアル理工学専攻（前期課程）

量子エネルギー工学分野

量子エネルギーシステム工学講座

エネルギー量子制御工学グループ

田渕将人

H18. 2 月

目次

第1章 序論.....	1
1.1 背景.....	1
1.1.1 我が国における原子力発電の現状.....	1
1.1.2 炉心計算と経済性.....	3
1.1.3 炉心計算の現状と課題.....	4
1.2 本研究の目的.....	5
1.3 本論文の構成.....	6
第2章 MOC の概要と本研究の方針.....	7
2.1 MOC の基礎.....	7
2.1.1 核計算の概要.....	7
2.1.2 MOC の概念と中性子束の計算方法.....	10
2.1.3 セル境界における角度中性子束の接続.....	15
2.1.4 Ray tracing のパラメータ.....	19
2.1.5 計算の流れ.....	25
2.2 MOC における計算誤差の発生要因.....	26
2.2.1 中性子束平坦化誤差.....	26
2.2.2 極角方向離散化誤差.....	27
2.2.3 方位角方向離散化誤差.....	28
2.2.4 CL の離散化誤差.....	28
2.2.5 セル境界での角度中性子束接続誤差.....	28
2.2.6 丸め誤差.....	29
2.3 本研究の方針.....	29
2.3.1 各誤差の重要度と低減方法.....	29
2.3.2 本研究で検討する誤差の種類.....	34
第3章 新たな最適極角分点セットの検討.....	35
3.1 MOC と衝突確率法の関係.....	35
3.1.1 衝突確率の式の導出.....	35
3.1.2 MOC で見積もる衝突確率.....	37
3.1.3 MOC での極角方向離散化誤差.....	39
3.2 最適化スキーム.....	39
3.2.1 最適化の方針.....	39

3.2.3 本研究で考案した最適化スキーム	40
3.3 最適化手法	41
3.3.1 目的関数	41
3.3.3 最急降下法	42
3.4 作成した分点セット	46
3.4.1 分点数1	46
3.4.2 分点数2	46
3.4.3 分点数3	47
3.5 検証計算	47
3.5.1 計算条件	47
3.5.2 計算結果	50
3.5.3 考察	50
3.6 本章のまとめ	51
第4章 方位角分点セットの検討	52
4.1 検討を行う分点セットの種類	52
4.2 検証計算	54
4.2.1 計算条件	54
4.2.2 計算結果	56
4.2.3 考察	60
4.3 本章のまとめ	61
第5章 Mobile chord 法の適用	62
5.1 Mobile Chord 法の概要	62
5.2 検証計算	63
5.2.1 計算条件	63
5.2.2 計算結果	66
5.2.3 考察	68
5.3 本章のまとめ	69
第6章 結論	70
6.1 結論	70
6.2 今後の課題	71
謝辞	72
参考文献	73

Appendix A 本研究で作成したプログラム MASAT2D の概要	75
Appendix B 本研究で検証計算に用いる計算体系.....	77
B.1 単ピンセル体系	77
B.2 C5G7 ベンチマーク問題.....	77
Appendix C Gauss 型積分公式の概要.....	82
C.1 Lagrange 補間	82
C2 補間型積分公式	82
C3 直交多項式.....	83
C4 Gauss 型積分公式.....	85
C5 Legendre 多項式を用いる場合.....	88
C6 第1種 Chebyshev 多項式を用いる場合	92
公刊論文リスト	95

第1章 序論

1.1 背景

1.1.1 我が国における原子力発電の現状

日本で初めての商業用原子炉である東海1号機が運転を開始したのは1966年7月25日のことである。日本にとって初めての商業炉はガス冷却炉であったが、1970年、国内初のBWRおよびPWRがそれぞれ営業運転を開始し、日本の商業炉の主流は軽水炉となった。それ以降、高度経済成長に伴うエネルギー需要の増大を背景に、次々と原子力発電所の建設が進んでいった。2005年12月現在、PWR23基、BWR31基の計54基の発電所が稼働中であり、日本全体の発電量の30%程度を担うまでになった。我が国の原子力発電所の状況をTable1.1に示す。

原子力発電は他の基幹電源と比較して、供給の安定性、環境への影響、経済性などのメリットを有している。しかし、自由化の進む日本の電力市場において、供給の安定性、環境への影響などの公益的なメリットは考慮されにくく、経済性が重要視されることが予想される。これに伴い、安定的な供給を行うことが難しい企業の参入、安価な残渣油や石炭など環境への負担の大きな燃料の使用などが懸念される。このような状況下では、原子力発電の優位性を維持するために、十分なコスト競争力を持つことが求められ、原子力発電所の運用をより効率的に行うことが要求される。これを受け、炉心の経済性の向上や効率的な燃料の使用を図るため、高燃焼度化燃料、混合酸化物燃料（Mixed Oxide: MOX）の導入、炉心内の構造の複雑化が考えられている。高燃焼度化を進めるにあたり、燃料濃縮度や可燃性毒物の濃度の上昇、可燃性毒物の本数の増加などによって燃料集合体内の核的な非均質性はさらに大きくなる傾向にあり、またMOX燃料の導入によっても、非均質性は同様に大きくなる^[1]。現在用いられている炉心解析手法では、非均質性が大きい場合、予測精度を上げることが困難になる傾向がある。これらの理由から、より精度良く炉心内の核特性を予測できる計算モデルが必要となる。さらに、炉心内の構造の複雑化に対応するため、幾何形状を近似なく取り扱うことのできる計算手法が求められる。

このように、電力自由化の進む我が国において、より経済的な発電所の運用が求められており、炉心核特性を予測するための計算の高度化は重要な課題である。次の項では、炉心計算と経済性についてさらに具体的に述べる。

電力会社	発電所	号機	種類	状態	運転開始	定格出力[万kW]
北海道電力	泊	1	PWR	運転中	平成元年6月	57.9
		2	PWR	運転中	平成3年4月	57.9
		3	PWR	建設中	平成21年12月	91.2
東北電力	東通	1	BWR	運転中	平成17年12月	110.0
		2	ABWR	着工予定	平成23年度以降	138.5
	浪江・小高	1	BWR	着工予定	平成23年度以降	82.5
		1	BWR	運転中	昭和59年6月	52.4
		2	BWR	運転中	平成7年7月	82.5
東京電力	東通	3	BWR	運転中	平成14年1月	82.5
		1	ABWR	着工予定	平成18年度	138.5
	福島第一	2	ABWR	着工予定	平成20年度以降	138.5
		1	BWR	運転中	昭和46年3月	46.0
		2	BWR	運転中	昭和49年7月	78.4
		3	BWR	運転中	昭和51年3月	78.4
		4	BWR	運転中	昭和53年10月	78.4
		5	BWR	運転中	昭和53年4月	78.4
		6	BWR	運転中	昭和53年10月	110.0
		7	ABWR	計画中	平成23年ごろ?	138.0
	8	ABWR	計画中	平成24年ごろ?	138.0	
	福島第二	1	BWR	運転中	昭和57年4月	110.0
		2	BWR	運転中	昭和59年2月	110.0
		3	BWR	運転中	昭和60年6月	110.0
		4	BWR	運転中	昭和62年8月	110.0
柏崎		1	BWR	運転中	昭和60年9月	110.0
		2	BWR	運転中	平成2年9月	110.0
		3	BWR	運転中	平成5年8月	110.0
	4	BWR	運転中	平成6年8月	110.0	
北陸電力	志賀	5	BWR	運転中	平成2年4月	110.0
		6	ABWR	運転中	平成8年11月	135.6
中部電力	浜岡	7	ABWR	運転中	平成9年7月	135.6
		1	BWR	運転中	平成5年7月	54.0
		2	ABWR	運転予定	平成18年3月	135.8
		1	BWR	運転中	昭和51年3月	54.0
		2	BWR	運転中	昭和53年11月	84.0
関西電力	美浜	3	BWR	運転中	昭和62年8月	110.0
		4	BWR	運転中	平成5年9月	113.7
		5	ABWR	運転中	平成17年1月	138.0
	大飯	1	PWR	運転中	昭和45年3月	34.0
		2	PWR	運転中	昭和47年7月	50.0
		3	PWR	運転中	昭和51年12月	82.6
		1	PWR	運転中	昭和54年3月	117.5
	高浜	2	PWR	運転中	昭和54年12月	117.5
		3	PWR	運転中	平成3年12月	118.0
		4	PWR	運転中	平成5年2月	118.0
		1	PWR	運転中	昭和49年11月	82.6
	中国電力	島根	2	PWR	運転中	昭和50年11月
3			PWR	運転中	昭和60年1月	87.0
4			PWR	運転中	昭和60年6月	87.0
上関		1	BWR	運転中	昭和49年3月	46.0
		2	BWR	運転中	平成元年2月	82.0
		3	ABWR	計画中	検討中	検討中
四国電力	伊方	1	ABWR	計画中	平成25年度?	137.3
		2	ABWR	計画中	平成28年度?	137.3
		1	PWR	運転中	昭和52年9月	56.6
九州電力	玄海	2	PWR	運転中	昭和57年3月	56.6
		3	PWR	運転中	平成6年12月	89.0
		1	PWR	運転中	昭和50年10月	55.9
		2	PWR	運転中	昭和56年3月	55.9
	川内	3	PWR	運転中	平成6年3月	118.0
		4	PWR	運転中	平成9年7月	118.0
		1	PWR	運転中	昭和59年7月	89.0
日本原子力発電	東海	2	PWR	運転中	昭和60年11月	89.0
		3	PWR	計画中	2010年代	150.0
	敦賀	1	ガス炉	運転終了	昭和41年7月	16.6
		2	BWR	運転中	昭和53年11月	110.0
		1	BWR	運転中	昭和45年3月	35.7
電源開発	大間	2	PWR	運転中	昭和62年2月	116.0
		3	APWR	計画中	平成26年3月	153.8
日本原子力発電	敦賀	4	APWR	計画中	平成27年3月	153.8
		1	ABWR	運転予定	平成24年3月?	138.3

Table1.1 日本の原子力発電所の現状 (2005年12月現在)

1.1.2 炉心計算と経済性

炉心には、PWR では 200 体程度、BWR では 800 体程度の燃料集合体が装荷されるが、各燃料集合体の配置（以下燃料装荷パターン）の決め方は炉心の安全性、経済性の観点から極めて重要である。設計の際には、天文学的な数の燃料装荷パターンの中で、安全性が確保でき、かつ、できる限り経済性の良い燃料装荷パターンを探すことが必要となる。その際、炉心の核特性を予測する必要があり、炉心内の中性子の挙動を計算によって見積もっている。この計算のことを炉心計算と呼ぶ。炉心内の中性子の挙動は(1.1)式で表される Boltzmann の中性子輸送方程式によって決まる。

$$\bar{\Omega} \cdot \nabla \phi(\bar{r}, \bar{\Omega}, E) + \Sigma_t(\bar{r}, E)\phi(\bar{r}, \bar{\Omega}, E) = Q(\bar{r}, \bar{\Omega}, E) \quad (1.1)$$

ただし、(1.1)式中の Q は散乱、核分裂などによる中性子源を表し、等方散乱の場合、 Q は以下の式で与えられる。

$$Q(\bar{r}, \bar{\Omega}, E) = \frac{1}{4\pi} \left\{ \begin{array}{l} \frac{\chi(\bar{r}, E)}{k_{eff}} \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} \frac{d\Omega}{4\pi} v \Sigma_f(\bar{r}, E') \phi(\bar{r}, \bar{\Omega}, E) \\ + \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} \frac{d\Omega}{4\pi} \Sigma_s(\bar{r}, E' \rightarrow E) \phi(\bar{r}, \bar{\Omega}, E) \end{array} \right\} \quad (1.2)$$

\bar{r} : 中性子の位置

$\bar{\Omega}$: 中性子の飛行方向

E : 中性子のエネルギー

ϕ : 角度中性子束

Σ_t : 全断面積

Σ_s : 散乱断面積

$v\Sigma_f$: (1 核分裂あたりに放出される平均の中性子数) \times (核分裂断面積)

χ : 核分裂スペクトル

k_{eff} : 実効増倍率

したがって、(1.1)式を正確に解くことができれば、核特性の予測という目標は達成される。しかし、解くべき方程式は 6 変数関数（位置 3、飛行方向 2、エネルギー 1）である上、左辺に微分項、右辺に積分項のある複雑な形であり、解析的に解くことはもちろんできず、直接数値的に解くことも困難である。そこで、実際の設計においては様々な近似を行うことによって(1.1)式の近似解を求めている。この近似解には当然のことながら、計算誤差が含まれることになる。炉心の安全性を担保するためには、計算誤差を考慮に入れて設計を行う必要があるので、炉心計算の精度は設計の自由度に影響を与える。炉心設計の自由度が制限されれば、選択可能な燃料装荷パターンが少なくなり、経済性の悪い燃料装荷パターンを選ばなければならなくなる。これを概念的に示したのが Fig.1.1 である。Fig.1.1 より、炉心計算の精度によって選択可能な燃料装荷パターンの数が左右されていることがわ

かる。

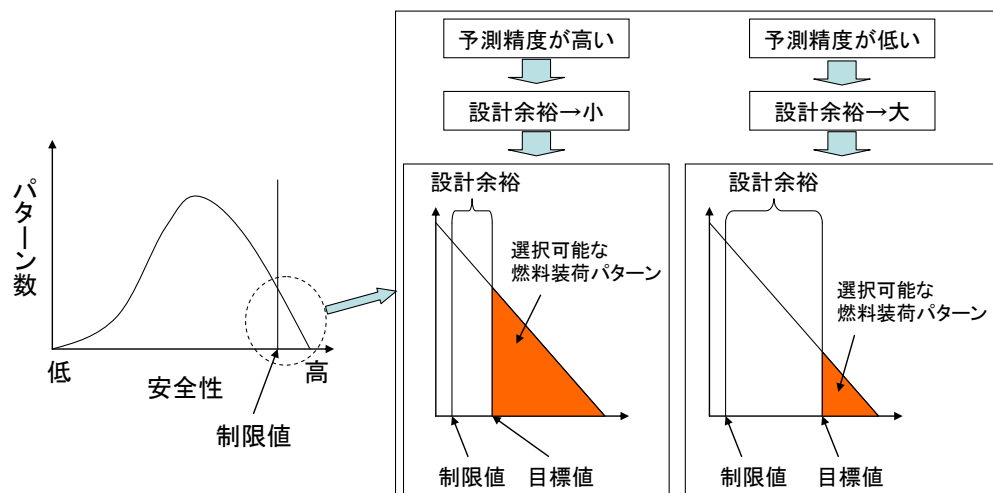


Fig.1.1 炉心計算の計算誤差と選択可能な燃料装荷パターンの数

また、安全性パラメータの1つに径方向出力ピーキング係数というパラメータがあるが、参考文献[2]によると、径方向出力ピーキング係数の制限値 1.48 に対して、設計余裕を見込んで 1.435 に目標値を設定した場合、目標値を満足できる燃料装荷パターンは全体の約 0.04% しかないことが報告されている。さらには、径方向出力ピーキング係数の予測精度が 1% 向上すると、1 炉心あたり年間約 4000 万円の燃料サイクルコストを削減できることも参考文献[2]で報告されている。このように炉心計算の精度は原子炉運転の経済性に大きな影響を与える。したがって、より精度良く核特性を予測できる手法が常に望まれている。

1.1.3 炉心計算の現状と課題

現在、炉心計算は近代ノード法によって行われるのが主流である。その際、燃料集合体の内部は均質化して扱われる。Fig.1.2 に BWR の燃料集合体 (GE11) を示す。Fig.1.2 から燃料集合体は複雑な幾何形状を持っていることが分かる。

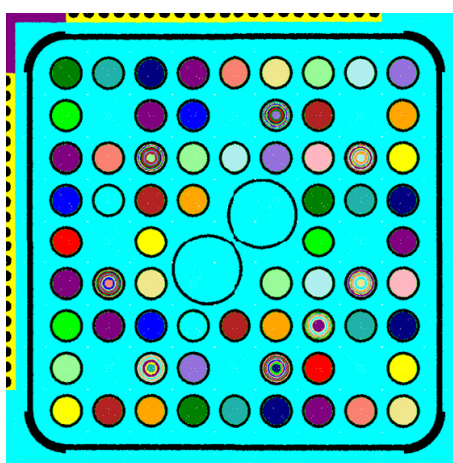


Fig.1.2 BWR 燃料集合体 (GE11)

このように複雑な幾何形状を持つ集合体を均質化することは、炉心計算の精度に悪影響を与える。なぜなら、集合体を均質化することによって、集合体内の中性子輸送を詳細に取扱うことができなくなるからである。今後、核的非均質性が大きくなることが予想されるので、幾何形状を厳密に取扱うことはさらに重要な課題となる。

現行の炉心計算手法のもう 1 つの課題として、角度中性子束の取扱い方が挙げられる。近代ノード法は拡散理論に基づいた手法であるので、角度中性子束を集団で扱っている。しかし、今後、集合体内の核的非均質性が大きくなることを考慮に入れると、角度中性子束の非等方性はさらに大きくなることが予想されるので、角度中性子束の分布を厳密に取扱うことのできる輸送理論に基づいた計算手法が望まれる。

このように、現行の炉心計算手法には、「幾何形状の取扱い」と「角度中性子束の取扱い」という 2 つの課題がある。この課題に対する解決策は、幾何形状を厳密に取扱える輸送計算手法を炉心計算に適用することである。このような計算手法としては、Monte Carlo 法、衝突確率法、characteristics 法 (method of characteristics ; 以下 MOC) が挙げられる。小規模体系においては、これらの手法はどれも有効な計算手法であるが、大規模体系においては、Monte Carlo 法、衝突確率法は演算量、メモリ量の観点から現実的な時間内で計算を行うことが困難である。したがって、Monte Carlo 法、衝突確率法は近い将来における現実的な炉心計算手法になることは考えにくい^[4]。これに対し、MOC は大規模体系においても演算量、メモリ量とも比較的少なく、近い将来において主要な炉心計算手法になる可能性を秘めている。さらに、近年の計算機の発達に伴い、次世代の炉心計算手法として、MOC への期待が一層高まっている。しかし、現時点では、MOC を炉心計算へ適用することは計算時間の観点からまだ現実的ではなく、実用化には程遠いというのが現状である。したがって、MOC の計算方法を改良し、計算の高速化を図ることが、MOC の実用化にとって、ひいては炉心計算の高度化にとって重要な課題である。

1.2 本研究の目的

前節で述べたように、炉心計算の高精度化を図るための方策として、MOC の適用が挙げられる。そのためには MOC の計算方法を改良し、計算を高速化する必要がある。したがって、本研究では MOC の計算の高速化を行うことを目的とする。MOC の計算を高速化するための手段としては次の 2 通りが考えられる。

① 反復計算の収束加速による高速化

MOC では反復計算により中性子束を求めている。この反復計算では、反復とともに解が正しい値に収束していく。この収束を速めることができれば、計算量を少なくすることができ、高速化につながる。

② より高精度な計算モデルによる高速化

現状の手法より高精度な計算モデルを考案できれば、必要な精度を得るための計算条件

は現状の手法より粗くすることができる。計算条件を粗くすることができれば、計算時間は短くなる。したがって、より高精度なモデルによって高速化を達成することができる。

①については、これまでにマルチグリッド法的一种である GCMR 法^{[3],[4]}や固有値問題の高速解法として期待されている Krylov 部分空間法の適用が検討されている。これに対し、②についての検討は①ほど進んでいない。そこで、本研究では特に②の手段に着目し、より高精度な計算モデルの構築を行うことを検討する。これを達成するため、まず MOC における計算誤差の発生要因を把握する。そして、それを基にして誤差の低減方法を検討し、高精度化を図っていく。

なお、本論文では二次元の MOC のみについて考える。その理由としては、計算機負荷の観点から MOC では三次元の問題に対しても二次元の重ね合わせとみなすのが主流であるので、二次元の MOC が三次元の問題にとっても基礎となるからである^{[5],[6],[7],[8]}。ただし、「二次元」というのは「中性子の飛行が二次元的である」という意味ではない。中性子束の減衰にとって重要となるのは中性子の飛行距離であるが、中性子は三次元的にランダムな飛行をしているため、三次元的な飛行を二次元的に扱うことはできない。ここで述べている「二次元」というのは「z 軸方向で領域の変化がない」という意味である。つまり、二次元の MOC では断面積やスカラー中性子束に z 軸方向の分布はないとみなし、計算を行う。

1.3 本論文の構成

2 章では MOC の基本的な概念や計算方法について説明し、MOC での計算誤差の発生要因、誤差の低減方法について考える。3 章では極角方向離散化誤差について、4 章では方位角方向離散化誤差についてそれぞれ検討する。5 章では衝突確率法で用いられる mobile chord 法の MOC への適用を試みる。そして 6 章で本論文の結論を述べる。

第 2 章 MOC の概要と本研究の方針

2.1 MOC の基礎^[9]

2.1.1 核計算の概要

前章でも述べたが、炉心の核特性を支配する中性子束は、(2.1)で表される Boltzmann の輸送方程式を解くことによって予測することが可能である。

$$\bar{\Omega} \cdot \nabla \phi(\bar{r}, \bar{\Omega}, E) + \Sigma_t(\bar{r}, E) \phi(\bar{r}, \bar{\Omega}, E) = Q(\bar{r}, \bar{\Omega}, E) \quad (2.1)$$

(2.1)式右辺の中性子源項は前章の(1.2)式で表され、実効増倍率を項中に含んでいる。実効増倍率は、(2.1)式を空間、エネルギーについて離散化し、行列で表現した際の最大固有値に相当し、中性子束はその固有値に属する固有ベクトルに相当する。「輸送方程式を解く」というのは実効増倍率、中性子束を求めることであるので、核計算は一種の固有値計算であると言える。代数学の定理によると、一般的な 5 次以上の代数方程式には四則とべき根で表される解の公式が存在せず、これを有限回数の代数演算で解くことはできない。N 次元行列の固有値問題は、N 次代数方程式を解くことと等価であるので、行列の次元数が小さい場合を除き、固有値問題を有限回数の代数演算で解くことはできない。したがって、一般的な固有値問題には反復解法が用いられる。反復解法とは、計算を繰り返しながら近似解を更新し、必要な精度まで近似解が収束すれば計算を打ち切るという方法である。固有値問題の反復解法は広く研究されており様々な手法が存在するが、どのような手法を用いるかは以下に示した行列の性質によって異なる。

- ・ 「対称行列」 or 「非対称行列」
- ・ 「固有値のみが必要」 or 「固有値と固有ベクトルの両方が必要」
- ・ 「一部の固有値成分のみ必要」 or 「すべての固有値成分が必要」

これらの項目を炉心計算について考えてみると、「非対称行列」、「固有値と固有ベクトルの両方が必要」、「一部の固有値成分のみが必要」である。このような組み合わせの場合、べき乗法という手法が最も適している。

ここで、べき乗法について簡単に説明する。N×N の任意の行列 **A** について固有値方程式は(2.2)式のように書ける。

$$\mathbf{A}\bar{v}_i = \lambda_i \bar{v}_i \quad (2.2)$$

ただし、 λ_i 、 \bar{v}_i はそれぞれ絶対値の大きさが i 番目の固有値およびそれに属する固有ベクトルである。固有ベクトルの線形独立性から、任意のベクトル $\bar{u}^{(0)}$ は次式のように固有ベクトルの線形結合によって表すことができる。

$$\bar{u}^{(0)} = \sum_{i=1}^N a_i \bar{v}_i \quad (2.3)$$

この $\bar{u}^{(0)}$ に行列 **A** を左から k 回かけて作られるベクトルを $\bar{u}^{(k)}$ とし、(2.3)式を使うと

$\vec{u}^{(k)}$ は以下のように変形することができる。

$$\vec{u}^{(k)} = \mathbf{A}^k \sum_{i=1}^N a_i \vec{v}_i = \sum_{i=1}^N a_i \lambda_i \mathbf{A}^{k-1} \vec{v}_i = \sum_{i=1}^N a_i \lambda_i^2 \mathbf{A}^{k-2} \vec{v}_i = \dots = \sum_{i=1}^N a_i \lambda_i^k \vec{v}_i \quad (2.4)$$

また、(2.4)式で表される性質を用い、十分に大きな k について考えれば、 $\vec{u}^{(k)}$ は(2.5)式のように書ける。

$$\begin{cases} |\lambda_i/\lambda_1| = 1 & (i=1) \\ |\lambda_i/\lambda_1| < 1 & (i>1) \end{cases} \quad (2.5)$$

$$\vec{u}^{(k)} = \sum_{i=1}^N a_i \lambda_i^k \vec{v}_i = \lambda_1^k \left\{ a_1 \vec{v}_1 + \sum_{i=2}^N a_i \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1} \right)^k \vec{v}_i \right\} \approx \lambda_1^k a_1 \vec{v}_1 \quad (2.6)$$

したがって、十分に大きな k をとれば、 $\vec{u}^{(k)}$ は最大固有値に属する固有ベクトルの定数倍に近づくので、 $\vec{u}^{(k)}$ から \vec{v}_1 を求めることができる。さらに、 $\vec{u}^{(k)}$ と $\vec{u}^{(k+1)}$ の関係から λ_1 が求まる。このようにして、最大固有値成分を求めることができる。また、元の行列 \mathbf{A} から、求めた最大固有値成分を除去した後、同じ操作を行うことで、二番目以降の固有値成分を求めることが可能である。このように、べき乗法では最大固有値成分から順番に求まるので、最大固有値成分のみが必要な問題において非常に効果的である。炉心計算では「一部の固有値成分のみが必要」と述べたが、多くの場合において必要となるのは最大固有値成分のみであり、べき乗法は炉心計算にとってまさに最適な手法である。

べき乗法を炉心計算に用いた場合の計算手順を Fig. 2.1 に示す。ただし、Fig. 2.1 中の ω_m 、 V_i はそれぞれ方向 m の角度中性子束が持つ重みと領域 i の体積である。Fig. 2.1 にあるように、通常、核計算の手順は、「核分裂中性子源の計算」と「その核分裂中性子源によって作られる中性子束分布の計算」の 2 つの操作から成る。前者はべき乗法により固有値を求める操作全体に相当し、これを外部反復と呼ぶ。後者の操作は、べき乗法の過程の 1 つであり、非斉次連立方程式を解く操作に等しい。特に体系が大きい場合やエネルギー群数が多い場合、この連立方程式の解法として反復解法が用いられるので、後者の操作を内部反復と呼ぶ。Fig. 2.1 において注意すべき点は、中性子束の初期値として(2.7)式を満たすようにしている点、(2.8)式のように核分裂中性子源を実効増倍率で割っている点である。これらは核分裂中性子源の総和を 1.0 に等しくするための操作であり、このように規格化しておけば、実効増倍率を(2.9)式によって求めることができる。

$$\sum_i V_i \sum_{g'} \nu \Sigma_{f,i,g'} \sum_m \omega_m \phi_{i,m,g'}^{(0)} = 1 \quad (2.7)$$

$$F_{i,m,g}^{(k)} = \frac{1}{4\pi} \frac{\chi_{i,g}}{k_{eff}^{(k)}} \sum_{g'} \nu \Sigma_{f,i,g'} \sum_m \omega_m \phi_{i,m,g'}^{(k)} \quad (2.8)$$

$$k_{eff}^{(k)} = \sum_i V_i \sum_{g'} \nu \Sigma_{f,i,g'} \sum_m \omega_m \phi_{i,m,g'}^{(k)} \quad (2.9)$$

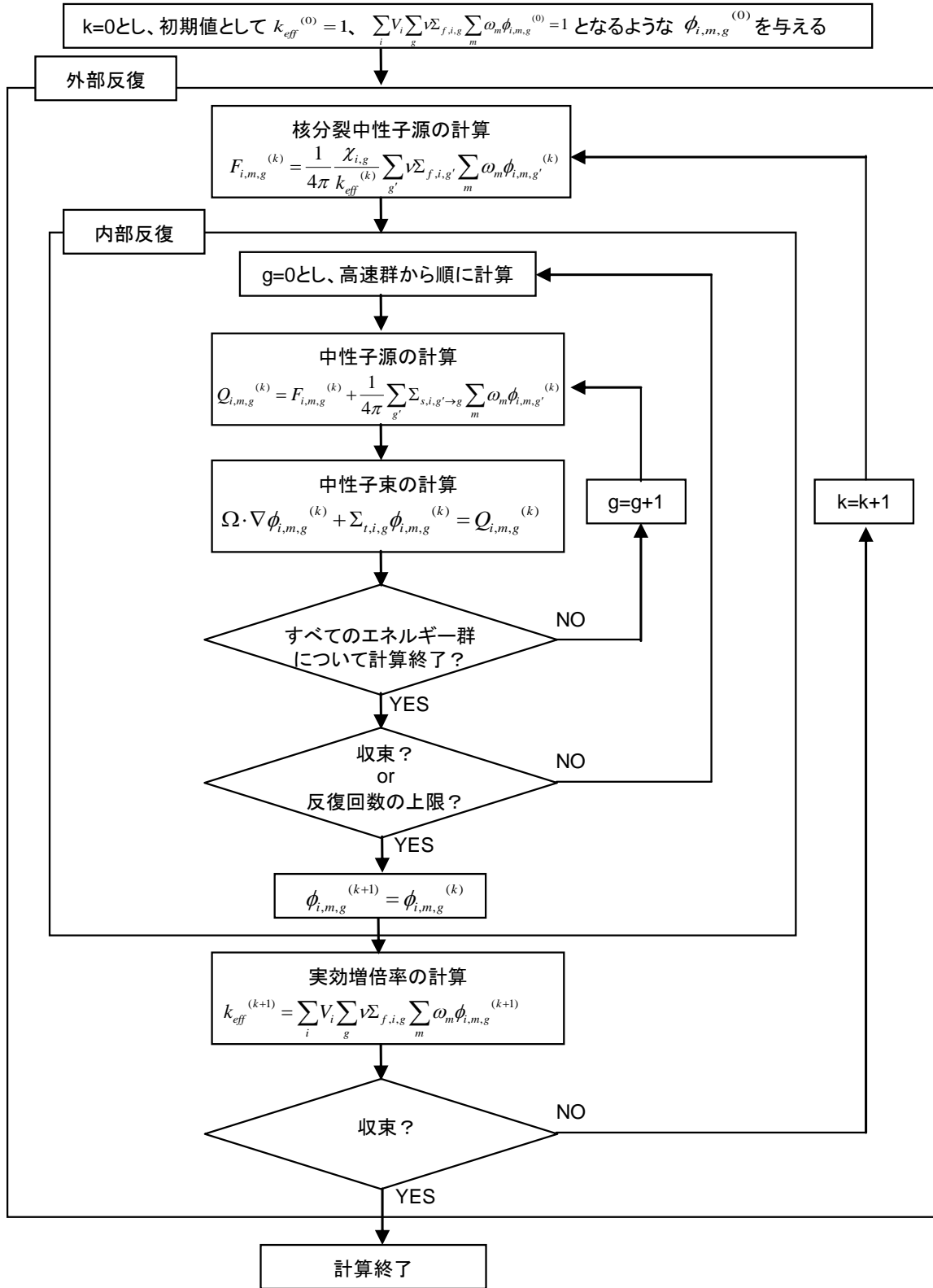


Fig. 2.1 べき乗法を用いた核計算のフローチャート

2.1.2 MOC の概念と中性子束の計算方法

体系内では中性子がランダムに飛行しているはずであるが、MOC では中性子の飛行方向を線で代表し、それらの線上のみを中性子が飛行していると仮定する。それを概念的に示した図が Fig. 2.2 である。

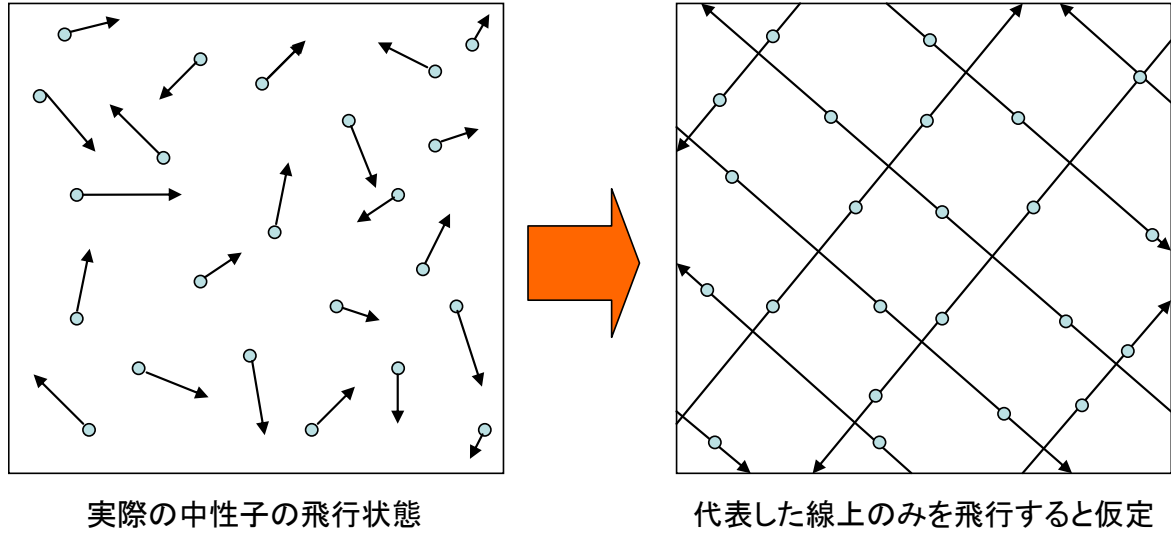


Fig. 2.2 MOC での中性子の飛行の考え方

Fig. 2.2 において中性子の飛行方向を代表していた線は characteristics line (以下 CL) と呼ばれ、「method of characteristics」の名前の由来になっている。

前項で述べた通り、(2.1)式で表される輸送方程式を直接解析的に解くことは特別な場合を除き不可能であるが、CL に沿った座標軸 s について考えれば以下のように変形していくことができる。まず、角度中性子束を s で微分したものについて考える。

$$\frac{d\phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega})}{ds} = \frac{\partial\phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega})}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial s} + \frac{\partial\phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega})}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial s} + \frac{\partial\phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega})}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial s} \quad (2.10)$$

また、任意の位置 (x_0, y_0, z_0) から CL に沿って s だけ移動した位置を (x, y, z) とすると、次式が成り立つ。

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_0 \\ y_0 \\ z_0 \end{pmatrix} + s \begin{pmatrix} \Omega_x \\ \Omega_y \\ \Omega_z \end{pmatrix} \quad (2.11)$$

ただし、 $\vec{\Omega} = \Omega_x \vec{e}_x + \Omega_y \vec{e}_y + \Omega_z \vec{e}_z$ である。(2.11)式を s で微分すると(2.12)式が得られる。

$$\begin{pmatrix} \frac{dx}{ds} \\ \frac{dy}{ds} \\ \frac{dz}{ds} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Omega_x \\ \Omega_y \\ \Omega_z \end{pmatrix} \quad (2.12)$$

(2.12)式を(2.10)式に代入すると、(2.13)式が得られる。

$$\frac{d\phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega})}{ds} = \Omega_x \frac{\partial\phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega})}{\partial x} + \Omega_y \frac{\partial\phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega})}{\partial y} + \Omega_z \frac{\partial\phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega})}{\partial z} \quad (2.13)$$

(2.13)式は次のように書くことができる。

$$\frac{d\phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega})}{ds} = \vec{\Omega} \cdot \nabla\phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \quad (2.14)$$

(2.14)式を前項の(2.1)式に代入することによって(2.15)式が得られる。

$$\frac{d\phi_{m,g}(s)}{ds} + \Sigma_{t,g}(s)\phi_{m,g}(s) = Q_{m,g}(s) \quad (2.15)$$

ただし、 m 、 g はそれぞれ飛行方向、エネルギーを表すインデックスである。(2.15)式中の断面積、中性子源がどちらも定数のとき、(2.15)式で表される微分方程式は容易に解くことができ、その解は未定係数 C を用いて(2.16)式のように表される。

$$\phi_{m,g}(s) = C \exp(-\Sigma_{t,g}s) + \frac{Q_{m,g}}{\Sigma_{t,g}} \quad (2.16)$$

ここで、Fig. 2.3 のような断面積、スカラー中性子束が一定の領域を想定する。一般的に断面積が一定と仮定した領域を **material region**、スカラー中性子束が一定と仮定した領域を **flat flux region** と呼ぶ。本論文ではそれらをそれぞれ物質領域、中性子束領域と呼ぶことにする。

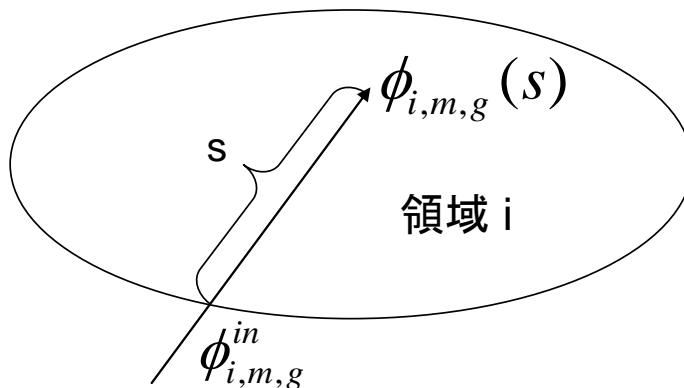


Fig. 2.3 中性子束領域 i における角度中性子束

(2.16)式を Fig. 2.3 について考え(2.17)式のように境界条件を与えると、(2.18)式が得られる。

$$\phi_{i,m,g}(0) = \phi_{i,m,g}^{in} \quad (2.17)$$

$$\phi_{i,m,g}(s) = \phi_{i,m,g}^{in} \exp(-\Sigma_{t,i,g}s) + \frac{Q_{i,m,g}}{\Sigma_{t,i,g}} \{1 - \exp(-\Sigma_{t,i,g}s)\} \quad (2.18)$$

(2.18)式の右辺第一項は入射中性子束の減衰を表す項であり、第二項は中性子源からの角度中性子束への寄与を表す項である。(2.18)式に基づいて考えれば、すべての中性子束領域において、入射中性子束の値から放出中性子束を計算できることがわかる。これを利用すれば、Fig. 2.4 に示したように、どのような幾何形状に対しても、CL と各中性子束領域境界の交点における角度中性子束の値を順に求めていくことが可能である。

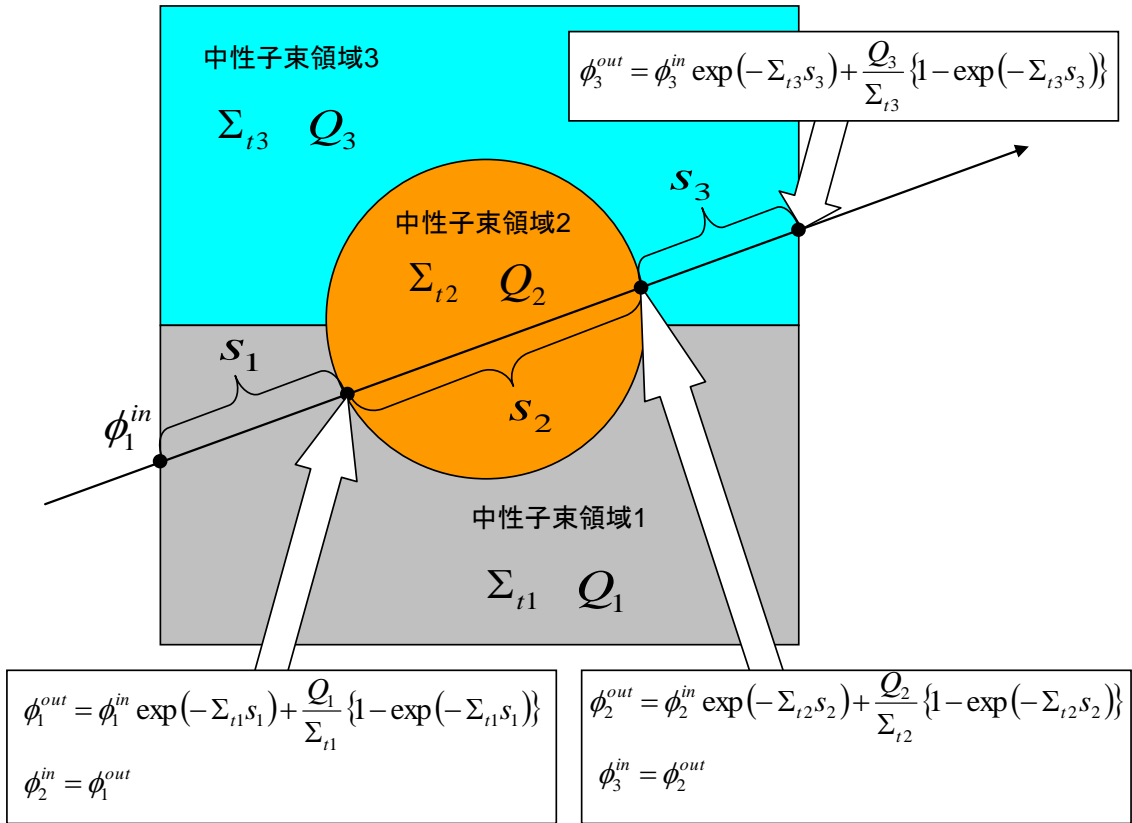


Fig.2.4 複数の中性子束領域についての入射中性子束と放出中性子束

したがって、あらゆる方向の CL を体系の端から端まで無数に引くことができれば、各中性子束領域のスカラー中性子束を正確に求めることが可能となる。実際には、あらゆる方向について無数の CL を引くことは不可能であるので、CL の方向や位置を離散化して計算が行われる。次項で詳しく説明するが、CL の方向、位置、引き方のルールを決定し、それ

らに基づいて体系内に CL を引いていく操作を ray tracing と呼ぶ。Ray tracing では CL の方向を決定後、その方向について体系内に平行に CL を引いていく。それを概念的に示した図が Fig. 2.5 である。

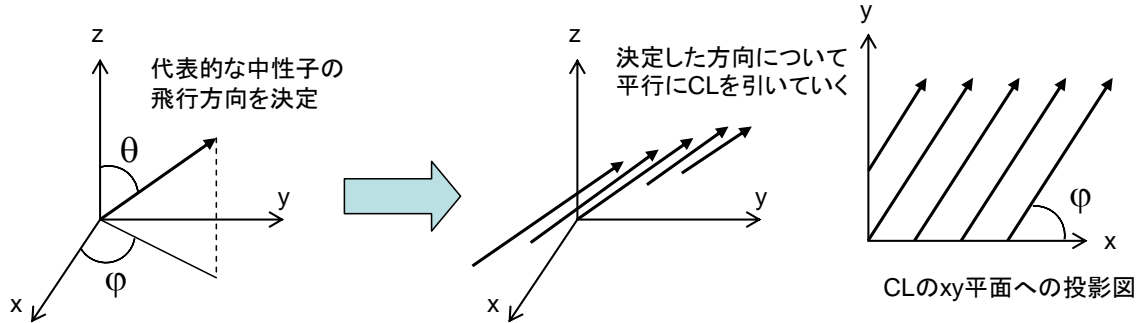


Fig. 2.5 Ray tracing の概念図

ここで、ray tracing に関する基礎的な語句の説明を行う。Fig. 2.6 にあるように、CL が代表している範囲を strip、strip と体系を構成する図形で囲まれている部分を segment、segment が CL を切り取る長さを segment 長と呼ぶ。また、strip の幅を ray separation と呼ぶ。

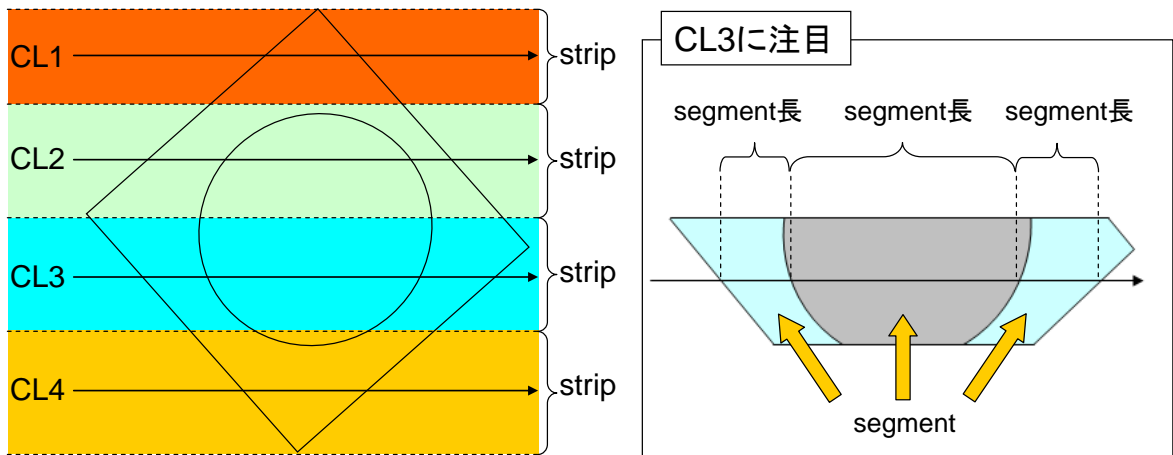


Fig. 2.6 Ray tracing に関する基礎的な語句の説明

次に MOC でのスカラー中性子束の求め方について考える。方向 m 、エネルギー g で中性子束領域 i を通過する k 番目の CL における入射中性子束、放出中性子束、segment 長をそれぞれ $\phi_{i,m,g,k}^{in}$ 、 $\phi_{i,m,g,k}^{out}$ 、 $s_{i,m,k}$ とし、中性子束領域 i 、エネルギー g のスカラー中性子束を $\Phi_{i,g}$ とすると、(2.18)式より以下の式が成り立つ。

$$\phi_{i,m,g,k}^{out} = \phi_{i,m,g,k}^{in} \exp\left(-\frac{\Sigma_{t,i,g} s_{i,m,k}}{\sin \theta_m}\right) + \frac{Q_{i,m,g}}{\Sigma_{t,i,g}} \left\{ 1 - \exp\left(-\frac{\Sigma_{t,i,g} s_{i,m,k}}{\sin \theta_m}\right) \right\} \quad (2.19)$$

$$\Phi_{i,g} = \sum_m \omega_m \frac{\sum_{k \in i} \delta A_{i,m,k} \int_0^{s_{i,m,k}} \phi_{i,m,g,k}(s) ds}{\sum_{k \in i} \delta A_{i,m,k} \int_0^{s_{i,m,k}} ds} \quad (2.20)$$

等方中性子源を仮定し、(2.20)式を変形すれば、(2.21)式が得られる。

$$\Phi_{i,g} = \frac{Q_{i,m,g}}{\Sigma_{t,i,g}} + \frac{1}{\Sigma_{t,i,g}} \sum_m \omega_m \sin \theta_m \frac{\sum_{k \in i} \delta A_{i,m,k} (\phi_{i,m,g,k}^{in} - \phi_{i,m,g,k}^{out})}{\sum_{k \in i} \delta A_{i,m,k} s_{i,m,k}} \quad (2.21)$$

(2.20)式は中性子束領域 i における体積積分であるので、(2.21)式第 2 項の分母は中性子束領域 i の体積と等しいことが望まれる。しかし、実際には CL を空間的に離散化しているため、(2.20)式第 2 項の分母と体積が等しくなるとは限らない。そこで、segment 長を(2.22)式のように補正する。補正後の segment 長 $t_{i,m,k}$ を用いれば、(2.19)式、(2.21)式はそれぞれ(2.23)式、(2.24)式のように変形できる。

$$t_{i,m,k} = s_{i,m,k} \frac{V_i}{\sum_{k \in i} \delta A_{i,m,k} s_{i,m,k}} \quad (2.22)$$

$$\phi_{i,m,g,k}^{out} = \phi_{i,m,g,k}^{in} \exp\left(-\frac{\Sigma_{t,i,g} t_{i,m,k}}{\sin \theta_m}\right) + \frac{Q_{i,m,g}}{\Sigma_{t,i,g}} \left\{1 - \exp\left(-\frac{\Sigma_{t,i,g} t_{i,m,k}}{\sin \theta_m}\right)\right\} \quad (2.23)$$

$$\Phi_{i,g} = \frac{Q_{i,g}}{\Sigma_{t,i,g}} + \frac{1}{\Sigma_{t,i,g} V_i} \sum_m \omega_m \sin \theta_m \sum_k \delta A_{i,m,k} (\phi_{i,m,g,k}^{in} - \phi_{i,m,g,k}^{out}) \quad (2.24)$$

ただし、中性子源 $Q_{i,g}$ は(2.25)式によって求める。

$$Q_{i,g} = \frac{1}{4\pi} \left\{ \frac{\chi_{i,g}}{k_{eff}} \sum_{g'} \nu \Sigma_{f,i,g'} \Phi_{i,g'} + \sum_{g'} \nu \Sigma_{s,i,g' \rightarrow g} \Phi_{i,g'} \right\} \quad (2.25)$$

このようにして、スカラー中性子束を求めることができる。

2.1.3 セル境界における角度中性子束の接続

Ray tracing を行う際、体系全体に対して行う方法とセルごとに行う方法（MRMB 法：memory reduction method for macroband）^[10]がある。これらについて以下で説明する。

- 体系全体に対して ray tracing する方法

この方法では、Fig. 2.7 のように体系全体に対して ray tracing を行う

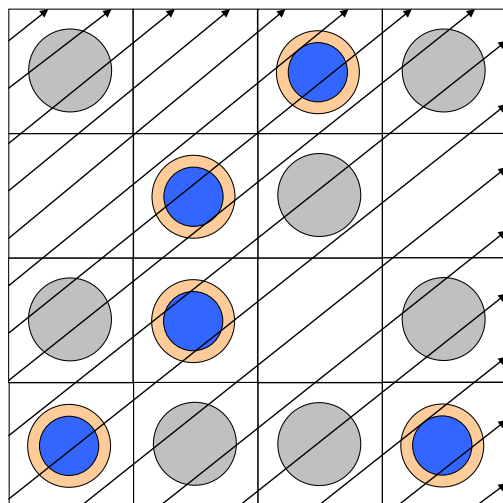


Fig. 2.7 体系全体に対して ray tracing を行う方法

この方法では、特に体系が大きい場合、ray tracing に多大な演算量やメモリ量が必要とになってしまう。

- MRMB 法

この方法では、Fig. 2.8 のようにセルごとに ray tracing を行う。

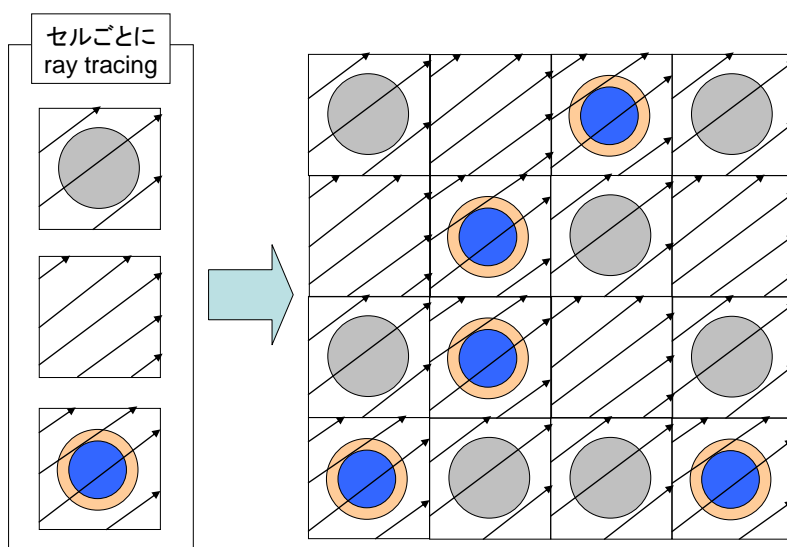


Fig. 2.8 MRMB 法での ray tracing

MRMB 法では、互いに異なる種類のセルについてのみ ray tracing を行うので、体系全体に対して ray tracing を行う方法に比べ、ray tracing に関する演算量、メモリ量を削減することができる。Fig. 2.7、Fig. 2.8 に示した体系では、MRMB 法を用いることで ray tracing に必要な演算量、メモリ量をどちらも約 $3/16$ に削減できている。集合体体系、全炉心体系では、体系の大部分が同じ形状の燃料棒によって構成されているため、より MRMB 法が効果的となる。なお、本研究で作成した MOC のプログラムでは MRMB 法を採用しており、本論文では MRMB 法で計算を行うことを前提として議論を進める。

次に、セル境界での角度中性子束の接続について説明する。Fig. 2.9 に示したように、セルの境界において、角度中性子束の放出点と入射点は必ずしも一致するとは限らない。何らかの操作を行って、セル境界における放出中性子束の値から入射中性子束の値を算出する操作を本論文では角度中性子束の接続と呼ぶ。

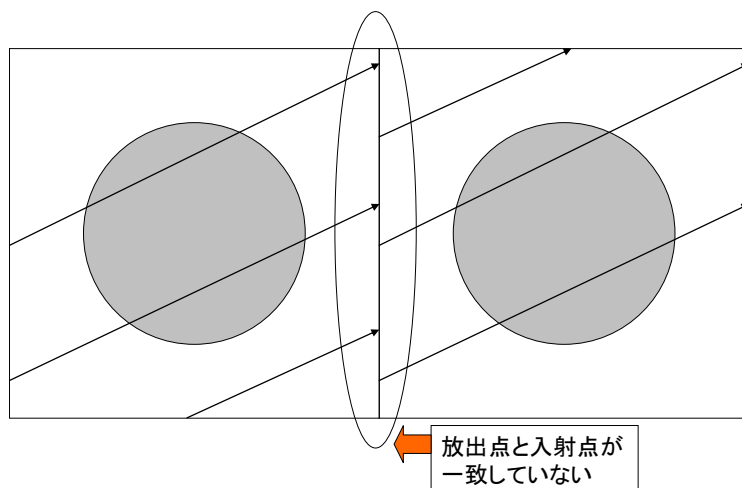


Fig. 2.9 セル境界における CL の不連続性

なお、体系全体に対して ray tracing を行う場合であれば、cyclic tracking という方法を用いることで角度中性子束の接続誤差を完全に排除することができる。Cyclic tracking とは Fig. 2.10 にあるように CL が体系の境界で反射を繰り返し、最終的には元の入射位置に戻ってくるように ray tracing を行う手法である。

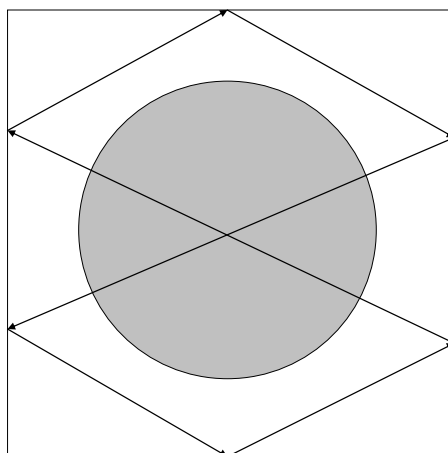


Fig. 2.10 Cyclic tracking の例

MRMB 法を行う場合については次の 3 通りの対処方法が知られている。

- ・ 内挿する方法

この方法では、Fig. 2.11 のように放出中性子束 ϕ_1^{out} 、 ϕ_2^{out} を(2.26)式によって内挿することで入射中性子束 ϕ^{in} を算出する。

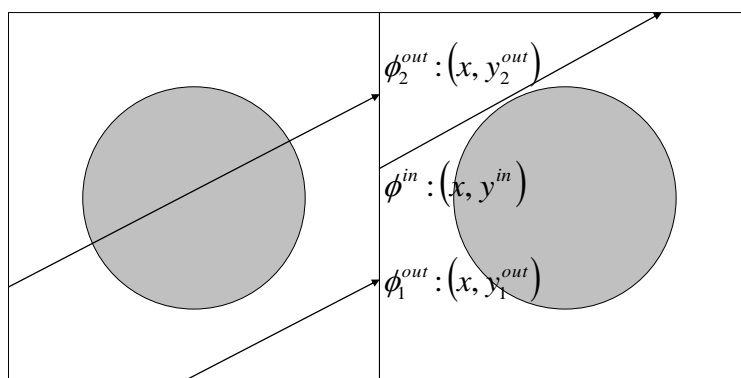


Fig.2. 11 セル境界における放出中性子束の内挿による入射中性子束の算出

$$\phi^{in} = \frac{y_2^{out} - y^{in}}{y_2^{out} - y_1^{out}} \phi_1^{out} + \frac{y^{in} - y_1^{out}}{y_2^{out} - y_1^{out}} \phi_2^{out} \quad (2.26)$$

- ・ 最も近接している放出中性子束の値を使用する方法

この方法では、入射中性子束の値には入射点から最も近い位置で放出される放出中性子束の値が代入される。例えば、Fig.2. 11 の場合であれば(2.27)式のように ϕ^{in} には ϕ_2^{out} が代入される。

$$\phi^{in} = \phi_2^{out} \quad (2.27)$$

- ・ 境界上での放出中性子束の平均値を使用する方法

この方法では、Fig. 2.12 のように、セル境界に小さな区間を考え、その区間内で放出される角度中性子束の平均値を計算し、その平均値をその区間において入射する角度中性子束の値とする。つまり、(2.28)式によって ϕ^{in} を決める。

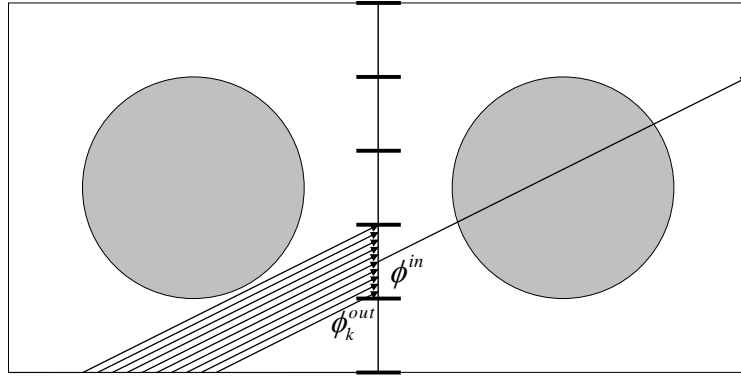


Fig.2.12 放出中性子束の平均値を採用する方法

$$\phi^{in} = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \phi_k^{out} \quad (2.28)$$

2.1.4 Ray tracing のパラメータ

MOC での核計算は大きく分けて ray tracing と固有値計算の 2 つの操作から成る。Ray tracing によって取得し得る情報の中で、固有値計算において必要な情報は以下の 4 つである。

- ① 各 segment が属する中性子束領域の番号
- ② 各 segment の segment 長
- ③ 各 strip の ray separation
- ④ セル境界における角度中性子束の接続に関する情報

①～③により、(2.23)式、(2.24)式に基づいて角度中性子束およびスカラー中性子束を計算することが可能になり、④により角度中性子束の接続が可能になる。したがって、ray tracing では①～④の情報を得ることが目的となる。これらの情報を得るには、体系を構成する図形と CL との交点を求める必要がある。逆に言えば、交点が求められれば、①～④の情報は容易に得ることができる。よって、ray tracing では、まず交点計算を行い、求めた交点を基に①～④を求めればよい。

次に ray tracing のパラメータについて説明を行う。Ray tracing を行う際のパラメータとしては以下のようなものが挙げられる。

- ① 極角方向分割数
- ② 極角方向分割方法
- ③ 方位角方向分割数
- ④ 方位角方向分割方法
- ⑤ トレース方法
- ⑥ Ray separation

上述した通り、あらゆる方向について無数の CL を引くことは不可能であるので、スカラー中性子束の計算の際には(2.29)式のように数値積分が用いられる。

$$\Phi_i = \int_0^{\pi/2} \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-\infty}^{\infty} d\rho \phi_i(\theta, \varphi, \rho) \approx \sum_j \sum_k \sum_l \omega_{\theta,j} \omega_{\varphi,k} \omega_{\rho,l} \phi_{i,j,k,l} \quad (2.29)$$

したがって、①～⑥のパラメータは(2.29)式で表される数値積分に関するパラメータである。以下でこれらのパラメータについて順番に説明を行っていく。

① 極角方向分割数

本論文では極角方向を CL と z 軸の成す角と定義する。MOC では CL の方向を決定する際、極角方向と方位角方向はそれぞれ独立に決定される。こうすることで、ray tracing は xy 平面上での二次元的なもので十分となり、ray tracing に必要な演算量とメモリ量を低減することができる。本研究で対象とするのは二次元の MOC であり、 $0 \leq \theta \leq \pi/2$ の範囲と $\pi/2 \leq \theta \leq \pi$ の範囲で角度中性子束の値は完全に対称であるので、極角に関しては

$0 \leq \theta \leq \pi/2$ の範囲のみを考える。極角方向分割数とは、中性子の極角方向の飛行を代表するような極角の数のことである。つまり、極角方向の中性子束の数値積分に用いる分点の数のことである。以下では極角方向分割数を N_θ と表記する。

② 極角方向分割方法

極角方向を N_θ 個に分割する場合、どのような極角を代表的な極角とみなし、その極角に対しどのような重みを与えるかを考える必要がある。以下では、極角とその重みの組み合わせを極角分点セットと呼び、極角分点セットの選び方のことを極角方向分割方法と呼ぶ。

現在までに知られている極角分点セットを以下で説明する。ただし、 i 番目の極角およびその重みをそれぞれ θ_i 、 $\omega_{p,i}$ とおく。

・ 等分割分点セット (Uniformly distributed angle quadrature set)

この分点セットでは、それぞれの CL が代表する極角の幅がすべて等しくなるように角度を設定する。つまり、台形公式による数値積分での分点セットのことである。詳しい説明は省くが、この分点セットでの極角およびその重みはそれぞれ(2.30)式、(2.31)式で与えられる。

$$\theta_i = \cos^{-1} \left[\frac{1}{2} \left\{ \cos \left(\frac{(m-1)\pi}{2N_\theta} \right) + \cos \left(\frac{m\pi}{2N_\theta} \right) \right\} \right] \quad (2.30)$$

$$\omega_{p,i} = \cos \left(\frac{(m-1)\pi}{2N_\theta} \right) - \cos \left(\frac{m\pi}{2N_\theta} \right) \quad (2.31)$$

・ Gauss-Legendre 分点セット (Gauss-Legendre quadrature set)

(2.32)式のように連続的な積分を、離散的に選んだ分点での関数値と重みの積の和で近似する数値積分法を Gauss 型積分公式と呼ぶ。

$$\int_a^b f(x) dx \approx \sum_i \omega_i f(x_i) \quad (2.32)$$

この方法において、Legendre 多項式の根を分点にし、それらの分点について Lagrange 補間を考慮に入れた重みを採用する方法を Gauss-Legendre 区分求積法と呼び、この分点と重みの組み合わせを Gauss-Legendre 分点セットと呼ぶ。Gauss 型積分公式や Gauss-Legendre 分点セットの詳細については Appendix で説明する。この分点セットを用いた場合、分点数 N で $2N-1$ 次以下の任意の多項式を正確に積分することが可能である。

- Leonard の最適極角分点セット (Leonard's optimum quadrature set) [11]

この分点セットは MOC 専用の極角分点セットであり Leonard らによって提案された。核分裂によって生じた中性子が最初の衝突を起こす確率を考慮して導出されている。この分点セットについては第 3 章で詳しく説明する。

以下では、極角方向の分割方法と分割数をまとめて表記する。また、分割方法は次のように省略する。

等分割分点セット→UDA

Gauss-Legendre 分点セット→GL

Leonard's optimum quadrature set→L_OPT

例えば、分点数 4 の等分割分点セットの場合、「4UDA」と省略して書く。

③ 方位角方向分割数

本論文では方位角方向を、 xy 平面上に CL を投影した線と x 軸が成す角と定義する。方位角については $0 \leq \theta \leq 2\pi$ の範囲を考える。方位角方向分割数とは、中性子の方位角方向の飛行を代表するような方位角の数のことである。つまり、方位角方向の中性子束の数値積分に用いる分点の数のことである。以下では方位角方向分割数を N_φ と表記する。

④ 方位角方向分割方法

方位角方向を N_φ 個に分割する場合、どのような方位角を代表的な方位角とみなし、その方位角に対しどのような重みを与えるかを考える必要がある。以下では、極角とその重みの組み合わせを方位角分点セットと呼び、方位角分点セットの選び方のことを方位角方向分割方法と呼ぶ。現在までに知られている方位角分点セットを以下で説明する。ただし、 i 番目の方位角およびその重みをそれぞれ φ_i 、 $\omega_{a,i}$ とする。

- 等分割分点セット (Uniformly distributed angle quadrature set)

極角分割方法については、極角方向の数値積分誤差を低減するように分点と重みが選ばれていた。しかし、角度中性子束の方位角方向の分布は極角方向のそれに比べ変化が激しく、体系によってもその分布は大きく異なる。したがって、一般的な問題に対し有効な方位角分点セットは困難であり、現在のところこのような分点セットはまだ見つからない。特別な方策がないので方位角については等分割に分割する方法がよく使われる。等分割分点セットでの方位角およびその重みはそれぞれ(2.33)式、(2.34)式の通りである。

$$\varphi_i = \left(i - \frac{1}{2} \right) \frac{2\pi}{N_\varphi} \quad (i = 1, 2, \dots, N_\varphi) \quad (2.33)$$

$$\omega_{a,i} = \frac{1}{N_\varphi} \quad (2.34)$$

- **Cyclic tracking** のための分点セット

等分割分点セットとは別の分割方法として **cyclic tracking** を行うための分点セットが挙げられる。上述した通り、**cyclic tracking** とは Fig. 2.10 のように、セル境界において角度中性子束の放出点と入射点が一致するように **ray tracing** を行う方法である。この分点セットはあくまで **cyclic tracking** を行うためのものであり、方位角方向の数値積分誤差を低減することを狙ったものではない。

以下では、方位角方向の分割方法と分割数をまとめて表記する。また、分割方法は次のように省略する。

等分割分点セット→UDA

Cyclic tracking のための分点セット→CT

例えば、分点数 64 の等分割分点セットの場合、「64UDA」と省略して書く。

⑤ トレース方法

①～④によって決定した CL の方向について、どのような規則で平行に線を引いていくかを考える必要がある。このような規則のことを本論文ではトレース方法と呼ぶ。現在までに知られているトレース方法を以下で説明する。

- **Equidistant** 法

このトレース方法では、Fig. 2.13 のようにセル全体に対し、等間隔に CL を引く。

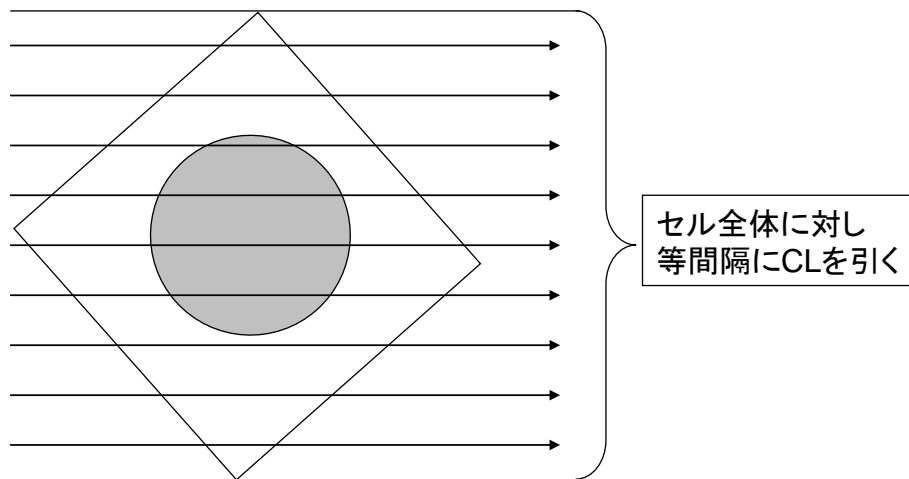


Fig. 2.13 Equidistant 法

このトレース方法には、**segment** 内に複数の物質が存在する可能性があること、**strip** 内に幾何学的な不連続点が含まれることから、数値積分の安定性に悪影響を与える可能性があることなどの問題点がある。

- Macroband 法

このトレース方法では、Fig. 2.14 のように、あらかじめ不連続点を通るように線を引き、それらの線で作られる帯 (macroband) を考え、各 macroband 内に等間隔に CL を引く。Macroband という概念を用いて equidistant 法について考えれば、equidistant 法はセル全体を1つの macroband として CL を引く方法であると見ることもできる。

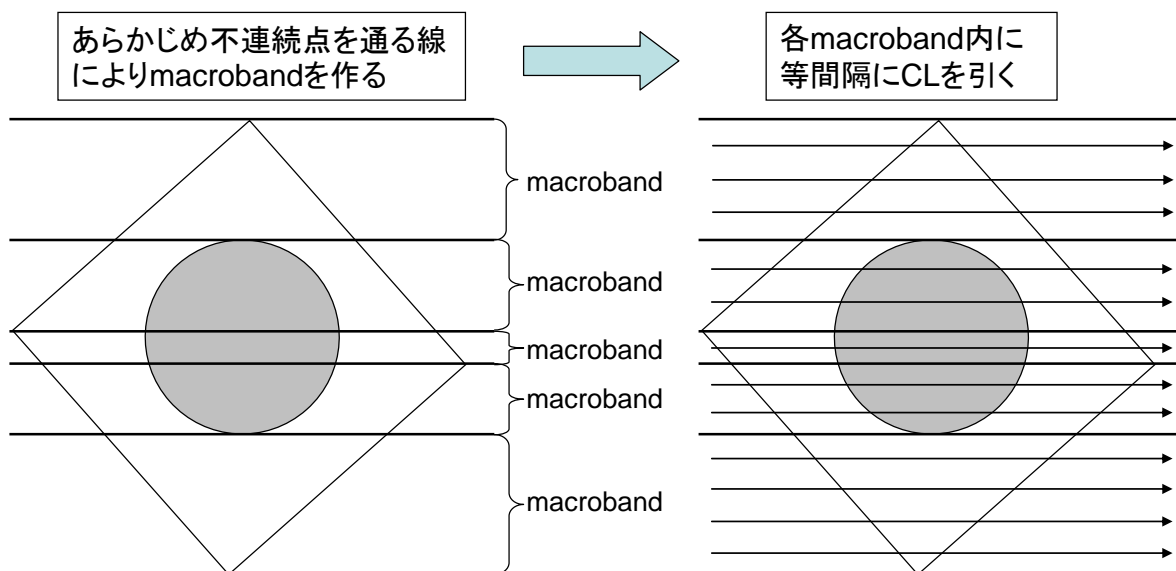


Fig.2. 14 Macroband 法

Macroband 法は material region macroband 法 (以下 MRM 法) と flux region macroband (以下 FRM 法) に分類することができる。前者は物質領域を形成している図形についての不連続点から macroband を作るのに対し、後者は中性子束領域を形成する図形 (つまりセルを構成するすべての図形) についての不連続点から macroband を作る。Macroband 法を採用することにより、「segment 内に複数の物質領域が存在する可能性がある」という equidistant 法の問題点を解消することができる。さらに、FRM 法であれば、「strip 内に幾何学的な不連続点を含む可能性がある」という問題点も解消することができる。

- Gauss-Legendre 区分求積法を用いた macroband 法^[12]

上述した macroband 法では、macroband 内に等間隔に CL を引いたが、このトレース方法では Gauss-Legendre 区分求積法に基づいて CL を引く。(2.29)式で見られるように、MOC では各 CL での角度中性子束の値を数値積分することでスカラー中性子束を求めており、CL の位置が数値積分における分点、ray separation がその重みに相当する。したがって、macroband 内を等間隔に分割するのではなく、Gauss-Legendre 分点セットに基づいて CL の位置と ray separation を決めれば、数値積分誤差の低減が期待できる。このトレース方法を簡単に示した図が Fig. 2.15 である。このトレース方法にも macroband を作る際に物質領域を基にしたものと中性子束領域を基にしたものの 2 種類が存在する。本論文では、

前者を MRMGL 法、後者を FRMGL 法と呼ぶことにする。

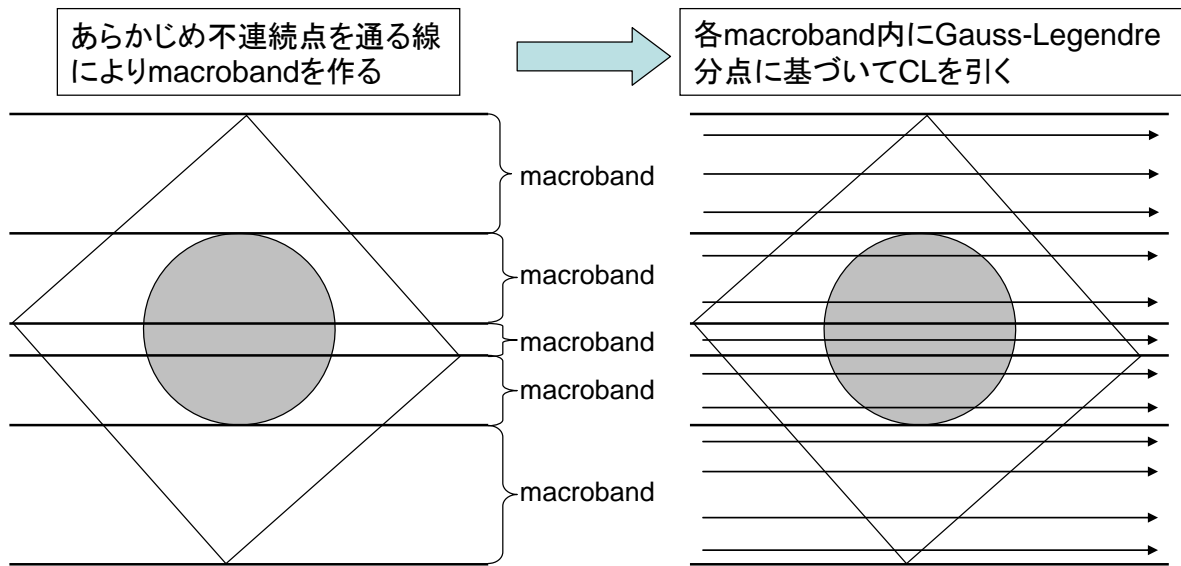


Fig.2.15 Gauss-Legendre 区分求積法を用いた macroband 法

⑥ Ray separation

トレース方法によって CL を引いていく規則は決まったので、最後に各 CL の間隔を決める必要がある。上でも述べたが、この間隔のことを本論文では ray separation と呼ぶ。Equidistant 法や等間隔の macroband 法では、ray separation の最大値を設定し、どの ray separation も設定した最大値を超えないような最小の数の CL を引くようにしている。つまり、次の(2.35)式と(2.36)式に基づいて ray separation を決定する。ただし、equidistant 法の場合、セル全体を1つの macroband とみなす。

$$N_{CL} = \left[\frac{\delta M}{\delta A_{\max}} \right] + 1 \quad (2.35)$$

$$\delta A = \frac{\delta M}{N_{CL}} \quad (2.36)$$

式中の δM 、 N_{CL} 、 δA 、 δA_{\max} はそれぞれ macroband の幅、macroband 内に引かれる CL の本数、ray separation、ray separation の最大値であるまた、(2.35)式右辺の [] はガウス記号であり、 $[x]$ は x を超えない最大の整数を意味する。

MRMGL 法や FRMGL 法では、(2.35)式に基づいて macroband 内の CL の本数を決定し、その本数と同じ分点数の Gauss-Legendre 分点セットを用いて CL の位置と ray separation を決める。

以下では、トレース方法と ray separation をまとめて表記する。例えば、FRM 法で最大の ray separation が 0.01cm の場合、「0.01FRM」と省略して書く。

2.1.5 計算の流れ

前項までで、MOC の概念の説明や計算に必要な数式の導出は行えたので、最後に計算手順を始めからまとめて書く。

上述した通り、MOC は ray tracing と固有値計算の2つの操作から成る。まず、ray tracing により固有値計算で必要となる種々の情報を得る。これらの情報は体系を構成する図形と CL の交点を求めることで容易に得ることができる。そして、ray tracing 終了後、Fig. 2.1 に示したフローチャートにしたがって固有値計算を行う。これらの一連の操作を Fig. 2.16 にまとめる。

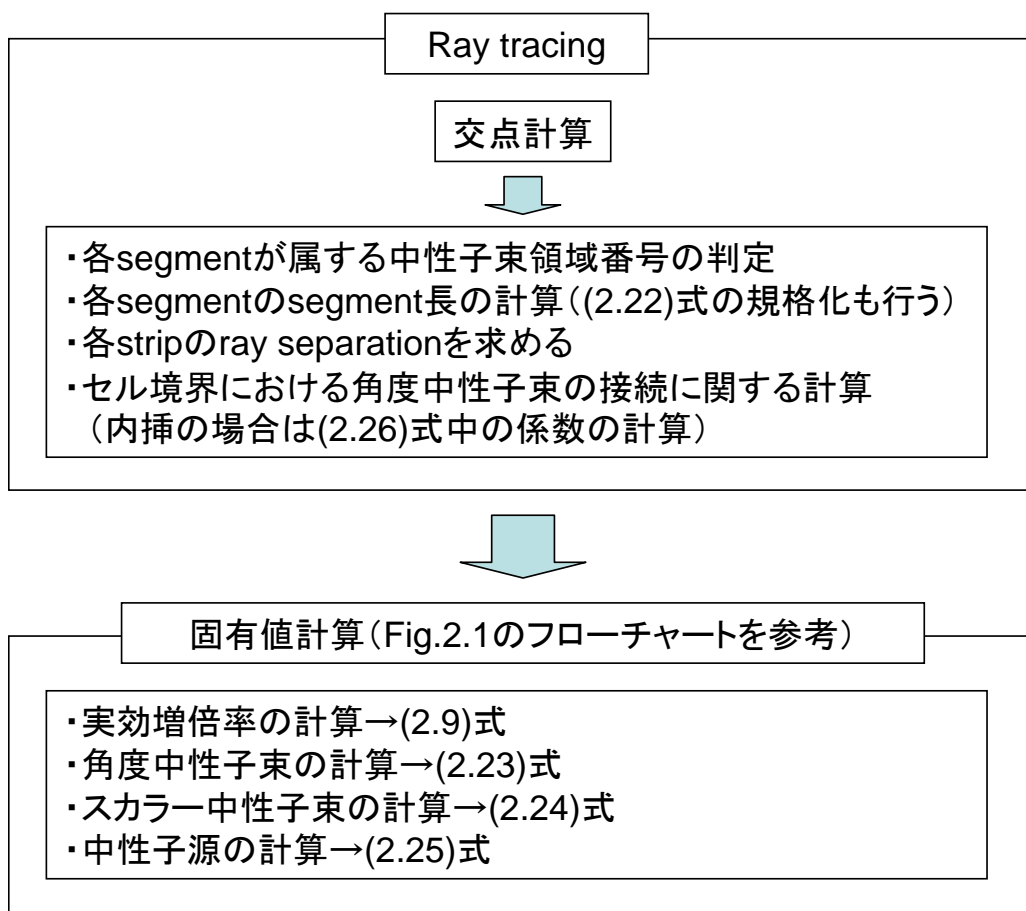


Fig.2. 16 MOC の計算の全体の流れ

本研究は、計算モデルの改良を行うので、既存の計算コードを用いて研究を行うことができない。したがって、本研究は自作のプログラムを用いて行った。この自作のプログラムを MASAT2D (Multiple Application Code for Simple Fuel Assembly Using Transport Calculation in 2-Dimensional Geometry) と呼ぶことにする。MASAT2D の概要については Appendix で紹介する。また、本研究での検証計算では、①単ピンセル体系、②C5G7 ベンチマーク問題^[13]の2通りの計算体系が用いられたが、これらの説明も Appendix. B で行う。

2.2 MOC における計算誤差の発生要因

2.2.1 中性子束平坦化誤差

MOC では中性子束領域内のスカラー中性子束を一定と仮定している。このような仮定をすることで、中性子束領域内の中性子源は一定となるので(2.23)式によって角度中性子束を求めることが可能になる。また、中性子束領域内のスカラー中性子束の分布を考慮しないのであれば、各中性子束領域について平均的なスカラー中性子束を求めればよいので、(2.24)式によって容易にスカラー中性子束を計算することができる。しかし、実際の中性子束領域内にはスカラー中性子束の分布があるので、それを平坦化することにより、誤差が生じる。条件によってはスカラー中性子束の分布が激しく変化する場合もあり得る。そのような場合には、中性子束領域のメッシュを詳細に設定する必要があり、計算に多大な時間を要することになる。

中性子束領域のメッシュ分割について様々な設定方法があるが、本論文では以下のような分割を考える。以下では、「X○Y△」と書いた場合、セル内に x 軸に垂直な線を等間隔に○本、y 軸に垂直な線を等間隔に△本を設定することを意味する。また、方位角方向にメッシュを切るときは「X○Y△A」のように書くこととする（本論文では方位各方向のメッシュ分割については 45° 方向のみを考える）。例えば、「X3Y2」、「X3Y2A」の場合、それぞれ Fig. 2.17 に示したような中性子束領域が設定される。

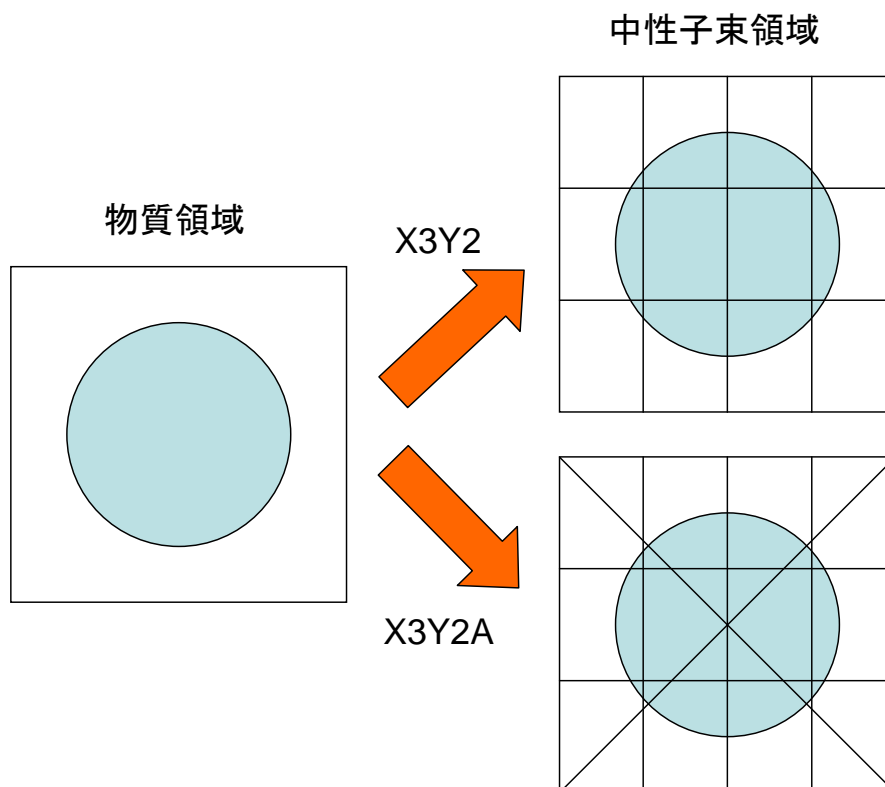


Fig. 2.17 中性子束領域の設定方法

2.2.2 極角方向離散化誤差

MOC では、極角方向を離散化して扱うため離散化誤差が発生する。Fig. 2.18 に角度中性子束の極角方向分布の一例を図示する。Fig.2.18 の分布は、後述する C5G7 ベンチマーク問題において Fig. 2.19 の位置での1群の角度中性子束の極角方向分布をプロットしたものである。

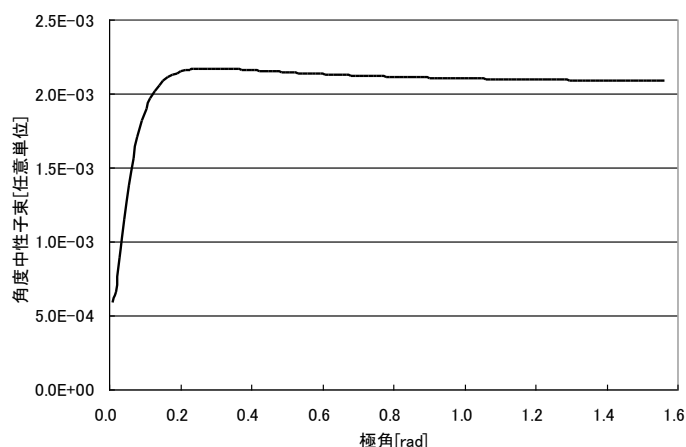


Fig. 2.18 角度中性子束の極角方向分布の例

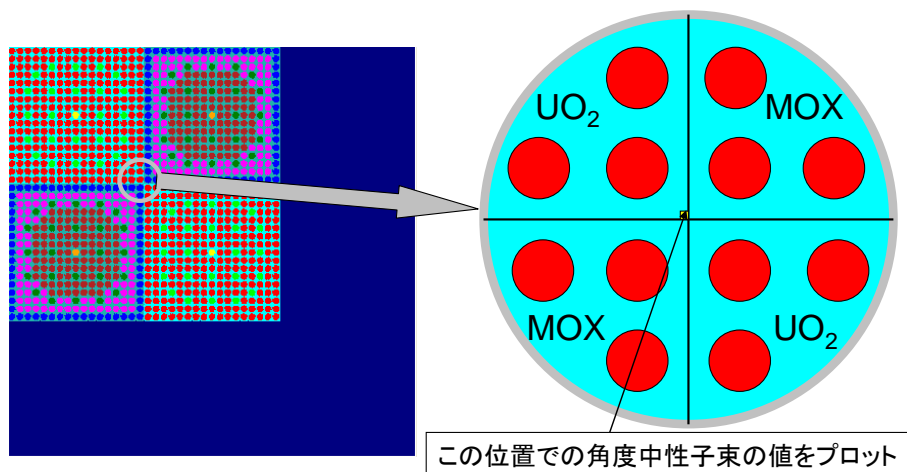


Fig.2.19 角度中性子束を計算した位置

Fig. 2.18 より、角度中性子束の極角方向分布は、極角が小さいとき、大きく変化しているが、極角が 0.2rad を超えたあたりからは滑らかな分布になっていることが分かる。分布の傾向はエネルギー群や位置によって異なるが、 z 軸方向に断面積の変化がないので、どのエネルギー、どの位置においても Fig. 2.19 のように比較的滑らかな分布になることが予想される。したがって、 $0 \leq \theta \leq \pi/2$ の範囲において数点～十数点程度の分点があれば、精度良く数値積分できることが予想できる。

2.2.3 方位角方向離散化誤差

極角方向の場合と同様に、MOC では方位角方向を離散化して扱うので、離散化誤差が発生する。Fig. 2.20 に角度中性子束の方位角方向の分布を図示する。Fig. 2.20 の分布は、極角方向のときと同様に、C5G7 ベンチマーク問題において Fig. 2.19 の位置での 1 群の角度中性子束の方位角方向分布をプロットしたものである。ただし、方位角 φ は CL を xy 平面上に投影した線が x 軸と成す角と定義する。

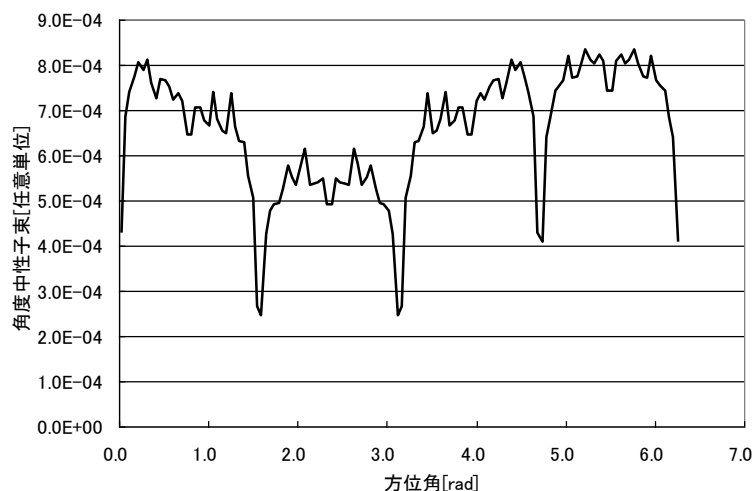


Fig.2.20 角度中性子束の方位角方向分布の例

Fig.2.20 より、角度中性子束の方位角方向分布には、極めて激しい変化が見られることが分かる。これは、方位角によって、CL の飛行履歴（どの物質中をどの程度通過してきたか）が大きく異なるためである。また、角度中性子束の分布に多くのピークが見られるのは、燃料棒が離散的に配置されているためであると考えられる。分布の傾向はエネルギー群や位置によって異なるものの、極角方向の分布に比べ激しい変化を持つ分布になることが予想される。したがって、方位角方向の数値積分を精度良く行うためには、 $0 \leq \varphi \leq 2\pi$ の範囲を数十～百数十もの分点が必要となることが予想できる。

2.2.4 CL の離散化誤差

MOC では、CL の位置を離散化することにより、離散化誤差が発生する。ここで示している離散化誤差とは、(2.24)式右辺第 2 項の数値積分誤差のことである。トレース方法と ray separation の決め方によって、CL の位置と重みが決まるので、この誤差はこれらの ray tracing パラメータに依存する。上述したように、等間隔に CL を引く equidistant 法では、strip 内に不連続点を含んでしまい、そのことが数値積分の安定性に悪影響を与える。

2.2.5 セル境界での角度中性子束接続誤差

上述したように、cyclic tracking を用いない場合、セル境界で角度中性子束を接続する必要がある。この際に何らかの近似が行われるため、誤差が発生する。前節で、角度中性子

束の接続方法として 3 通りの方法を説明したが、いずれの接続方法でも、ray separation を小さくし CL の数を増やせば、誤差を小さくすることができる。CL の離散化誤差と相殺されてしまうので、この誤差だけを評価するのは難しい。本研究では、計算量と精度のバランスを考慮し、線形補間での内挿によって角度中性子の接続を行うものとする。

2.2.6 丸め誤差

計算機では、実数を有限桁の浮動小数点数として扱っている。つまり、実数を離散的な小数で表現していることになる。実数での演算結果を離散的な浮動小数点数に変換するための操作を丸めと呼び、この丸めによって生じる誤差のことを丸め誤差と呼ぶ。1 つの演算に対する丸め誤差は無視しうるほど小さいが、これらが蓄積すれば無視できなくなる可能性がある。これを MOC について考えてみる。倍精度での計算であれば、丸め誤差は無視できる程度であると考えられるが、単精度での計算の場合は丸め誤差に注意する必要がある。MOC において丸め誤差に注意すべき操作は、ray tracing の際の中性子束領域の判定や固有値計算全体である。これは ray tracing での中性子束領域の判定において大きな丸め誤差があると、領域を正しく判定できない可能性があることや、固有値計算では多数回の加減乗除を行うので丸め誤差が蓄積しやすいからである。場合によっては、蓄積した丸め誤差により固有値計算での各反復における近似解が振動し、収束性に悪影響を与えることもある。

2.3 本研究の方針

2.3.1 各誤差の重要度と低減方法

前節で 6 種類の誤差発生要因について説明を行った。このうち、丸め誤差については、「MOC におけるより高精度な計算モデルの考案」という本研究の趣旨に沿っていないので本研究では考慮しない。ここでは、残りの 5 種類の誤差について、それぞれの重要度と低減方法を考える。まず、それぞれの誤差の大きさや挙動を調べるため、C5G7 ベンチマーク問題について計算を行った。C5G7 ベンチマーク問題を選んだ理由として、この問題は、体系がある程度大きいこと、非均質性が大きいこと、中性子スペクトルの変化が激しいことなどから、実際の炉心の持つ性質の多くを反映していると考えられるからである。計算に用いるセルの幾何形状を示したものを Fig. 2.21 に、計算体系を簡略的に図示したものを Fig. 2.22 に、各燃料集合体中の燃料棒配置を示したものを Fig. 2.23 にそれぞれ示す。

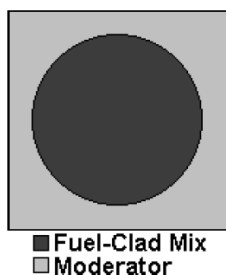


Fig. 2.21 セルの幾何形状

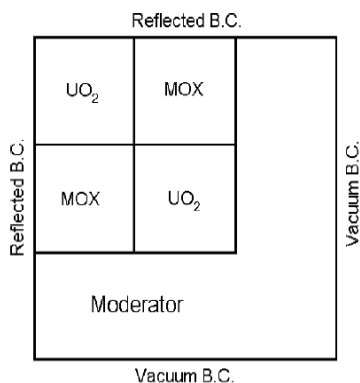


Fig. 2.22 C5G7 ベンチマーク問題の計算体系

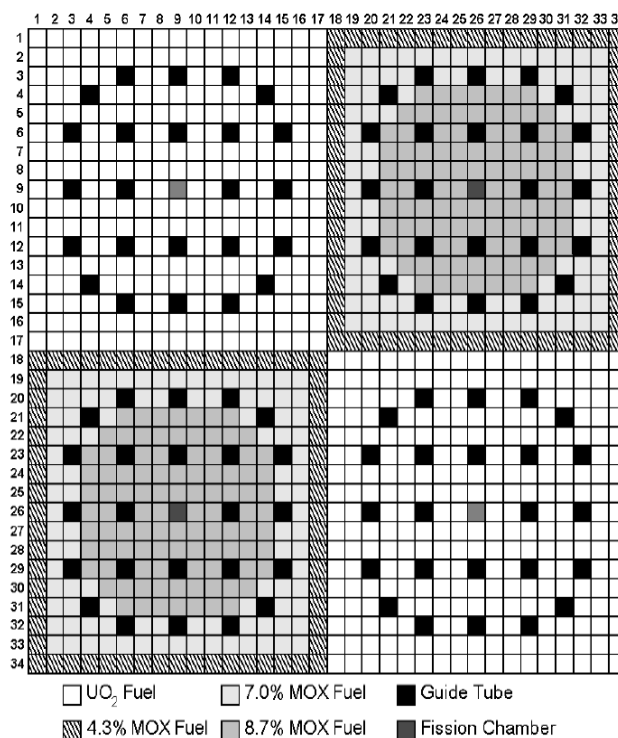


Fig. 2.23 各集合体の燃料棒配置

セルのピッチは $1.26\text{cm} \times 1.26\text{cm}$ 、セル内部の燃料、被覆管、ギャップは均質化されており、その半径は 0.54cm である。①極角方向分割数、②方位角方向分割数、③ray separation、④中性子束領域の設定の4種類のパラメータを変えたときの、差異の変化を調べた。それぞれの誤差をできる限り分離するため、①～④についてのベースとなる計算条件を考え、どれかのパラメータを変化させる場合、他3つのパラメータをベースの計算条件に固定するようにして計算を行った。参照解としては、他3つのパラメータをベースの計算条件に固定した状態で、注目しているパラメータを詳細な条件に設定した際の解を使用した。ただし、5種類の誤差要因のうち、CL位置離散化誤差と角度中性子束接続誤差は分離することができなかつたので、ray separation を変化させることによって変化するものは、これら両方の誤差の和である。ベースとなる計算条件を Table 2.1 に示す。

Table 2.1 単ピンセル計算でベースとなる計算条件

極角	4UDA ^{*1}
方位角	64UDA ^{*2}
ray separation	0.05MRM ^{*3}
領域メッシュ	X5Y5 ^{*4}

*1) 21 ページ,6 行目を参照 *2) 22 ページ,8 行目を参照
 *3) 24 ページ,35 行目を参照 *4) 26 ページ,12 行目を参照

領域メッシュの例として、ベースの計算条件での中性子束領域を Fig. 2.24、Fig. 2.25 に示す。Fig. 2.24 は燃料集合体内のセルについてであり、Fig. 2.25 は減速材領域のセルにつ

いてである。

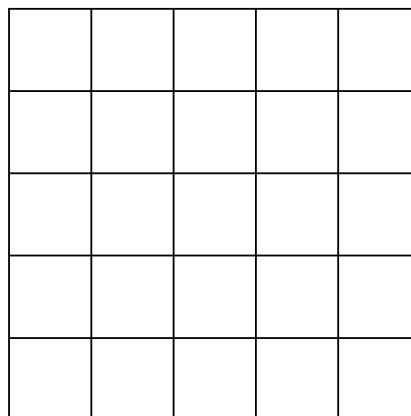
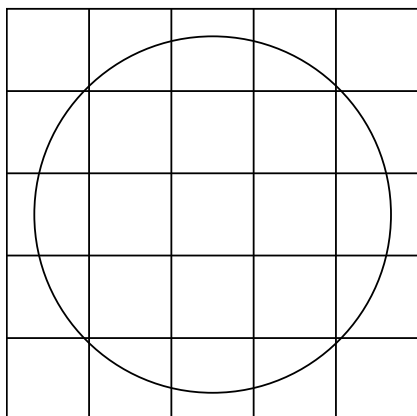


Fig. 2.24 中性子束領域（集合体内のセル） Fig. 2.25 中性子束領域（減速領域のセル）

また、パラメータを変化させる範囲および参照解となる計算条件を Table 2.2 にまとめる。

Table 2.2 パラメータを変化させる範囲および参照解となる計算条件

	変化させる範囲	参照解
極角	1~8,10,12,16UDA ^{*1}	20UDA ^{*1}
方位角	8,16,24,32,48,64,96,128,192UDA ^{*2}	256UDA ^{*2}
ray separation	0.2,0.15,0.1,0.07,0.05, 0.04,0.03,0.02,0.015MRM ^{*3}	0.001MRM ^{*3}
領域メッシュ	X1Y1~X10Y10,X12Y12, X15Y15,X18Y18 ^{*4}	X20Y20 ^{*4}

*1) 21 ページ,6 行目を参照

*2) 22 ページ,8 行目を参照

*3) 24 ページ,35 行目を参照

*4) 26 ページ,12 行目を参照

計算結果は、本来なら計算時間と精度の関係について示されるべきであるが、計算時間はプログラム作成者の技術に依存する部分もあり、正しく評価するのが難しい。したがって、本研究では総 segment 数を指標として用いる。なぜなら、総 segment 数はプログラム作成者の技術には依存せず、かつ、計算条件の詳細さを最も的確に表現している値だからである。また、MOC での計算時間の大部分を占める固有値計算の計算時間も総 segment 数にほぼ比例するので、総 segment 数を指標として用いることは妥当である。以下で、その結果について説明する。

実効増倍率は各領域の核分裂率を空間で積分して得られる値であり、この積分において各領域の誤差が相殺されてしまう可能性がある。つまり、上述した 4 つの誤差要因の内 1 つの計算条件を変化させるとき、その誤差要因が他の 3 つの誤差要因と完全に分離できたとしても、計算条件を変化させたときの実効増倍率の誤差は振動することが考えられ、評価が難しい。そこで、各領域の誤差が相殺されない値として、燃料棒出力の参照値からの自乗平均差異と最大差異を評価の対象として選ぶ。逆に言えば、ある誤差要因に関する計算条件を変化させたとき、燃料棒出力の自乗平均差異や最大差異が振動しなければ、他の

誤差要因と完全に分離できていることが確認でき、注目している誤差要因のみについて評価することができる。Fig. 2.26 に燃料棒出力の自乗平均差異、Fig. 2.27 に燃料棒出力の最大差異を示す。ただし、それぞれの横軸は、ベースとなる計算条件での総 segment 数が 1.0 になるように総 segment 数を規格化したものである。

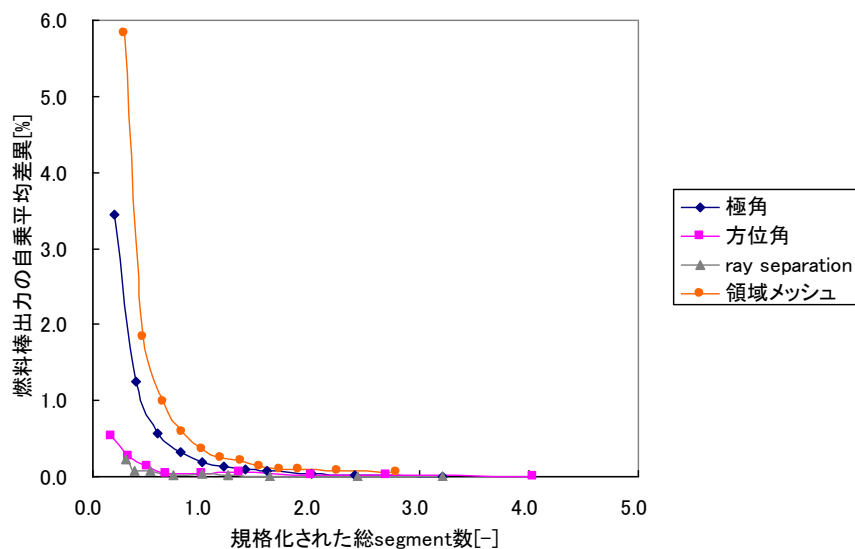


Fig. 2.26 C5G7 についての計算結果（燃料棒出力の自乗平均差異）

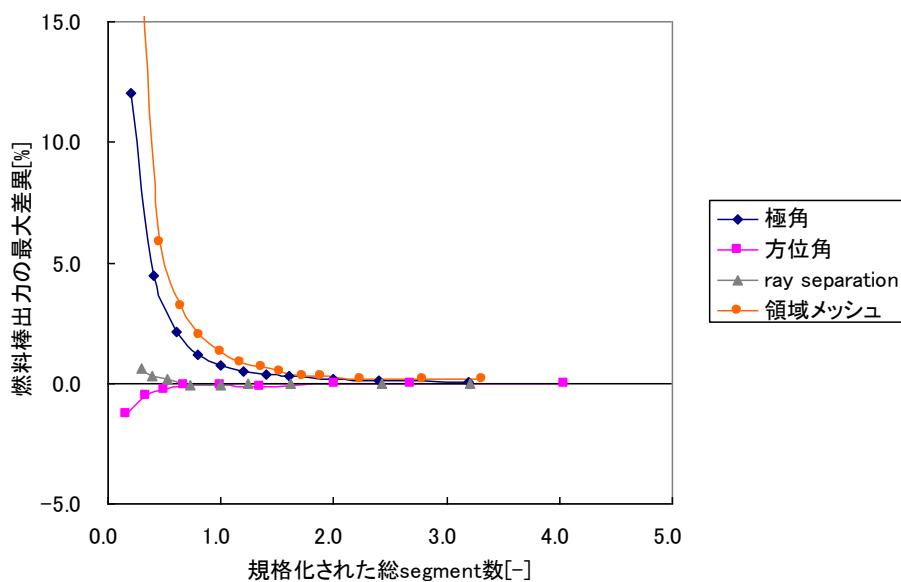


Fig. 2.27 C5G7 についての計算結果（燃料棒出力の最大差異）

Fig. 2.26、Fig. 2.27 より、計算条件を変化させたときの差異の分布はほとんど振動していないことが分かり、注目している誤差要因を他の誤差要因と分離できていることが確認できる。また、Fig. 2.26、Fig. 2.27 において重要なのは差異の収束の仕方である。なぜな

ら、Fig. 2.28 に示した通り、誤差がそれぞれ分離できていれば、ベースの計算条件を変化させたとしても、それぞれの差異の相対的な関係は変化しないからである。

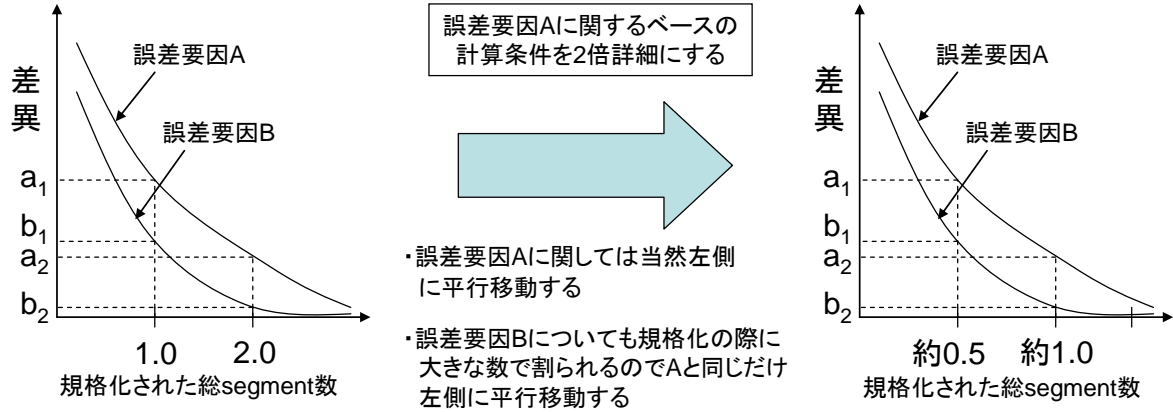


Fig. 2.28 ベースの計算条件と差異の相対値の非相関性

Fig. 2.26、Fig. 2.27 より、極角方向の離散化誤差と中性子束平坦化誤差が支配的であることが分かった。C5G7 ベンチマーク問題では、体系内に UO_2 、MOX、軽水など様々な物質が存在しており、体系内の非均質性が大きく、実際の炉心の状態に比較的近い。したがって、C5G7 ベンチマーク問題において支配的だった誤差である極角方向離散化誤差と中性子束平坦化誤差は全炉心計算においても重要となることが考えられる。

次に、それぞれの誤差の低減方法について考えてみる。

・ 中性子束平坦化誤差

この誤差は中性子束領域のスカラー中性子束の値を一定とみなすことで生じている。そこで、この誤差を低減するには、中性子束領域内の中性子束分布を考慮することが必要となる。中性子束分布を考慮した場合、2つの問題点が生じる。1つ目は、(2.23)式で角度中性子束が計算できなくなることである。(2.23)式は中性子束領域内で中性子源が一定と仮定することで導出された。分布を考慮するならば、新たに式を導出する必要があるが、新たに導出した式はおそらく(2.23)式より複雑な式になり、演算量が増えてしまう恐れがある。2つ目は、領域内の中性子束分布の係数を求めなければならないことである。つまり、(2.24)式のように単純な足し合わせで中性子束を求めることができないということである。分布の係数を求めるには、最小二乗法などを用いることになるが、かなりの演算量の増加が予想される。これらの演算量の増加が、2~3倍程度で済むのであれば、領域内の中性子束分布を考慮することが有効な解決策になる可能性は十分にある。

・ 極角方向離散化誤差

この誤差の低減は、有効な極角分点セットが考案できれば達成できる。Fig. 2.18にあるように、角度中性子束の極角方向分布は比較的滑らかであり、z軸方向で断面積の変化がないことから、有効な分点セットを数学的に求めることができる可能性がある。

- ・ 方位角方向離散化誤差

この誤差は、極角方向離散化誤差と同様、有効な分点セットが考案できれば、低減することができる。角度中性子束の方位角方向分布は Fig. 2.20 にあるように、変化の激しい分布になっている。現在は等分割分点セットを用いて数値積分を行っているが、直交多項式を用いた Gauss 型積分公式を用いることで高精度化できる可能性がある。

- ・ CL の位置離散化誤差

この誤差に対しては、mobile chord 法^[14]や strip 内の角度中性子束の分布を考慮することなどが有効な手段として考えられる。Mobile chord 法は衝突確率法で用いられている手法で、CL の strip 内での相対位置を変化させていくことで誤差の相殺を図る手法である。Strip 内の角度中性子束の分布を考慮する方法では、CL が粗くても精度の良い結果が期待できる反面、演算量の増加が予想される。

- ・ セル境界における角度中性子束の接続誤差

上述した通り、本研究では内挿による接続のみを考える。内挿する方法を用いる場合、この誤差を低減する方法としては、線形補間ではなく高次の補間を行うことが挙げられる。

2.3.2 本研究で検討する誤差の種類

前節の計算結果より、低減の優先度は(中性子束平坦化誤差)>(極角方向離散化誤差)>(方位角方向離散化誤差)>(CL の位置離散化誤差+角度中性子の接続誤差)であったが、低減の難易度も考慮し、本研究では、①極角方向離散化誤差、②方位角方向離散化誤差、③CL の位置離散化誤差、④角度中性子束の接続誤差、⑤中性子束平坦化誤差の順番で検討していくことにした。

第 3 章で極角方向離散化誤差について、第 4 章で方位角方向離散化誤差について、第 5 章で CL の位置離散化誤差の低減方法の 1 つである mobile chord 法について検討する。残念ながら、strip 内の角度中性子束の分布の考慮する方法、角度中性子束の接続誤差、中性子束平坦化誤差については、時間の関係上、本研究では検討することができなかった。これらについては今後の課題としたい。

第3章 新たな最適極角分点セットの検討

この章では、極角方向離散化誤差の低減を行うため、新たに極角分点セットの作成を行い、その妥当性を検討する。第2章でも説明したように、現在、最適な極角分点セットとして L_OPT (Leonard 分点セット^[11]) が知られている。 L_OPT を用いた場合、セル計算や集合体計算においては高精度な結果を得ることができるが、後で示す $C5G7$ ベンチマーク問題の場合のように計算条件によっては精度が悪化する傾向が見られる。そこで、本研究では Leonard の手法とは異なるスキームを考案し、新たに最適極角分点セットの作成を試みた。

3.1 MOC と衝突確率法の関係

極角分点セットの作成を行うにあたり、MOC と衝突確率法の関係が重要となるので、この節では、両手法の関係について考察する。

3.1.1 衝突確率の式の導出^[15]

領域 i で生じた中性子が最初の衝突を領域 j で起こす確率を「領域 i から領域 j への衝突確率」と呼び、 P_{ij} と表記する。まず、位置 \vec{r} で生じた中性子が最初の衝突を位置 \vec{r}' で起こす確率 $P(\vec{r} \rightarrow \vec{r}')$ は次式で与えられる。

$$P(\vec{r} \rightarrow \vec{r}') = \frac{\Sigma_t(\vec{r}')}{4\pi|\vec{r} - \vec{r}'|^2} \exp\left(-\int_0^{|\vec{r}-\vec{r}'|} \Sigma_t\left(\vec{r} - s \frac{\vec{r} - \vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|}\right) ds\right) \quad (3.1)$$

P_{ij} を領域 i 内の位置 \vec{r} で生じた中性子が最初の衝突を領域 j 内の位置 \vec{r}' で起こす確率と考えると、(3.2)式のように表される。

$$P_{ij} = \frac{1}{V_i V_j} \int_{V_i} d\vec{r}' \int_{V_j} d\vec{r} \frac{\Sigma_t(\vec{r}')}{4\pi|\vec{r} - \vec{r}'|^2} \exp\left(-\int_0^{|\vec{r}-\vec{r}'|} \Sigma_t\left(\vec{r} - s \frac{\vec{r} - \vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|}\right) ds\right) \quad (3.2)$$

任意の二次元体系における衝突確率の式を導出するため、Fig. 3.1 のような二次元体系を考える。(3.2)式を Fig. 3.1 について考えれば、(3.3)式のように書くことができる。

$$P_{ij} = \frac{\left\{ \int_{-\infty}^{\infty} d\rho \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\frac{\pi}{2}} \sin\theta d\theta \int_{AB}^{AC} ds \exp\left(-\frac{\Sigma_{t,i}|AC-s|}{\sin\theta}\right) \right.}{\int_{-\infty}^{\infty} d\rho \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\frac{\pi}{2}} \sin\theta d\theta \int_{AB}^{AC} ds} \times \left. \int_{AD}^{AE} ds' \frac{\Sigma_{t,j}}{\sin\theta} \exp\left(-\frac{\Sigma_{t,j}|s'-AD|}{\sin\theta}\right) \exp\left(-\int_{AC}^{AD} dl \frac{\Sigma_t(l)}{\sin\theta}\right) \right\} \quad (3.3)$$

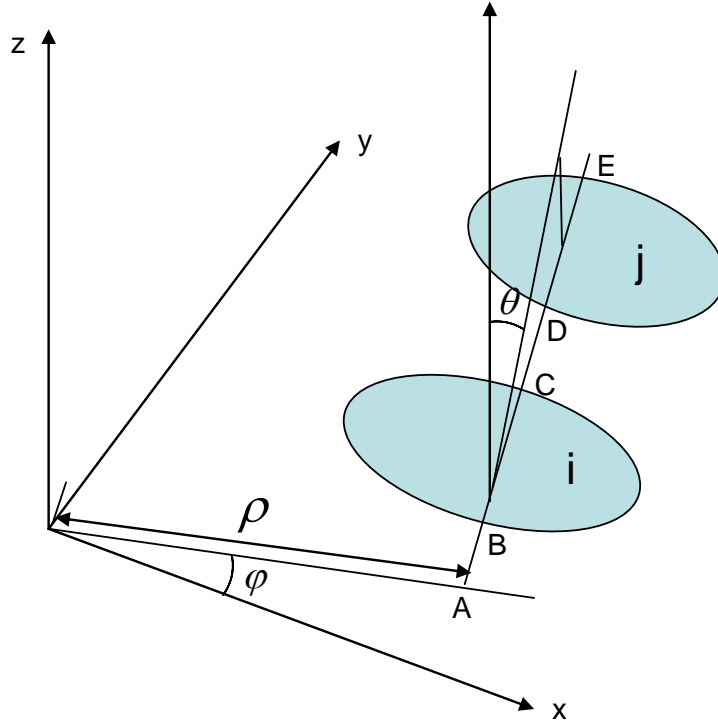


Fig. 3.1 一般的な二次元体系

(3.3)式中の ρ に関する積分は、注目すべき方向について、体系の端から端まで線を引いていくことを意味している。すなわち、MOC での ray tracing と同じ操作である。MOC での ray tracing と同様に、衝突確率の計算では中性子の代表的な飛行方向について平行に線を引いていく。そして、それらの線上で求まる微小な衝突確率を足し合わせていくことで、領域全体の衝突確率を計算する。それでは、(3.3)式を変形し、一般的な二次元体系での衝突確率の式を求めると、(3.4)式のようになる。

$$P_{ij} = \frac{1}{2\pi \sum_{i,j} V_i} \int_0^\infty d\rho \int_0^{2\pi} d\varphi \left\{ \begin{array}{l} Ki_3 \left(\sum_{k=i+1}^{j-1} \tau_k \right) - Ki_3 \left(\sum_{k=i}^{j-1} \tau_k \right) \\ - Ki_3 \left(\sum_{k=i-1}^j \tau_k \right) + Ki_3 \left(\sum_{k=i}^j \tau_k \right) \end{array} \right\} \quad (3.4)$$

ただし、(3.4)式中の τ_k は領域 k における光学距離、 $Ki_3(x)$ は3次の Bickley 関数である。Bickley 関数は(3.5)式で与えられている。

$$Ki_n(x) = \int_0^{\pi/2} d\theta \sin^{n-1} \theta \exp\left(-\frac{x}{\sin \theta}\right) \quad (3.5)$$

(3.4)式中には連続的な積分が含まれているが、実際の ray tracing では離散的に計算が行われるので、それを考慮に入れると、衝突確率の式は(3.6)式のように書き直せる。ただし、(3.6)式中の m, n はそれぞれ方位角、線の位置を表すインデックスで、 $\mu_m, \delta A_{m,n}$ はそれぞ

れ方位角の重み、ray separation である。

$$P_{ij} = \frac{1}{2\pi\Sigma_{t,i}V_i} \sum_m \mu_m \sum_n \delta A_{m,n} \left\{ \begin{array}{l} Ki_3 \left(\sum_{k=i+1}^{j-1} \tau_{m,n,k} \right) - Ki_3 \left(\sum_{k=i}^{j-1} \tau_{m,n,k} \right) \\ - Ki_3 \left(\sum_{k=i-1}^j \tau_{m,n,k} \right) + Ki_3 \left(\sum_{k=i}^j \tau_{m,n,k} \right) \end{array} \right\} \quad (3.6)$$

ここまでで、一般的な二次元体系における衝突確率の式を導出できた。

3.1.2 MOC で見積もる衝突確率

衝突確率 P_{ij} は領域 i で生じた中性子が領域 j で最初の衝突を起こす確率であった。これを MOC について考える。領域 i と領域 j の両方を通過するある CL 上での平均的な角度中性子束を $\bar{\phi}_{j,m,n}$ (m,n はそれぞれ方向、CL の位置を表すインデックス) とし、 $\bar{\phi}_{j,m,n}$ の領域 i の中性子源からの寄与を考える。まず、(2.32)式より $\bar{\phi}_{j,m,n}$ は(3.7)式のように書ける。

$$\bar{\phi}_{j,m,n} = \frac{Q_{j,m}}{\Sigma_{t,j}} + \frac{\sin \theta_m}{\Sigma_{t,j} V_j} \left[\begin{array}{l} \phi_{j,m,n}^{in} \left\{ 1 - \exp \left(-\frac{\tau_{j,m,n}}{\sin \theta_m} \right) \right\} \\ + \frac{Q_{j,m}}{\Sigma_{t,j}} \left\{ 1 - \exp \left(-\frac{\tau_{j,m,n}}{\sin \theta_m} \right) \right\} \end{array} \right] \quad (3.7)$$

(3.7)式中で、 $\phi_{j,m,n}^{in}$ のみが領域 i の中性子源からの寄与に関係しているため、 $\phi_{j,m,n}^{in}$ を含まない項を $C_{j,m,n}$ とすると、(3.7)式は(3.8)式のように書き直せる。

$$\bar{\phi}_{j,m,n} = \frac{\sin \theta_m}{\Sigma_{t,j} V_j} \phi_{j,m,n}^{in} \left\{ 1 - \exp \left(-\frac{\tau_{j,m,n}}{\sin \theta_m} \right) \right\} + C_{j,m,n} \quad (3.8)$$

また、(3.9)式を(3.8)式に代入することで(3.10)式が得られる。

$$\phi_{j,m,n}^{in} = \phi_{j-1,m,n}^{out} = \phi_{j-1,m,n}^{in} \exp \left(-\frac{\tau_{j-1,m,n}}{\sin \theta_m} \right) + \frac{Q_{j-1,m}}{\Sigma_{t,j-1}} \left\{ 1 - \exp \left(-\frac{\tau_{j-1,m,n}}{\sin \theta_m} \right) \right\} \quad (3.9)$$

$$\bar{\phi}_{j,m,n} = \frac{\sin \theta_m}{\Sigma_{t,j} V_j} \left[\begin{array}{l} \phi_{j-1,m,n}^{in} \exp \left(-\frac{\tau_{j-1,m,n}}{\sin \theta_m} \right) \\ + \frac{Q_{j-1,m}}{\Sigma_{t,j-1}} \left\{ 1 - \exp \left(-\frac{\tau_{j-1,m,n}}{\sin \theta_m} \right) \right\} \end{array} \right] \left\{ 1 - \exp \left(-\frac{\tau_{j,m,n}}{\sin \theta_m} \right) \right\} + C_{j,m,n} \quad (3.10)$$

(3.8)式と同様に、(3.10)式中で領域 i の中性子源からの寄与に関係していない項を $C_{j-1,m}$ とおくと、(3.11)式のように書ける。

$$\bar{\phi}_{j,m,n} = \frac{\sin \theta_m}{\Sigma_{t,j} V_j} \phi_{j-1,m,n}^{\text{in}} \exp\left(-\frac{\tau_{j-1,m,n}}{\sin \theta_m}\right) \left\{ 1 - \exp\left(-\frac{\tau_{j,m,n}}{\sin \theta_m}\right) \right\} + C_{j-1,m,n} + C_{j,m,n} \quad (3.11)$$

このような操作を繰り返すと、 $\bar{\phi}_{j,m,n}$ は最終的に(3.12)式のように書ける。

$$\bar{\phi}_{j,m,n} = \frac{\sin \theta_m}{\Sigma_{t,j} V_j} \frac{Q_{i,m}}{\Sigma_{t,i}} \left\{ \begin{array}{l} \exp\left(-\sum_{k=i+1}^{j-1} \tau_{k,m,n} / \sin \theta_m\right) - \exp\left(-\sum_{k=i}^{j-1} \tau_{k,m,n} / \sin \theta_m\right) \\ - \exp\left(-\sum_{k=i+1}^j \tau_{k,m,n} / \sin \theta_m\right) + \exp\left(-\sum_{k=i}^j \tau_{k,m,n} / \sin \theta_m\right) \end{array} \right\} + \sum_{k=i}^j C_{j,m,n} \quad (3.12)$$

ここで、領域 j のスカラー中性子束の内、領域 i の中性子源からの寄与による成分を $\Phi_{i \rightarrow j}$ とすると、 $\Phi_{i \rightarrow j}$ は(3.12)式の右辺第一項を角度や CL の位置を変えて足し合わせたものに等しいので(3.13)式が成り立つ。ただし、 Ω_m 、 $\delta A_{m,n}$ はそれぞれ方向（極角と方位角の両方）の重み、ray separation である。

$$\Phi_{i \rightarrow j} = \sum_m \Omega_m \sum_n \delta A_{m,n} \frac{\sin \theta_m}{\Sigma_{t,j} V_j} \frac{Q_{i,m}}{\Sigma_{t,i}} \left\{ \begin{array}{l} \exp\left(-\sum_{k=i+1}^{j-1} \tau_{k,m,n} / \sin \theta_m\right) - \exp\left(-\sum_{k=i}^{j-1} \tau_{k,m,n} / \sin \theta_m\right) \\ - \exp\left(-\sum_{k=i+1}^j \tau_{k,m,n} / \sin \theta_m\right) + \exp\left(-\sum_{k=i}^j \tau_{k,m,n} / \sin \theta_m\right) \end{array} \right\} \quad (3.13)$$

また、定義より(3.14)式が成り立つ。

$$P_{ij} \sum_m Q_{i,m} V_i = \Sigma_{t,j} \Phi_{i \rightarrow j} V_j \quad (3.14)$$

(3.14)式において、中性子源が等方と仮定し、(3.13)式を代入すると(3.15)式が得られる。

$$2\pi P_{ij} Q_i V_i = \frac{Q_i}{\Sigma_{t,i}} \sum_m \Omega_m \sum_n \delta A_{m,n} \sin \theta_m \left\{ \begin{array}{l} \exp\left(-\sum_{k=i+1}^{j-1} \tau_{k,m,n} / \sin \theta_m\right) - \exp\left(-\sum_{k=i}^{j-1} \tau_{k,m,n} / \sin \theta_m\right) \\ - \exp\left(-\sum_{k=i+1}^j \tau_{k,m,n} / \sin \theta_m\right) + \exp\left(-\sum_{k=i}^j \tau_{k,m,n} / \sin \theta_m\right) \end{array} \right\} \quad (3.15)$$

したがって、MOC で衝突確率を見積もると(3.16)式となる。

$$P_{ij} = \frac{1}{2\pi \Sigma_{t,i} V_i} \sum_m \Omega_m \sum_n \delta A_{m,n} \sin \theta_m \left\{ \begin{array}{l} \exp\left(-\sum_{k=i+1}^{j-1} \tau_{k,m,n} / \sin \theta_m\right) - \exp\left(-\sum_{k=i}^{j-1} \tau_{k,m,n} / \sin \theta_m\right) \\ - \exp\left(-\sum_{k=i+1}^j \tau_{k,m,n} / \sin \theta_m\right) + \exp\left(-\sum_{k=i}^j \tau_{k,m,n} / \sin \theta_m\right) \end{array} \right\} \quad (3.16)$$

ここで、(3.17)式で定義される関数を用いると、(3.16)式は(3.18)式のように書き直せる。ただし、(3.17)式中の ω_i 、(3.18)式中の μ_m はそれぞれ極角の重み、方位角の重みである。

$$Ki_{An}(x) \equiv \sum_{i=1}^{N_\theta} \omega_i \sin^{n-2} \theta_i \exp\left(-\frac{x}{\sin \theta_i}\right) \quad (3.17)$$

$$P_{ij} = \frac{1}{2\pi \sum_{t,i} V_i} \sum_m \mu_m \sum_n \delta A_{m,n} \left\{ \begin{array}{l} Ki_{A3} \left(-\sum_{k=i+1}^{j-1} \tau_{k,m,n} \right) - Ki_{A3} \left(-\sum_{k=i}^{j-1} \tau_{k,m,n} \right) \\ Ki_{A3} \left(-\sum_{k=i+1}^j \tau_{k,m,n} \right) + Ki_{A3} \left(-\sum_{k=i}^j \tau_{k,m,n} \right) \end{array} \right\} \quad (3.18)$$

このようにして、MOCで見積もる衝突確率の式が導出できた。

3.1.3 MOCでの極角方向離散化誤差

前項までに衝突確率の式を導出した。衝突確率法で用いられるのは(3.6)式であり、MOCでの衝突確率に相当するものは(3.18)式である。両者を見比べると、式の形が酷似しており、(3.6)式中の Bickley 関数を $Ki_{An}(x)$ で置き換えたものが(3.18)式と完全に一致する。

ここで、 $Ki_{An}(x)$ について考える。(3.17)式は、(3.5)式中の連続的な積分を、極角分点セットを用いた数値積分に置き換えたものに等しく、 $Ki_{An}(x)$ は「離散的に求めた Bickley 関数」と考えることができる。したがって、MOCにおいて極角分割数を十分に大きくすれば、Bickley 関数と $Ki_{An}(x)$ は等しくなり、(3.6)式と(3.18)式は完全に一致する。つまり、衝突確率法と MOC の違いは極角方向の扱い方である。衝突確率法では連続的に、MOC では離散的にそれぞれ極角方向の積分を行う。この事実から、MOCでの極角方向の離散化誤差を完全に排除したものが衝突確率法と等価であると結論付けられる。

3.2 最適化スキーム

3.2.1 最適化の方針

前節で説明したように、等方散乱を仮定したとき、衝突確率法は MOC において極角方向の離散化誤差を完全に排除したものと等価である。つまり、MOCにおける極角方向離散化誤差は衝突確率法との差に等しい。ここで、新たに $Ki_{En}(x)$ を (3.19)式で定義する。 $Ki_{En}(x)$ は Bickley 関数に関する MOCでの離散化誤差を表している。

$$Ki_{En}(x) = Ki_n(x) - Ki_{An}(x) \quad (3.19)$$

(3.6)式、(3.18)式より、衝突確率は Bickley 関数の4つの足し合わせで求まるが、MOCで見積もる衝突確率は $Ki_{An}(x)$ の4つの足し合わせで求まることが分かる。したがって、MOCにおける極角方向離散化誤差は(3.20)式で表される E_{ij} で決まることが言える。

$$E_{ij} = Ki_{E3} \left(\sum_{k=i+1}^{j-1} \tau_{m,n,k} \right) - Ki_{E3} \left(\sum_{k=i}^{j-1} \tau_{m,n,k} \right) - Ki_{E3} \left(\sum_{k=i-1}^j \tau_{m,n,k} \right) + Ki_{E3} \left(\sum_{k=i}^j \tau_{m,n,k} \right) \quad (3.20)$$

E_{ij} が極角方向離散化誤差の要因となっているので、 E_{ij} の絶対値を常に小さくできるような極角分点セット (θ_i, ω_i) があれば、極角方向離散化誤差を最小限に抑えることが可能となる。そこで、本研究では E_{ij} の絶対値が常に小さくなるような条件について考えていく。

3.2.2 従来法^[11]

既存の極角分点セットとして、等分割分点セット (UDA)、Gauss-Legendre 分点セット (GL)、Leonard の最適極角分点セット (L_OPT) などがあることを第2章で説明した。これらの分点セットのうち、L_OPT は前項までで説明した「 E_{ij} の絶対値を常に小さくする」という考え方に基づいて考案された。L_OPT は次のような性質を利用して作成される。

$$|E_{i,j}| \leq 2E_{2\max} \quad (3.21)$$

ただし、 $E_{n\max}$ は次式で定義される。つまり、 $E_{n\max}$ は x を変化させたときの $Ki_{En}(x)$ の絶対値の最大値である。

$$E_{n\max} \equiv \max_x |Ki_{En}(x)| \quad (3.22)$$

したがって、(3.21)式より、 $Ki_2(x)$ の離散化誤差の最大値が最小になる角度と重みを選べば、 E_{ij} の絶対値を常に小さくすることができる。L_OPT は分点数 2 についてのみ提案されており、2L_OPT での極角と重みの値はそれぞれ以下のように与えられている。

$$\begin{aligned} \sin \theta_1 &= 0.273658, & \sin \theta_2 &= 0.865714 \\ \omega_1 &= 0.139473, & \omega_2 &= 0.860527 \end{aligned}$$

L_OPT を用いた場合、セル計算や集合体計算などにおいては高精度な結果を得ることができるが、後で示す C5G7 ベンチマーク問題などの漏れのある体系においては著しく精度が悪化することがある。そこで、本研究では Leonard らの手法とは異なる最適化スキームを考案し、新たな最適極角分点セットの作成を試みた。

3.2.3 本研究で考案した最適化スキーム^[16]

本研究においても「 E_{ij} の絶対値を常に小さくする」ということを目標にする点は、Leonard の手法のときと同様である。Leonard の手法では(3.21)を利用して目標を達成しようとした。これはおそらく、(3.20)式の4つの項を互いにキャンセルさせることを狙った方策である。なぜなら、 $Ki_{E3}(x)$ を微分し符号を変えたものが $Ki_{E2}(x)$ であり、 $Ki_{E2}(x)$ を常に小さくすることは $Ki_{E3}(x)$ の値を定数に近づけることに等しく、 $Ki_{E3}(x)$ が定数に近ければ(3.20)式の4つの項は互いにキャンセルし合うからである。これに対し、本研究では(3.20)式右辺の各項の絶対値をすべて小さくすることで、それらを足し合わせた E_{ij} の絶対値も小さくなることを狙う。(3.20)式右辺の各項の絶対値をすべて小さくするには、どのような x に対しても $Ki_{E3}(x)$ の絶対値が小さい値をとるようにしなければならない。ここで、 $Ki_{E3}(x)$ の絶対値の最大値 $E_{3\max}$ について考えると、当然のことながら、 $Ki_{E3}(x)$ の絶対値はどの x に対しても $E_{3\max}$ 以下になる。したがって、 $E_{3\max}$ を小さくできれば $Ki_{E3}(x)$ の絶対値はどの x に対しても小さい値をとり、(3.20)式右辺の各項の値はすべて小さくなる。つまり、本研究での最適化スキームは、 $Ki_3(x)$ の離散化誤差の最大値 $E_{3\max}$ を最小にすることである。以下では本研究で作成する分点セットを TY_OPT (Tabuchi and Yamamoto's optimum

quadrature set) と呼ぶことにする。

この節の内容を要約する。MOC での極角方向離散化誤差は(3.20)式で表される E_{ij} によって決まり、 E_{ij} の絶対値を常に小さくすることが要求される。この目標を達成するため、Leonard の手法では $Ki_{E2}(x)$ の絶対値の最大値を、本研究では $Ki_{E3}(x)$ の絶対値の最大値をそれぞれ最小化するという最適化スキームを用いる。

3.3 最適化手法

3.3.1 目的関数

この項では、最適化を行う際の目的関数について考える。本研究での最適化スキームは $Ki_{E3}(x)$ の絶対値の最大値を最小化するというものであるが、Leonard の手法での最適化スキームにも対応できるように、少し一般化して $Ki_{En}(x)$ の絶対値の最大値を最小化するという問題に対する目的関数を考える。

まず、(3.23)式、(3.24)式のようなベクトルを定義する。

$$\vec{\omega} = \{\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_{N_\theta}\} \quad (3.23)$$

$$\vec{s} = \{\sin \theta_1, \sin \theta_2, \dots, \sin \theta_{N_\theta}\} = \{s_1, s_2, \dots, s_{N_\theta}\} \quad (3.24)$$

ここで、(3.25)式に注意すると、この最適化問題における変数の数は $\vec{\omega}: N_\theta - 1$ 、 $\vec{s}: N_\theta$ の合計 $2N_\theta - 1$ であることが分かる。

$$\sum_{i=1}^{N_\theta} \omega_i = 1 \quad (3.25)$$

これらを用いれば、 $Ki_{En}(x)$ は(3.26)式で表される。

$$Ki_{En}(x) = \sum_{i=1}^{N_\theta} \omega_i s_i^{n-2} \exp\left(-\frac{x}{s_i}\right) - \int_0^{\pi/2} d\theta \sin^{n-1} \theta \exp\left(-\frac{x}{\sin \theta}\right) \quad (3.26)$$

「 $Ki_{En}(x)$ の絶対値の最大値を最小化する」ということと「 $Ki_{En}(x)$ の2乗の最大値を最小化する」ということは等価であるので、(3.27)式を目的関数 T_n と考えることにする。2乗する理由は、後で説明する最急降下法において、目的関数の偏微分を解析的に行えるようにするためである。(3.27)式中の x_0 は $Ki_{En}(x)$ の絶対値の最大値を与える x であり、(3.28)式を満たす。当然、 x_0 は $\vec{\omega}$ と \vec{s} の関数である。

$$T_n(\vec{\omega}, \vec{s}) = \left\{ \sum_{i=1}^{N_\theta} \omega_i s_i^{n-2} \exp\left(-\frac{x_0(\vec{\omega}, \vec{s})}{s_i}\right) - \int_0^{\pi/2} d\theta \sin^{n-1} \theta \exp\left(-\frac{x_0(\vec{\omega}, \vec{s})}{\sin \theta}\right) \right\}^2 \quad (3.27)$$

$$E_{n\max} = |Ki_{En}(x_0(\vec{\omega}, \vec{s}))| \quad (3.28)$$

したがって、(3.28)式を満足するような x_0 に対し、 T_n が最小となる $\vec{\omega}$ と \vec{s} の組み合わせを探ることが最適化の目標となる。目的関数が設定されたので、次に最適化手法について説明する。

3.3.2 Multi-Stage Monte Carlo Optimization 法

(3.27)式を最小化する問題は、多変数非線形関数の最適化問題である。このような問題に対する解法はいくつかあるが、本研究では、まず multi-stage Monte Carlo optimization 法（以下 MSMCO 法）に着目した。MSMCO 法では乱数を用いて最適化を行う。しかし、 $\bar{\omega}$ と \bar{s} をただ単純に取り得る範囲内でランダムに選ぶのではなく、取り得る変数の範囲を徐々に限定していく。こうすることで、単純なランダムサーチより高速に最適化を行うことができる。しかし、変数の数が3を超えると、探索範囲の観点から MSMCO 法による最適化は著しく困難になる。そこで、別の最適化手法として、次の項で最急降下法の適用を検討する。

3.3.3 最急降下法

最急降下法とは、 k 回目の反復における近似解 \bar{x}_k での最急勾配方向に適当な距離進むことにより、 $k+1$ 回目の反復における近似解 \bar{x}_{k+1} を求める手法である。具体的には(3.29)式に基づいて近似解を求める。これを反復すれば、関数 $f(\bar{x})$ の極値が求まる。

$$\bar{x}^{(k+1)} = \bar{x}^{(k)} + \alpha^{(k)} \nabla f(\bar{x}^{(k)}) \quad (3.29)$$

この手法には、準最適解に陥りやすいという欠点があるものの、初期値や $\alpha^{(k)}$ の値を変えて複数回試行すれば、最適解に近い解は得られるはずである。ただし、この手法を用いるには関数 $f(\bar{x})$ の勾配を求める必要がある。つまり、既知の量だけで $f(\bar{x})$ の勾配が表されなければならない。そこで、 $f(\bar{x})$ の勾配を求めてみる。(3.27)式を任意の変数 t で偏微分すると、以下ようになる。

$$\frac{\partial T_n(\bar{\omega}, \bar{s})}{\partial t} = 2Ki_{En}(x_0) \left[\sum_{i=1}^{N_\theta} s_i^{n-2} \left\{ \frac{\partial \omega_i}{\partial t} + \left((n-2) \frac{\omega_i}{s_i} + \frac{\omega_i x_0}{s_i^2} \right) \frac{\partial s_i}{\partial t} - \frac{\omega_i}{s_i} \frac{\partial x_0}{\partial t} \right\} \exp\left(-\frac{x_0}{s_i}\right) + \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin^{n-2} \theta \exp\left(-\frac{x_0}{\sin \theta}\right) \frac{\partial x_0}{\partial t} \right] \quad (3.30)$$

$$= 2Ki_{En}(x_0) \left[\sum_{i=1}^{N_\theta} s_i^{n-2} \left\{ \frac{\partial \omega_i}{\partial t} + \left((n-2) \frac{\omega_i}{s_i} + \frac{\omega_i x_0}{s_i^2} \right) \frac{\partial s_i}{\partial t} \right\} \exp\left(-\frac{x_0}{s_i}\right) - \left\{ \sum_{i=1}^m \omega_i s_i^{n-3} \exp\left(-\frac{x_0}{s_i}\right) - \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin^{n-2} \theta \exp\left(-\frac{x_0}{\sin \theta}\right) \right\} \frac{\partial x_0}{\partial t} \right] \quad (3.31)$$

$$= 2Ki_{En}(x_0) \left[\sum_{i=1}^m s_i^{n-2} \left\{ \frac{\partial \omega_i}{\partial t} + \left((n-2) \frac{\omega_i}{s_i} + \frac{\omega_i x_0}{s_i^2} \right) \frac{\partial s_i}{\partial t} \right\} \exp\left(-\frac{x_0}{s_i}\right) - Ki_{En-1}(x_0) \frac{\partial x_0}{\partial t} \right] \quad (3.32)$$

(3.32)式中には既知でない量 $\frac{\partial x_0}{\partial t}$ が存在する。しかし、 $x_0(\bar{\omega}, \bar{s})$ が(3.28)式を満たすこと（つまり、 x_0 において $Ki_{En}(x)$ が極値を持つこと）と(3.33)式を考慮に入れると、(3.34)式が成り

立つ。

$$\frac{\partial Ki_{En}(x)}{\partial x} = -Ki_{En-1}(x) \quad (3.33)$$

$$Ki_{En-1}(x_0) = 0 \quad (3.34)$$

よって、(3.32)式は(3.35)式のように書き直せる。

$$\frac{\partial T_n(\bar{\omega}, \bar{s})}{\partial t} = 2Ki_{En}(x_0) \sum_{i=1}^{N_\theta} s_i^{n-2} \left\{ \frac{\partial \omega_i}{\partial t} + \left((n-2) \frac{\omega_i}{s_i} + \frac{\omega_i x_0}{s_i^2} \right) \frac{\partial s_i}{\partial t} \right\} \exp\left(-\frac{x_0}{s_i}\right) \quad (3.35)$$

(3.35)式において $t = s_j$ とおくと、 s_j は他の変数と独立に選ばれるので、(3.36)式のようになる。

$$\frac{\partial T_n(\bar{\omega}, \bar{s})}{\partial s_j} = 2Ki_{En}(x_0) \omega_j s_j^{n-3} \left(n - 2 + \frac{x_0}{s_j} \right) \exp\left(-\frac{x_0}{s_j}\right) \quad (3.37)$$

次に $t = \omega_k$ とおく場合について考えると、(3.25)式の条件があるため、 ω_i と ω_j ($i \neq j$) を独立な変数と考えることができない。そこで、(3.38)式を満たすベクトル \bar{b} を考え、 $1 \leq j \leq m$ の範囲で $t = b_j$ を(3.35)式に代入すると(3.39)式が導かれる。

$$\omega_i = b_{i+1} - b_i, \quad b_1 = 0, \quad b_{m+1} = 1 \quad (3.38)$$

$$\frac{\partial T_n(\bar{\omega}, \bar{s})}{\partial b_j} = 2Ki_{En}(x_0) \left\{ s_{j-1}^{n-2} \exp\left(-\frac{x_0}{s_{j-1}}\right) - s_j^{n-2} \exp\left(-\frac{x_0}{s_j}\right) \right\} \quad (3.39)$$

また、 $\frac{\partial T_n(\bar{\omega}, \bar{s})}{\partial \omega_j}$ と $\frac{\partial T_n(\bar{\omega}, \bar{s})}{\partial b_j}$ には以下のような関係が成り立つ。

$$\frac{\partial T_n(\bar{\omega}, \bar{s})}{\partial \omega_j} = \begin{cases} \frac{\partial T_n(\bar{\omega}, \bar{s})}{\partial b_{j+1}} & (j=1) \\ \frac{\partial T_n(\bar{\omega}, \bar{s})}{\partial b_{j+1}} - \frac{\partial T_n(\bar{\omega}, \bar{s})}{\partial b_j} & (2 \leq j \leq m-1) \\ -\frac{\partial T_n(\bar{\omega}, \bar{s})}{\partial b_j} & (j=m) \end{cases} \quad (3.40)$$

(3.39)式、(3.40)式から $\frac{\partial T_n(\bar{\omega}, \bar{s})}{\partial \omega_j}$ は以下のように表せる。

$m=1$ のとき

$$\frac{\partial T_n(\bar{\omega}, \bar{s})}{\partial \omega_j} = 0 \quad (3.41)$$

$m=2$ のとき

$$\frac{\partial T_n(\bar{\omega}, \bar{s})}{\partial \omega_j} = \begin{cases} 2Ki_{En}(x_0) \left\{ s_1^{n-2} \exp\left(-\frac{x_0}{s_1}\right) - s_2^{n-2} \exp\left(-\frac{x_0}{s_2}\right) \right\} & (j=1) \\ 2Ki_{En}(x_0) \left\{ -s_1^{n-2} \exp\left(-\frac{x_0}{s_1}\right) + s_2^{n-2} \exp\left(-\frac{x_0}{s_2}\right) \right\} & (j=2) \end{cases} \quad (3.42)$$

$m \geq 3$ のとき

$$\frac{\partial T_n(\bar{\omega}, \bar{s})}{\partial \omega_j} = \begin{cases} 2Ki_{En}(x_0) \left\{ s_1^{n-2} \exp\left(-\frac{x_0}{s_1}\right) - s_2^{n-2} \exp\left(-\frac{x_0}{s_2}\right) \right\} & (j=1) \\ 2Ki_{En}(x_0) \left\{ \begin{array}{l} -s_{j-1}^{n-2} \exp\left(-\frac{x_0}{s_{j-1}}\right) + 2s_j^{n-2} \exp\left(-\frac{x_0}{s_j}\right) \\ -s_{j+1}^{n-2} \exp\left(-\frac{x_0}{s_{j+1}}\right) \end{array} \right\} & (2 \leq j \leq m-1) \\ 2Ki_{En}(x_0) \left\{ -s_{m-1}^{n-2} \exp\left(-\frac{x_0}{s_{m-1}}\right) + s_m^{n-2} \exp\left(-\frac{x_0}{s_m}\right) \right\} & (j=m) \end{cases} \quad (3.43)$$

これらをまとめると、Table 3.1 のようになる。

Table 3.1 導出した式のまとめ

		L_OPT		TY_OPT	
$\frac{\partial T_n}{\partial \omega_j}$	$N_0=1$	0		$N_0=1$	0
	$N_0=2$	$j=1$	$2Ki_{E2}(x_0) \left\{ \exp\left(-\frac{x_0}{s_1}\right) - \exp\left(-\frac{x_0}{s_2}\right) \right\}$	$j=1$	$2Ki_{E3}(x_0) \left\{ s_1 \exp\left(-\frac{x_0}{s_1}\right) - s_2 \exp\left(-\frac{x_0}{s_2}\right) \right\}$
		$j=2$	$2Ki_{E2}(x_0) \left\{ -\exp\left(-\frac{x_0}{s_1}\right) + \exp\left(-\frac{x_0}{s_2}\right) \right\}$	$j=2$	$2Ki_{E3}(x_0) \left\{ -s_1 \exp\left(-\frac{x_0}{s_1}\right) + s_2 \exp\left(-\frac{x_0}{s_2}\right) \right\}$
	$N_0 \geq 3$	$2 \leq j \leq N_0-1$	$2Ki_{E2}(x_0) \left\{ -\exp\left(-\frac{x_0}{s_{j-1}}\right) + 2 \exp\left(-\frac{x_0}{s_j}\right) - \exp\left(-\frac{x_0}{s_{j+1}}\right) \right\}$	$2 \leq j \leq N_0-1$	$2Ki_{E3}(x_0) \left\{ -s_{j-1} \exp\left(-\frac{x_0}{s_{j-1}}\right) + 2s_j \exp\left(-\frac{x_0}{s_j}\right) - s_{j+1} \exp\left(-\frac{x_0}{s_{j+1}}\right) \right\}$
$j=N_0$		$2Ki_{E2}(x_0) \left\{ -\exp\left(-\frac{x_0}{s_{N_0-1}}\right) + \exp\left(-\frac{x_0}{s_{N_0}}\right) \right\}$	$j=N_0$	$2Ki_{E3}(x_0) \left\{ -s_{N_0-1} \exp\left(-\frac{x_0}{s_{N_0-1}}\right) + s_{N_0} \exp\left(-\frac{x_0}{s_{N_0}}\right) \right\}$	
$\frac{\partial T_n}{\partial s_j}$	$2Ki_{E2}(x_0) \frac{\omega_j x_0}{s_j^2} \exp\left(-\frac{x_0}{s_j}\right)$		$2Ki_{E3}(x_0) \omega_j \left(1 + \frac{x_0}{s_j}\right) \exp\left(-\frac{x_0}{s_j}\right)$		

ここまでで、(3.29)式中の勾配についての式の導出は行うことができた。次に $\alpha^{(k)}$ について考える。これについては、 $T_n(\bar{\omega}, \bar{s})$ の式の形が複雑であるため、 $\alpha^{(k)}$ を一意に決められるような数式の導出を行うことができない。そこで、乱数によって $\alpha^{(k)}$ を決めることにした。ただし、 $\alpha^{(k)}$ を決めるにあたり、(3.44)式および(3.45)式の2つの制約条件がある。

$$b_{j-1}^{(k+1)} \leq b_j^{(k+1)} \leq b_{j+1}^{(k+1)} \quad (3.44)$$

$$0 \leq s_j^{(k+1)} \leq 1 \quad (3.45)$$

これらの条件は、(3.46)式～(3.49)式を考慮に入れると、(3.50)式～(3.54)式にまとめられ

る。

$$\omega_j^{(k)} = b_{j+1}^{(k)} - b_j^{(k)} \quad (3.46)$$

$$\omega_j^{(k+1)} = \omega_j^{(k)} - \alpha^{(k)} \frac{\partial T_n}{\partial \omega_j^{(k)}} \quad (3.47)$$

$$s_j^{(k+1)} = s_j^{(k)} - \alpha^{(k)} \frac{\partial T_n}{\partial s_j^{(k)}} \quad (3.48)$$

$$\alpha^{(k)} \geq 0 \quad (3.49)$$

$$\cdot \frac{\partial T_n}{\partial \omega_j^{(k)}} > 0 \text{ のとき} \quad 0 \leq \alpha^{(k)} \leq \omega_j^{(k)} \bigg/ \frac{\partial T_n}{\partial \omega_j^{(k)}} \quad (3.50)$$

$$\cdot \frac{\partial T_n}{\partial \omega_j^{(k)}} \leq 0 \text{ のとき} \quad \alpha^{(k)} \text{ に制限なし} \quad (3.51)$$

$$\cdot \frac{\partial T_n}{\partial s_j^{(k)}} > 0 \text{ のとき} \quad 0 \leq \alpha^{(k)} \leq s_j^{(k)} \bigg/ \frac{\partial T_n}{\partial s_j^{(k)}} \quad (3.52)$$

$$\cdot \frac{\partial T_n}{\partial s_j^{(k)}} < 0 \text{ のとき} \quad 0 \leq \alpha^{(k)} \leq (s_j^{(k)} - 1) \bigg/ \frac{\partial T_n}{\partial s_j^{(k)}} \quad (3.53)$$

$$\cdot \frac{\partial T_n}{\partial s_j^{(k)}} = 0 \text{ のとき} \quad \alpha^{(k)} \text{ に制限なし} \quad (3.54)$$

すべての j について(3.50)式～(3.54)式の条件をすべて満たす最大の $\alpha^{(k)}$ を $\alpha_{\max}^{(k)}$ とおき、(3.55)式のように $\alpha^{(k)}$ を決めることにした。

$$\alpha^{(k)} = \alpha_{\max}^{(k)} \cdot \delta \cdot \xi \quad (3.55)$$

ただし、 δ は $0 < \delta \leq 1$ を満たす適当な定数、 ξ は $0 < \xi \leq 1$ の一様乱数である。これらの式を用いて最適化を行い、分点数 3 以下の L_OPT と TY_OPT を作成した。これらの分点セットの値を Table 3.2 に示す。

Table3.2 L_OPT と TY_OPT での極角と重みの値

	L_OPT		TY_OPT	
	sin θ	ω	sin θ	ω
分点数1	0.752244	1.000000	0.798184	1.000000
分点数2	0.273658	0.139473	0.363900*	0.212854*
	0.865714	0.860527	0.899900*	0.787146*
分点数3	0.103840	0.020530	0.166648	0.046233
	0.430723	0.219161	0.537707	0.283619
	0.905435	0.760309	0.932954	0.670148

*) 参考文献[16]中にある分点数 2 の TY_OPT の値は、最適化の途中段階であったため、この表中の値とは若干異なる。

3.4 作成した分点セット

3.4.1 分点数 1

上で述べたように、MOC での極角方向離散化誤差は(3.20)式で表される E_{ij} で決まる。また、 E_{ij} は $Ki_{E3}(x)$ の足し合わせであり、 $Ki_{E3}(x)$ がどのような分布になっているかは非常に重要である。そこで、各分点セットでの $Ki_{E3}(x)$ について調べる。Fig. 3.2 に各分点セット (UDA、GL、L_OPT、TY_OPT) での $Ki_{E3}(x)$ を示す。

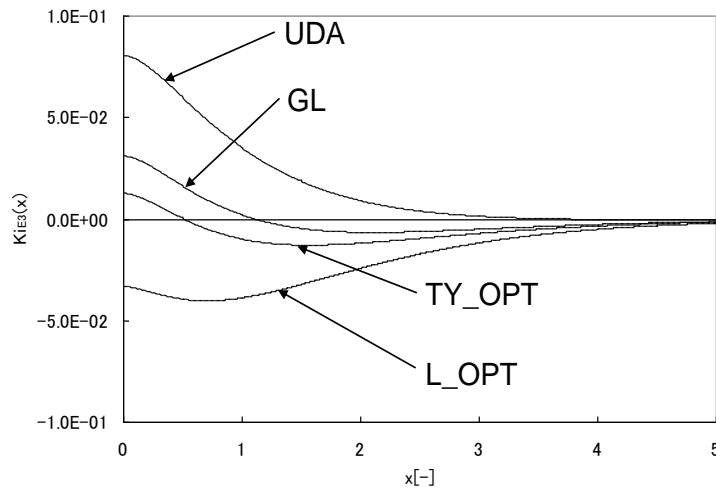


Fig.3.2 各分点セットでの $Ki_{E3}(x)$ の分布 (分点数 1)

Fig. 3.2 より、他の分点セットと比較すると、UDA での $Ki_{E3}(x)$ の絶対値は若干大きい値になっていることが分かる。しかし、その差は顕著なものではなく、分点数 1 についてはどの分点セットにおいても $Ki_{E3}(x)$ の分布はそれほど大差ない。

3.4.2 分点数 2

Fig. 3.3 に分点数 2 のときの各分点セット (UDA、GL、L_OPT、TY_OPT) での $Ki_{E3}(x)$ を示す。

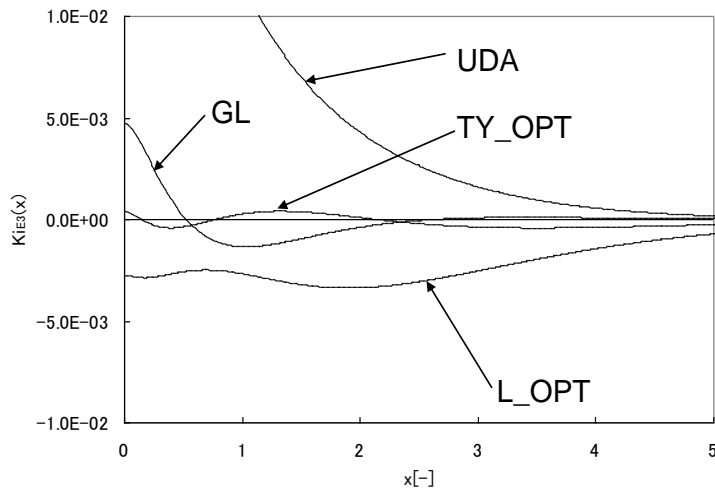


Fig. 3.3 各分点セットでの $Ki_{E3}(x)$ の分布 (分点数 2)

Fig. 3.3 より、分点数が2 のときについては分点セットによって $Ki_{E3}(x)$ の分布に大きな差があることが分かる。他の分点セットと比較して、TY_OPT での $Ki_{E3}(x)$ の絶対値がどの x に対しても極めて小さいことが分かる。よって、TY_OPT を用いることによって極角方向の離散化誤差を著しく低減できることが期待される。

3.4.3 分点数3

Fig. 3.4 に分点数3 のときの各分点セット (UDA、GL、L_OPT、TY_OPT) での $Ki_{E3}(x)$ を示す。

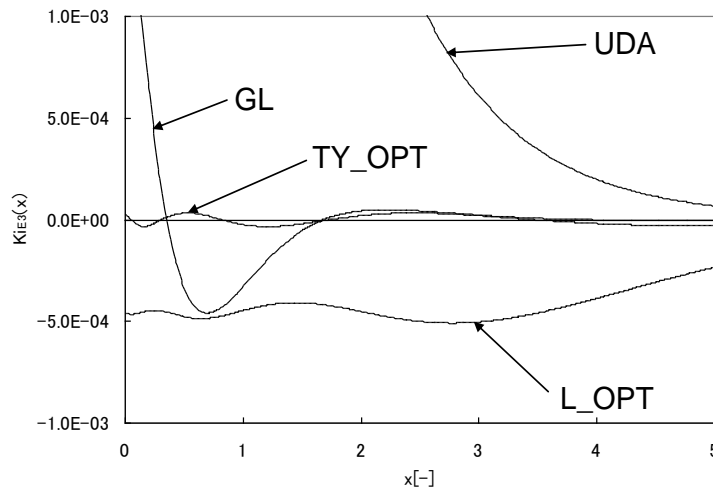


Fig. 3.4 各分点セットでの $Ki_{E3}(x)$ の分布 (分点数3)

Fig. 3.4 より、TY_OPT での $Ki_{E3}(x)$ の絶対値は常に小さく (最大で 3.36×10^{-5})、分点数3 の TY_OPT はほぼ完璧に Bickley 関数を表現できていると言える。したがって、分点数3 の TY_OPT を用いれば、極角方向の離散化誤差は無視し得るほど小さくなることが期待される。

3.5 検証計算

3.5.1 計算条件

新たに作成した TY_OPT の妥当性を確認するため、2 種類の検証計算を行った。単ピンセル体系と C5G7 ベンチマーク問題である。それぞれの計算条件について以下で説明する。

- ・ 単ピンセル体系

濃縮度 4.1wt% の UO_2 燃料のピンセル体系である。計算体系は Fig. 3.5 に示す通りである。核定数には 16 群の断面積を用いる。境界条件はどの面についても完全反射境界条件を用いる。

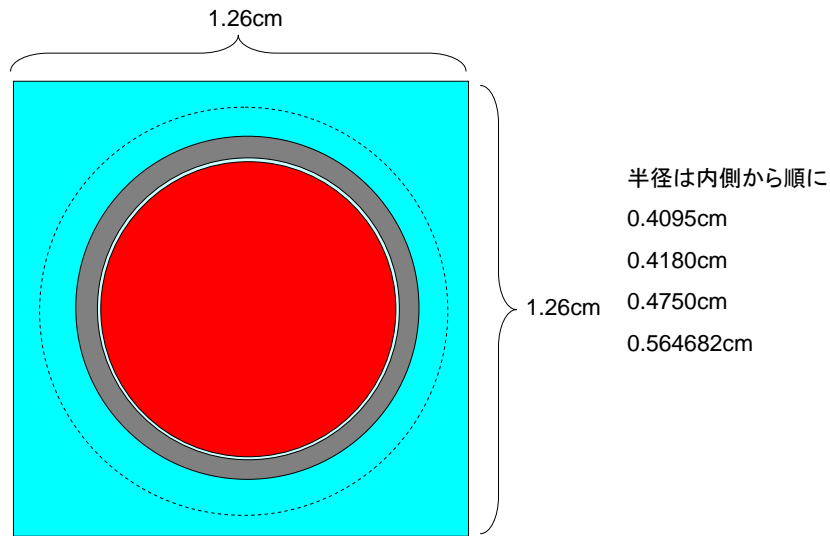


Fig. 3.5 単ピンセルの計算体系

UDA、GL、L_OPT、TY_OPT の4種類の極角分点セットを用い、どの分点セットについても極角方向分割数を1~3に変化させ、実効増倍率の参照値との差異を調べた。参照値は16GLでの結果である。方位角を64UDA、ray separationを0.05FRM、中性子束領域をFig. 3.6のようにそれぞれ設定し、計算を行った。

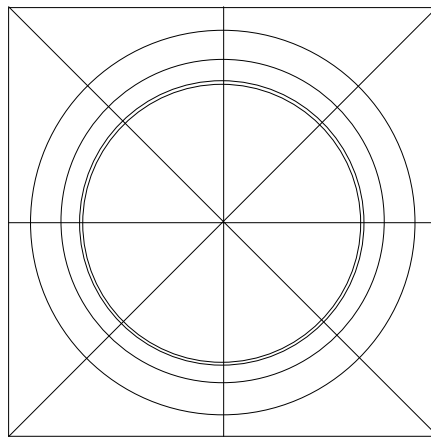


Fig. 3.6 単ピンセル計算における中性子束領域

• C5G7 ベンチマーク問題

計算に用いるセルの幾何形状を示したものがFig. 3.7である。また、計算体系を簡略的に図示したものをFig. 3.8に、各燃料集合体中の燃料棒配置を示したものをFig. 3.9にそれぞれ示す。

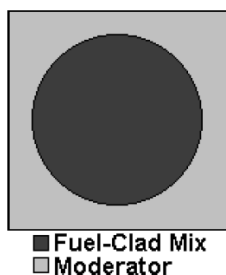


Fig. 3.7 セルの幾何形状

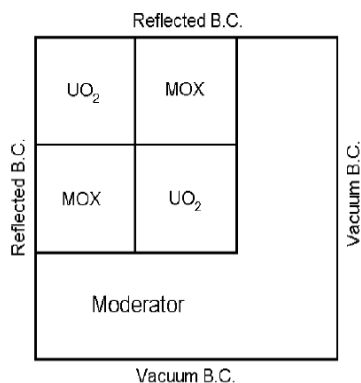


Fig. 3.8 C5G7 ベンチマーク問題の計算体系

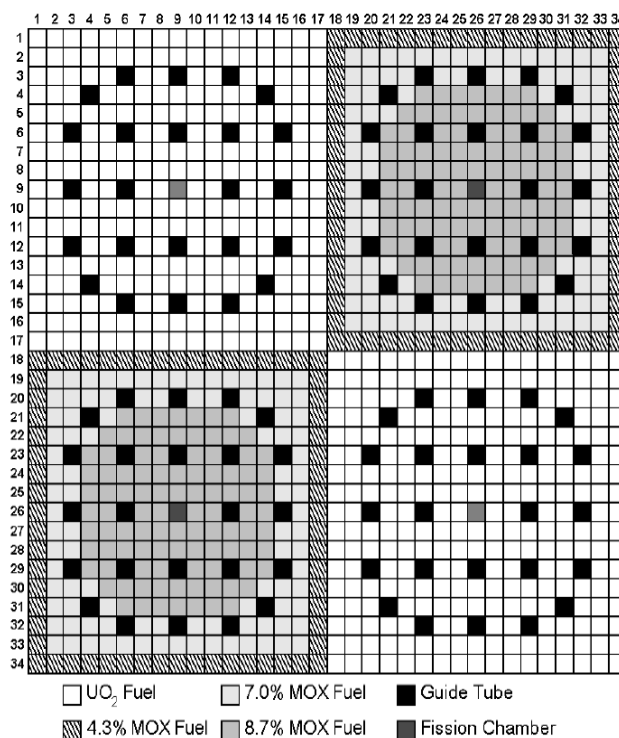


Fig. 3.9 各集合体の燃料棒配置

セルのピッチは $1.26\text{cm} \times 1.26\text{cm}$ 、セル内部の燃料、被覆管、ギャップは均質化されており、その半径は 0.54cm である。単ピンセル計算のときと同様の4種類の極角分点セットを用いた。どの分点セットについても極角方向分割数を1~3に変化させ、参照値との差異を調べた。実効増倍率、燃料棒出力分布（自乗平均差異、最大差異）について評価した。参照値は16GLでの結果である。方位角を64UDA、ray separationを0.05FRM、中性子束領域を燃料集合体内のセルについてはFig. 3.10、減速材領域のセルについてはFig.3.11のようにそれぞれ設定し、計算を行った。

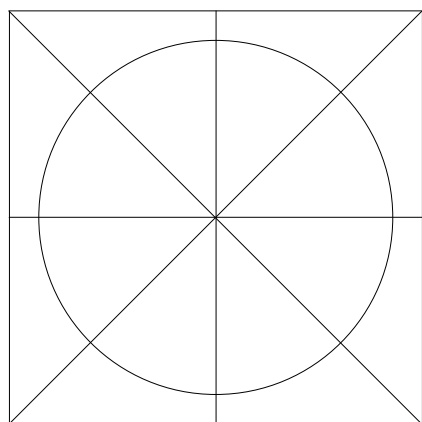


Fig. 3.10 C5G7 ベンチマーク問題における中性子束領域（集合体内のセル）

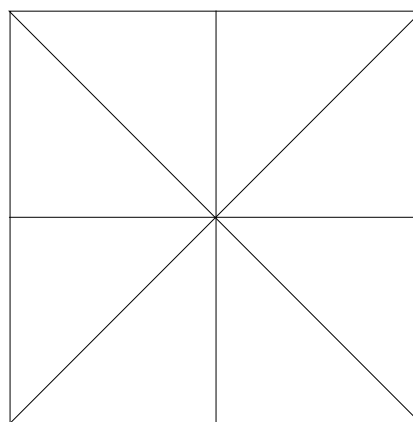


Fig. 3.11 C5G7 ベンチマーク問題における中性子束領域（減速領域のセル）

3.5.2 計算結果

- ・ 単ピンセル体系

実効増倍率の参照値との差異を Table 3.3 に示す。

Table 3.3 単ピンセル体系での計算結果（実効増倍率の差異）

極角分割数	UDA	GL	L OPT	TY OPT
1	0.072%	0.046%	0.006%	0.036%
2	0.022%	0.001%	-0.009%	-0.012%
3	0.006%	-0.008%	0.001%	-0.002%

- ・ C5G7 ベンチマーク問題

計算結果の参照値との差異を Table 3.4~Table 3.5 に示す。Table 3.4 は実効増倍率の差異、Table 3.5 は燃料棒出力の自乗平均差異、Table 3.6 は燃料棒出力の最大差異をそれぞれ示している。

Table 3.4 C5G7 ベンチマーク問題での計算結果（実効増倍率の差異）

極角分割数	UDA	GL	L OPT	TY OPT
1	-0.861%	-0.034%	1.023%	0.269%
2	-0.331%	-0.011%	0.097%	-0.005%
3	-0.160%	-0.011%	0.022%	-0.001%

Table 3.5 C5G7 ベンチマーク問題での計算結果（燃料棒出力の自乗平均差異）

極角分割数	UDA	GL	L OPT	TY OPT
1	3.443%	0.493%	4.687%	1.402%
2	1.263%	0.168%	0.437%	0.069%
3	0.581%	0.085%	0.085%	0.003%

Table 3.6 C5G7 ベンチマーク問題での計算結果（燃料棒出力の最大差異）

極角分割数	UDA	GL	L OPT	TY OPT
1	12.008%	1.622%	-12.359%	-3.186%
2	4.499%	-0.341%	-1.198%	-0.135%
3	2.151%	-0.165%	-0.236%	-0.005%

3.5.3 考察

これらの計算についての考察を行う。

- ・ 単ピンセル体系

どの計算条件においても差異は小さい値を示していることが分かる。これは、体系が単純であるためと考えられる。総合的に見ると、L_OPT を用いた場合、最も精度良く計算できていると考えられる。UDA での結果は他の分点セットでの結果より若干精度が悪いが、どの分点セットを用いてもそれほど大きな差は出ない。したがって、このような体系ではどのような分点セットを用いてもある程度良好な結果が得られるので、TY_OPT の精度の良し悪しを判断することは難しい。

- ・ C5G7 ベンチマーク問題

どの分点セットにおいても、分点数 1 のときの結果では、分点数が 2 以上のときの結

果に比べ、極めて差異が大きい。これは C5G7 ベンチマーク問題のような複雑な体系において、 $0 \leq \theta \leq \pi/2$ の範囲を1つの角度で代表することは極めて困難であることを示している。したがって、分点数2以上についてのみ考える。また、Table 3.4~Table 3.6 で共通して見られるのは UDA での結果の精度が他の分点セットでのものと比べ著しく(平均的に1桁)悪いことである。よって、複雑な体系を計算する場合には、極角方向を単純に等分割に分けるのではなく、何らかの方針に基づいて極角を分割する必要がある。本研究で作成した TY_OPT に注目すると、分点数2、分点数3とも差異は非常に小さい。2TY_OPT を他の分点セットと比較すると、2GL に比べ2~3倍、2L_OPT に比べ10倍程度差異は小さい。また、3TY_OPT を他の分点セットと比較すると、3GL に比べ10~30倍、3L_OPT に比べ20~40倍差異は小さい。追加で行った計算結果より、2TY_OPT、3TY_OPT の精度は、C5G7 ベンチマーク問題では、それぞれ3~4GL、10~12GL と同程度であることが分かった。

よって、TY_OPT を用いれば、2分点でも十分な精度が得られ、3分点においては極角方向離散化誤差を無視できるほど高精度であることが言え、TY_OPT の妥当性が確認された。

3.6 本章のまとめ

本章では、まず MOC において極角方向離散化誤差を完全に排除したものと衝突確率法が等価であることを示した。そして、その考え方に基づいて、従来法とは異なる最適極角分点セットの最適化スキームを考案し、新たな最適極角分点セット TY_OPT の作成を行った。最後に検証計算を通じ、TY_OPT の妥当性を確認した。

第4章 方位角分点セットの検討

4.1 検討を行う分点セットの種類

第2章で示した角度中性子束の方位角方向分布の例 (Fig. 2.20) をもう一度 Fig. 4.1 に示す。また、MOX 燃料中の角度中性子束の方位角方向分布を参考文献[1]で見ることができ。ただし、Fig. 4.1 中の方位角は CL を xy 平面上に投影した線が x 軸と成す角とする。

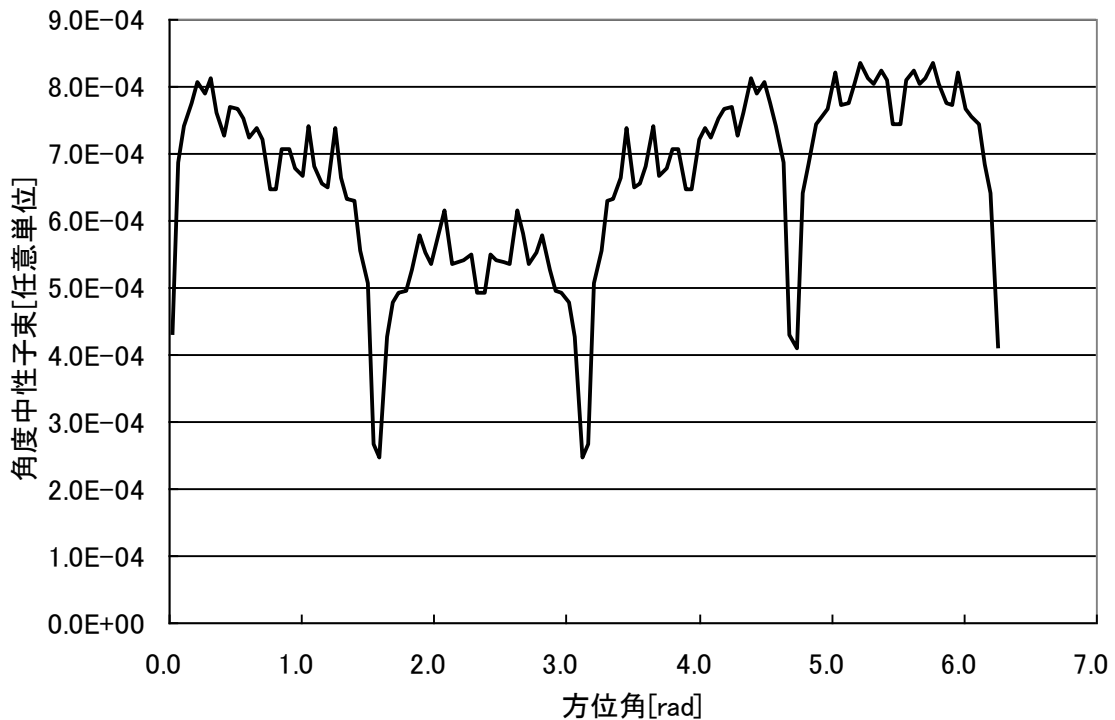


Fig. 4.1 角度中性子束の方位角方向分布の例

このように、角度中性子束の方位角方向の分布は非常に複雑であり、激しく振動している。また、燃料集合体中には制御棒や燃料棒など核的性質の異なるものが離散化して配置されているため、ピークを持った分布になっている。このような分布を持つ関数の数値積分は困難であり、有効な分点セットは見つかっていないことから、通常は (cyclic tracking を行わない場合は) UDA が用いられる。しかし、たとえ困難な数値積分であったとしても、単純に等分割する分点セットを用いるよりは、何らかの論理的根拠に基づいて導出される分点セットを用いた方が、精度は良くなることが予想される。つまり、最も単純な分点セットである UDA ではなく、直交多項式を利用した Gauss 型積分公式に基づく分点セットを用いれば、多少は精度が上がると思われる。本研究では、Gauss 型積分公式に用いる多項式として、Legendre 多項式と第 1 種 Chebyshev 多項式に注目した。なぜなら、両多項式とも有限区間で定義される直交多項式であり、分点数が N のとき、Gauss-Legendre 分点セットでは(4.1)式、Gauss-Chebyshev 分点では(4.2)式で表される関数 $f(x)$ について

(4.3)式が成り立つからである。ただし、(4.3)式中の x_i は直交多項式の根、 ω_i は Gauss 型積分公式に基づいて導出される重みである。

$$f(x) = \sum_{i=0}^{2N-1} a_i x^i \quad (4.1)$$

$$f(x) = \sum_{i=0}^{2N-1} \frac{a_i x^i}{\sqrt{1-x^2}} \quad (4.2)$$

$$\int_{-1}^1 f(x) dx = \sum_{i=1}^N \omega_i f(x_i) \quad (4.3)$$

以下では、これらの分点セットをそれぞれ GL、GC と省略する。なお、Gauss 型積分公式、Legendre 多項式、Chebyshev 多項式については Appendix C で詳細に説明する。

(4.1)式は一般的な $2N-1$ 次の多項式である。したがって、角度中性子束分布が多項式に近い関数であれば、GL が有効であると期待できる。ここで、(4.1)式と(4.2)式を比較すると、(4.2)式の方が多くの極値を持つことが分かる。よって、Fig.4.1 のように激しく振動する関数に対しては、GL より GC の方が有効であることが予想される。いずれにせよ、どちらかの分点セットが UDA より高精度な結果をもたらす可能性は十分にある。

次に、GL や GC での角度分点の決め方について考える。体系の境界での角度中性子束の反射を考慮に入れると、代表する方位角の値は $0 \leq \theta \leq 2\pi$ で $1/8$ 対称である必要がある。つまり、代表する方位角は x 軸、 y 軸、 $y=x$ 、 $y=-x$ のいずれに対しても対称でなければならない。しかし、この対称性の条件だけでは、GL や GC での角度は 2 通り存在してしまう。なぜなら、GL や GC での分点は $-1 \leq x \leq 1$ の範囲に $x=0$ に対して対称になるように分布しているため、 $\varphi = \pi/8$ を $x=0$ にとる場合と $\varphi = \pi/4$ を $x=0$ にとる場合の 2 通りが考えられるからである。これを図で示したものが Fig. 4.2 である。

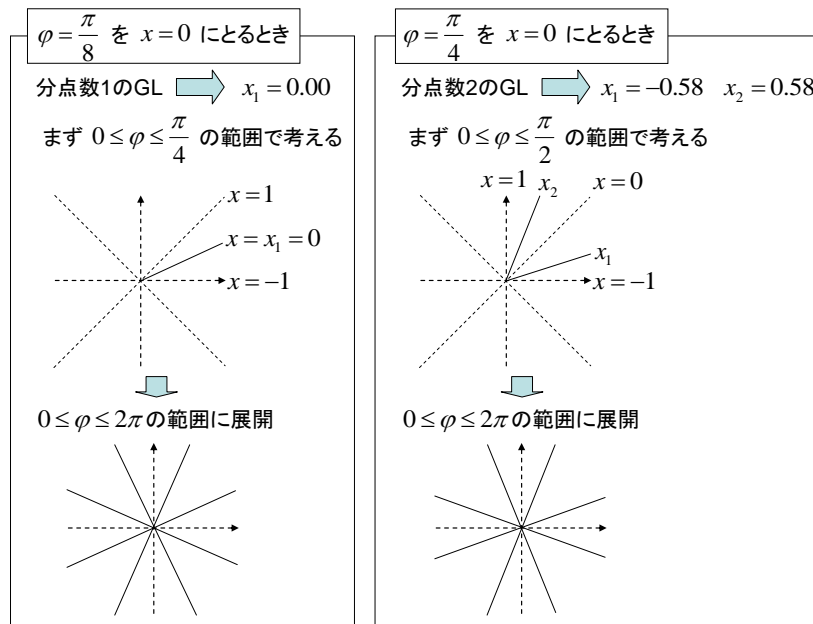


Fig.4.2 方位角の決め方の例 (8GL の場合)

Fig. 4.2 に示した 2 種類の方角角の決め方を区別するため、本章では Fig. 4.2 の左側の決め方を octant 法、右側を quarter 法と呼ぶことにする。

4.2 検証計算

4.2.1 計算条件

単ピンセル体系と C5G7 ベンチマーク問題の 2 種類の体系で計算を行った。それぞれの計算条件について以下で説明する。

- 単ピンセル体系

濃縮度 4.1wt% の UO_2 燃料のピンセル体系である。計算体系は Fig. 4.3 に示す通りである。核定数には 16 群の断面積を用いる。境界条件はどの面についても完全反射境界条件を用いる。

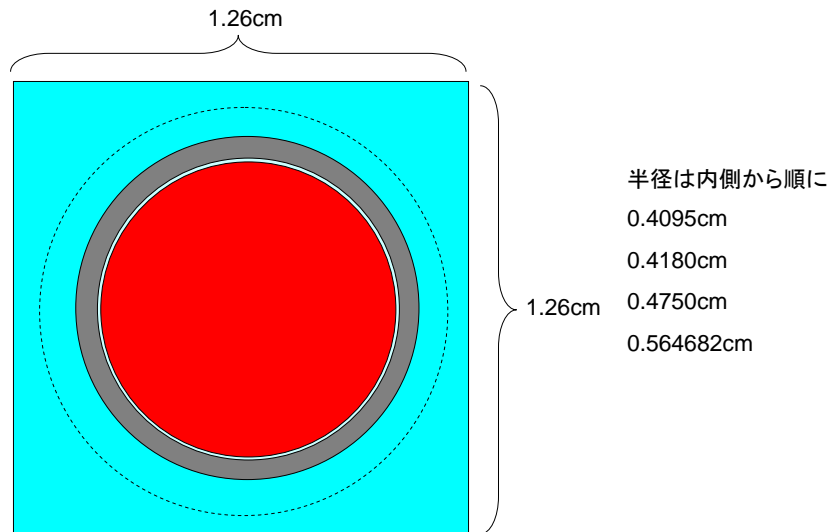


Fig. 4.3 単ピンセルの計算体系

UDA、GL、GC の 3 通りの方角角分点セットを用いて計算を行った。GL と GC については octant 法と quarter 法で計算を行った。それぞれの分点セットについて方位角分割数を 32、48、64、96、128、192、256 の 7 通りに変化させ、参照値との実効増倍率の差異を調べた。参照値には 1024UDA での結果を用いた。極角を 2TY_OPT、ray separation を 0.05FRM、中性子束領域を Fig. 4.4 のようにそれぞれ設定し、計算を行った。

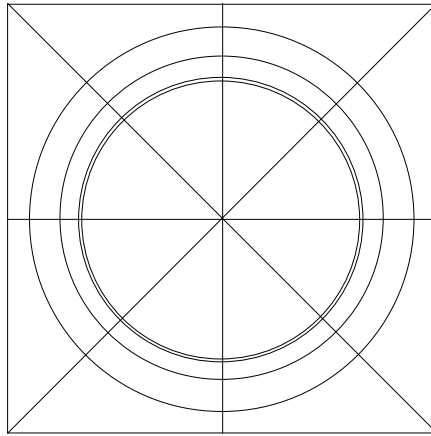


Fig. 4.4 単ピンセル計算における中性子束領域

・ C5G7 ベンチマーク問題

計算に用いるセルの幾何形状を示したものが Fig. 4.5 である。また、計算体系を簡略的に図示したものを Fig. 4.6 に、各燃料集合体中の燃料棒配置を示したものを Fig. 4.7 にそれぞれ示す。

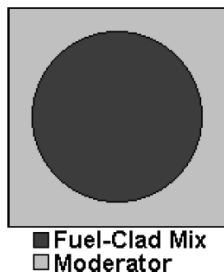


Fig. 4.5 セルの幾何形状

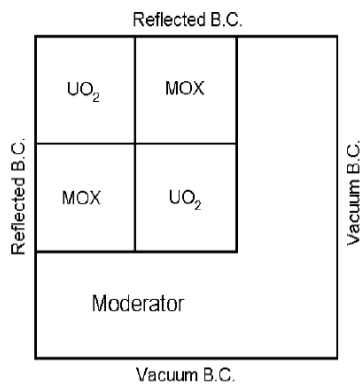


Fig. 4.6 C5G7 ベンチマーク問題の計算体系

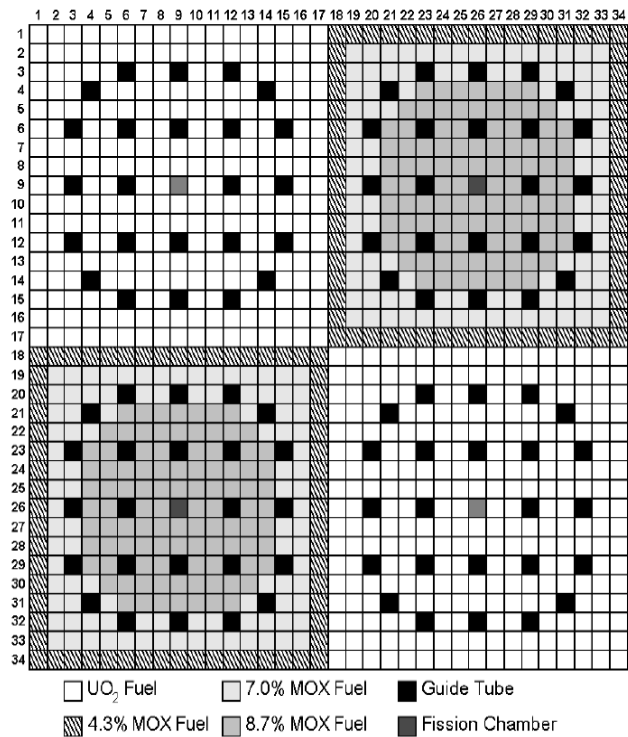


Fig. 4.7 各集合体の燃料棒配置

セルのピッチは $1.26\text{cm} \times 1.26\text{cm}$ 、セル内部の燃料、被覆管、ギャップは均質化されており、その半径は 0.54cm である。単ピンセル計算のときと同様の3種類の方位角分点セットを用い、GL と GC については octant 法と quarter 法で計算を行った。どの分点セ

ットについても方位角方向分割数を 32、48、64、96、128、192、256 の 7 通りに変化させ、参照値との差異を調べた。実効増倍率、燃料棒出力分布（自乗平均差異、最大差異）について評価した。参照値は 1024UDA での結果である。極角を 2TY_OPT、ray separation を 0.05FRM、中性子束領域を燃料集合体内のセルについては Fig. 4.8、減速材領域のセルについては Fig.4.9 のようにそれぞれ設定し、計算を行った。

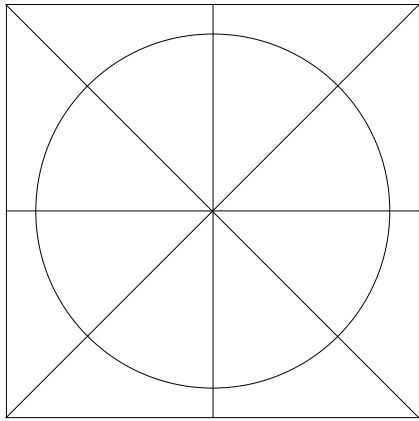


Fig. 4.8 C5G7 ベンチマーク問題における中性子束領域（集合体内のセル）

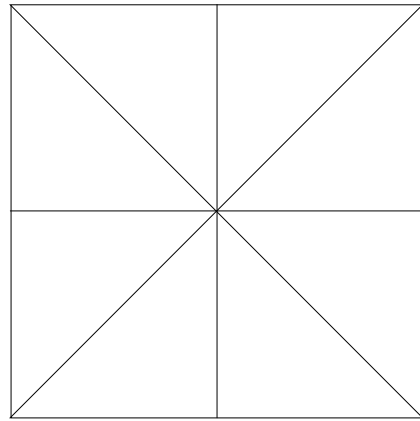


Fig. 4.9 C5G7 ベンチマーク問題における中性子束領域（減速領域のセル）

4.2.2 計算結果

- ・ 単ピンセル体系

実効増倍率の参照値との差異を Fig. 4.10、Fig. 4.11 に示す。Fig. 4.10、Fig. 4.11 は GL と GC での角度の決め方にそれぞれ octant 法、quarter 法を用いた場合の結果である。

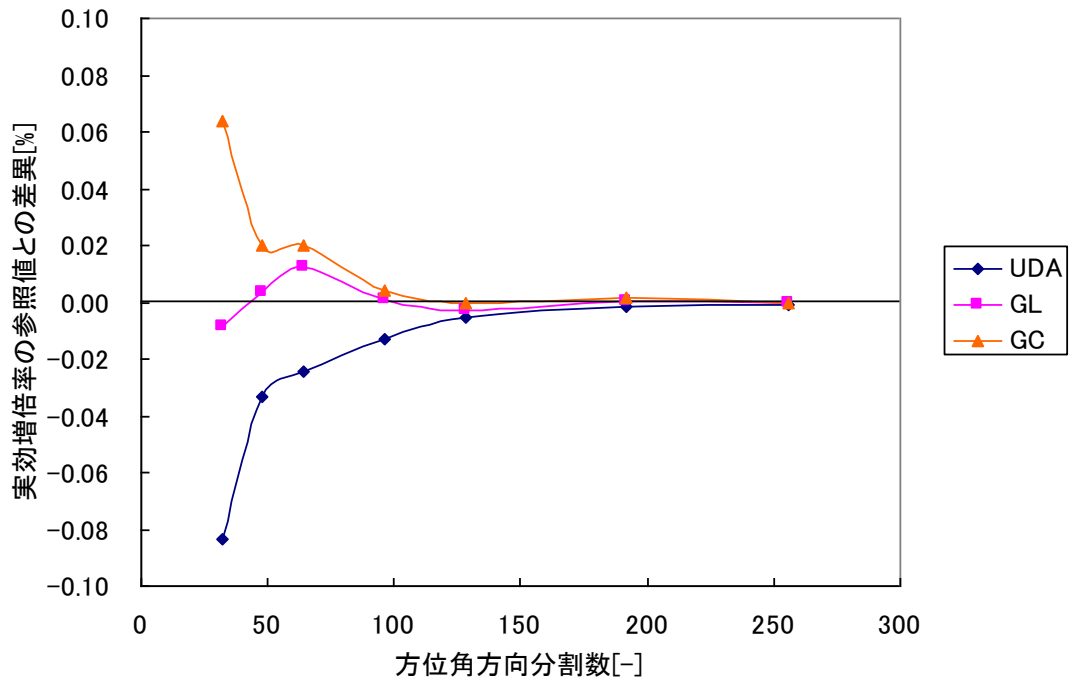


Fig. 4.10 単ピンセル体系での計算結果（実効増倍率の差異、octant 法）

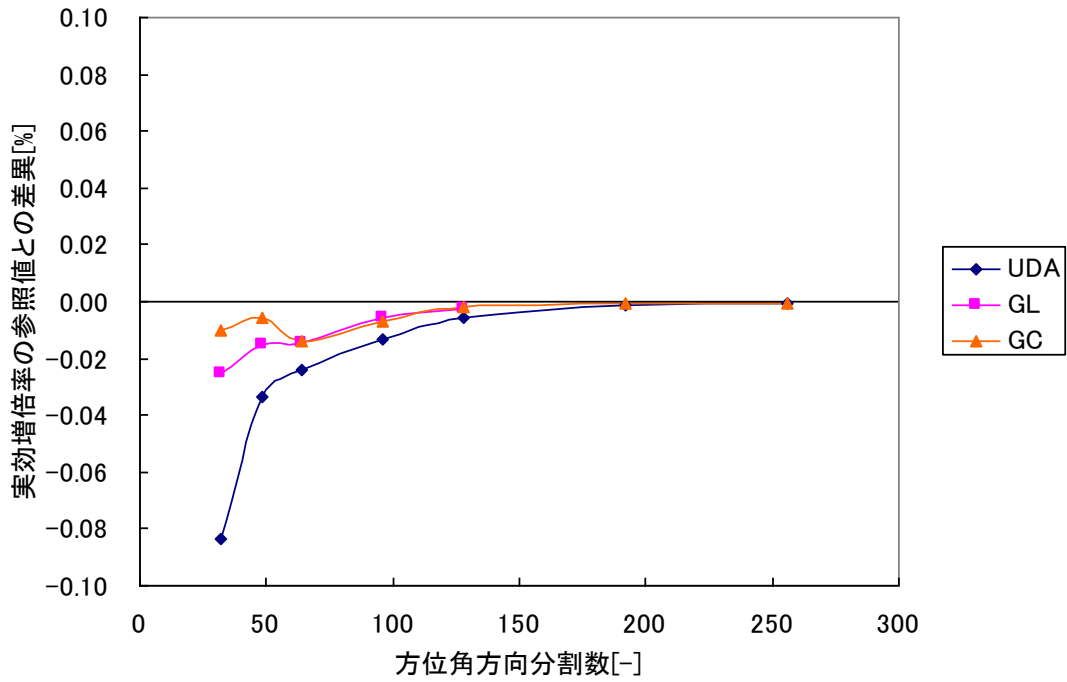


Fig. 4.11 単ピンセル体系での計算結果（実効増倍率の差異、quarter 法）

・ C5G7 ベンチマーク問題

計算結果の参照値との差異を Fig. 4.12～Fig. 4.17 に示す。Fig. 4.12～Fig. 4.14 は octant 法について、Fig. 4.15～Fig. 4.17 は quarter 法についてである。Fig. 4.12、Fig. 4.15 は実効増倍率の差異、Fig. 4.11、Fig. 4.16 は燃料棒出力の自乗平均差異、Fig. 4.14、Fig. 4.17 は燃料棒出力の最大差異をそれぞれ示している。

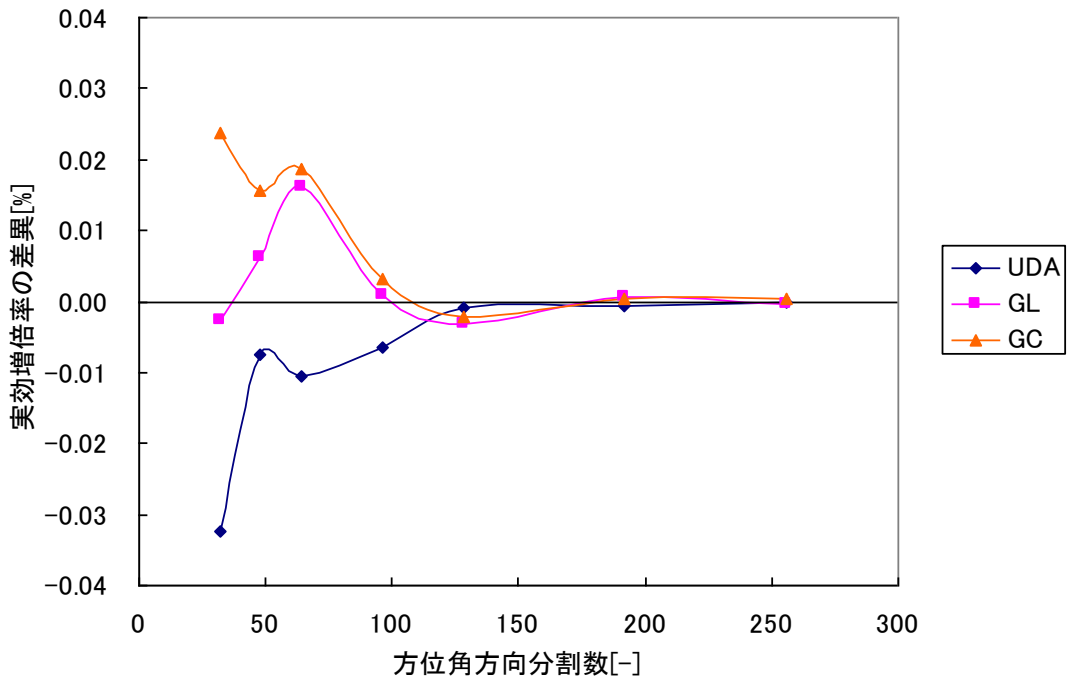


Fig. 4.12 C5G7 ベンチマーク問題での計算結果（実効増倍率の差異、octant 法）

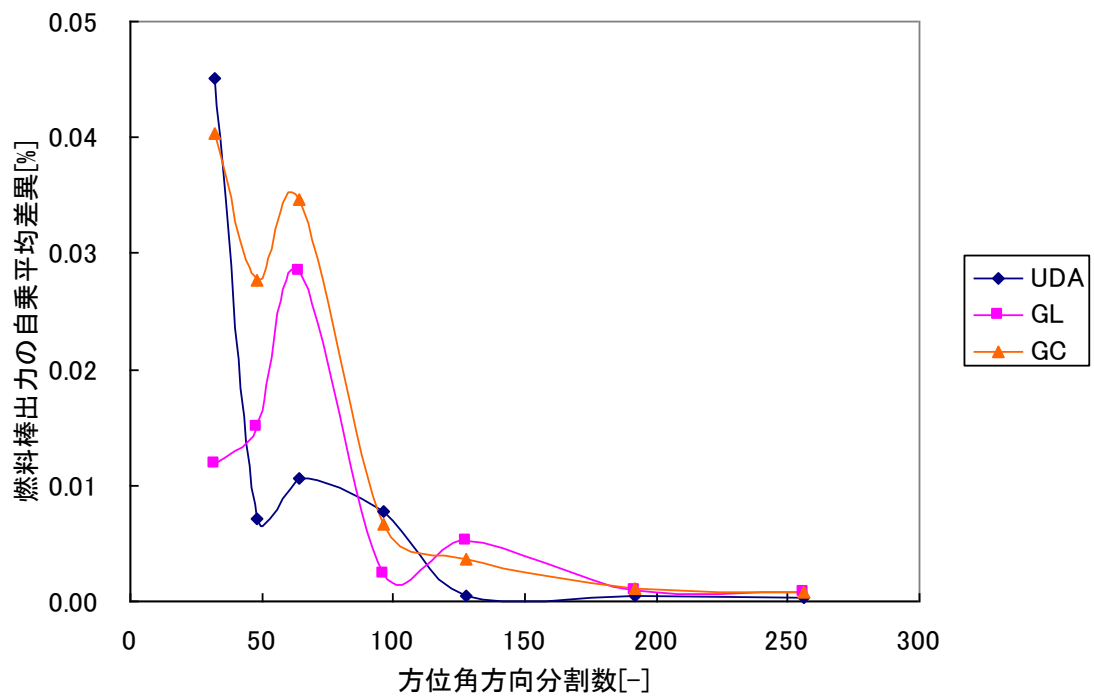


Fig. 4.13 C5G7 ベンチマーク問題での計算結果（燃料棒出力の自乗平均差異、octant 法）

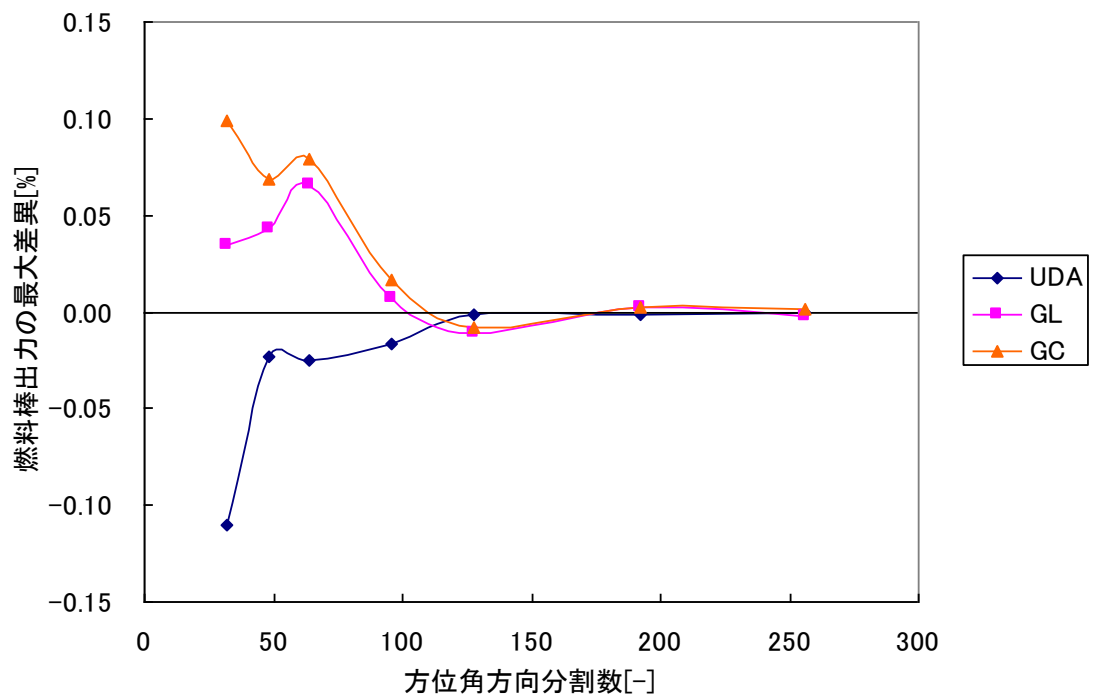


Fig. 4.14 C5G7 ベンチマーク問題での計算結果（燃料棒出力の最大差異、octant 法）

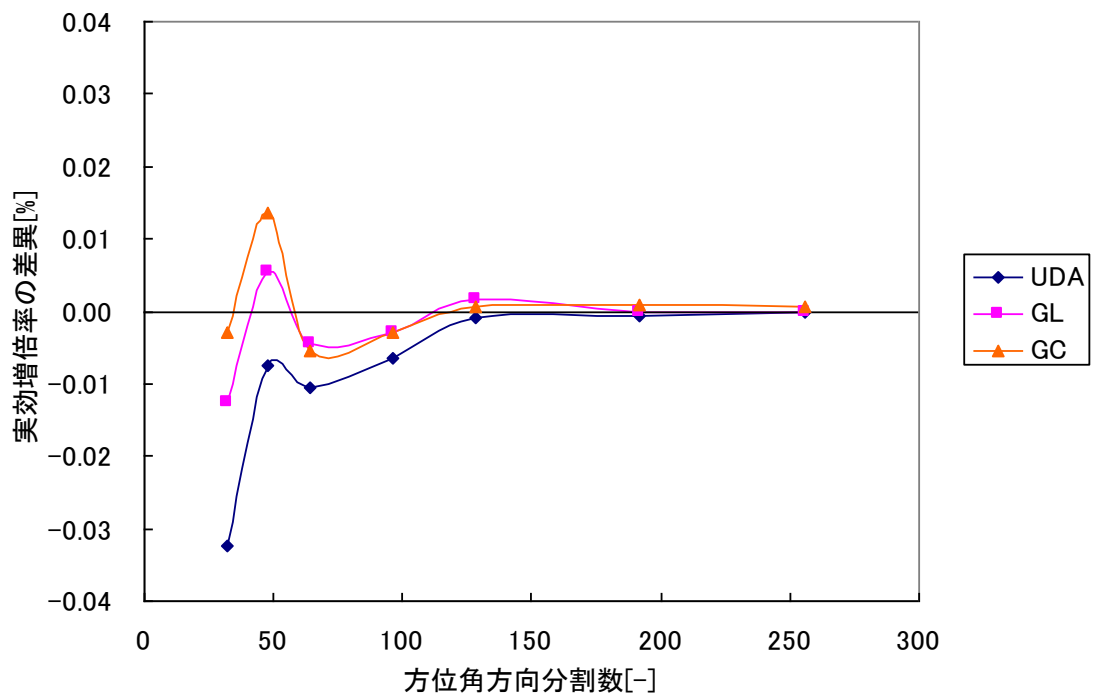


Fig. 4.15 C5G7 ベンチマーク問題での計算結果（実効増倍率の差異、quarter 法）

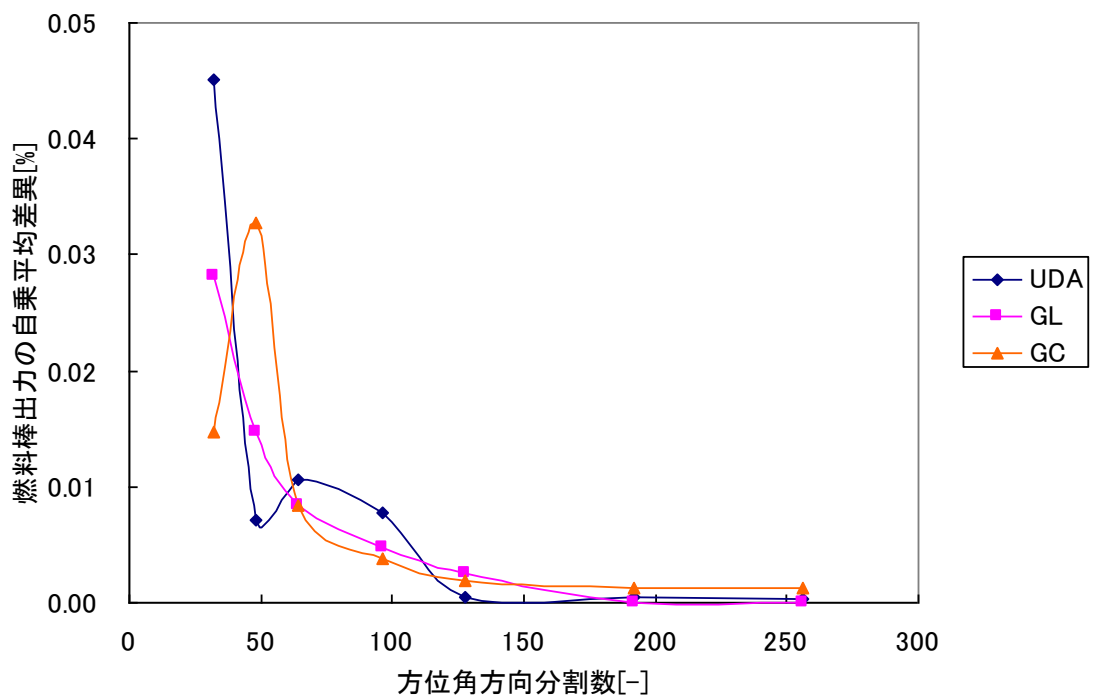


Fig. 4.16 C5G7 ベンチマーク問題での計算結果（燃料棒出力の自乗平均差異、quarter 法）

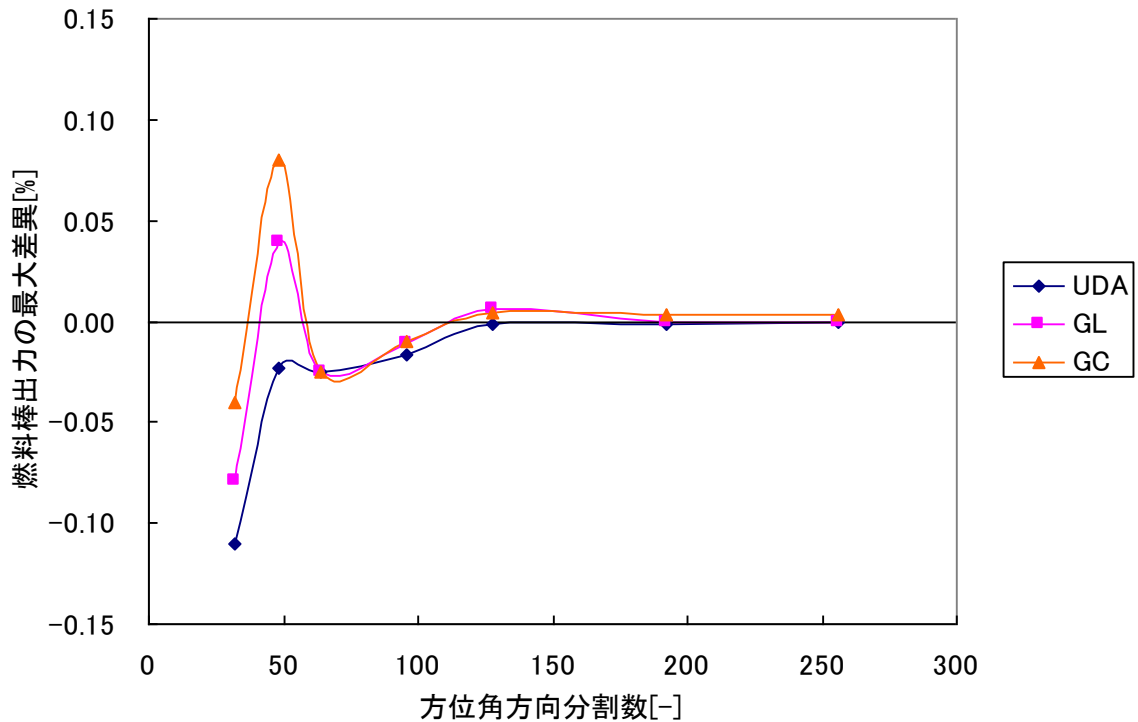


Fig.4.17 C5G7 ベンチマーク問題での計算結果（燃料棒出力の最大差異、quarter 法）

4.2.3 考察

これらの計算についての考察を行う。

- ・ 単ピンセル体系

Fig. 4.10、Fig. 4.11 を見ると、UDA よりも精度良く計算できているのは GL (octant 法)、GL (quarter 法)、GC (quarter 法) である。特に GC (quarter 法) の精度が最も良い。これらの結果から、単ピンセル体系において最も高精度な分点セットは GC (quarter 法) だと言える。しかし、GC (quarter 法) の精度が顕著に良いわけではなく、偶然精度が良かったという可能性も否定できない。

- ・ C5G7 ベンチマーク問題

Fig. 4.12～Fig. 4.17 から、GL と GC の傾向が似ていること、どのグラフも振動しながら収束していくことなどが分かる。GL の精度が平均的に最も良いように見えるが、Fig. 4.12～Fig. 4.17 のグラフはどれも互いに傾向が異なり、どの分点セットが良いかということに対し、確実な結論を出すことはできない。また、振動が最も小さかったのは UDA であり、他の分点セットは激しく振動することがあった。よって、最も無難な分点セットは UDA であると言えるかもしれない。

今回の計算では「どの分点セットが良いのか」という疑問に対して答えを出すことが

できなかった。ただ、振動が最も小さかったという理由より、UDA を用いるのが最も無難だと考えられる。計算結果全体から、どの分点セットを用いたとしても、方位角方向の離散化誤差を十分小さくするには、方位角方向分割数を 96 程度以上に設定する必要があることが分かった。

4.3 本章のまとめ

本章では、方位角方向離散化誤差の低減を目的とし、方位角分点セットの検討を行った。Gauss-Legendre 分点セットと Gauss-Chebyshev 分点セットの適用を試みた。これらの分点セットを用いて検証計算を行ったが、最も良い分点セットがどれなのか明確な答えを出すことができなかった。ただ、計算を通して、方位角方向の離散化誤差を十分小さくするには、方位角方向分割数を 96 程度以上に設定する必要があることが分かった。

第5章 Mobile chord 法の適用

5.1 Mobile Chord 法の概要^[14]

Mobile chord 法は元々、衝突確率法に用いられてきた。Equidistant 法や通常の macroband 法では Fig. 5.1 のように strip の中央を CL が通過していると考えられる。これに対し、mobile chord 法では Fig. 5.2 のように strip の中央でない位置を CL が通過していると考えられる。

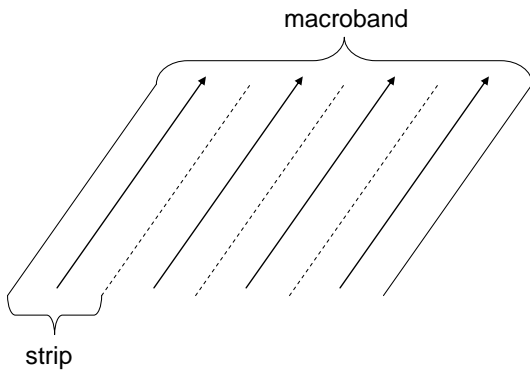


Fig. 5.1 Strip の中央を通過する CL

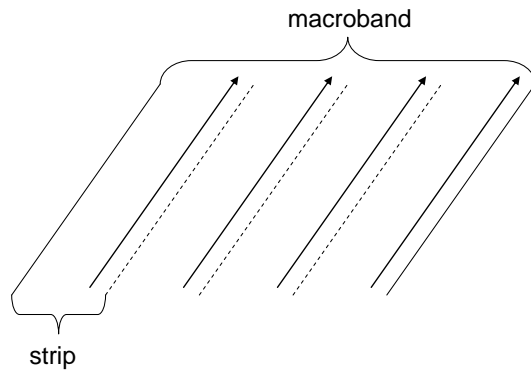


Fig. 5.2 Strip の中央でない位置を通過する CL

Mobile chord 法での strip 内の CL の相対位置は方位角によって変えられる。具体的には Fig. 5.3 のように、 i 番目の方位角での CL と $i+1$ 番目の方位角での CL をそれぞれの strip 内の相対位置が互いに逆側になるようにする。こうすることによって、 i 番目の方位角での CL における誤差と $i+1$ 番目の方位角でのそれを相殺することが期待できる。HELIOS では (5.1) 式に基づいて strip 内の CL の相対位置を決めている^[1]。

$$x_i = \begin{cases} \frac{i}{2N_\phi} & (i = 1, 3, 5, \dots, N_\phi - 1) \\ 1 - x_{i-1} & (i = 2, 4, 6, \dots, N_\phi) \end{cases} \quad (5.1)$$

ただし、 x_i は strip 内における CL の相対位置 ($0 \leq x_i \leq 1$)、 N_ϕ は方位角方向分割数である。

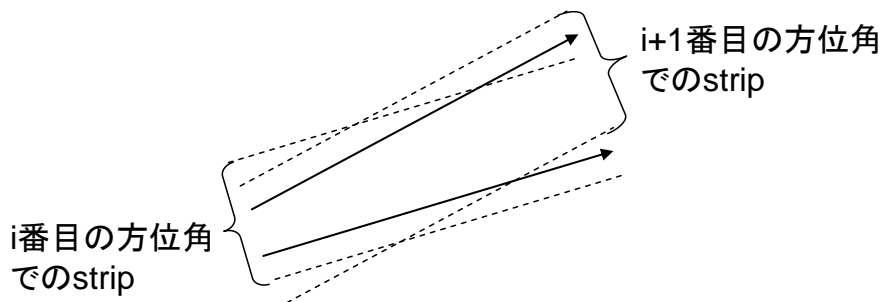


Fig. 5.3 Mobile chord 法での方位角による CL の相対位置の変化

次に、mobile chord 法を用いた場合の ray tracing の様子を macroband 法のものと比較した図を Fig. 5.4 に示す。

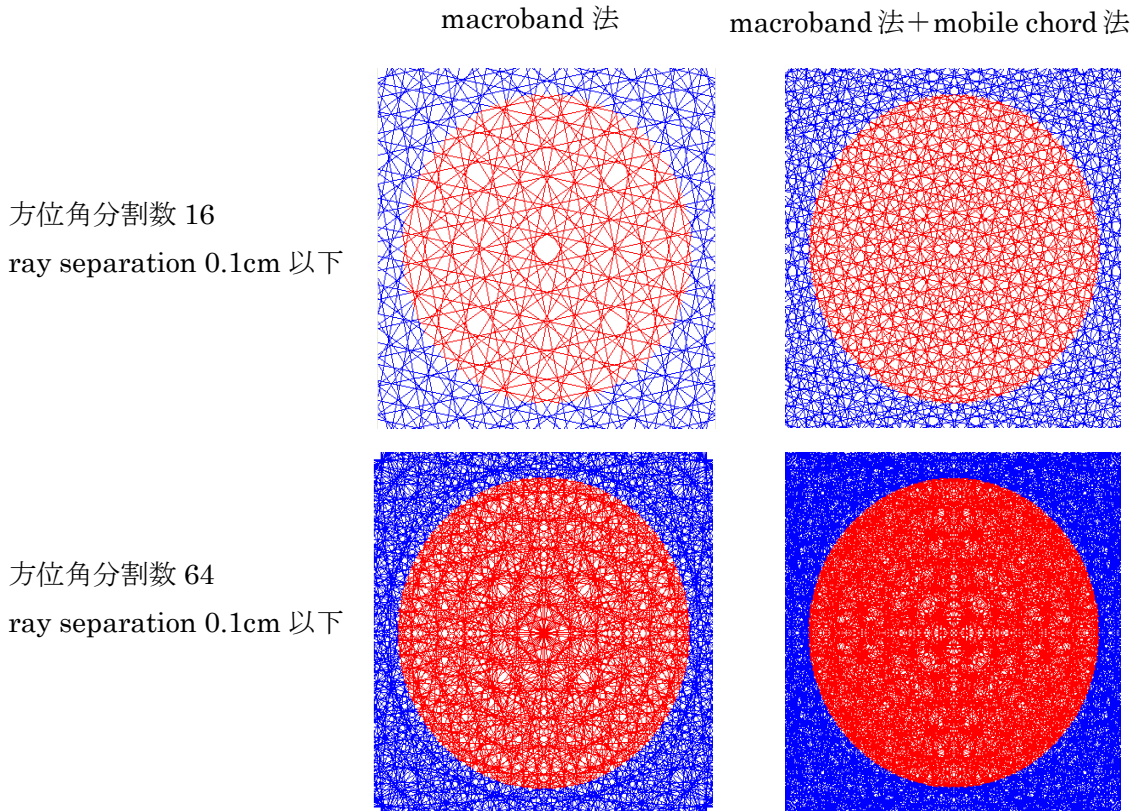


Fig. 5.4 Mobile chord 法での ray tracing の様子

Fig. 5.4 から mobile chord 法では CL が体系内に均一に引かれていることが分かる。均一に CL が引かれることで、誤差を相殺できることが予想され、高精度な計算結果を得られることが期待できる。Mobile chord 法の効果を調べるため、次の節で検証計算を行う。

5.2 検証計算

5.2.1 計算条件

Mobile chord 法の妥当性を確認するため、単ピンセル体系と C5G7 ベンチマーク問題の 2 種類の体系で計算を行った。

- ・ 単ピンセル体系

濃縮度 4.1wt% の UO_2 燃料のピンセル体系である。計算体系は Fig. 5.5 に示す通りである。核定数には 16 群の断面積を用いる。境界条件はどの面についても完全反射境界条件を用いる。

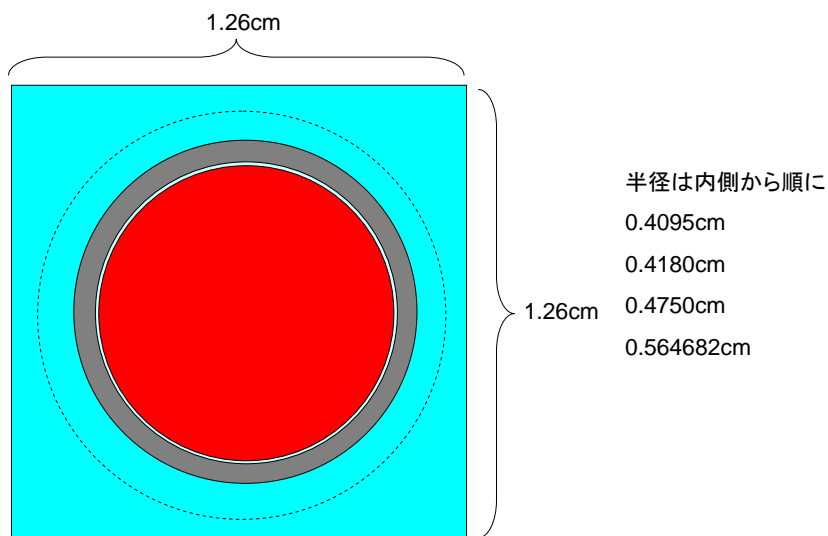


Fig. 5.5 単ピンセルの計算体系

FRM 法、FRMGL 法、FRM 法+Mobile Chord 法（以下 FRMMC 法）の 3 通りのトレース方法について計算を行った。それぞれのトレース方法について ray separation の最大値を 0.2cm、0.1cm、0.07cm、0.05cm、0.03cm、0.02cm、0.01cm の 7 通りに変化させ、参照値との実効増倍率の差異を調べた。参照値には 0.005FRMGL での結果を用いた。極角を 2TY_OPT、方位角を 64UDA、中性子束領域を Fig. 5.6 のようにそれぞれ設定し、計算を行った。

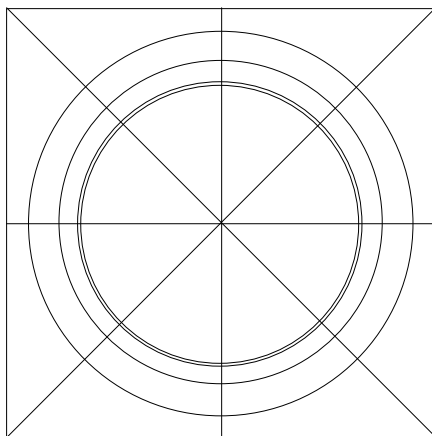


Fig. 5.6 単ピンセル計算における中性子束領域

・ C5G7 ベンチマーク問題

計算に用いるセルの幾何形状を示したものが Fig. 5.7 である。また、計算体系を簡略的に図示したものを Fig. 5.8 に、各燃料集合体中の燃料棒配置を示したものを Fig. 5.9 にそれぞれ示す。

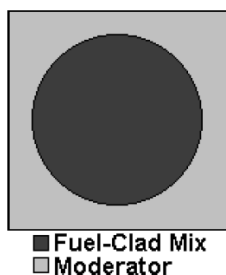


Fig. 5.7 セルの幾何形状

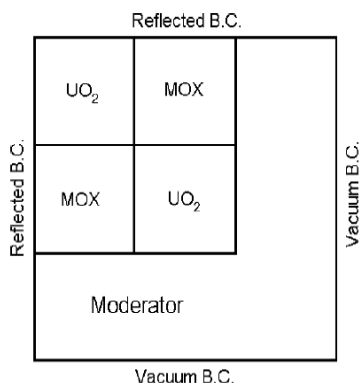


Fig. 5.8 C5G7 ベンチマーク問題の計算体系

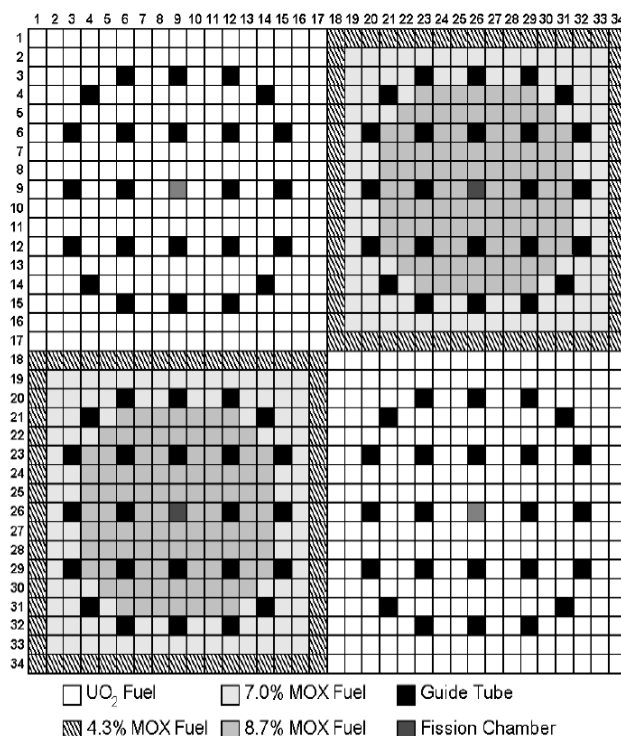


Fig. 5.9 各集合体の燃料棒配置

セルのピッチは $1.26\text{cm} \times 1.26\text{cm}$ 、セル内部の燃料、被覆管、ギャップは均質化されており、その半径は 0.54cm である。単ピンセル計算のときと同様に FRM 法、FRMGL 法、FRM 法+Mobile Chord 法（以下 FRMMC 法）の3種類のトレース方法を用い、それぞれのトレース方法について ray separation の最大値を 0.2cm 、 0.1cm 、 0.07cm 、 0.05cm 、 0.03cm 、 0.02cm 、 0.01cm の7通りに変化させ、参照値との差異を調べた。実効増倍率、燃料棒出力分布（自乗平均差異、最大差異）について評価した。参照値は 0.005FRMGL での結果である。極角を 2TY_OPT、方位角を 64UDA、中性子束領域を燃料集合体内のセルについては Fig. 5.10、減速材領域のセルについては Fig.5.11 のようにそれぞれ設定し、計算を行った。

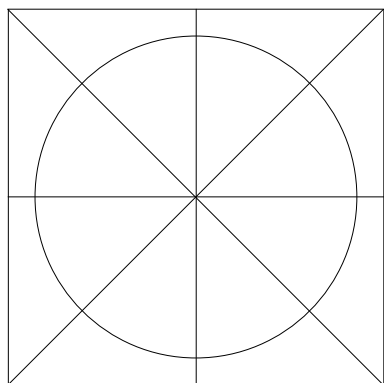


Fig. 5.10 C5G7 ベンチマーク問題における中性子束領域（集合体内のセル）

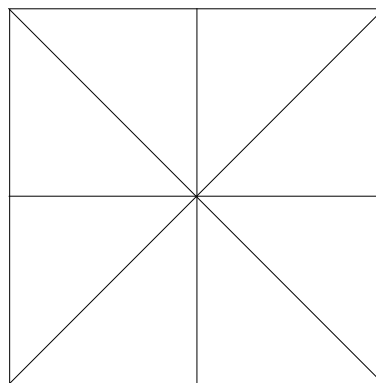


Fig. 5.11 C5G7 ベンチマーク問題における中性子束領域（減速領域のセル）

5.2.2 計算結果

- 単ピンセル体系

実効増倍率の参照値との差異を Fig. 5.12 に示す。

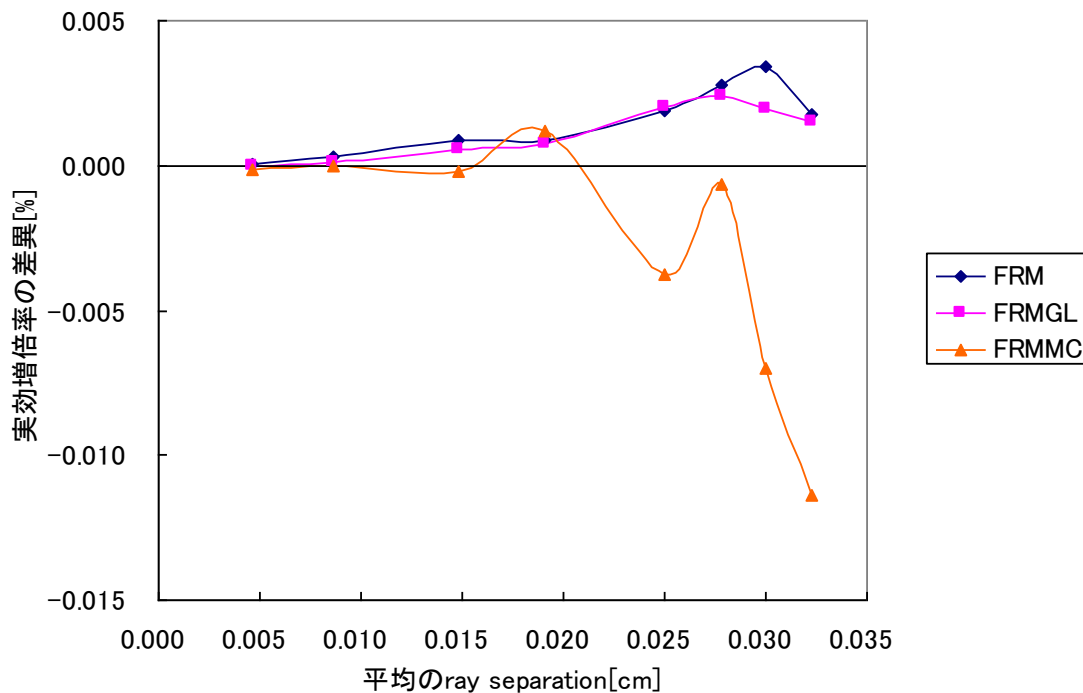


Fig. 5.12 単ピンセル体系での計算結果 (実効増倍率の差異)

- C5G7 ベンチマーク問題

計算結果の参照値との差異を Fig. 5.13~Fig. 5.15 に示す。Fig. 5.13 は実効増倍率の差異、Fig. 5.14 は燃料棒出力の自乗平均差異、Fig. 5.15 は燃料棒出力の最大差異をそれぞれ示している。

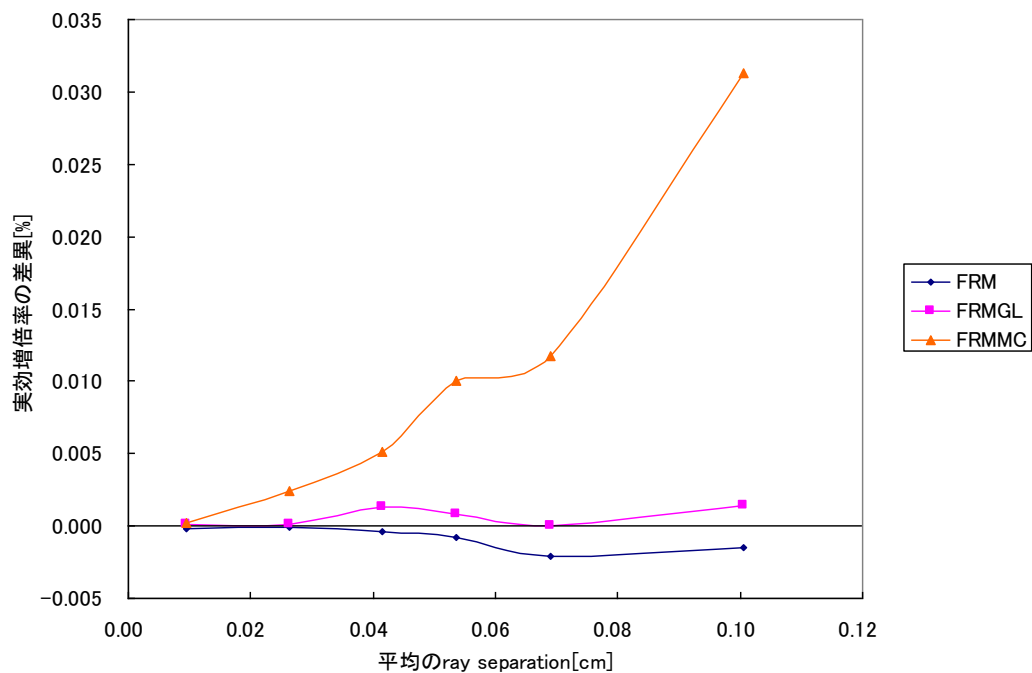


Fig. 5.13 C5G7 ベンチマーク問題での計算結果 (実効増倍率の差異)

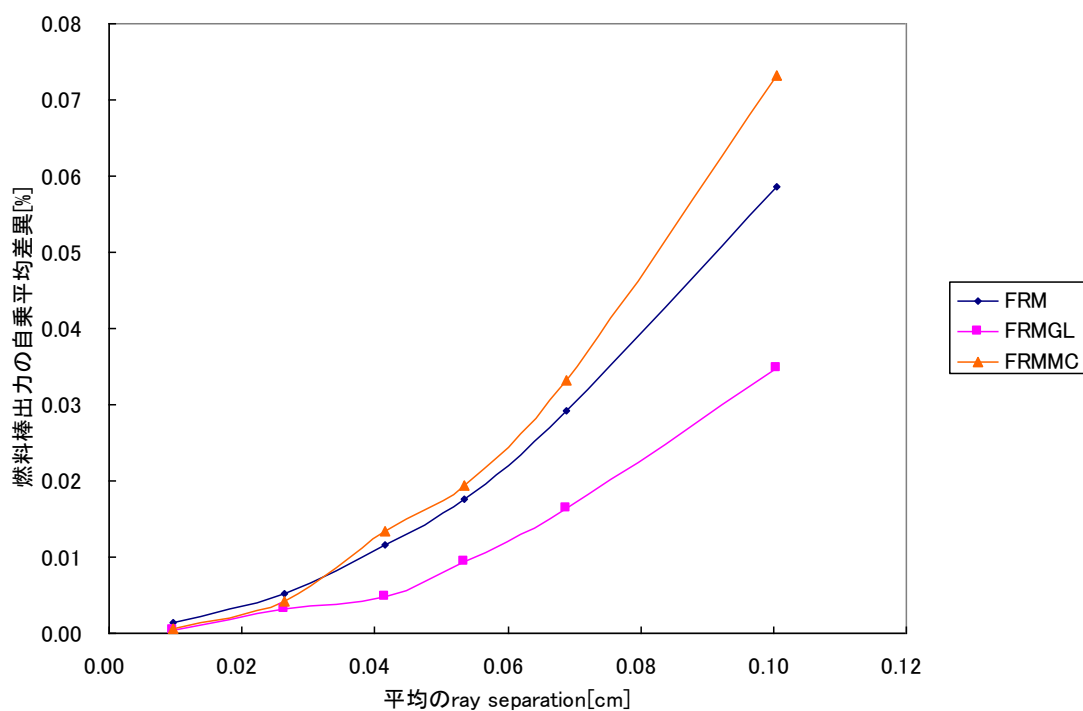


Fig. 5.14 C5G7 ベンチマーク問題での計算結果 (燃料棒出力の自乗平均差異)

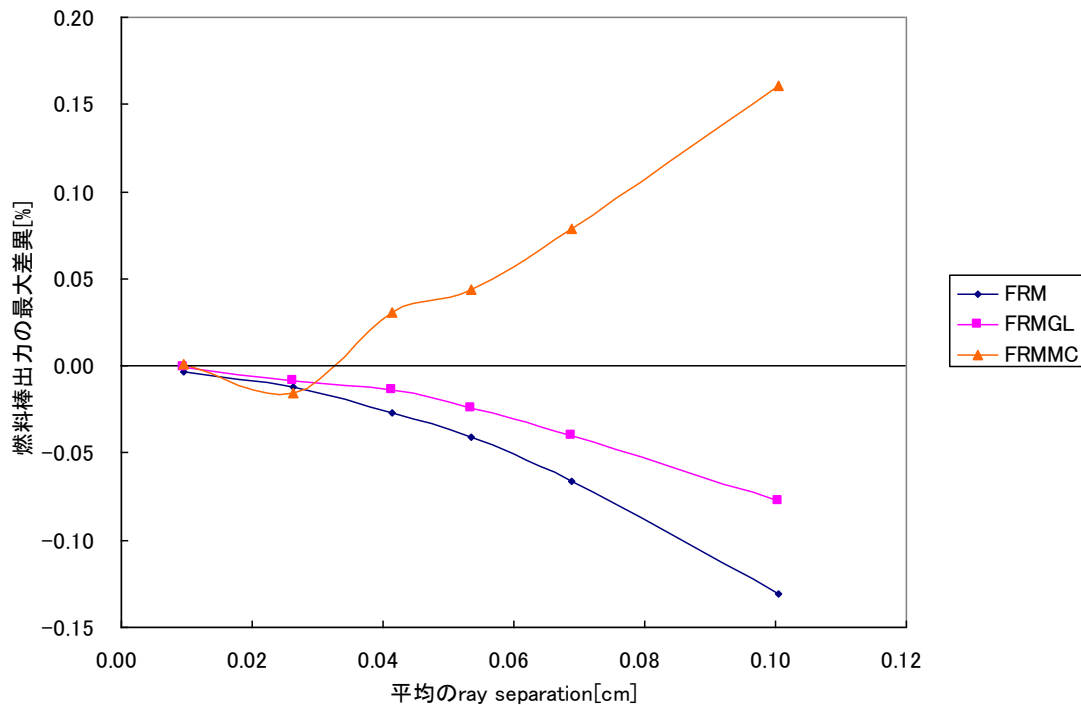


Fig. 5.15 C5G7 ベンチマーク問題での計算結果（燃料棒出力の最大差異）

5.2.3 考察

これらの計算についての考察を行う。

- 単ピンセル体系

平均の ray separation が大きいとき、FRMMC 法の精度は著しく悪い。FRM 法と FRMGL 法は似た傾向を示し、差異の大きさもほぼ同じであるが、若干 FRMGL 法での精度の方が良い。

- C5G7 ベンチマーク問題

単ピンセル体系のときと同様、平均の ray separation が大きいとき、FRMMC 法の精度は悪い。FRM 法と FRMGL 法は似た傾向を示しているが、精度は明らかに FRMGL 法の方が良い。

全体を通して、FRMMC 法の精度は良くないことが分かった。Fig. 5.4 で見られるように、Mobile chord 法では体系内に均一に CL が引かれ、精度良く計算できることが予想されていたが、まったく逆の結果になった。この理由は不明であるが、衝突確率法において mobile chord 法が有効な手法であったこと、MOC と衝突確率法は極角方向の積分以外の点では本質的に等価であることを考慮に入れると、本研究で用いたプログラムに問題があり、意図通りに計算できていない可能性も考えられる。この点については再度検討する必要がある。もし、今回の結果の範囲内で考えるなら、どの結果を見ても FRMGL 法が最も良く、現時点では最良のトレース方法は FRMGL 法（もしくは MRMGL 法）だ

と結論付けられる。

5.3 本章のまとめ

本章では、CL の位置離散化誤差の低減を目的とし、衝突確率法で用いられている **mobile chord** 法の MOC への適用を行った。**Mobile chord** 法を用いて **ray tracing** した場合、満遍なく CL が引かれるので、精度良く計算できることが期待された。しかし、検証計算の結果から、**mobile chord** 法の精度は悪く、**FRMGL** 法の精度が最も良いことが分かった。プログラムに問題がある可能性も否定できないが、今回の結果に基づいて考えると、現時点での最良のトレース方法は **FRMGL** (もしくは **MRMGL** 法) だと結論付けられる。

第6章 結論

6.1 結論

原子力発電所の運用において、燃料を効率的に使用し、燃料サイクルコストを低減することは、ウラン資源の有効利用や発電コストの低減にとって重要である。より効率的な燃料の使用を行うため、燃料の高燃焼度化や MOX 燃料の導入、炉心内の構造の複雑化などが考えられており、炉心内の非均質性は一層大きくなることが予想される。非均質性が大きい場合、予測精度を上げることは困難になる傾向があり、より高精度な炉心解析手法が求められる。そこで、本研究では、次世代の炉心計算手法として期待が高まっている MOC に着目した。しかし、現行の MOC を炉心計算へ適用することは計算時間の観点から現実的ではなく、計算の高速化が必要である。本研究では、MOC の計算の高速化を図るため、MOC の高精度化について検討を行った。本研究で得られた結論を以下に示す。

- ① C5G7 ベンチマーク問題において、極角方向、方位角方向、ray separation、中性子束領域に関するパラメータを変化させて計算を行うことで、各誤差の重要度を調べた。その結果、中性子束平坦化誤差と極角方向離散化誤差が支配的であることが分かった。
- ② MOC と衝突確率法の関係について考察し、従来法とは異なる最適化スキームを考案した。それに基づいて、新たな最適極角分点セット TY_OPT を作成した。
- ③ 検証計算を通じ、TY_OPT の妥当性を確認した。C5G7 ベンチマーク問題では、分点数 2 の TY_OPT は分点数 3~4 の GL と、分点数 3 の TY_OPT は分点数 10~12 の GL とそれぞれ同等の精度を持っていることが分かった。また、分点数 3 の TY_OPT を用いれば、極角方向の離散化誤差を無視できる程度にまで低減可能であることが分かった。
- ④ 方位角方向の中性子束分布が激しく振動する分布であることを確認した。方位角方向の数値積分について、従来法とは異なる分点セットとして、GL と GC に着目した。
- ⑤ 検証計算により、GL、GC を従来法の UDA と比較した結果、各分点セット間で顕著な違いは見られず、最適な分点セットがどれなのか明確な答えを出すことはできなかった。
- ⑥ 衝突確率法での ray tracing 方法である mobile chord 法に着目し、MOC への適用を検討した。
- ⑦ 検証計算において、mobile chord 法を FRM や FRMGL と比較した結果、mobile chord 法の適用による精度の向上は見られなかった。作成したプログラムに問題がある可能性もあるが、この検証においては FRMGL を用いた場合に最も高精度な結果を得ることができた。

6.2 今後の課題

今後の課題として以下の点が挙げられる。

① 中性子束領域内の中性子源分布の考慮

中性子束平坦化誤差を低減するための方策として、中性子束領域内の中性子源分布を考慮することが挙げられる。参考文献[17]では、中性子源を1次多項式で与えているが、より高次の多項式や他の関数形を用いるなどの検討を行うことで、さらなる改良が期待できる。

② Strip 内の角度中性子束分布の考慮

CL の離散化誤差を低減するための方策として、strip 内の角度中性子束分布の考慮が挙げられる。分布を考慮し、かつ、できる限り計算量を増加させないような方法が望まれる。

③ セル境界における角度中性子束の接続誤差の低減

セル境界での角度中性子の接続方法を MASAT2D では線形補間で行っているが、より高次の補間を行うことなどで、誤差の低減が期待できる。

④ Equivalence factor の検討

簡易な計算条件で、詳細な計算条件での結果を再現可能な equivalence factor の検討によって、計算の高速化が期待できる。この方法では、詳細な計算条件（例えば方位角 256UDA）でセルまたは集合体計算を行い、その結果を再現できるように、簡易な計算条件（例えば方位角 8UDA）で計算に用いる断面積を補正する。その補正された断面積を用いて、全炉心計算を簡易な計算条件で行えば、詳細な計算条件での結果に近い解を高速な計算によって得ることが期待できる。

参考文献

- [1] 牛尾直史、“軽水炉燃料集合体計算手法の高度化に関する研究”、博士論文、大阪大学 (2003).
- [2] A. Yamamoto, “Effect of Radial Peaking Factor Limitation on Discharge Burnup”, *J. Nucl. Sci. Technol.*, 39, 12, 1260 (2002).
- [3] A. Yamamoto, Y. Kitamura, T. Ushio, N. Sugimura, "Convergence Improvement of Coarse Mesh Rebalance Method for Neutron Transport Calculations," *J. Nucl. Sci. Technol.*, **41**, 781 (2004).
- [4] A. Yamamoto, "Generalized Coarse Mesh Rebalance Method for Acceleration of Neutron Transport Calculations," *Nucl. Sci. Eng.*, **151**, 274 (2005).
- [5] H. G. Joo, et al., “Dynamic Implementation of the Equivalence Theory in the Heterogeneous Whole Core Transport Calculation,” Proc. Int. Conf. on the New Frontiers of Nuclear Technology: Reactor Physics, Safety and High-Performance Computing, Seoul, Korea, Oct. 7-10, 13A-02, (2002).
- [6] S. Kosaka, T. Takeda, “Diffusion-like 3-D heterogeneous Core Calculation with 2-D Characteristics Transport Correction by Non-linear Iteration Technique,” Proc. Nuclear Mathematical and Computational Sciences: A Century in Review, A Century Anew, Gatlinburg, Tennessee, April 6-11, 2003, American Nuclear Society (2003).
- [7] G. J. Wu, R. Roy, “A New Characteristics Algorithm for 3-D Transport Calculations,” *Ann. Nucl. Energy*, **30**, 1 (2003)
- [8] J. B. Taylor, A. J. Baratta, D. Knott,” Towards a Three-dimensional Kinetics Methodology Based on the Method of Characteristics,” Proc. Advances in Nuclear Fuel Management III. Oct. 5-8, 2003, Hilton Head Island, SC (2003).
- [9] J. R. Askew, *A Characteristics Formulation to the Neutron Transport Equation in Complicated Geometries*, AEEW-M1108, UKAEA, Winfrith (1972).
- [10] A. Yamamoto, N. Sugimura, T. Ushio,” Calculation Models of AEGIS, an Advanced Neutronics Solver of Next-Generation,” *Trans. Am. Nucl. Soc.*, **92** (2005).
- [11] A. Leonard, C.T. McDaniel, “Optimal Polar Angles and Weights,” *Trans. Am. Nucl. Soc.*, **73** 171 (1995).
- [12] A. Yamamoto, M. Tabuchi, N. Sugimura, T. Ushio,” Non-Equidistant Ray Tracing for the Method of Characteristics,” *Proc. Mathematics and Computation, Supercomputing, Reactor Physics and Nuclear and Biological Applications (M&C2005)* (2005).
- [13] Benchmark on Deterministic Transport Calculations Without Spatial Homogenization, NEA/NSC/DOC (2003)16, ISBN92-64-02139-6, OECD, (2003).

- [14] E. A. Villarino, R. J. J. Stamm'ler, A. A. Ferri, J. J. Casal, "HELIOS: Angularly Dependent Collision Probabilities," *Nucl. Sci. Eng.*, **112**, 16 (1992).
- [15] 小林啓祐, "原子炉物理," コロナ社 (1996).
- [16] M. Tabuchi, A. Yamamoto, T. Endo, N. Sugimura, T. Ushio, M. Mori, "Yet Another Optimum Polar Angle Quadrature Set for the Method of Characteristics," *Trans. Am. Nucl. Soc.*, **93** (2005).
- [17] P. T. Petkov and T. Takeda, "Transport Calculations of MOX and UO₂ Pin Cells by the Method of Characteristics," *J. Nucl. Sci. Technol.*, **35**, 12 (1998).
- [18] N. Sugimura, T. Ushio, A. Yamamoto, "Verification Calculation of AEGIS, an Advanced Neutronics Solver of Next Generation," *Trans. Am. Nucl. Soc.*, **92** (2005).
- [19] D. Knott, *KRAM: A Lattice Physics Code for Modeling the BWR Fuel Designs*, Ph.D. Thesis, Pennsylvania State University, (1990).
- [20] 森正武, "計算機による数値積分," 日本コンピュータ協会 (1981).
- [21] <http://www7.ocn.ne.jp/~kawa1/numeric.pdf>

Appendix A 本研究で作成したプログラム MASAT2D の概要

MASAT2D は中性子輸送方程式を解き、実効増倍率、中性子束分布を計算するプログラムである。主な機能は以下に示す。ただし、以下で記載されている略称については、論文中の説明に基づいたものである。

- 計算手法：MOC、Monte-Carlo 法、拡散法が選択可能
(本論文では MOC のみを用いた)
- エネルギー群：多群
- 散乱：等方散乱のみ
- 固有値計算の加速法 (MOC、拡散法)：GCMR 法^{[3],[4]}
- Ray tracing (MOC のみ)
 - 極角分点セット：UDA、GL、L_OPT、TY_OPT が選択可能
任意の分点セットを入力することも可
 - 方位角分点セット：UDA、GL_quarter、GL_octant、GC_quarter、GC_octant が選択可能
任意の分点セットを入力することも可
 - トレース方法：equidistant 法、MRM、FRM、MRMGL、FRMGL が選択可能
(equidistant 法、MRM、FRM については mobile-chord 法が適用可)
- 取り扱える幾何形状

拡散法を用いる場合、取り扱える幾何形状は staggered でない格子状メッシュのみである。拡散法以外を用いる場合については以下の通りである。

セルが格子状に並んだ体系のみ取り扱える。ただし、セルが staggered に配置されたものを取り扱うことはできない。セルは正方格子である必要はなく、セル内に円と線を含むことができる。取り扱える幾何形状の例を示したものが Fig. A.1 である。

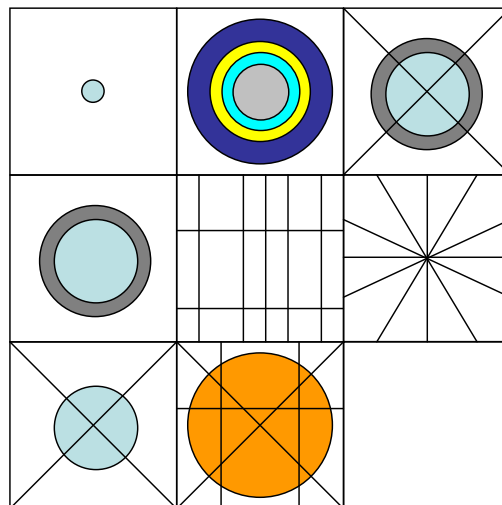


Fig. A.1 MASAT2D で取り扱える幾何形状の例(拡散法以外)

円の数に制限はないが、円の中心がセルの中心と一致するものしか扱うことができず、円の一部分がセルからはみ出るものも扱うことができない。線の数に制限はないが、 x 軸または y 軸に平行な線および Fig. A.2 にあるようなセルの中心を通りセルの $1/4$ 部分の面積を等分割する線のみが取り扱い可能である。

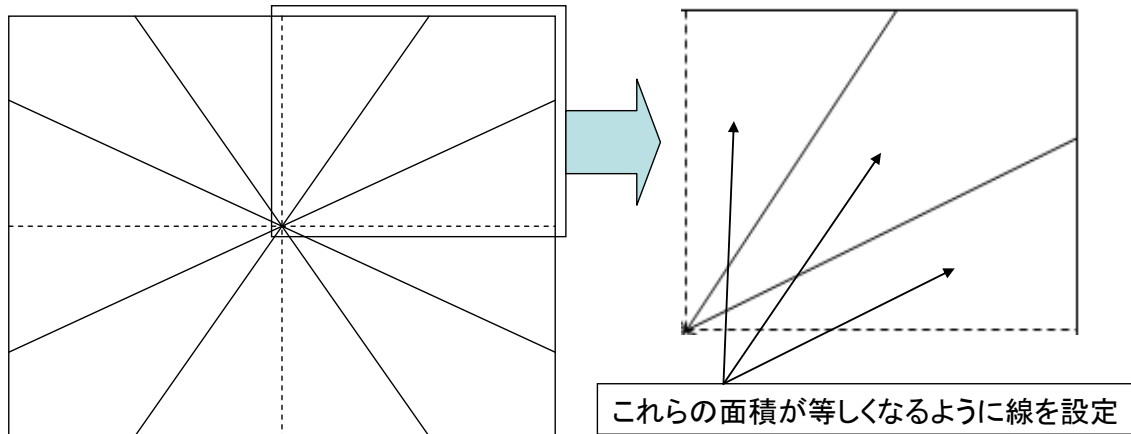


Fig. A.2 セルの中心を通りセルの $1/4$ 部分の面積を等分割する線の例

物質領域はセルを構成する長方形とセル内に含まれる円のいずれか 2 つで囲まれた部分もしくは単一の円で囲まれた部分でのみ定義することができる。したがって、セル内の線によって定義可能なのは中性子領域のみであり、物質領域の数はセル内に含まれる円の数に 1 を足した数に等しくなる。

- CL の表示

入力した計算体系において ray tracing を行った際の CL を CLIP (characteristics line imaging program) [18]によって表示することができる。CL の表示の際には、物質領域ごとや中性子束領域ごとに CL の色を変えることができ、この機能を用いることで幾何形状を正確に入力できているか確認することができる。CL の表示のための ray tracing は、固有値計算のための ray tracing とは別に行われるので、これらのパラメータは独立して決めることができる。Monte-Carlo 法や拡散法のように ray tracing を用いない手法についても CL の表示のための ray tracing によって、入力した計算体系の確認をすることができる。

Appendix B 本研究で検証計算に用いる計算体系

B.1 単ピンセル体系

濃縮度 4.1wt%の UO_2 燃料のピンセル体系である。計算体系は Fig. B.1 に示す通りである。核定数には $\text{kram}^{[19]}$ で作成した 16 群の断面積を用いる。境界条件はどの面についても完全反射境界条件を用いる。

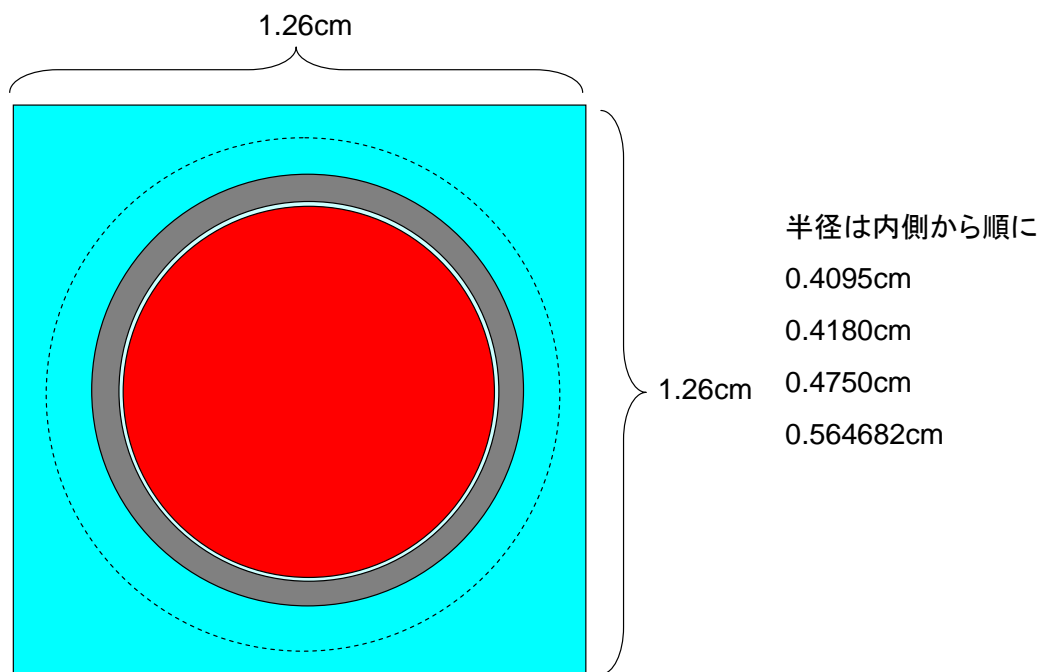


Fig. B.1 単ピンセルの計算体系

B.2 C5G7 ベンチマーク問題^[13]

C5G7 ベンチマーク問題の体系は、PWR の燃料集合体、MOX の燃料集合体、水反射体から成る体系である。この問題は Monte-Carlo 計算コード MCNP により精度の高い解が得られている。また、この問題は体系がある程度大きく、中性子スペクトルが急激に変化するなどの特徴があるので、非均質輸送計算の精度を評価する際によく用いられる。

計算に用いるセルの幾何形状を示したものが Fig. B.2 である。また、計算体系を簡略的に図示したものを Fig. B.3 に、各燃料集合体中の燃料棒配置を示したものを Fig. B.4 にそれぞれ示す。

セルのピッチは $1.26\text{cm} \times 1.26\text{cm}$ 、セル内部の燃料、被覆管、ギャップは均質化されており、その半径は 0.54cm である。核定数については Table B.1～Table B.7 に示す 7 群断面積がこのベンチマーク問題では用意されている。

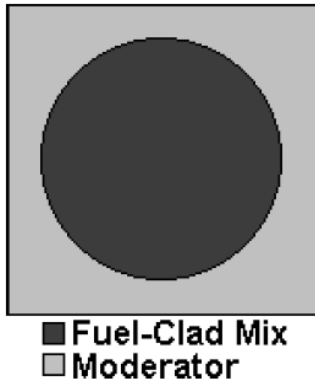


Fig. B.2 セルの幾何形状

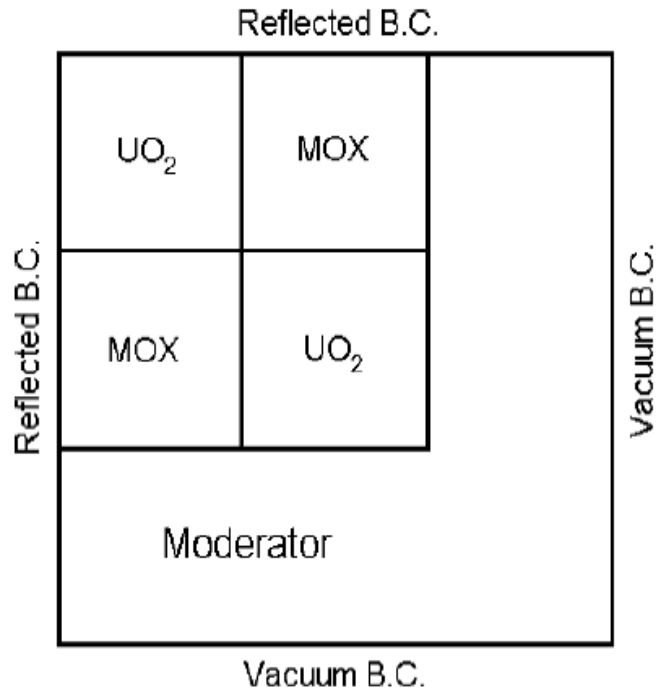


Fig. B.3 C5G7 ベンチマーク問題の計算体系

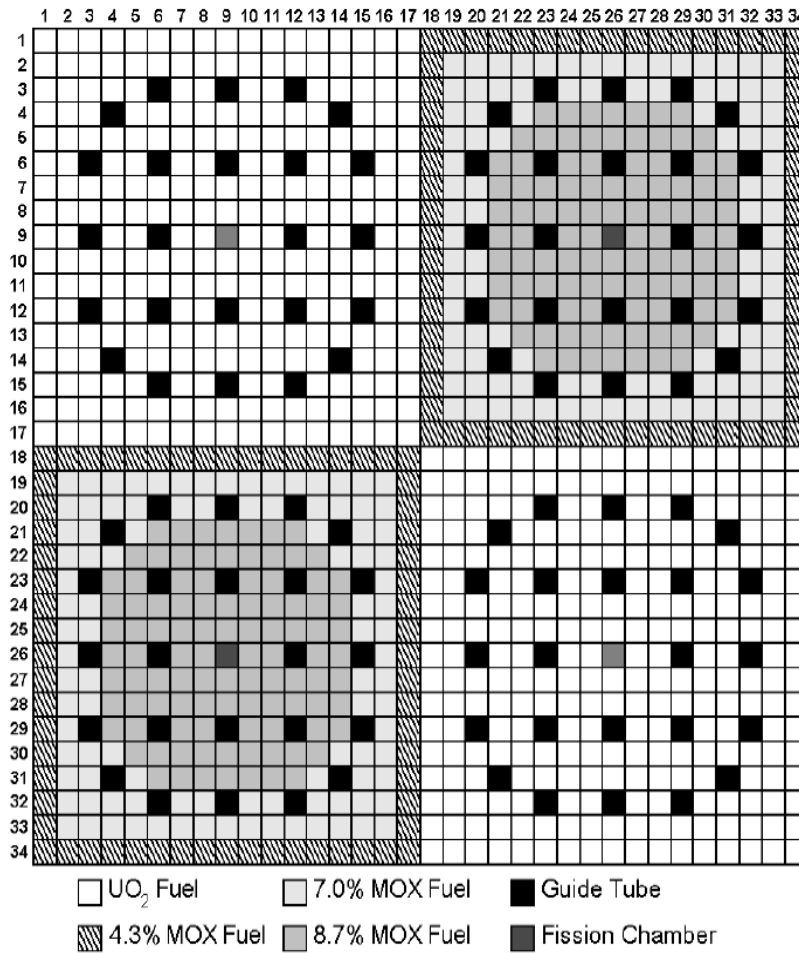


Fig. B.4 各集合体の燃料棒配置

Table B.1 C5G7 ベンチマーク問題で用いる 7 群断面積 (UO₂ 燃料)

	Σ_t	Σ_{tr}	Σ_a	Σ_c	Σ_f	ν	χ
group1	2.12450E-01	1.77949E-01	8.02480E-03	8.12740E-04	7.21206E-03	2.78145E+00	5.87910E-01
group2	3.55470E-01	3.29805E-01	3.71740E-03	2.89810E-03	8.19301E-04	2.47443E+00	4.11760E-01
group3	4.85540E-01	4.80388E-01	2.67690E-02	2.03158E-02	6.45320E-03	2.43383E+00	3.39060E-04
group4	5.59400E-01	5.54367E-01	9.62360E-02	7.76712E-02	1.85648E-02	2.43380E+00	1.17610E-07
group5	3.18030E-01	3.11801E-01	3.00200E-02	1.22116E-02	1.78084E-02	2.43380E+00	0.00000E+00
group6	4.01460E-01	3.95168E-01	1.11260E-01	2.82252E-02	8.30348E-02	2.43380E+00	0.00000E+00
group7	5.70610E-01	5.64406E-01	2.82780E-01	6.67760E-02	2.16004E-01	2.43380E+00	0.00000E+00
Σ_s							
	to group1	to group2	to group3	to group4	to group5	to group6	to group7
group1	1.27537E-01	4.23780E-02	9.43740E-06	5.51630E-09	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00
group2	0.00000E+00	3.24456E-01	1.63140E-03	3.14270E-09	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00
group3	0.00000E+00	0.00000E+00	4.50940E-01	2.67920E-03	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00
group4	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	4.52565E-01	5.56640E-03	0.00000E+00	0.00000E+00
group5	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	1.25250E-04	2.71401E-01	1.02550E-02	1.00210E-08
group6	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	1.29680E-03	2.65802E-01	1.68090E-02
group7	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	8.54580E-03	2.73080E-01

Table B.2 C5G7 ベンチマーク問題で用いる 7 群断面積 (4.3%MOX 燃料)

	Σ_t	Σ_{tr}	Σ_a	Σ_c	Σ_f	ν	χ
group1	2.11920E-01	1.78731E-01	8.43390E-03	8.06860E-04	7.62704E-03	2.85209E+00	5.87910E-01
group2	3.55810E-01	3.30849E-01	3.75770E-03	2.88080E-03	8.76898E-04	2.89099E+00	4.11760E-01
group3	4.88900E-01	4.83772E-01	2.79700E-02	2.22717E-02	5.69835E-03	2.85486E+00	3.39060E-04
group4	5.71940E-01	5.66922E-01	1.04210E-01	8.13228E-02	2.28872E-02	2.86073E+00	1.17610E-07
group5	4.32390E-01	4.26227E-01	1.39940E-01	1.29177E-01	1.07635E-02	2.85447E+00	0.00000E+00
group6	6.84950E-01	6.78997E-01	4.09180E-01	1.76423E-01	2.32757E-01	2.86415E+00	0.00000E+00
group7	6.88910E-01	6.82852E-01	4.09350E-01	1.60382E-01	2.48968E-01	2.86780E+00	0.00000E+00
Σ_s							
	to group1	to group2	to group3	to group4	to group5	to group6	to group7
group1	1.28876E-01	4.14130E-02	8.22900E-06	5.04050E-09	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00
group2	0.00000E+00	3.25452E-01	1.63950E-03	1.59820E-09	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00
group3	0.00000E+00	0.00000E+00	4.53188E-01	2.61420E-03	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00
group4	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	4.57173E-01	5.53940E-03	0.00000E+00	0.00000E+00
group5	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	1.60460E-04	2.76814E-01	9.31270E-03	9.16560E-09
group6	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	2.00510E-03	2.52962E-01	1.48500E-02
group7	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	8.49480E-03	2.65007E-01

Table B.3 C5G7 ベンチマーク問題で用いる 7 群断面積 (7.0%MOX 燃料)

	Σ_t	Σ_{tr}	Σ_a	Σ_c	Σ_f	ν	χ
group1	2.14540E-01	1.81323E-01	9.06570E-03	8.11240E-04	8.25446E-03	2.88498E+00	5.87910E-01
group2	3.59350E-01	3.34368E-01	4.29670E-03	2.97105E-03	1.32565E-03	2.91079E+00	4.11760E-01
group3	4.98910E-01	4.93785E-01	3.28810E-02	2.44594E-02	8.42156E-03	2.86574E+00	3.39060E-04
group4	5.96220E-01	5.91216E-01	1.22030E-01	8.91570E-02	3.28730E-02	2.87063E+00	1.17610E-07
group5	4.80350E-01	4.74198E-01	1.82980E-01	1.67016E-01	1.59636E-02	2.86714E+00	0.00000E+00
group6	8.39360E-01	8.33601E-01	5.68460E-01	2.44666E-01	3.23794E-01	2.86658E+00	0.00000E+00
group7	8.59480E-01	8.53603E-01	5.85210E-01	2.22407E-01	3.62803E-01	2.87539E+00	0.00000E+00
Σ_s							
	to group1	to group2	to group3	to group4	to group5	to group6	to group7
group1	1.30457E-01	4.17920E-02	8.51050E-06	5.13290E-09	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00
group2	0.00000E+00	3.28428E-01	1.64360E-03	2.20170E-09	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00
group3	0.00000E+00	0.00000E+00	4.58371E-01	2.53310E-03	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00
group4	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	4.63709E-01	5.47660E-03	0.00000E+00	0.00000E+00
group5	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	1.76190E-04	2.82313E-01	8.72890E-03	9.00160E-09
group6	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	2.27600E-03	2.49751E-01	1.31140E-02
group7	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	8.86450E-03	2.59529E-01

Table B.4 C5G7 ベンチマーク問題で用いる 7 群断面積 (8.7%MOX 燃料)

	Σ_t	Σ_{tr}	Σ_a	Σ_c	Σ_f	ν	χ
group1	2.16280E-01	1.83045E-01	9.48620E-03	8.14110E-04	8.67209E-03	2.90426E+00	5.87910E-01
group2	3.61700E-01	3.36705E-01	4.65560E-03	3.03134E-03	1.62426E-03	2.91795E+00	4.11760E-01
group3	5.05630E-01	5.00507E-01	3.62400E-02	2.59684E-02	1.02716E-02	2.86986E+00	3.39060E-04
group4	6.11170E-01	6.06174E-01	1.32720E-01	9.36753E-02	3.90447E-02	2.87491E+00	1.17610E-07
group5	5.08900E-01	5.02754E-01	2.08400E-01	1.89142E-01	1.92576E-02	2.87175E+00	0.00000E+00
group6	9.26670E-01	9.21028E-01	6.58700E-01	2.83812E-01	3.74888E-01	2.86752E+00	0.00000E+00
group7	9.60990E-01	9.55231E-01	6.90170E-01	2.59571E-01	4.30599E-01	2.87808E+00	0.00000E+00
Σ_s							
	to group1	to group2	to group3	to group4	to group5	to group6	to group7
group1	1.31504E-01	4.20460E-02	8.69720E-06	5.19380E-09	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00
group2	0.00000E+00	3.30403E-01	1.64630E-03	2.60060E-09	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00
group3	0.00000E+00	0.00000E+00	4.61792E-01	2.47490E-03	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00
group4	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	4.68021E-01	5.43300E-03	0.00000E+00	0.00000E+00
group5	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	1.85970E-04	2.85771E-01	8.39730E-03	8.92800E-09
group6	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	2.39160E-03	2.47614E-01	1.23220E-02
group7	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	8.96810E-03	2.56093E-01

Table B.5 C5G7 ベンチマーク問題で用いる 7 群断面積 (fission chamber)

	Σ_t	Σ_{tr}	Σ_a	Σ_c	Σ_f	ν	χ
group1	1.90730E-01	1.26032E-01	5.11320E-04	5.11315E-04	4.79002E-09	2.76283E+00	5.87910E-01
group2	4.56520E-01	2.93160E-01	7.58130E-05	7.58072E-05	5.82564E-09	2.46239E+00	4.11760E-01
group3	6.40700E-01	2.84250E-01	3.16430E-04	3.15966E-04	4.63719E-07	2.43380E+00	3.39060E-04
group4	6.49840E-01	2.81020E-01	1.16750E-03	1.16226E-03	5.24406E-06	2.43380E+00	1.17610E-07
group5	6.70630E-01	3.34460E-01	3.39770E-03	3.39755E-03	1.45390E-07	2.43380E+00	0.00000E+00
group6	8.75060E-01	5.65640E-01	9.18860E-03	9.18789E-03	7.14972E-07	2.43380E+00	0.00000E+00
group7	1.43450E+00	1.17214E+00	2.32440E-02	2.32419E-02	2.08041E-06	2.43380E+00	0.00000E+00
Σ_s							
	to group1	to group2	to group3	to group4	to group5	to group6	to group7
group1	6.61659E-02	5.90700E-02	2.83340E-04	1.46220E-06	2.06420E-08	0.00000E+00	0.00000E+00
group2	0.00000E+00	2.40377E-01	5.24350E-02	2.49900E-04	1.92390E-05	2.98750E-06	4.21400E-07
group3	0.00000E+00	0.00000E+00	1.83425E-01	9.22880E-02	6.93650E-03	1.07900E-03	2.05430E-04
group4	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	7.90769E-02	1.69990E-01	2.58600E-02	4.92560E-03
group5	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	3.73400E-05	9.97570E-02	2.06790E-01	2.44780E-02
group6	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	9.17420E-04	3.16774E-01	2.38760E-01
group7	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	4.97930E-02	1.09910E+00

Table B.6 C5G7 ベンチマーク問題で用いる 7 群断面積 (guide tube)

	Σ_t	Σ_{tr}	Σ_a	Σ_c	Σ_f	ν	χ
group1	1.90730E-01	1.26032E-01	5.11320E-04	5.11320E-04	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00
group2	4.56520E-01	2.93160E-01	7.58010E-05	7.58010E-05	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00
group3	6.40670E-01	2.84240E-01	3.15720E-04	3.15720E-04	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00
group4	6.49670E-01	2.80960E-01	1.15820E-03	1.15820E-03	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00
group5	6.70580E-01	3.34440E-01	3.39750E-03	3.39750E-03	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00
group6	8.75050E-01	5.65640E-01	9.18780E-03	9.18780E-03	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00
group7	1.43450E+00	1.17215E+00	2.32420E-02	2.32420E-02	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00
Σ_s							
	to group1	to group2	to group3	to group4	to group5	to group6	to group7
group1	6.61659E-02	5.90700E-02	2.83340E-04	1.46220E-06	2.06420E-08	0.00000E+00	0.00000E+00
group2	0.00000E+00	2.40377E-01	5.24350E-02	2.49900E-04	1.92390E-05	2.98750E-06	4.21400E-07
group3	0.00000E+00	0.00000E+00	1.83297E-01	9.23970E-02	6.94460E-03	1.08030E-03	2.05670E-04
group4	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	7.88511E-02	1.70140E-01	2.58810E-02	4.92970E-03
group5	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	3.73330E-05	9.97372E-02	2.06790E-01	2.44780E-02
group6	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	9.17260E-04	3.16765E-01	2.38770E-01
group7	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	4.97920E-02	1.09912E+00

Table B.7 C5G7 ベンチマーク問題で用いる 7 群断面積 (減速材)

	Σ_t	Σ_{tr}	Σ_a	Σ_c	Σ_f	ν	χ
group1	2.30070E-01	1.59206E-01	6.01050E-04	6.01050E-04	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00
group2	7.76460E-01	4.12970E-01	1.57930E-05	1.57930E-05	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00
group3	1.48420E+00	5.90310E-01	3.37160E-04	3.37160E-04	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00
group4	1.50520E+00	5.84350E-01	1.94060E-03	1.94060E-03	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00
group5	1.55920E+00	7.18000E-01	5.74160E-03	5.74160E-03	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00
group6	2.02540E+00	1.25445E+00	1.50010E-02	1.50010E-02	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00
group7	3.30570E+00	2.65038E+00	3.72390E-02	3.72390E-02	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00
Σ_s							
	to group1	to group2	to group3	to group4	to group5	to group6	to group7
group1	4.44777E-02	1.13400E-01	7.23470E-04	3.74990E-06	5.31840E-08	0.00000E+00	0.00000E+00
group2	0.00000E+00	2.82334E-01	1.29940E-01	6.23400E-04	4.80020E-05	7.44860E-06	1.04550E-06
group3	0.00000E+00	0.00000E+00	3.45256E-01	2.24570E-01	1.69990E-02	2.64430E-03	5.03440E-04
group4	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	9.10284E-02	4.15510E-01	6.37320E-02	1.21390E-02
group5	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	7.14370E-05	1.39138E-01	5.11820E-01	6.12290E-02
group6	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	2.21570E-03	6.99913E-01	5.37320E-01
group7	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	1.32440E-01	2.48070E+00

Appendix C Gauss 型積分公式の概要^{[20], [21]}

C.1 Lagrange 補間

任意の $n+1$ 個の相異なる点 $(x_0, y_0), (x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)$ が与えられたとき、次式を満たすような n 次多項式 $f(x)$ が一意に存在する。

$$f(x_i) = y_i \quad (i = 0, 1, \dots, n) \quad (\text{C.1})$$

ここで、 $f(x)$ を (C.2) 式のように表す。

$$f(x) = \sum_{i=0}^n L_i(x) f(x_i) \quad (\text{C.2})$$

(C.2) 式を Lagrange の補間公式と呼ぶ。(C.2) 式が常に成り立つためには、 $L_i(x)$ は以下 の関係を満たす必要がある。

$$L_i(x_j) = \begin{cases} 0 & (i \neq j) \\ 1 & (i = j) \end{cases} \quad (\text{C.3})$$

また、 $L_i(x)$ は n 次多項式であるので、 $i \neq j$ のとき $L_i(x_j) = 0$ を満たすためには、 $L_i(x)$ は $(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\cdots(x-x_n)$ の定数倍である必要がある。さらに、 $i = j$ のとき $L_i(x_j) = 1$ であることを考慮に入れると、 $L_i(x)$ は次式で表すことができる。

$$L_i(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\cdots(x-x_n)}{(x_i-x_0)(x_i-x_1)\cdots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\cdots(x_i-x_n)} = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^n \frac{x-x_j}{x_i-x_j} \quad (\text{C.4})$$

C2 補間型積分公式

次式のように、 $[a, b]$ の範囲内に存在する n 個の相異なる点 x_1, x_2, \dots, x_n を用いて近似的に積分を行うことを考える。

$$\int_a^b k(x) f(x) dx \approx \sum_{i=1}^n \omega_i f(x_i) \quad (\text{C.5})$$

(C.5) 式において、分点 x_1, x_2, \dots, x_n に基づいて Lagrange 補間を行い、求めた補間多項式を積分する方法を補間型積分則と呼び、(C.5) 式を補間型積分公式と呼ぶ。区間 $[a, b]$ を長さの等しい $n-1$ 個の小区間に分割し、 $k(x) = 1$ とする場合をニュートン・コーツ則と呼び、台形則やシンプソン則などはこれに属する。台形公式では 1 次多項式を、シンプソン則では 3 次多項式を正確に積分することができる。また、(C.5) 式において、 $k(x) = 1$ とし Chebyshev 多項式の根を分点として選んだ際に導かれる公式をフェエールの公式と呼び、第 1 種 Chebyshev 多項式の極値点を分点にとるクレンショウ・カーチスの公式などはこれに属する。補間型積分則を用いた場合、 n 個の分点で $n-1$ 次以下の多項式を正確に計算することが可能である。

C3 直交多項式

$\omega(x) \geq 0$ を $[a, b]$ 上で定義された重みの関数とするとき、次式の間係を満たす $G_n(x)$ を直交多項式と呼ぶ。

$$\int_a^b \omega(x) G_m(x) G_n(x) dx = \begin{cases} 0 & (m \neq n) \\ \gamma_n & (m = n) \end{cases} \quad (C.6)$$

ただし、 γ_n はゼロでない適当な定数である。直交多項式の性質は以下の通りである。

- ① $G_n(x)$ は n 次の多項式である。
- ② 直交条件(C.6)式が成り立つ。
- ③ (C.7)式のように x^r 乗は $i \leq r$ の $G_i(x)$ の線形結合で表される。

$$x^r = \sum_{i=0}^r a_i G_i(x) \quad (C.7)$$

- ④ 性質③より、 $G_n(x)$ は $n-1$ 次以下のすべての多項式と直交する。
- ⑤ $G_n(x)$ は区間 $[a, b]$ において相異なる実根を持つ。
- ⑥ (C.8)式で表される 3 項漸化式が成立する。

$$G_{n+1}(x) = (s_n x + t_n) G_n(x) + u_n G_{n-1}(x) \quad (C.8)$$

以下では、Legendre 多項式と第 1 種 Chebyshev 多項式の 2 種類の直交多項式に注目する。Table C.1 にそれぞれの多項式の基本的性質、Fig. C1、Fig. C.2 にそれぞれをプロットしたものを示す。

Table C.1 Legendre 多項式と第 1 種 Chebyshev 多項式の基本的性質

	Legendre 多項式	第1種Chebyshev多項式
記号	$P_n(x)$	$T_n(x)$
区間	$[-1, 1]$	$[-1, 1]$
重み関数	$\omega(x) = 1$	$\omega(x) = (1-x^2)^{-1/2}$
標準化	$P_n(1) = 1$	$T_n(1) = 1$
ノルム	$\int_{-1}^1 \{P_n(x)\}^2 dx = \frac{2}{2n+1}$	$\int_{-1}^1 (1-x^2)^{-1/2} \{T_n(x)\}^2 dx = \begin{cases} \pi/2 & (n \neq 0) \\ \pi & (n = 0) \end{cases}$
具体的表現	$P_n(x) = \frac{1}{2^n} \sum_{m=0}^{[n/2]} (-1)^m \frac{(2n-2m)!}{m!(n-m)!(n-2m)!} x^{n-2m}$	$T_n(x) = \frac{n}{2} \sum_{m=0}^{[n/2]} (-1)^m \frac{(n-m-1)!}{m!(n-2m)!} (2x)^{n-2m} = \cos(n \arccos x)$
漸化式	$P_0(x) = 1, P_1(x) = x$ $(n+1)P_{n+1}(x) = (2n+1)xP_n(x) - nP_{n-1}(x)$	$T_0(x) = 1, T_1(x) = x$ $T_{n+1}(x) = 2xT_n(x) - T_{n-1}(x)$
不定積分	$\int P_n(x) dx = \frac{1}{2n+1} \{P_{n+1}(x) - P_{n-1}(x)\}$	$\int T_n(x) dx = \begin{cases} T_1(x) & (n=0) \\ \frac{1}{4} T_2(x) & (n=1) \\ \frac{1}{2} \left\{ \frac{T_{n+1}(x)}{n+1} - \frac{T_{n-1}(x)}{n-1} \right\} & (n \geq 2) \end{cases}$
例	$P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1)$ $P_3(x) = \frac{1}{2}(5x^3 - 3x)$ $P_4(x) = \frac{1}{8}(35x^4 - 30x^2 + 3)$ $P_5(x) = \frac{1}{8}(63x^5 - 70x^3 + 15x)$ $P_6(x) = \frac{1}{16}(231x^6 - 315x^4 + 105x^2 - 5)$	$T_2(x) = 2x^2 - 1$ $T_3(x) = 4x^3 - 3x$ $T_4(x) = 8x^4 - 8x^2 + 1$ $T_5(x) = 16x^5 - 20x^3 + 5x$ $T_6(x) = 32x^6 - 48x^4 + 18x^2 - 1$

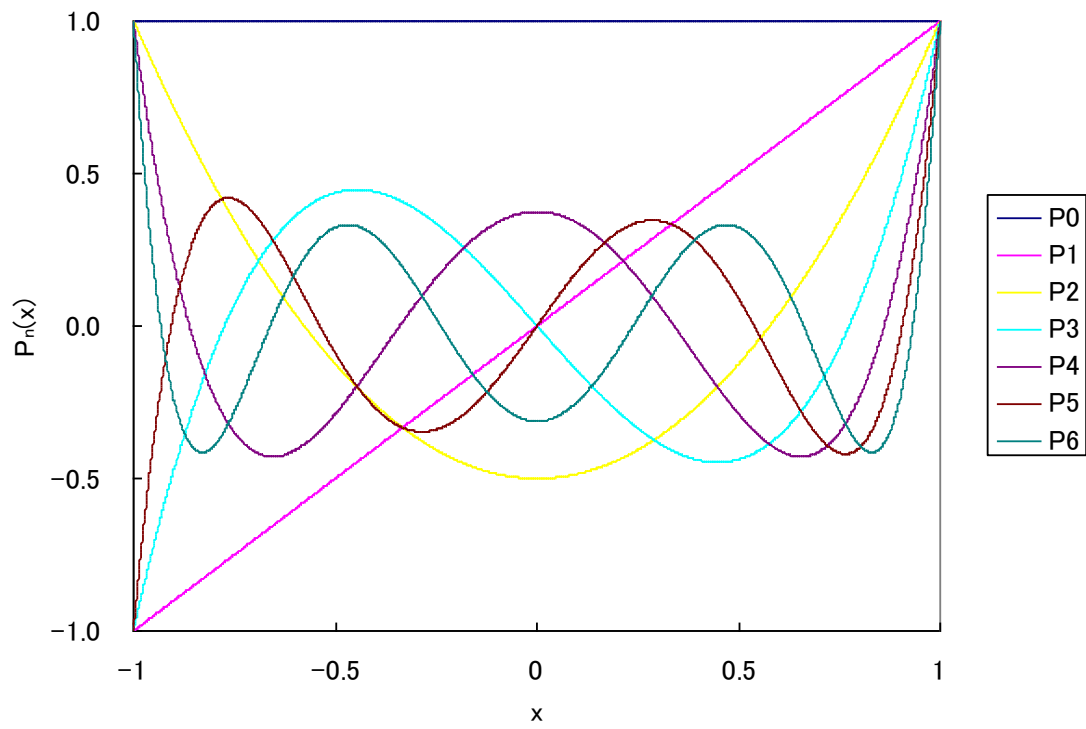


Fig. C.1 Legendre 多項式の分布

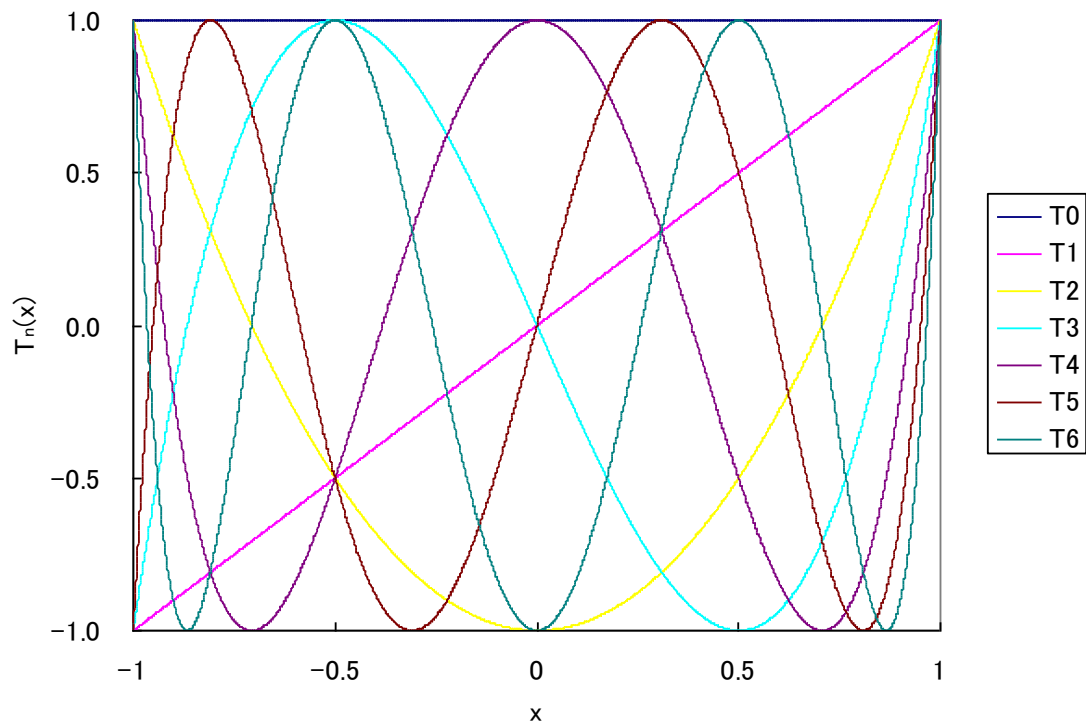


Fig. C.2 第1種 Chebyshev 多項式の分布

C4 Gauss 型積分公式

(C.5)式において、ある直交多項式の根を分点にとり、その直交多項式の重み関数を(C.5)式中の $k(x)$ として用いると、(C.9)式のような近似積分公式が導かれる。ただし、(C.9)式右辺の ω_i はLagrange補間から求める係数である。

$$\int_a^b \omega(x)f(x)dx \approx \sum_{i=1}^n \omega_i f(x_i) \quad (\text{C.9})$$

(C.9)式を Gauss 型積分公式と呼ぶ。 $f(x)$ が $2n-1$ 次の多項式であれば、(C.9)式の両辺は完全に等しくできる。以下でこれを証明する。

$f(x)$ は $2n-1$ 次の多項式であるとし、 $f(x)$ をある n 次直交多項式 $G_n(x)$ で割ったときの商を $Q(x)$ 、余りを $R(x)$ とすると、(C.10)が成り立つ。

$$f(x) = G_n(x)Q(x) + R(x) \quad (\text{C.10})$$

(C.10)式に $G_n(x)$ の重み関数を掛け、区間 $[a, b]$ で積分すると、(C.11)式が導かれる。

$$\int_a^b \omega(x)f(x)dx = \int_a^b \omega(x)G_n(x)Q(x)dx + \int_a^b \omega(x)R(x)dx \quad (\text{C.11})$$

$Q(x)$ は $n-1$ 次多項式なので、(C.11)式右辺第1項はゼロになり、(C.11)式は(C.12)式に変形できる。

$$\int_a^b \omega(x)f(x)dx = \int_a^b \omega(x)R(x)dx \quad (\text{C.12})$$

また、分点として $G_n(x)$ の根を用いると、(C.10)式より(C.13)式が導かれる。

$$f(x_i) = R(x_i) \quad (\text{C.13})$$

ここで、 $R(x)$ についてLagrange補間を考えると、 $R(x)$ は $n-1$ 次多項式なので次式のようにな個の分点で正確に表現することができる。

$$R(x) = \sum_{i=1}^n \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \frac{x - x_j}{x_i - x_j} R(x_i) \quad (\text{C.14})$$

(C.12)式~(C.14)式より、(C.15)式を導くことができる。

$$\int_a^b \omega(x)f(x)dx = \int_a^b \omega(x) \sum_{i=1}^n \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \frac{x - x_j}{x_i - x_j} f(x_i) dx = \sum_{i=1}^n \omega_i f(x_i) \quad (\text{C.15})$$

ただし、(C.15)式中の ω_i は(C.16)式で求まる。

$$\omega_i = \int_a^b \omega(x) \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \frac{x - x_j}{x_i - x_j} dx \quad (\text{C.16})$$

よって、 $f(x)$ が $2n-1$ 次の多項式のとき、分点に直交多項式 $G_n(x)$ の根を用い、(C.16)式の重みを使えば、(C.9)式の両辺は完全に等しくなることが示せた。

以下で、重みの計算についてもう少し考える。(C.16)式を用いて重みを求める場合、掛け合わせや積分の計算を行う必要があり、特に分点数が多いときには計算が煩雑になる。そこで、容易に重みを計算できるように(C.16)式を変形する。

(C.17)式で定義された $\varphi_n(x)$ を用いると、(C.18)式が成り立つ。

$$\varphi_n(x) \equiv \prod_{j=1}^n (x - x_j) \quad (\text{C.17})$$

$$\varphi_n'(x) = \sum_{i=1}^n \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n (x - x_j) \quad (\text{C.18})$$

(C.18)式に $x = x_i$ を代入すると、(C.19)式が導かれる。

$$\varphi_n'(x_i) = \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n (x_i - x_j) \quad (\text{C.19})$$

(C.17)式、(C.19)式を(C.16)式に代入すると(C.20)式が得られる。

$$\omega_i = \int_a^b \omega(x) \frac{\varphi_n(x)}{\varphi_n'(x_i)(x - x_i)} dx \quad (\text{C.20})$$

ここで、 $\varphi_n(x)$ について考えると、直交多項式 $G_n(x)$ のすべての根 x_i ($i=1, 2, \dots, n$) について $\varphi_n(x_i) = 0$ が成り立ち、 $\varphi_n(x)$ の次数は $G_n(x)$ と同様に n であるので、(C.21)式が成り立つ。ただし、(C.21)式中の A_n は $G_n(x)$ の最高次の係数である。

$$G_n(x) = A_n \varphi_n(x) \quad (\text{C.21})$$

また、(C.21)式の両辺を微分することで、(C.22)式が得られる。

$$G_n'(x_i) = A_n \varphi_n'(x_i) \quad (\text{C.22})$$

(C.21)式、(C.22)式を(C.20)式に代入すると、(C.23)式が得られる。

$$\omega_i = \frac{1}{G_n'(x_i)} \int_a^b \frac{\omega(x) G_n(x)}{x - x_i} dx \quad (\text{C.23})$$

(C.23)式は(C.16)式と比較すれば簡潔な式であるが、さらなる簡潔化を行うため変形を進める。

(C.8)式より、 $G_n(x)$ の最高次の係数 A_n について(C.24)式のような漸化式が成り立つ。

$$A_{n+1} = s_n A_n \quad (\text{C.24})$$

(C.8)式の両辺に $\omega(x) G_{n-1}(x)$ を乗じて区間 $[a, b]$ で積分を行うと、(C.25)式が導かれる。ただし、(C.25)式中の γ は(C.6)式中の γ である。

$$0 = s_n \int_a^b \omega(x) G_n(x) G_{n-1}(x) dx + u_n \gamma_{n-1} \quad (\text{C.25})$$

(C.24)式を用いて(C.25)式を変形し、 u_n について解けば(C.26)式が得られる。

$$u_n = -\frac{s_n \gamma_n}{s_{n-1} \gamma_{n-1}} \quad (\text{C.26})$$

また、(C.8)式に(C.26)式を代入し、両辺に $G_n(y)$ を乗じ、 $s_n \gamma_n$ で割ると(C.27)式が導かれる。

$$\frac{G_{n+1}(x)G_n(y)}{s_n \gamma_n} = \frac{(s_n x + t_n)G_n(x)G_n(y)}{s_n \gamma_n} - \frac{G_{n-1}(x)G_n(y)}{s_{n-1} \gamma_{n-1}} \quad (\text{C.27})$$

(C.27)式について x と y を交換した式をつくり、それを(C.27)式から引くと、(C.28)式が得られる。

$$\begin{aligned} & \frac{G_{n+1}(x)G_n(y) - G_n(x)G_{n+1}(y)}{s_n \gamma_n} \\ & - \frac{G_n(x)G_{n-1}(y) - G_{n-1}(x)G_n(y)}{s_{n-1} \gamma_{n-1}} = (x-y) \frac{G_n(x)G_n(y)}{\gamma_n} \end{aligned} \quad (\text{C.28})$$

(C.28)式左辺第1項を α_n とおくと、左辺第2項は α_{n-1} とおけるので、(C.28)式から(C.29)式が導ける。

$$\frac{G_{n+1}(x)G_n(y) - G_n(x)G_{n+1}(y)}{s_n \gamma_n} = (x-y) \sum_{k=0}^{n-1} \frac{G_k(x)G_k(y)}{\gamma_k} \quad (\text{C.29})$$

(C.29)式はクリストッフエル・ダルブー (Christoffel-Darboux) の恒等式として知られている。(C.29)式において $y = x_i$ とおき、両辺に $\omega(x)G_0(x)/(x-x_i)$ を乗じて区間 $[a, b]$ で積分を行うと、(C.30)式が得られる。

$$-\frac{G_{n+1}(x_i)}{s_n \gamma_n} \int_a^b \frac{\omega(x)G_n(x)G_0(x)}{x-x_i} dx = \sum_{k=0}^{n-1} \frac{G_k(x_i)}{\gamma_k} \int_a^b \omega(x)G_k(x)G_0(x) dx = G_0(x_i) \quad (\text{C.30})$$

(C.30)式において $G_0(x)$ が定数であることを考慮すると、(C.31)式が成り立つ。

$$\int_a^b \frac{\omega(x)G_n(x)}{x-x_i} dx = -\frac{s_n \gamma_n}{G_{n+1}(x_i)} \quad (\text{C.31})$$

(C.31)式を(C.23)式に代入することで、(C.32)式が得られる。

$$\omega_i = -\frac{s_n \gamma_n}{G_{n+1}(x_i)G_n'(x_i)} \quad (\text{C.32})$$

さらに、(C.8)式、(C.26)式より(C.33)式が成り立つので、これを(C.32)式に代入することで(C.34)式が得られる。

$$G_{n+1}(x_i) = -\frac{s_n \gamma_n}{s_{n-1} \gamma_{n-1}} G_{n-1}(x_i) \quad (\text{C.33})$$

$$\omega_i = \frac{s_{n-1}\gamma_{n-1}}{G_{n-1}(x_i)G_n'(x_i)} \quad (\text{C.34})$$

(C.34)式中には、掛け合わせや積分の計算はなく、 s_{n-1} 、 γ_{n-1} 、 $G_{n-1}(x)$ 、 $G_n'(x)$ のいずれも容易に求まる量であるので、(C.34)式を用いれば、重みを容易に計算することができる。

それでは、Gauss 型積分についてまとめる。 $f(x)$ が $2n-1$ 次の多項式るとき、分点 x_i に直交多項式 $G_n(x)$ の根を用い、重み ω_i に(C.34)式を用いることで、(C.35)式が正確に成り立つ。ただし、 $\omega(x)$ は $[a, b]$ 上で定義される $G_n(x)$ の重み関数である。

$$\int_a^b \omega(x)f(x)dx = \sum_{i=1}^n \omega_i f(x_i) \quad (\text{C.35})$$

以下では、直交多項式として Legendre 多項式を用いる場合と第 1 種 Chebyshev 多項式を用いる場合の 2 のケースについて説明を行う。

C5 Legendre 多項式を用いる場合

まず、Legendre 多項式の根について考える。Legendre 多項式の根を x_i とすると、(C.36)式が成り立つことが知られている。

$$x_i = \left(1 - \frac{1}{8n^2} + \frac{1}{8n^3}\right) \cos\left(\frac{4i-1}{4n+2}\pi\right) + O(n^{-4}) \quad (i=1, 2, \dots, n) \quad (\text{C.36})$$

したがって、(C.36)式右辺第 1 項の値を初期値としてニュートン法を用いれば、Legendre 多項式の根を容易に求めることができる。

次に、重み ω_i について考える。上述した通り、重みは(C.34)式で求めることができる。Legendre 多項式での s_n 、 γ_n はそれぞれ以下の通りである。

$$s_n = \frac{2n+1}{n+1} \quad (\text{C.36})$$

$$\gamma_n = \frac{2}{2n+1} \quad (\text{C.37})$$

また、Legendre 多項式に関するロドリゲスの公式(C.38)式を用いると、(C.39)式が導かれる。

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} (x^2 - 1)^n \quad (\text{C.38})$$

$$(x^2 - 1)P_n'(x) = n(xP_n(x) - P_{n-1}(x)) \quad (\text{C.39})$$

(C.39)式において $x = x_i$ を代入すると(C.40)式が得られる。

$$P_n'(x_i) = \frac{nP_{n-1}(x_i)}{1 - x_i^2} \quad (\text{C.40})$$

(C.36)式、(C.37)式、(C.40)式を(C.34)式に代入すると、(C.41)式が得られる。

$$\omega_i = \frac{2(1-x_i^2)}{\{nP_{n-1}(x_i)\}^2} \quad (\text{C.41})$$

よって、(C.41)式により Legendre 多項式を用いる場合の重みが計算できる。

このようにして、Legendre 多項式の根を分点にとり、(C.41)式の重みを用いる分点セットを Gauss-Legendre 分点セットと呼ぶ。Gauss-Legendre 分点セットを用いれば、 $f(x)$ が $2n-1$ 次の多項式するとき、(C.42)式が成り立つ。

$$\int_{-1}^1 f(x)dx = \sum_{i=1}^n \omega_i f(x_i) \quad (\text{C.42})$$

ただし、積分区間が $[-1,1]$ でない場合は、(C.43)式のように変数変換を行い、(C.44)式を用いればよい。

$$t_i = \frac{b-a}{2}x_i + \frac{a+b}{2} \quad (\text{C.43})$$

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=1}^n \omega_i f(t_i) \quad (\text{C.44})$$

Table C.2 に分点数 1~26、Table C.3 に分点数 27~36 の Gauss-Legendre 分点セットの値をそれぞれ示す。

Table C.2 Gauss-Legendre 分点セットの値 (1~26 分点)

n	x_i	ω_i	n	x_i	ω_i	n	x_i	ω_i
1	0.0000000E+00	2.0000000E+00	16	$\pm 9.50125098E-02$	1.89450610E-01	22	$\pm 6.97392733E-02$	1.39251873E-01
2	$\pm 5.77350269E-01$	1.0000000E+00		$\pm 2.81603551E-01$	1.82603415E-01		$\pm 2.07860427E-01$	1.36541498E-01
3	0.0000000E+00	8.8888889E-01	$\pm 4.58016778E-01$	1.69156519E-01	$\pm 3.41935821E-01$	1.31173505E-01		
	$\pm 7.74596669E-01$	5.5555556E-01	$\pm 6.17876244E-01$	1.49595989E-01	$\pm 4.69355838E-01$	1.23252377E-01		
4	$\pm 3.39981044E-01$	6.52145155E-01	$\pm 7.55404408E-01$	1.24628971E-01	$\pm 5.87640404E-01$	1.12932296E-01		
	$\pm 8.61136312E-01$	3.47854845E-01	$\pm 8.65631202E-01$	9.51585117E-02	$\pm 6.94487263E-01$	1.00414144E-01		
5	0.0000000E+00	5.6888889E-01	$\pm 9.44575023E-01$	6.22535239E-02	$\pm 7.87816806E-01$	8.59416062E-02		
	$\pm 5.38469310E-01$	4.78628670E-01	$\pm 9.89400935E-01$	2.71524594E-02	$\pm 8.65812578E-01$	6.97964684E-02		
6	$\pm 9.06179846E-01$	2.36926885E-01	0.0000000E+00	1.79446470E-01	$\pm 9.26956772E-01$	5.2293352E-02		
	$\pm 2.38619186E-01$	4.67913935E-01	$\pm 1.78484181E-01$	1.76562705E-01	$\pm 9.70060498E-01$	3.37749016E-02		
7	$\pm 6.61209386E-01$	3.60761573E-01	$\pm 3.51231763E-01$	1.68004102E-01	$\pm 9.94294585E-01$	1.46279953E-02		
	$\pm 9.32469514E-01$	1.71324492E-01	$\pm 5.12690537E-01$	1.54045761E-01	0.0000000E+00	1.33654572E-01		
8	0.0000000E+00	4.17959184E-01	$\pm 6.57671159E-01$	1.35136368E-01	$\pm 1.33256824E-01$	1.32462039E-01		
	$\pm 4.05845151E-01$	3.81830051E-01	$\pm 7.81514004E-01$	1.11883847E-01	$\pm 2.64135681E-01$	1.28905722E-01		
9	$\pm 7.41531186E-01$	2.79705391E-01	$\pm 8.80239154E-01$	8.50361483E-02	$\pm 3.90301038E-01$	1.23049084E-01		
	$\pm 9.49107912E-01$	1.29484966E-01	$\pm 9.50675522E-01$	5.54595294E-02	$\pm 5.09501478E-01$	1.14996640E-01		
10	$\pm 1.83434642E-01$	3.62683783E-01	$\pm 9.90575475E-01$	2.41483029E-02	$\pm 6.19609876E-01$	1.04892091E-01		
	$\pm 5.25532410E-01$	3.13706646E-01	$\pm 8.47750130E-02$	1.69142383E-01	$\pm 7.18661363E-01$	9.29157661E-02		
11	$\pm 7.96666477E-01$	2.22381034E-01	$\pm 2.51886226E-01$	1.64276484E-01	$\pm 8.04888402E-01$	7.92814118E-02		
	$\pm 9.60289856E-01$	1.01228536E-01	$\pm 4.11751161E-01$	1.54684675E-01	$\pm 8.76752358E-01$	6.42324214E-02		
12	0.0000000E+00	3.30239355E-01	$\pm 5.59770831E-01$	1.40642915E-01	$\pm 9.32971087E-01$	4.80376717E-02		
	$\pm 3.24253423E-01$	3.12347077E-01	$\pm 6.91687043E-01$	1.2255207E-01	$\pm 9.72542471E-01$	3.09880059E-02		
13	$\pm 6.13371433E-01$	2.60610696E-01	$\pm 8.03704959E-01$	1.00942044E-01	$\pm 9.94769335E-01$	1.34118595E-02		
	$\pm 8.36031107E-01$	1.80648161E-01	$\pm 8.92602466E-01$	7.64257303E-02	$\pm 6.40568929E-02$	1.27938195E-01		
14	$\pm 9.68160240E-01$	8.12743884E-02	$\pm 9.55823950E-01$	4.97145489E-02	$\pm 1.91118867E-01$	1.25837456E-01		
	$\pm 1.48874339E-01$	2.95524225E-01	$\pm 9.91565168E-01$	2.16160135E-02	$\pm 3.15042680E-01$	1.21670473E-01		
15	$\pm 4.33395394E-01$	2.69266719E-01	0.0000000E+00	1.61054450E-01	$\pm 4.33793508E-01$	1.15505668E-01		
	$\pm 6.79409568E-01$	2.19086363E-01	$\pm 1.60358646E-01$	1.58968843E-01	$\pm 5.45421471E-01$	1.07444270E-01		
16	$\pm 8.65063367E-01$	1.49451349E-01	$\pm 3.16564100E-01$	1.52766042E-01	$\pm 6.48093652E-01$	9.76186521E-02		
	$\pm 9.73906529E-01$	6.66713443E-02	$\pm 4.64570741E-01$	1.42606702E-01	$\pm 7.40124192E-01$	8.61901615E-02		
17	0.0000000E+00	2.72925087E-01	$\pm 6.00545305E-01$	1.28753963E-01	$\pm 8.20001986E-01$	7.33464814E-02		
	$\pm 2.69543156E-01$	2.62804545E-01	$\pm 7.20966177E-01$	1.11566646E-01	$\pm 8.86415527E-01$	5.92985849E-02		
18	$\pm 5.19096129E-01$	2.33193765E-01	$\pm 8.22714657E-01$	9.14900216E-02	$\pm 9.38274552E-01$	4.42774388E-02		
	$\pm 7.30152006E-01$	1.86290211E-01	$\pm 9.03155904E-01$	6.90445427E-02	$\pm 9.74728556E-01$	2.85313886E-02		
19	$\pm 8.87062600E-01$	1.25580369E-01	$\pm 9.60208152E-01$	4.48142268E-02	$\pm 9.95187220E-01$	1.23412298E-02		
	$\pm 9.78228658E-01$	5.56685671E-02	$\pm 9.92406844E-01$	1.94617882E-02	0.0000000E+00	1.23176054E-01		
20	$\pm 1.25233409E-01$	2.49147046E-01	$\pm 7.65265211E-02$	1.52753387E-01	$\pm 1.22864693E-01$	1.22242443E-01		
	$\pm 3.67831499E-01$	2.33492537E-01	$\pm 2.27785851E-01$	1.49172986E-01	$\pm 2.43866884E-01$	1.19455764E-01		
21	$\pm 5.87317954E-01$	2.03167427E-01	$\pm 3.73706089E-01$	1.42096109E-01	$\pm 3.61172306E-01$	1.14858259E-01		
	$\pm 7.69902674E-01$	1.60078329E-01	$\pm 5.10867002E-01$	1.31688638E-01	$\pm 4.73002731E-01$	1.08519624E-01		
22	$\pm 9.04117256E-01$	1.06939326E-01	$\pm 6.36053681E-01$	1.18194532E-01	$\pm 5.77662930E-01$	1.00535949E-01		
	$\pm 9.81560634E-01$	4.71753364E-02	$\pm 7.46331906E-01$	1.01930120E-01	$\pm 6.73566368E-01$	9.10282620E-02		
23	0.0000000E+00	2.32551553E-01	$\pm 8.39116972E-01$	8.32767416E-02	$\pm 7.59259263E-01$	8.01407003E-02		
	$\pm 2.30458316E-01$	2.26283180E-01	$\pm 9.12234428E-01$	6.26720483E-02	$\pm 8.33442629E-01$	6.80383338E-02		
24	$\pm 4.48492751E-01$	2.07816048E-01	$\pm 9.63971927E-01$	4.06014298E-02	$\pm 8.94991998E-01$	5.49046960E-02		
	$\pm 6.42349339E-01$	1.78145981E-01	$\pm 9.93128599E-01$	1.76140071E-02	$\pm 9.42974571E-01$	4.09391567E-02		
25	$\pm 8.01578091E-01$	1.38873510E-01	0.0000000E+00	1.46081134E-01	$\pm 9.76663921E-01$	2.63549866E-02		
	$\pm 9.17598399E-01$	9.21214998E-02	$\pm 1.45561854E-01$	1.44524404E-01	$\pm 9.95556970E-01$	1.13937985E-02		
26	$\pm 9.84183055E-01$	4.04840048E-02	$\pm 2.88021317E-01$	1.39887395E-01	$\pm 5.92300934E-02$	1.18321415E-01		
	$\pm 1.08054949E-01$	2.15263853E-01	$\pm 4.24342120E-01$	1.32268939E-01	$\pm 1.76858820E-01$	1.16660443E-01		
27	$\pm 3.19112369E-01$	2.05198464E-01	$\pm 5.51618836E-01$	1.21831416E-01	$\pm 2.92004839E-01$	1.13361817E-01		
	$\pm 5.15248636E-01$	1.85538397E-01	$\pm 6.67138804E-01$	1.08797299E-01	$\pm 4.03051755E-01$	1.08471841E-01		
28	$\pm 6.87292905E-01$	1.57203167E-01	$\pm 7.68439963E-01$	9.3444235E-02	$\pm 5.08440715E-01$	1.02059161E-01		
	$\pm 8.27201315E-01$	1.21518571E-01	$\pm 8.53363365E-01$	7.61001136E-02	$\pm 6.06692293E-01$	9.42138004E-02		
29	$\pm 9.28434884E-01$	8.01580872E-02	$\pm 9.20099334E-01$	5.71344254E-02	$\pm 6.96427260E-01$	8.50458943E-02		
	$\pm 9.86283809E-01$	3.51194603E-02	$\pm 9.67226839E-01$	3.69537898E-02	$\pm 7.76385949E-01$	7.46841498E-02		
30	0.0000000E+00	2.02578242E-01	$\pm 9.93752171E-01$	1.60172283E-02	$\pm 8.45445943E-01$	6.32740462E-02		
	$\pm 2.01194094E-01$	1.98431485E-01			$\pm 9.02637862E-01$	5.09758256E-02		
31	$\pm 3.94151347E-01$	1.86161000E-01			$\pm 9.47159067E-01$	3.79623830E-02		
	$\pm 5.70972173E-01$	1.66269206E-01			$\pm 9.78385446E-01$	2.44178513E-02		
32	$\pm 7.24417731E-01$	1.39570678E-01			$\pm 9.95885701E-01$	1.05513726E-02		
	$\pm 8.48206583E-01$	1.07159220E-01						
33	$\pm 9.37273392E-01$	7.03660475E-02						
	$\pm 9.87992518E-01$	3.07532420E-02						

Table C.3 Gauss-Legendre 分点セットの値 (27~36 分点)

n	x_i	ω_i	n	x_i	ω_i	n	x_i	ω_i
27	0.00000000E+00	1.14220867E-01	31	0.00000000E+00	9.97205445E-02	34	\pm 4.55098220E-02	9.09567419E-02
	\pm 1.13972586E-01	1.13476346E-01		\pm 9.95553122E-02	9.92250109E-02		\pm 1.36152357E-01	9.02030459E-02
	\pm 2.26459365E-01	1.11252488E-01		\pm 1.98121199E-01	9.77433351E-02		\pm 2.25666692E-01	8.87018993E-02
	\pm 3.35993904E-01	1.07578286E-01		\pm 2.94718070E-01	9.52902426E-02		\pm 3.13311081E-01	8.64657412E-02
	\pm 4.41148252E-01	1.02501638E-01		\pm 3.88385902E-01	9.18901136E-02		\pm 3.98359278E-01	8.35131011E-02
	\pm 5.40551565E-01	9.60887274E-02		\pm 4.78193782E-01	8.75767404E-02		\pm 4.80106545E-01	7.98684457E-02
	\pm 6.32907972E-01	8.84231585E-02		\pm 5.63249161E-01	8.23929915E-02		\pm 5.57875501E-01	7.55619758E-02
	\pm 7.17013474E-01	7.96048678E-02		\pm 6.42706723E-01	7.63903865E-02		\pm 6.31021727E-01	7.06293778E-02
	\pm 7.91771639E-01	6.97488235E-02		\pm 7.15776784E-01	6.96285827E-02		\pm 6.98939113E-01	6.51115175E-02
	\pm 8.56207908E-01	5.89835375E-02		\pm 7.81733149E-01	6.21747868E-02		\pm 7.61064878E-01	5.90541586E-02
	\pm 9.09482321E-01	4.74494115E-02		\pm 8.39920319E-01	5.41030837E-02		\pm 8.16884225E-01	5.25073503E-02
	\pm 9.50900558E-01	3.52970548E-02		\pm 8.89760031E-01	4.54937003E-02		\pm 8.65934641E-01	4.55257555E-02
	\pm 9.79923476E-01	2.26862310E-02		\pm 9.30756999E-01	3.64322879E-02		\pm 9.07809685E-01	3.81663601E-02
	\pm 9.96179263E-01	9.79899615E-03		\pm 9.62503921E-01	2.70090048E-02		\pm 9.42162368E-01	3.04916659E-02
28	\pm 5.50792899E-02	1.10047013E-01	32	\pm 4.83076657E-02	9.65400872E-02	35	0.00000000E+00	8.84867851E-02
	\pm 1.64569282E-01	1.08711192E-01		\pm 1.44471962E-01	9.56387188E-02		\pm 8.83713433E-02	8.81405207E-02
	\pm 2.72061628E-01	1.06055766E-01		\pm 2.39287362E-01	9.38443978E-02		\pm 1.76051061E-01	8.71044374E-02
	\pm 3.76251516E-01	1.02112967E-01		\pm 3.31868602E-01	9.11738774E-02		\pm 2.62352941E-01	8.53866439E-02
	\pm 4.75874225E-01	9.69306579E-02		\pm 4.21351276E-01	8.76520918E-02		\pm 3.46601554E-01	8.30005845E-02
	\pm 5.69720472E-01	9.05717443E-02		\pm 5.06899909E-01	8.33119231E-02		\pm 4.28137542E-01	7.99649334E-02
	\pm 6.56651094E-01	8.31134171E-02		\pm 5.87715757E-01	7.81938949E-02		\pm 5.06322773E-01	7.63034486E-02
	\pm 7.35610878E-01	7.46462142E-02		\pm 6.63044267E-01	7.23457920E-02		\pm 5.80545345E-01	7.20447872E-02
	\pm 8.05641371E-01	6.52729241E-02		\pm 7.32182119E-01	6.58222274E-02		\pm 6.50224364E-01	6.72222758E-02
	\pm 8.65892522E-01	5.51073450E-02		\pm 7.94483793E-01	5.86840730E-02		\pm 7.14814503E-01	6.18736735E-02
	\pm 9.15633028E-01	4.42729358E-02		\pm 8.49367622E-01	5.09981099E-02		\pm 7.73810250E-01	5.60407786E-02
	\pm 9.54259278E-01	3.29014271E-02		\pm 8.96321138E-01	4.28358008E-02		\pm 8.26749893E-01	4.97694654E-02
	\pm 9.81303167E-01	2.11321117E-02		\pm 9.34906107E-01	3.42739887E-02		\pm 8.73219173E-01	4.31081590E-02
	\pm 9.96442497E-01	9.12428436E-03		\pm 9.64762218E-01	2.53919621E-02		\pm 9.12854110E-01	3.61106240E-02
29	0.00000000E+00	1.06479382E-01	33	0.00000000E+00	9.37684465E-02	36	\pm 9.45345450E-01	2.88284952E-02
	\pm 1.06278230E-01	1.05876155E-01		\pm 9.36310659E-02	9.33564264E-02		\pm 9.70437213E-01	2.13238119E-02
	\pm 2.11352286E-01	1.04073310E-01		\pm 1.86439299E-01	9.21239870E-02		\pm 9.87936104E-01	1.36501625E-02
	\pm 3.14031638E-01	1.01091274E-01		\pm 2.77609097E-01	9.00819590E-02		\pm 9.97706441E-01	5.88380513E-03
	\pm 4.13152888E-01	9.69638340E-02		\pm 3.66339258E-01	8.72482880E-02		\pm 4.30181985E-02	8.59832942E-02
	\pm 5.07592955E-01	9.17377571E-02		\pm 4.51850017E-01	8.36478764E-02		\pm 1.28736104E-01	8.53467042E-02
	\pm 5.96281797E-01	8.54722573E-02		\pm 5.33389905E-01	7.93123651E-02		\pm 2.13500892E-01	8.40782371E-02
	\pm 6.78214538E-01	7.82383270E-02		\pm 6.10242346E-01	7.42798550E-02		\pm 2.96684995E-01	8.21872845E-02
	\pm 7.52462852E-01	7.01179332E-02		\pm 6.81731960E-01	6.85945735E-02		\pm 3.77672547E-01	7.96878461E-02
	\pm 8.18185488E-01	6.12030913E-02		\pm 7.47230495E-01	6.23064826E-02		\pm 4.55863944E-01	7.65984272E-02
	\pm 8.74637804E-01	5.15948242E-02		\pm 8.06162362E-01	5.54708447E-02		\pm 5.30680286E-01	7.29419009E-02
	\pm 9.21180234E-01	4.14020675E-02		\pm 8.58009640E-01	4.81477514E-02		\pm 6.01567658E-01	6.87453375E-02
	\pm 9.57285594E-01	3.07404870E-02		\pm 9.02316789E-01	4.04015240E-02		\pm 6.68001237E-01	6.40398170E-02
	\pm 9.82545507E-01	1.97320869E-02		\pm 9.38694346E-01	3.23003838E-02		\pm 7.29489171E-01	5.88601342E-02
\pm 9.96679442E-01	8.51690509E-03	\pm 9.66822934E-01	2.39155219E-02	\pm 7.85576227E-01	5.32447934E-02			
30	\pm 5.14718426E-02	1.02852653E-01	36	\pm 9.86455711E-01	1.53217228E-02	36	\pm 8.79929692E-01	4.08760293E-02
	\pm 1.53869914E-01	1.01762390E-01		\pm 9.97424699E-01	6.60621514E-03		\pm 9.17498066E-01	3.42134393E-02
	\pm 2.54636926E-01	9.95934204E-02					\pm 9.48272438E-01	2.72991019E-02
	\pm 3.52704726E-01	9.63687370E-02					\pm 9.72028404E-01	2.01809328E-02
	\pm 4.47033770E-01	9.21225221E-02					\pm 9.88585883E-01	1.29166322E-02
	\pm 5.36624148E-01	8.68997870E-02					\pm 9.97830686E-01	5.56514864E-03
	\pm 6.20526183E-01	8.07558951E-02						
	\pm 6.97850495E-01	7.37559746E-02						
	\pm 7.6777432E-01	6.59742301E-02						
	\pm 8.29565764E-01	5.74931554E-02						
	\pm 8.82560533E-01	4.84026736E-02						
	\pm 9.26200052E-01	3.87991921E-02						
	\pm 9.60021859E-01	2.87847087E-02						
	\pm 9.83668128E-01	1.84664651E-02						
\pm 9.96893482E-01	7.96819684E-03							

C6 第1種 Chebyshev 多項式を用いる場合

第1種 Chebyshev 多項式の根 x_i は次式で与えられる。

$$x_i = \cos \frac{2i-1}{2n} \pi \quad (\text{C.45})$$

次に、重み ω_i について考えると、上述した通り、重みは(C.34)式で求めることができる。

第1種 Chebyshev 多項式での s_n 、 γ_n はそれぞれ以下の通りである。

$$s_n = 2 \quad (\text{C.46})$$

$$\gamma_n = \frac{\pi}{2} \quad (\text{C.47})$$

また、 $T_n'(x)$ 、 $T_{n-1}(x)$ はそれぞれ次のように表される。

$$T_n'(x) = \frac{n \sin(n \arccos x)}{\sin(\arccos x)} \quad (\text{C.48})$$

$$T_{n-1}(x) = xT_n(x) + \sin(n \arccos x) \sin(\arccos x) \quad (\text{C.49})$$

(C.45)式～(C.49)式を(C.34)式に代入すると、(C.50)式が得られる。

$$\omega_i = \frac{\pi}{n \sin^2(n \arccos x_i)} = \frac{\pi}{n} \quad (\text{C.50})$$

このようにして、第1種 Chebyshev 多項式の根を分点にとり、(C.50)式の重みを用いる分点セットを Gauss-Chebyshev 分点セットと呼ぶ。Gauss-Chebyshev 分点セットを用いれば、 $f(x)$ が $2n-1$ 次の多項式の時、(C.51)式が成り立つ。

$$\int_{-1}^1 \frac{f(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx = \sum_{i=1}^n \omega_i f(x_i) \quad (\text{C.51})$$

実際の数値計算では、 $f(x)$ の積分値を求める機会が多く、(C.51)式を変形した(C.52)式がよく用いられる。ただし、(C.52)式中の ω_i' は(C.53)式で与えられる。

$$\int_{-1}^1 f(x) dx = \sum_{i=1}^n \omega_i' f(x_i) \quad (\text{C.52})$$

$$\omega_i' = \omega_i \sqrt{1-x_i^2} = \frac{\pi}{n} \sin \frac{2i-1}{2n} \pi \quad (\text{C.53})$$

ただし、積分区間が $[-1,1]$ ではない場合は、(C.54)式のように変数変換を行い、(C.55)式を用いればよい。

$$t_i = \frac{b-a}{2} x_i + \frac{a+b}{2} \quad (\text{C.54})$$

$$\int_a^b f(x) dx = \sum_{i=1}^n \omega_i' f(t_i) \quad (\text{C.55})$$

Table C.4 に分点数 1～26、Table C.5 に分点数 27～36 の Gauss-Chebyshev 分点セット

の値をそれぞれ示す。

Table C.4 Gauss-Chebyshev 分点セットの値 (1~26 分点)

n	x_i	$\omega_i \sqrt{1-x_i^2}$	n	x_i	$\omega_i \sqrt{1-x_i^2}$	n	x_i	$\omega_i \sqrt{1-x_i^2}$
1	0.00000000E+00	3.14159265E+00	16	± 9.80171403E-02	1.95404064E-01	22	± 7.13391832E-02	1.42435829E-01
2	± 7.07106781E-01	1.11072073E+00		± 2.90284677E-01	1.87894796E-01		± 2.12565290E-01	1.39536246E-01
3	0.00000000E+00	1.04719755E+00		± 4.71396737E-01	1.73164835E-01		± 3.49464180E-01	1.33796108E-01
4	± 8.66025404E-01	5.23598776E-01		± 6.34393284E-01	1.51780248E-01		± 4.79248987E-01	1.25332267E-01
5	± 3.82683432E-01	7.25613288E-01		± 7.73010453E-01	1.24562830E-01		± 5.99277667E-01	1.14317022E-01
6	± 9.23879533E-01	3.00558865E-01	± 8.81921264E-01	9.25585328E-02	± 7.07106781E-01	1.00974612E-01		
7	0.00000000E+00	6.28318531E-01	± 9.56940336E-01	5.69972631E-02	± 8.00541241E-01	8.55766507E-02		
8	± 5.87785252E-01	5.08320369E-01	± 9.95184727E-01	1.92456205E-02	± 8.77678990E-01	6.84365953E-02		
9	± 9.51056516E-01	1.94161104E-01	0.00000000E+00	1.84799568E-01	± 9.36949725E-01	4.99033682E-02		
10	± 2.58819045E-01	5.05757580E-01	± 1.83749518E-01	1.81653004E-01	± 9.77146866E-01	3.03542524E-02		
11	± 7.07106781E-01	3.70240245E-01	± 3.61241666E-01	1.72320465E-01	± 9.97452115E-01	1.01872115E-02		
12	± 9.65925826E-01	1.35517335E-01	± 5.26432163E-01	1.57119759E-01	0.00000000E+00	1.36590985E-01		
13	0.00000000E+00	4.48798951E-01	± 6.73695644E-01	1.36568529E-01	± 1.36166649E-01	1.35318769E-01		
14	± 4.33883739E-01	4.04353882E-01	± 7.98017227E-01	1.11366620E-01	± 2.69796771E-01	1.31525821E-01		
15	± 7.81831482E-01	2.79821569E-01	± 8.95163291E-01	8.23722555E-02	± 3.98401090E-01	1.25282795E-01		
16	± 9.74927912E-01	9.98671616E-02	± 9.61825643E-01	5.05728023E-02	± 5.19583950E-01	1.16705988E-01		
17	± 1.95090322E-01	3.85153479E-01	± 9.95734176E-01	1.70511530E-02	± 6.31087944E-01	1.05955169E-01		
18	± 5.55570233E-01	3.26517353E-01	± 8.71557427E-02	1.73868775E-01	± 7.30835964E-01	9.32306061E-02		
19	± 8.31469612E-01	2.18171920E-01	± 2.58819045E-01	1.68585860E-01	± 8.16969893E-01	7.87693332E-02		
20	± 9.80785280E-01	7.66117903E-02	± 4.22618262E-01	1.58180549E-01	± 8.87885218E-01	6.28407366E-02		
21	0.00000000E+00	3.49065850E-01	± 5.73576436E-01	1.42969002E-01	± 9.42260922E-01	4.57415361E-02		
22	± 3.42020143E-01	3.28014604E-01	± 7.07106781E-01	1.23413415E-01	± 9.79084088E-01	2.77902572E-02		
23	± 6.42787610E-01	2.67399555E-01	± 8.19152044E-01	1.00107973E-01	± 9.97668769E-01	9.32129846E-03		
24	± 8.66025404E-01	1.74532925E-01	± 9.06307787E-01	7.37608015E-02	± 6.54031292E-02	1.30619428E-01		
25	± 9.84807753E-01	6.06146488E-02	± 9.65925826E-01	4.51724450E-02	± 1.95090322E-01	1.28384493E-01		
26	± 1.56434465E-01	3.10291443E-01	± 9.96194698E-01	1.52115467E-02	± 3.21439465E-01	1.23952864E-01		
27	± 4.53990500E-01	2.79917955E-01	0.00000000E+00	1.65346982E-01	± 4.42288690E-01	1.17400367E-01		
28	± 7.07106781E-01	2.22144147E-01	± 1.64594590E-01	1.63091864E-01	± 5.55570233E-01	1.08839118E-01		
29	± 8.91006524E-01	1.42625322E-01	± 3.24699469E-01	1.56388026E-01	± 6.59345815E-01	9.84156007E-02		
30	± 9.87688341E-01	4.91453366E-02	± 4.75947393E-01	1.45418330E-01	± 7.51839807E-01	8.63081654E-02		
31	0.00000000E+00	2.85599332E-01	± 6.14212713E-01	1.30482001E-01	± 8.31469612E-01	7.27239734E-02		
32	± 2.81732557E-01	2.74030552E-01	± 7.35723911E-01	1.11986464E-01	± 8.96872742E-01	5.78954542E-02		
33	± 5.40640817E-01	2.40261447E-01	± 8.37166478E-01	9.04362271E-02	± 9.46930129E-01	4.20763276E-02		
34	± 7.5749574E-01	1.87027788E-01	± 9.15773327E-01	6.64191261E-02	± 9.80785280E-01	2.55372634E-02		
35	± 9.09631995E-01	1.18642250E-01	± 9.69400266E-01	4.05902844E-02	± 9.97858923E-01	8.56124960E-03		
36	± 9.89821442E-01	4.06450228E-02	± 9.96584493E-01	1.36542455E-02	0.00000000E+00	1.25663706E-01		
37	± 1.30526192E-01	2.59559658E-01	± 7.84590957E-02	1.56595409E-01	± 1.25333234E-01	1.24672810E-01		
38	± 3.82683432E-01	2.41871096E-01	± 2.33445364E-01	1.52739510E-01	± 2.48689887E-01	1.21715750E-01		
39	± 6.08761429E-01	2.07699419E-01	± 3.82683432E-01	1.45122658E-01	± 3.68124553E-01	1.16839159E-01		
40	± 7.93353340E-01	1.59373369E-01	± 5.22498565E-01	1.33932404E-01	± 4.81753674E-01	1.10119945E-01		
41	± 9.23879533E-01	1.00186288E-01	± 6.49448048E-01	1.19444290E-01	± 5.87785252E-01	1.01664074E-01		
42	± 9.91444861E-01	3.41716772E-02	± 7.60405966E-01	1.02015061E-01	± 6.84547106E-01	9.16048994E-02		
43	0.00000000E+00	2.41660973E-01	± 8.52640164E-01	8.20738826E-02	± 7.70513243E-01	8.01010609E-02		
44	± 2.39315664E-01	2.34638745E-01	± 9.23879533E-01	6.01117730E-02	± 8.44327926E-01	6.73339809E-02		
45	± 4.64723172E-01	2.13980165E-01	± 9.72369920E-01	3.66695120E-02	± 9.04827052E-01	5.35050038E-02		
46	± 6.63122658E-01	1.80885836E-01	± 9.96917334E-01	1.23243259E-02	± 9.51056516E-01	3.88322208E-02		
47	± 8.22983866E-01	1.37279080E-01	0.00000000E+00	1.49599650E-01	± 9.82287251E-01	2.35470305E-02		
48	± 9.35016243E-01	8.56941622E-02	± 1.49042266E-01	1.47928746E-01	± 9.98026728E-01	7.89048939E-03		
49	± 9.92708874E-01	2.91290115E-02	± 2.94755174E-01	1.42953357E-01	± 6.03784974E-02	1.20610038E-01		
50	± 1.11964476E-01	2.22988498E-01	± 4.33883739E-01	1.34784627E-01	± 1.80255038E-01	1.18851272E-01		
51	± 3.30279062E-01	2.11806924E-01	± 5.63320058E-01	1.23605032E-01	± 2.97503054E-01	1.15359387E-01		
52	± 5.32032077E-01	1.90004466E-01	± 6.80172738E-01	1.09664304E-01	± 4.10412805E-01	1.10185302E-01		
53	± 7.07106781E-01	1.58674391E-01	± 7.81831482E-01	9.32738562E-02	± 5.17337814E-01	1.03404468E-01		
54	± 8.46724199E-01	1.19387719E-01	± 8.66025404E-01	7.47998251E-02	± 6.16718873E-01	9.51157631E-02		
55	± 9.43883330E-01	7.41144482E-02	± 9.30873749E-01	5.46548894E-02	± 7.07106781E-01	8.54400565E-02		
56	± 9.93712210E-01	2.51247697E-02	± 9.74927912E-01	3.32890539E-02	± 7.87183481E-01	7.45184415E-02		
57	0.00000000E+00	2.09439510E-01	± 9.97203797E-01	1.11795959E-02	± 8.55781272E-01	6.25101799E-02		
58	± 2.07911691E-01	2.04862754E-01			± 9.11899846E-01	4.95903790E-02		
59	± 4.06736643E-01	1.91332513E-01			± 9.54720867E-01	3.59474388E-02		
60	± 5.87785252E-01	1.69440123E-01			± 9.83619907E-01	2.17803039E-02		
61	± 7.43144825E-01	1.40142386E-01			± 9.98175554E-01	7.29556323E-03		
62	± 8.66025404E-01	1.04719755E-01						
63	± 9.51056516E-01	6.47203680E-02						
64	± 9.94521895E-01	2.18923902E-02						

Table C.5 Gauss-Chebyshev 分点セットの値 (27~36 分点)

n	x_j	$\omega_j \sqrt{1-x_j^2}$	n	x_j	$\omega_j \sqrt{1-x_j^2}$	n	x_j	$\omega_j \sqrt{1-x_j^2}$
27	0.00000000E+00	1.16355283E-01	31	0.00000000E+00	1.01341699E-01	34	\pm 4.61834586E-02	9.23011910E-02
	\pm 1.16092914E-01	1.15568531E-01		\pm 1.01168322E-01	1.00821747E-01		\pm 1.38156355E-01	9.15137098E-02
	\pm 2.30615871E-01	1.13218912E-01		\pm 2.01298520E-01	9.92672280E-02		\pm 2.28950550E-01	8.99454659E-02
	\pm 3.42020143E-01	1.09338201E-01		\pm 2.99363123E-01	9.66940929E-02		\pm 3.17791420E-01	8.76098390E-02
	\pm 4.48799180E-01	1.03978879E-01		\pm 3.94355855E-01	9.31287455E-02		\pm 4.03921005E-01	8.45267558E-02
	\pm 5.49508978E-01	9.72134211E-02		\pm 4.85301963E-01	8.86077712E-02		\pm 4.86604479E-01	8.07225201E-02
	\pm 6.42787610E-01	8.91333183E-02		\pm 5.71268215E-01	8.31775612E-02		\pm 5.65136414E-01	7.62295884E-02
	\pm 7.27373642E-01	7.98478403E-02		\pm 6.51372483E-01	7.68938369E-02		\pm 6.38846806E-01	7.10862927E-02
	\pm 8.02123193E-01	6.94825572E-02		\pm 7.24792787E-01	6.98210778E-02		\pm 7.07106781E-01	6.53365138E-02
	\pm 8.66025404E-01	5.81776417E-02		\pm 7.90775737E-01	6.20318599E-02		\pm 7.69333971E-01	5.90293068E-02
	\pm 9.18216107E-01	4.60859735E-02		\pm 8.48644257E-01	5.36061113E-02		\pm 8.24997475E-01	5.22184826E-02
	\pm 9.57989512E-01	3.33710714E-02		\pm 8.97804540E-01	4.46302913E-02		\pm 8.73622391E-01	4.49621487E-02
	\pm 9.84807753E-01	2.02048829E-02		\pm 9.37752132E-01	3.51965042E-02		\pm 9.14793868E-01	3.73222136E-02
	\pm 9.98308158E-01	6.76545805E-03		\pm 9.68077119E-01	2.54015534E-02		\pm 9.48160648E-01	2.93638585E-02
				\pm 9.88468324E-01	1.53459482E-02		\pm 9.73438054E-01	2.11549813E-02
				\pm 9.98716507E-01	5.13287280E-03		\pm 9.90410431E-01	1.27656173E-02
							\pm 9.98932975E-01	4.26734160E-03
28	\pm 5.60704472E-02	1.12023227E-01	32	\pm 4.90676743E-02	9.80565146E-02	35	0.00000000E+00	8.97597901E-02
	\pm 1.67506223E-01	1.10614470E-01		\pm 1.46730474E-01	9.71121768E-02		\pm 8.96393089E-02	8.93984436E-02
	\pm 2.76835511E-01	1.07814671E-01		\pm 2.42980180E-01	9.52325956E-02		\pm 1.78556895E-01	8.83173133E-02
	\pm 3.82683432E-01	1.03659041E-01		\pm 3.36889853E-01	9.24358724E-02		\pm 2.66036846E-01	8.65251040E-02
	\pm 4.83718887E-01	9.81998383E-02		\pm 4.27555093E-01	8.87489413E-02		\pm 3.51374824E-01	8.40362455E-02
	\pm 5.78671296E-01	9.15057155E-02		\pm 5.14102744E-01	8.42073094E-02		\pm 4.33883739E-01	8.08707765E-02
	\pm 6.66346578E-01	8.36608553E-02		\pm 5.95699304E-01	7.88547150E-02		\pm 5.12899277E-01	7.70541835E-02
	\pm 7.45642165E-01	7.47639112E-02		\pm 6.71558955E-01	7.27427066E-02		\pm 5.87785252E-01	7.26171956E-02
	\pm 8.15560869E-01	6.49267676E-02		\pm 7.40951125E-01	6.59301462E-02		\pm 6.57938726E-01	6.75955367E-02
	\pm 8.75223422E-01	5.42731322E-02		\pm 8.03207531E-01	5.84826425E-02		\pm 7.22794864E-01	6.20296383E-02
	\pm 9.23879533E-01	4.29369807E-02		\pm 8.57728610E-01	5.04719189E-02		\pm 7.81831482E-01	5.59643137E-02
	\pm 9.60917322E-01	3.10608717E-02		\pm 9.03989293E-01	4.19751231E-02		\pm 8.34573254E-01	4.94483974E-02
	\pm 9.85871019E-01	1.87941543E-02		\pm 9.41544065E-01	3.30740840E-02		\pm 8.80595532E-01	4.25343517E-02
	\pm 9.98426815E-01	6.29108947E-03		\pm 9.70031253E-01	2.38545234E-02		\pm 9.19527773E-01	3.52778443E-02
				\pm 9.89176510E-01	1.44052306E-02		\pm 9.51056516E-01	2.77373006E-02
				\pm 9.98795456E-01	4.81720766E-03		\pm 9.74927912E-01	1.99734323E-02
							\pm 9.90949762E-01	1.20487498E-02
				\pm 9.98993067E-01	4.02705776E-03			
29	0.00000000E+00	1.08330781E-01	33	0.00000000E+00	9.51997774E-02	36	\pm 4.36193874E-02	8.71834043E-02
	\pm 1.08119018E-01	1.07695741E-01		\pm 9.50560433E-02	9.47687054E-02		\pm 1.30526192E-01	8.65198859E-02
	\pm 2.14970440E-01	1.05798068E-01		\pm 1.89251244E-01	9.34793934E-02		\pm 2.16439614E-01	8.51978990E-02
	\pm 3.19301530E-01	1.02660008E-01		\pm 2.81732557E-01	9.13435175E-02		\pm 3.00705800E-01	8.32275046E-02
	\pm 4.19889102E-01	9.83183542E-02		\pm 3.71662456E-01	8.83804206E-02		\pm 3.82683432E-01	8.06236987E-02
	\pm 5.15553857E-01	9.28240072E-02		\pm 4.58226522E-01	8.46169368E-02		\pm 4.61748613E-01	7.74062977E-02
	\pm 6.05174215E-01	8.62413837E-02		\pm 5.40640817E-01	8.00871490E-02		\pm 5.37299608E-01	7.35997881E-02
	\pm 6.87699459E-01	7.86476588E-02		\pm 6.18158986E-01	7.48320796E-02		\pm 6.08761429E-01	6.92331396E-02
	\pm 7.62162055E-01	7.01318619E-02		\pm 6.90079011E-01	6.88993193E-02		\pm 6.75590208E-01	6.43395851E-02
	\pm 8.27688998E-01	6.07938332E-02		\pm 7.55749574E-01	6.23425961E-02		\pm 7.37277337E-01	5.89563676E-02
	\pm 8.83512044E-01	5.07430523E-02		\pm 8.14575952E-01	5.52212887E-02		\pm 7.93353340E-01	5.31244565E-02
	\pm 9.28976720E-01	4.00973555E-02		\pm 8.66025404E-01	4.75998887E-02		\pm 8.43391446E-01	4.68882362E-02
	\pm 9.63549993E-01	2.89815539E-02		\pm 9.09631995E-01	3.95474168E-02		\pm 8.87010833E-01	4.02951681E-02
	\pm 9.86826523E-01	1.75259701E-02		\pm 9.45000819E-01	3.11367973E-02		\pm 9.23879533E-01	3.33954294E-02
	\pm 9.98533414E-01	5.86491026E-03		\pm 9.71811568E-01	2.24441982E-02		\pm 9.53716951E-01	2.62415314E-02
				\pm 9.89821442E-01	1.35483409E-02		\pm 9.76296007E-01	1.88879195E-02
				\pm 9.98867339E-01	4.52978779E-03		\pm 9.91444861E-01	1.13905591E-02
				\pm 9.99048222E-01	3.80650964E-03			
30	\pm 5.23359562E-02	1.04576240E-01						
	\pm 1.56434465E-01	1.03430481E-01						
	\pm 2.58819045E-01	1.01151516E-01						
	\pm 3.58367950E-01	9.77643136E-02						
	\pm 4.53990500E-01	9.33059850E-02						
	\pm 5.44639035E-01	8.78253765E-02						
	\pm 6.29320391E-01	8.13825348E-02						
	\pm 7.07106781E-01	7.40480490E-02						
	\pm 7.77145961E-01	6.59022772E-02						
	\pm 8.38670568E-01	5.70344664E-02						
	\pm 8.91006524E-01	4.75417740E-02						
	\pm 9.33580426E-01	3.75282039E-02						
	\pm 9.65925826E-01	2.71034670E-02						
	\pm 9.87688341E-01	1.63817789E-02						
	\pm 9.98629535E-01	5.48060852E-03						

公刊論文リスト

口頭発表

- 1) M. Tabuchi, Y. Hanayama, M. Yamasaki, A. Yamamoto, "The Feasibility Study of the Minimum-Shuffling Reloading Strategy for PWRs," PHYSOR2004 (2004)
- 2) 田渕将人, 山本章夫, 遠藤知弘, 杉村直紀, 牛尾直史, 森正明, "次世代非均質輸送計算システム AEGIS の開発(3): 検証計算," 日本原子力学会 2005 年春の年会 (2005).
- 3) 田渕将人, 山本章夫, 遠藤知弘, 杉村直紀, 牛尾直史, 森正明, "次世代非均質輸送計算システム AEGIS の開発(5): 新たな最適極角分点セットの作成," 日本原子力学会 2005 年秋の大会 (2005).
- 4) M. Tabuchi, A. Yamamoto, T. Endo, N. Sugimura, T. Ushio, M. Mori, "Yet Another Optimum Polar Angle Quadrature Set for the Method of Characteristics," 2005 American Nuclear Society Winter Meeting (2005).