

<照射欠陥集合体の濃度変化シミュレータのご説明>

—内容—

1. はじめに
2. コード作成（拡張）例
3. 作業方針

< 1. はじめに >

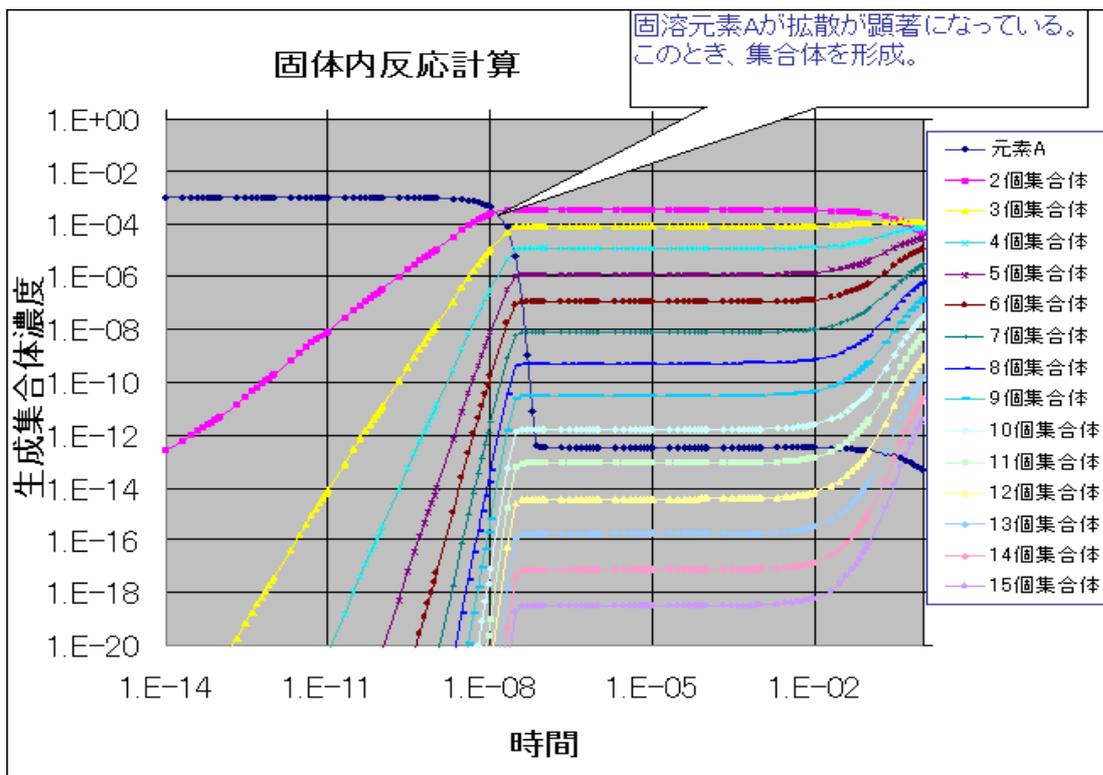
1-1. 本資料のご説明について

ここでは、照射欠陥の成長過程に対し、拡散を考慮し濃度の空間分布を計算する提案を行う。まず、照射欠陥の成長過程に関する、弊社実績の説明を行う。その後、実績を基にした当問題に対する作業方針を記す。

1-2. 弊社の実績

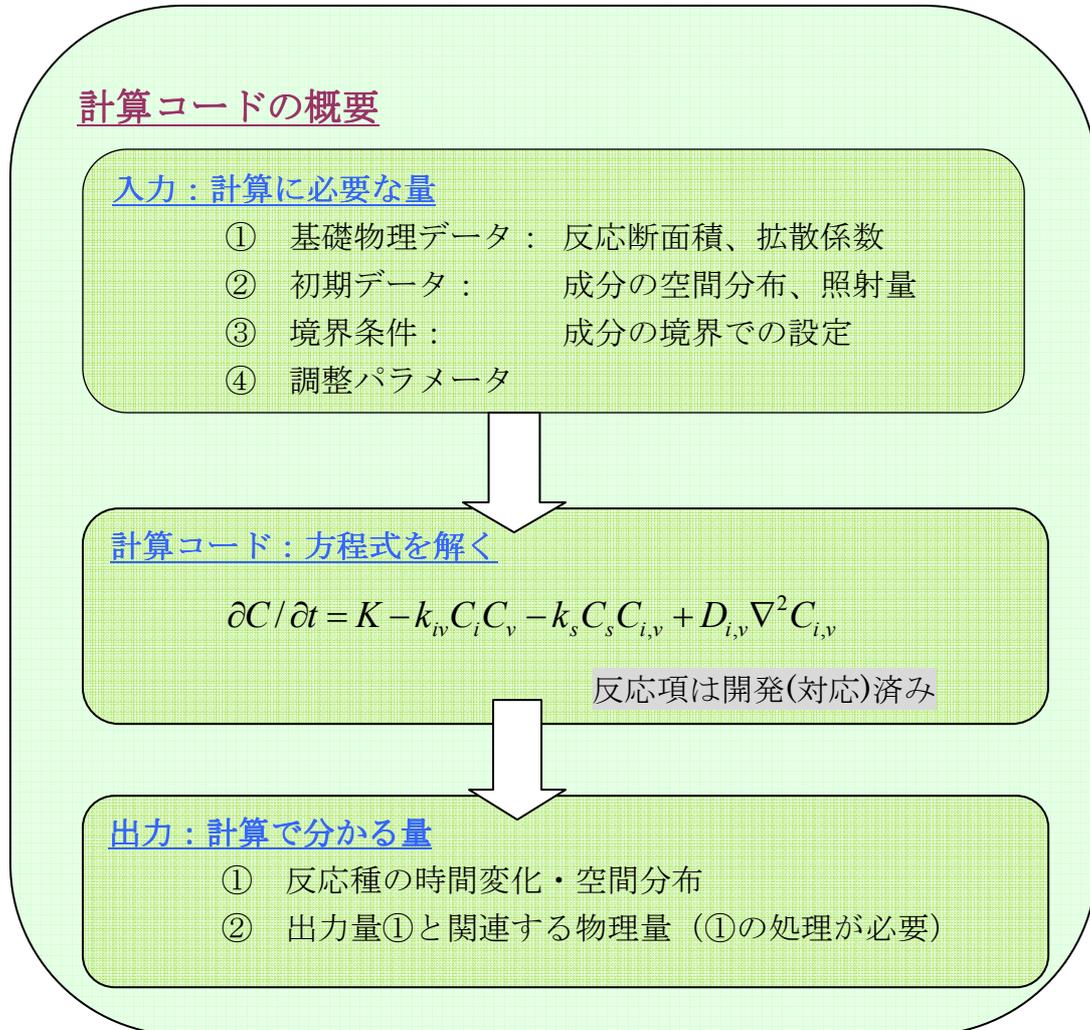
本件に関する案件で、「照射欠陥成長過程の計算」のソルバー開発とモデル計算を行った。モデルは反応速度論を基に、 i, v , 不純物 のそれぞれに対し数十集合体までの反応を考慮した。

一般に反応方程式は、非線形微分方程式である。更に、反応の時定数が時間・成分に依存し解きにくい性質を持つ。このため、陰的手法を採用し、Newton法で各時間の解を求めた（下図、参照）。



< 2. コード作成 (拡張) 例 >

以上の実績を踏まえ、本件に対応できる計算コードの概要は以下になるだろう。



—拡散も解くコードへ拡張すること—

今までの実績は、0d-計算への対応であった。このため、成分の時間変化のみ導出される。一方、今回は成分の空間分布も注目するため、拡散項を解く部分の追加が必要である。

また、入出力の処理（書式設定、他物理量への変換）は適当なルーチンを追加することで、対応可能となる。

< 3. 作業方針 >

作業の流れ

現在、数十種類の i, v , 集合体の反応を解くコード開発とモデル計算の実績を有する。本件では、ご要望に応じてコードをカスタマイズする必要がある。

そして、解く方程式を“反応項” + “拡散項” と解釈し、発生作業を列挙すると、大まかに以下 3 点になる。

- ① 反応項を解くコードのカスタマイズ。
- ② 拡散項を解くプログラムの追加。
- ③ 反応拡散方程式を解くプログラムの追加：①, ②の結合。

また作業に先立ち、方程式を解く解法を選定する必要がある。候補として、部分段階法をベースに、各項対し陰解法を適用することが考えられる。