

直接法による楕円型偏微分方程式の解法

原子力研 中山 隆

系昭 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ん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。拡散方程式は数学的にいうと Sturm-Liouville 型又は楕円型の偏微分方程式の特殊な場合にあつて、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すなわち右辺の Source 項を固定したときを解く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-Seidel 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かえしを 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. ADI 法 (Alternating Direction Implicit 法)
- の二つがあり、Outer Iteration の代表的なものに

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れると実に数多くの方法がある訳で、収束の早さは理論的推定の他に実際、計算機にかけてみる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 回ですませることは計算時間を著しく短縮できると期待されるであろう。

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機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った。しかし最近の計算機の大型化によってこの欠点も漸次なくなりつつある。最近東沼、小林らによって直接法を用いた 2 次元拡散コードが完成したのでそれを紹介し、実際問題にあらわされる困

難を提示しようと思う。

直接法で用いられる漸化式にはニミ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えらぶ必要がある。また2変数の場合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IBM7044, 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ーとして用いるため、情報の出し入れに時間がかかって、反復法にくらべ圧倒的優位さは達せられていない。したがって直接法の真価は将来のより大容量の計算機時代には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楕円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。

$$-D^i(r) \Delta \phi^i(r) + \Sigma_t^i(r) \phi^i(r) = \chi^i S(r) + \Sigma_r^{i-1} \phi^{i-1}(r) \quad (2-1)$$

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

$$\Sigma_t^i(r) = \Sigma_a^i(r) + \Sigma_r^i(r) + D^i(r) B_z^2(r) \quad (2-3)$$

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

ここで添次 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 $i=1$ 、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 $G \leq 4$ となっている。

さらに

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

$$\sum \chi_i = 1 \quad (\text{分枝スペクトル}) \quad (2-5)$$

γ は位置座標で 1 次元の場合は x , 2 次元の場合は (x, y) 又は (r, z) 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、すなわち固有値 λ とそれに対応する中性子束 $\phi(r)$ を求めることである。境界条件はもっとも外側の境界で $\phi(r) = 0$ または $\frac{\partial \phi}{\partial n} = 0$ 。制御棒領域との境界では $\frac{1}{\phi} \frac{\partial \phi(r)}{\partial n} = -\gamma$ (γ は定数) である。係数 Σ_t , Σ_a 等は γ の関数として stepwise continuous であり、解 $\phi(r)$ 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。

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

$$f(x) = \frac{\chi_i}{\lambda} s(r) + \sum_{r=1}^{i-1} \phi^{i-1}(x) \quad (2-7)$$

§ 3. 差分方程式

さや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い、近似差分方程式を解くのが普通である。差分化の手づきは文献(2), (3)に詳しいからこゝでは省くことにして、1次元の場合の結果として

$$p_i \phi_i - q_i \phi_{i-1} - r_i \phi_{i+1} = k_i \quad (1 \leq i \leq N) \quad (3-1)$$

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、 $m = N, N+1$, 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ものを記すと次のようになる。
 (3-2)の形での行列 A は

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

ただし各要素 A_i, B_i, C_i は行列である。 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) または (r, z) の場合についても行列 A は前述の5つの性質を満足する。

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

[定理] 固有値 λ は正で simple であり、対応する固有ベクトル ϕ はたゞ1つ存在し、^{その要素は}すべて非負である。

種々の加速法の比較については文献(4)に詳しく調べられている。

§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。まず1次元の場合には、(3-1)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。こゝで $a_i > 0$, $b_i > 0$, $c_i > 0$ である。両辺を a_i で除いて

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

とかけば解を求める 三つの漸化式は次の如くなる。

$$\left. \begin{aligned} w_{i+1} &= \frac{-1}{B_{i+1} + C_{i+1} w_i} \quad (i=1, \sim n-2), \quad w_1 = -\frac{1}{B_1} \\ g_{i+1} &= \frac{F_{i+1} + C_{i+1} g_i}{B_{i+1} + C_{i+1} w_i} \quad (i=1, \sim n-1), \quad g_1 = \frac{K_1}{B_1} \\ \phi_i &= g_i - w_i \phi_{i+1} \quad (i=1, \sim n-1) \end{aligned} \right\} (4-3)$$

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) の同様なことは

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

なる置換をしてみればわかる。さらにもう 1つの漸化式として

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

$$\left. \begin{aligned} v_{i+1} &= \frac{C_{i+1}}{\alpha_i} v_i + F_i \\ \phi_i &= \frac{\phi_{i+1} + v_i}{\alpha_i} \end{aligned} \right\} \quad (4-6)$$

$$\left. \begin{aligned} \text{これは } \beta_i &= C_i / \alpha_{i-1} \\ z_i + F_i &= v_{i+1} \end{aligned} \right\} \quad (4-7)$$

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出来る。

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

$$A = \begin{pmatrix} B_1 C_1 & \dots & 0 \\ A_2 B_2 & C_2 & \dots & 0 \\ \vdots & & & C_{N-1} \\ 0 & \dots & A_N B_N \end{pmatrix} \quad (4-8)$$

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

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

(A と C が前の (4-3) 式と入れかかっていることは以上のことで同じことである)

Marchuk の漸化式 (4-4) に対応するものは

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

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

KAK コードではこの (4-11) の漸化式を用いている。それは 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対応して各々次のようにとる。

(1) $\phi = 0$ の場合

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

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

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

(3) $\frac{1}{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial \gamma} = -\frac{1}{\gamma}$ (対数微分条件) の場合

$$\left. \beta_1 = \frac{1 + (\Delta \gamma) / (2\gamma)}{1 - (\Delta \gamma) / (2\gamma)} C_1^{(1)} \right\}$$

$$\left. \begin{aligned} z_1 &= 0 \\ \phi_{N-1} &= \left\{ \frac{1 + (\Delta r)/2\sigma}{1 - (\Delta r)/2\sigma} C_N^{(1)} - \beta_N \right\}^T z_N \end{aligned} \right\} \quad (4-14)$$

Δr は r 方向のミスマッチである。

直接法の短所であるところのメモリー数も多く要することは次の説明でも明らかであろう。たとえば $N \times N$ の mesh とすると N を指定するだけでも行列の対称性を考慮して、 $N^2/2$ 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フスキー⁽³⁾、2 次元の場合すばベンコテエンツォフ⁽³⁾により安定性の研究がなされている。

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。一旦その高さ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こむ。ところが吸収断面積の大きい制御棒では拡散近似がなりたたないで、制御棒領域に適当な境界条件を与えることにより解かねばならない。近似境界条件は外挿距離 λ のところで中性子束が 0 になるとして次式で与えられる。

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

ここで δ はホ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。制御棒領域の内角では中性子束 ϕ 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ねばならぬ）L字型、口字型、正字型あるいはそれらの和集合となる。さらに 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わけである。

角 (k, l) が制御棒領域の内角である場合には対数微分条件を与える以上、計算する必要はないから便宜上

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

として Matrix 表示に組み込んでおく。又角 (k, l) が制御棒領域の境界角の場合にも (5-1) を用いて、三角、四角、又は五角階差を求め、その表示の中に組み入れる。ここで $R_{ij} = 0$ といったため 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 $R_{ij} \neq 0$ の角では両辺を 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、直接法と差分方程式の解法に用いる場合の注意として種々の漸化式を適宜に境界条件に応じて使い分ける例を示したのである。

終りに LAK コードで計算した原子炉の臨界度の領域の概

様を才工図に示す。斜線のついた部分が(①と⑤) 制御棒領域と毒物カーテンの部分であるが対数微分条件を用いるところである。こうい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援用について工夫が必要になるのである。

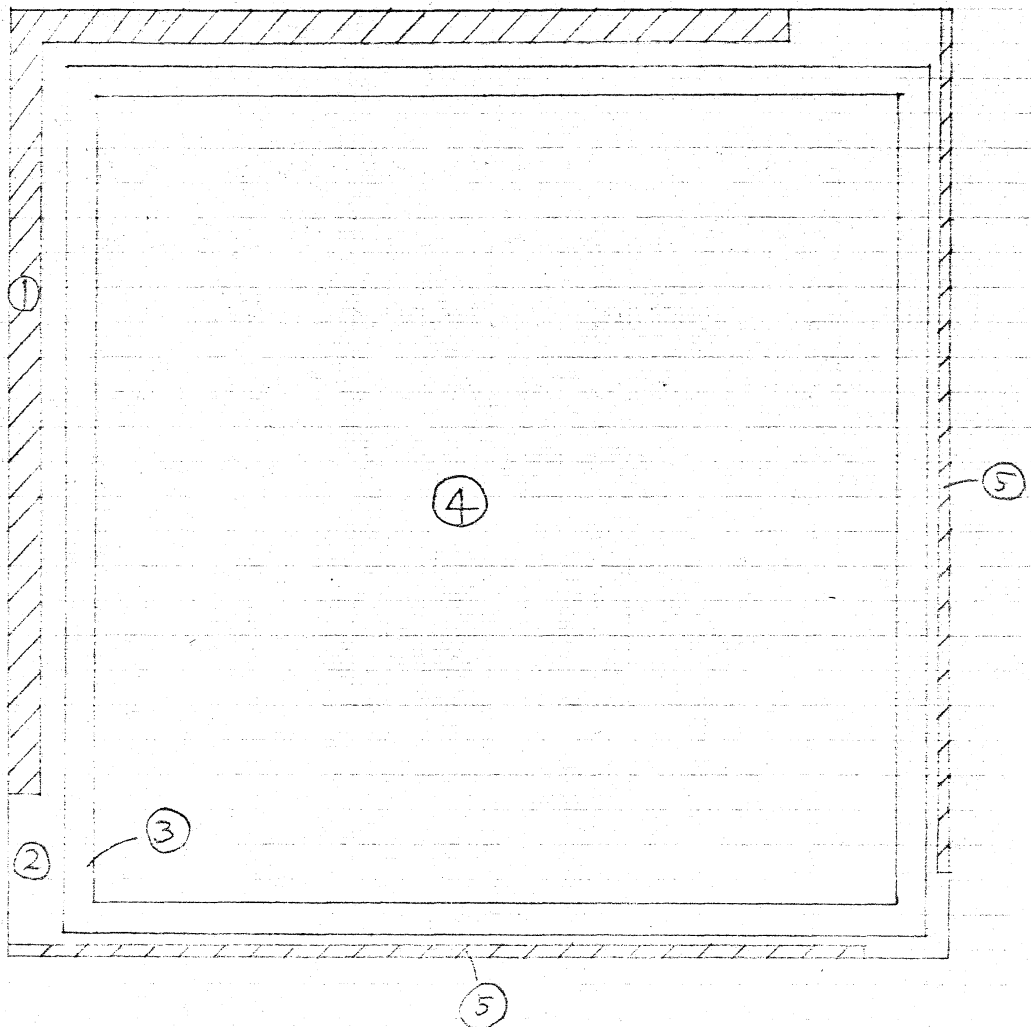
多も おわりに

若者の一人赤沼は現在滞伊中でシンポジウムには出席できなかった。同氏が主に仕事をこなしにかかわらず本報告の執筆には関与できなかったもので、不十分な点が多々あると思う。諸君の叱咤を待つ所である。

(以上)

参考文献

1. 赤沼・久家・安川 : The K4K program for the Numerical Solution of Few-group Neutron Diffusion Equations in 2D imensions. 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. 三菱製作所 : 昭和37年原子力平和利用研究委託費 [拡散コードの収斂加速に関する試験研究] (1964).



JPDR型燃料要素セル

- ① 制御棒領域
- ② 水 Gap
- ③ Channel box
- ④ 燃料 assembly
- ⑤ poison curtain

和国 計算例の幾何図形 (KAKO-1)