

直接法による格子型偏微分方程式の解法

原子力研 中山 隆

赤沼 誠

小林健介

1. 序

原子炉設計においては、臨界計算、燃焼度計算、動特性計算および安全解析等殆どどの計算にいわゆる拡散方程式を解くことが非常に多い。拡散方程式は數学的にいうと Sturm-Liouville 型又は格子型の偏微分方程式の特殊な場合に当る。かつ固有値問題であるために固有値を求める繰り返し計算があり、固有値を仮定したときにはまわり右辺の Source 項を固定したとき立する微分方程式の解法には反復法が用いられてきた。これは連立1次方程式を Gauss-Zeidel の反復法で解くことに相当する。その収束を早めるための種々の加速法が次々と工夫されて、計算コードに取り入れられてきた。この右辺の Source term を固定して微分方程式を反復法で解く繰りかえしを Inner Iteration とよび、固有値を求める繰り返しを Outer Iteration とよんでいる。

Inner Iteration の代表的加速法に

1. SOR 法 (Successive Overrelaxation 法)

2. A.D.I 法 (Alternating Direction Implicit 法)

の二つがあり、Outer Iteration の代表的なものは

1. 定数加速法

2. chebyshev 多項式法

3. Wielandt 法

がある。また SOR の中には point, one-line, two-line 等があり、その変型も考えに入ると実に多くの方法があるさて、収束の早さは理論的推定の他に実際、計算耗にかけてより実験による比較を行う必要がある。

計算時間は Inner Iteration の回数と Outer Iteration の回数の積に比例するから、以下述べるような直接法を用いることによって、Inner の部分を 1 回で済ませることは計算時間も著しく短縮できると期待されるである。

直接法の定式化は既に Marchuk, Varga 等によって得られていたが、そのコード化は計算耗のメモリーを多く必要とする欠点があるために従来あまり用いられなかつた。しかし最近の計算耗の大型化によってこの欠点も漸次なくなりつつある。最近赤沼、小林らによつて直接法を用いた 2 次元弦散コードが完成したのでそれを紹介し、実際問題にあらわれる因

難を提示しようと思う。

直接法で用いられる漸化式には二三のバリエーションがあるが問題の幾何形状および境界条件に適当なものを使らざる必要がある。また2次元の場合にはこの漸化式の中に小行列の逆転を含むがこの計算にも直接法が用いられる。

ただ現在の計算機(原研はIBM1044, 32K)では漸化式を解く場合、メモリーが未だ十分でなく、磁気テープを補助メモリ一として用いるため、情報の出し入れに時間がかかるって、又復雑にくらべ圧倒的優位さは達せられていない。したがつて直接法の眞価は将来のより大容量の計算機時代こそ發揮されるものと期待される。

2. 拡散方程式

われわれの解くべき微分方程式は次の形の標準型連立偏微分方程式(1次元の場合は連立常微分方程式である)である。

$$-D^i(r) \Delta \phi^i(r) + \sum_t^i \nu \sum_f^i (r) \phi^i(r) = S^i(r) + \sum_{t=1}^{i-1} \phi^{i-1}(r) \quad (2-1)$$

$$S(r) = \frac{1}{\lambda} \sum_i \nu \sum_f^i (r) \phi^i(r) \quad (2-2)$$

$$\sum_t^i (r) = \sum_a^i (r) + \sum_r^i (r) + D^i(r) B_z^i(r) \quad (2-3)$$

$$(i=1, 2, \dots, G)$$

ここで添え字*i*はエネルギー組の番号をあらわし、高速エネルギー組は*i=L*、一番下の熱中性子領域は*G*であらわされる。
通常3群又は4群であり、KAKコードでは*G≤4*となつてゐる。

さらに

$$\sum_r^0 = \sum_r^g = 0 \quad (2-4)$$

$$\sum x_i = 1 \quad (\text{分割スペクトル}) \quad (2-5)$$

Γ は位置座標で 1 次元の場合は x , 2 次元の場合には (x, y) 又は (r, θ) である。 \sum_r の r は removal (除去断面積) を意味し、上のエネルギー組からその下のエネルギー組へおちる中性子の割合をあらわす。

問題は与えられた幾何形状、領域の配置、境界条件に対して (2-1) 式を境界値問題として解くこと、すなはち固有値 λ とこれに対応する中性子束 $\phi(r)$ を求めることがある。境界条件はもともと外側の境界で $\phi(r) = 0$ または $\frac{\partial \phi}{\partial n} = 0$ 。制御棒領域との境界では $\frac{1}{\phi} \frac{\partial \phi(r)}{\partial n} = -\tau$ (τ は定数) である。係数 \sum_t , \sum_{a_t} は Γ の関数として stepwise continuous であり、所 $\phi(r)$ は連続、しかし 1 次導関数 $\frac{\partial \phi}{\partial r}$ は領域の境界のみで不連続であるが流れ (Current) $D \frac{\partial \phi}{\partial r}$ は連続という条件がつく。

特に 1 次元の場合 (無限板、無限円筒、球) 方程式 (2-1) は次の形の 2 階常微分方程式となる。添字 i は省略する。

$$-\frac{d}{dx} \left\{ D(x) \frac{d\phi(x)}{dx} \right\} + \sum_t(x) \phi(x) = f(x) \quad (2-6)$$

$$f(x) = \frac{x_i}{\lambda} \tau(r) + \sum_r^{i-1} \phi^{i-1}(x) \quad (2-7)$$

§3. 差分方程式

さわめて簡単な場合を除いて積分を解析的に行うことは殆んど不可能である。したがって本節で述べるような差分化を行ふ、近似差分方程式を解くのが普通である。差分化の手つきは文献(2), (3)に詳しく述べられて行くとして、1次元の場合には、結果として

$$P_i \phi_i - Q_i \phi_{i-1} - R_i \phi_{i+1} = f_i \quad (1 \leq i \leq N) \quad (3-1)$$

なる差分方程式になり、これを行列の形に書けば

$$A \bar{\phi} = K \quad (3-2)$$

となる。こゝに行列 A は $m \times m$ の行列で、 $m=N, N+1, \text{又は } N+2$ の何れかであり、境界条件によって定まる。 $(3-1)$ から行列 A の性質として次の5項があげられる。⁽²⁾

(1) A は real, tridiagonal である。

(2) A の対角線要素は正、非対角線要素は 0 又は負である。

(3) A は irreducibly diagonally dominant, それゆえに irreducible M 行列である。かつ $A^{-1} > 0$

(4) A に関する point Jacobi 行列 B は非負で convergent である。

(5) B は index 2 の Consistently ordered cyclic 行列である。かつ B は実の固有値をもち、そのスペクトル半径 $\rho(B) < 1$ である。

2次元の場合も結果の行列型のみを記すと次のようになる
○ (3-2) の形での行列 A は

$$A = \begin{pmatrix} B_1 C_1 & 0 & \cdots & 0 \\ A_2 B_2 C_2 & \ddots & & \\ & \vdots & & C_{N-1} \\ 0 & \cdots & A_N B_N & \end{pmatrix} \quad (3-3)$$

で但し各要素 A_i, B_i, C_i は ~~矩~~ 行列である。 B_i は tridiagonal, A_i, C_i は diagonal matrix である。 N は水平格子線の数である。 2次元 (x, y) 又は (r, z) の場合に $\forall i$ も行列 A は前述の 5 の性質を満足する。

拡散方程式の数値解を得るために、拡散差分方程式の絶対値最小の固有値とそれに対応する固有関数を求めるわけであるが、これに因して次の定理が成立する。

[定理] 固有値は正で simple であり、対応する固有ベクトル中にはたゞ 1 つ存在し、すべて ^{この意味で} 非負である。

種々の加速法の比較については文献(4)に詳しく説べられてゐる。

§4. 直接法

方程式 (3-2) を解くために反復法と直接法があるが、直接法では次の形の漸化式が用いられる。先ず 1 次元の場合には、(3-2) 式を少し書き直して

$$a_i \phi_{i+1} - b_i \phi_i + c_i \phi_{i-1} = -r_i \quad (4-1)$$

とする。又 $a_i > 0, b_i > 0, c_i > 0$ である。両辺を a_i で除して

$$B_i = b_i/a_i, \quad C_i = c_i/a_i, \quad F_i = k_i/a_i \quad (4-2)$$

とすれば解を求める 3 つの漸化式は次の如くなる。

$$\left. \begin{aligned} w_{i+1} &= \frac{-1}{B_{i+1} + C_{i+1} w_i} \quad (i=1, \dots, n-2), \quad w_1 = -\frac{1}{B_1} \\ g_{i+1} &= \frac{F_{i+1} + C_{i+1} g_i}{B_{i+1} + C_{i+1} w_i} \quad (i=1, \dots, n-1), \quad g_1 = \frac{k_1}{B_1} \\ \phi_i &= g_i - w_i \phi_{i+1} \quad (i=1, \dots, n-1) \end{aligned} \right\} (4-3)$$

この式は Varga の本⁽²⁾にある。これと全く同等(変数変換によつて)な漸化式が Marchuk⁽³⁾の次の式である。

$$\left. \begin{aligned} \beta_{i+1} &= \frac{C_{i+1}}{B_i - \beta_i} \\ z_{i+1} &= \beta_{i+1} (z_i + F_i) \\ \phi_i &= (\beta_{i+1} \phi_{i+1} + z_{i+1}) / C_{i+1} \end{aligned} \right\} (4-4)$$

(4-3) と (4-4) の同等性については

$$\left. \begin{aligned} \beta_i &= -C_i w_{i-1} \\ z_{i+1} &= C_{i+1} g_i \end{aligned} \right\} (4-5)$$

を用いて示せばわかる。これらは 1 つの漸化式と見て

$$\alpha_{i+1} = B_{i+1} - \frac{C_{i+1}}{\alpha_i} \quad ?$$

$$\left. \begin{array}{l} v_{i+1} = \frac{c_{i+1}}{\alpha_i} v_i + f_i \\ \phi_i = \frac{\phi_{i+1} + v_i}{\alpha_i} \end{array} \right\} \quad (4-6)$$

$$\left. \begin{array}{l} \text{すなは} \beta_i = c_i / \alpha_{i-1} \\ z_i + f_i = v_{i+1} \end{array} \right\} \quad (4-7)$$

の置換で(4-4)式と同等になる。このように上述の三つの漸化式のセットは互に同等であるけれども境界条件によって使い分けすることができる。

次に2次元の場合の漸化式は1次元のアナロジーから得た
行列Aは($A\phi=F$)

$$A = \begin{pmatrix} B_1 C_1 & \cdots & 0 \\ A_2 B_2 C_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & & \vdots \\ 0 & \cdots & A_N B_N \end{pmatrix} \quad (4-8)$$

となる。前述したように B_i は tridiagonal, A_i, C_i は diagonal matrix である。Targa の漸化式(4-3)に対応するものは

$$\left. \begin{array}{l} w_{k+1} = (B_{k+1} - A_{k+1} w_k)^{-1} C_{k+1} \\ g_{k+1} = (B_{k+1} - A_{k+1} w_k)^{-1} (F_{k+1} - A_{k+1} g_k) \\ \phi_k = g_k - w_k \phi_{k+1} \end{array} \right\} \quad (4-9)$$

(AとCが前の(4-3)式に入れかわっていることは同じ上の二点で同じことである)

Marchuk の漸化式 (4-4) を用いての ϕ

$$\left. \begin{array}{l} \beta_{k+1} = C_{k+1}^{(i)} (B_k^{(i)} - \beta_k)^{-1} \\ Z_{k+1} = \beta_{k+1} (Z_k + F_k^{(i)})^{-1} \\ \phi_k = C_{k+1}^{(i)-1} (\beta_{k+1}, \phi_{k+1}, Z_{k+1}) \end{array} \right\} (4-10)$$

$$B_k^{(i)} = A_k^{-1} B_k, \quad C_k^{(i)} = A_k^{-1} C_k, \quad F_k^{(i)} = A_k^{-1} F_k. \quad (4-11)$$

KAKO-FT ではこの (4-11) の漸化式を用いている。これは A_k をストアするためのメモリーを節約するためである。
漸化式の出発値は境界条件に応じて各々次のようになる。

(1) $\phi = 0$ の場合

$$\left. \begin{array}{l} \beta_1 = 0 \\ Z_1 = 0 \\ \phi_{N-1} = C_N^{(i)-1} Z_N \end{array} \right\} (4-12)$$

(2) $\frac{\partial \phi}{\partial \gamma} = 0$ の場合

$$\left. \begin{array}{l} \beta_1 = C_1^{(i)} \\ Z_1 = 0 \\ \phi_{N-1} = (C_N^{(i)} - \beta_N)^{-1} Z_N \end{array} \right\} (4-13)$$

(3) $\frac{1}{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial \gamma} = -\frac{1}{J}$ (初期微分条件) の場合

$$\beta_1 = \frac{1 + (\Delta \gamma)/2\delta}{1 - (\Delta \gamma)/2\delta} C_1^{(i)}$$

$$\begin{aligned} z_1 &= 0 \\ \phi_{N-1} &= \left\{ \frac{1 + (\Delta r)/2\beta}{1 - (\Delta r)/2\beta} C_N^{(1)} - \beta_N \right\} z_N \end{aligned} \quad (4.14)$$

Δr は r 方向の メッシュ サイズである。

直接法の短所であるところのメモリー数を多く要することは次の説明でも明らかである。左とすれば $N \times N$ の mesh とすると N^2 を指定するだけでも行列の対称性を考慮して、 $N^3/2$ を要する。

丸め誤差の蓄積による不安定性の問題があるが、1次元の場合ロフワイエスキーニ⁽³⁾、2次元の場合バベンコテエンツオフ⁽³⁾により安定性の研究がなされている。

3.5. 制御棒領域における取り扱い

原子炉を実際に動かせる場合、原子炉を臨界よりもかなり大きく作っておかねばならない。実効倍率を 1 より大きくして始めて中性子の数を増す手段が得られ、目的の高さの出力に達することができるからである。一旦その点に達したならば実効倍率を 1 にまで減らさなければならぬ。中性子の増加を調節するためには Cd や B(ボロン) でできた制御棒をさしておき、ところが吸收断面積の大きい制御棒では拡散近似がなりかたないって、制御棒領域に適当な境界条件を与えることにより解のねばならない。近似境界条件は外挿距離 δ のところでの中性子束が 0 となるとして次式で与えられる。

$$\frac{1}{\phi} \cdot \frac{\partial \phi}{\partial n} = -\frac{1}{\delta} \quad (5-1)$$

ここで ϕ はボルツマンの輸送方程式の近似解からまたはモンテカルロ法によっても求められる定数である。制御棒領域の内界では中性子束中は 0 とするので制御棒領域以外の領域は（未知中性子束を求めるばたうな～） L 字型、口字型、正字型あるいはそれらの和集合となる。これは Matrix Factorization は長方形領域においてのみ有効であるので次の方法を工夫した中でである。

もし (k, l) が制御棒領域の内界である場合には対数微分条件を導く以上、計算する必要はないがであるが便宜上

$$R_{ij} = L_{ij} = T_{ij} = B_{ij} = 0, \quad D_{ij} = 1, \quad S_{ij} = 0 \quad (5-2)$$

として Matrix 表示に組み込んでおく。又 (k, l) が制御棒領域の境界点の場合にも (5-1) を用いて、三元、四元、又は 5 頂點差を求めてその表示の中に組入れる。ここで $R_{ij} = 0$ といつても A^{-1} は存在しないので Marchuk の式ではなく Varga (4-9) を用い、反対に $R_{ij} \neq 0$ の点では両辺を R_{ij} で除し、メモリーの節約を計ったのである。

以上のように本報告において、直接法と繰り返し法の解法に用いる場合の注意として種々の漸化式と適当な境界条件について使いあける例を示したのである。

終りに YAKO によって計算した原子炉の臨界度の経過の概

様を下図に示す。斜線のついた部分が(①と⑤) 制御操作域と毒物カーテンの部分でするゆる対数微分条件を用いるところである。こう複雑な積分領域であるので通常の方法に加えて本節のような漸化式の提供について工夫が必要となるのである。

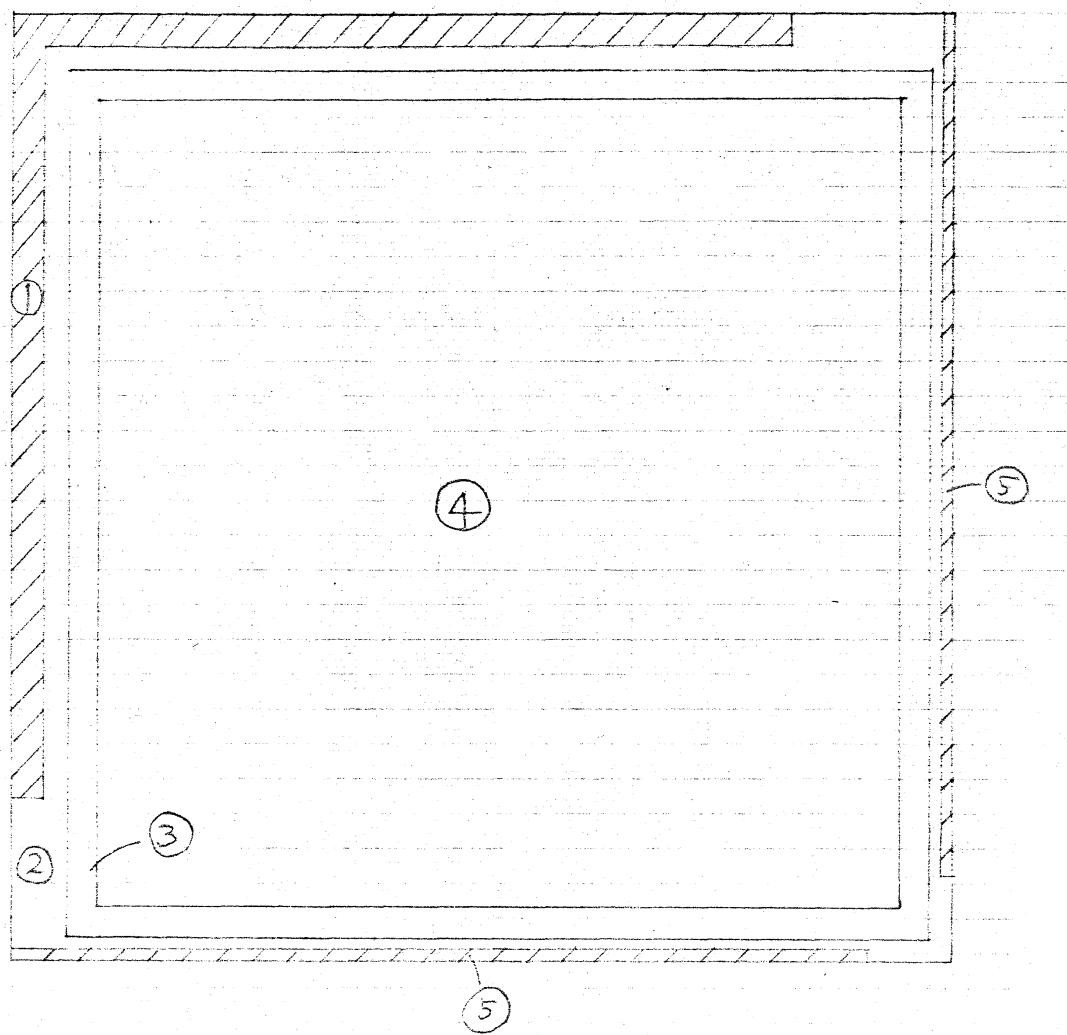
5.7 おわりに

最後の一人赤沼は現在深伊中でニンポーラムは出席できなかつた。同氏が主に仕事をしたとかからず本報告の執筆には関与できなかつるので、不十分な点が多々あると思ふ。調整のヒビを行つ所である。

(以上)

参考文献

1. 赤沼、久家、安川 : The KAK Program for the Numerical Solution of Few-Group Neutron Diffusion Equations in 2D dimensions. JAERI 1127. (1967).
2. R. S. Varga : Matrix Iterative Analysis, Prentice-Hall, Inc. (1962).
3. G. I. Marchuk : Numerical Methods for Nuclear Reactor Calculations (translated from Russian), Consulting Bureau, Inc. (1959).
4. 三立製作所 : 昭和37年原子力平和利用研究委託費
[核能二一下の収斂加速に関する試験研究] (1964).



JPDR型燃素斗臂車

- (1) 制御棒領域
- (2) Gap
- (3) Channel box
- (4) 純料 assembly
- (5) poison curtain

社団 料理制御の或可田形 (KAKO)