Research Paper

A Fast Numerical Solution of the Neutron Diffusion Equation by Tridiagonal Approximate Factorization Parameter

Katsuyoshi Sotani NEC Software Kansai

Abstract. This is a report on a fast numerical simulation for the neutron diffusion equation. The general original version was developed by Oak Ridge National Laboratory, and they adopted the SLOR method which is commonly used in computational physics. In this paper, we have adopted the TFBCG parameter method for obtaining the numerical solution. We investigated the efficiency of inner and outer iteration's programming balance using a high speed technique referred to the improved version together with this numerical solution. As a result, we have achieved simulations which are 3.12 times faster than the conventional method.

KEYWORDS : neutron diffusion equation, computational physics, TFBCG parameter method, iterative solution, fast simulation

三項対角近似因子分解パラメータを用いた中性子拡散方程式の高速数値解法

曽谷勝義

NECソフトウェア関西

要約

中性子拡散方程式の高速数値シミュレーションについて報告する。一般オリジナル版はオー クリッジ国立研究所で開発され、計算物理に良く使われる SLOR 法を採用している。この論文 では数値解法として TFBCG パラメータ法を採用した。この数値解法による改良版と名付けた 高速化技術と共に、内側反復回数と外側反復回数のバランスの効率性について研究を行った。 その結果として、通常のシミュレーションより 3.12 倍 速く解が得られた。

1.はじめに

原子力コードを構成する偏微分方程式は差分法で離散近似すると、連立一次方程式となり大規 模な規則疎行列となる。大規模な規則疎行列は直接法より反復法の方が実用的である。計算物 理として良く用いられて来た方法は、SOR 法と呼ばれる反復解法である[17]。この方法は加速 パラメータをうまく選ぶ事で収束が速く、広く用いられている[11]。この SOR 法には幾つかの修正 版となる解法があり、SLOR 法や Odd-even SOR 法その他がある。一方、共役勾配法(CG 法) は、n次元空間を考え一次独立な、クトルを定義し、ある係数を求め、空間内を直交性を保って探 索する事により、n次元の行列は理論的にはn回の反復で収束する事が出来る解法である。最 近では反復計算の低減と安定化から、前処理として元の行列を適切に変える事により、いろい ろな方法が考え出されている。ICCG 法、ILUBCG 法その他である[10]。

原子力コードの中で従来から使用されてきた中性子拡散方程式シミュレーションコードは、SLOR 法を用 いて加速パラメータは最良にして、適当な反復数による実用的精度で、効率良く計算を終了させる 形をとっている。ところでこの中性子拡散方程式シミュレーションコードの高速化を試みた論文は他にも 見受けられる。特に参考文献[4]においての改良方法は、一般オリジナル版の SLOR 法をベクトル化向 きとして一時代注目を浴びた Odd-even SOR 法に変更し、それによりプロヴラムの高速化を実施 した事例が報告されている。この方法では、連立一次方程式のソルバ部分のベクトル化効率を如何に 上げるかに主眼を置き、プログジング技術の面から論じられている。当コードの改良策は数値解法 の変更だけではなく、プロゲラム全体のパランスを追求すると共に、高速数値解法の実践を行った点 が特徴である。つまり本稿では、中性子拡散方程式シミュレーションコードを構成する全体の計算方法と して、内側反復と外側反復の関係に着目し、これを数値シミュレーションにより最適な形を目指した。 当シミュレーションコードの数式モデルは非対称行列である。コードの主要計算部分は元の SLOR 法に対して、 加速パラメータを伴う三項対角近似因子分解法(TF 法)としての前処理を施し、双対共役勾配法 (BCG 法)を計算の基礎反復とし、同時に中性子拡散方程式の中に相対残差/ILIを定義して計算 を行った。これによりハードウエアが同一条件のもとで、計算物理に広く使われてきた従来の方法(一 般オリジナル版)に比べて、実用上の許容範囲である現状の水準において 3.12 倍の高速性が得られ た点を報告する。

2. 中性子拡散方程式の概要

原子炉の設計では、核分裂連鎖反応が定常的に維持される事が第一条件であり、燃料の組成 を変更したり、原子炉の大きさを調整する等の計算を行う。この時、原子炉理論の数値シミュレーシ ョンとして中性子拡散方程式を用いる。これは楕円形偏微分方程式の固有値問題を数値計算によ り解く事である。ここでは2次元形状、2群問題を対象とする。

2.1 中性子拡散方程式の表現

(2.1)	Β Φ	=	$\frac{1}{k_e}$ F Φ
	В	:	中性子輸送散乱吸収係数
	Φ	:	中性子束
	F	:	中性子源係数
	k _e	:	実効増倍率

各群の中性子の空間移動を拡散法則によって扱うものが多群拡散理論であり、中性子が核分裂 連鎖反応のみによって供給されている場合の定常的な中性子の釣り合いを表す方程式は、多群 拡散理論として式(2.1)で表現される。

2.2 着目群における表現形式

(2.2)
$$-D^{g}(\mathbf{r})\nabla^{2}\Phi^{g}(\mathbf{r}) + \left\{ \sum_{T}^{g}(\mathbf{r})\Phi^{g}(\mathbf{r}) - \sum_{g < g} \sum_{r}^{g \leftarrow g}(\mathbf{r})\Phi^{g}(\mathbf{r}) \right\}$$

 $= \frac{1}{k_{e}}\chi^{g}\sum_{g=1}^{G}\nu\sum_{f}^{g}(\mathbf{r})\Phi^{g}(\mathbf{r})$
但し、 $\sum_{T}^{g}(\mathbf{r}) = \sum_{a}^{g}(\mathbf{r}) + \sum_{r}\sum_{r}^{g \leftarrow g}(\mathbf{r}) + D^{g}B^{2}(\mathbf{r})$
 $g :$ 群 No $(T$ 群;高速中性子、2群;熱中性子)

$$D^g$$
 :
 g 群の拡散係数

 ∇^2
 :
 ラプラス 演算子

 Φ^g
 :
 g 群の中性子束

 \sum_{r}^{g}
 :
 g 群の核分裂断面積

 \sum_{a}^{g}
 :
 g 群の吸収断面積

 $\sum_{r}^{g' \leftarrow g}$
 :
 g 群から g' 群への散乱断面積 (g' > g の時)

 ν
 :
 1回の核分裂により放出される中性子の平均個数

 χ^g
 :
 分裂中性子スペクトル , G 群数迄($\sum_{g=1}^{G} \chi^g = 1$)

 B^2
 :
 幾何学的(縦方向)バックリング

式(2.2)は特定の k_e に対して $\Phi(\mathbf{r})=0$ 以外の解を持つ。この値が中性子保存則の固有値である。

2.3 中性子拡散方程式における固有値問題の解法

式(2.1)から \mathbf{B}^{-1} F $\Phi = \mathbf{k}_{e} \Phi$ と表現することにより、この式は \mathbf{B}^{-1} F の固有値、 固有ベクトルを求める固有値問題として表現される。

式(2.2)は差分近似により離散化され、その最大固有値を求める。固有値問題の反復の途中計算 値を Ψ で表現すると、最大固有値は次式のベキ乗法によって求められる。

(2.3)
$$\Psi^{(t+1)} = \mathbf{B}^{-1} \mathbf{F} \Phi^{(t)}$$

(2.4)
$$k_e^{(t+1)} = \frac{ \begin{bmatrix} \mathbf{F} & \Psi^{(t+1)} \end{bmatrix} }{ \begin{bmatrix} \mathbf{F} & \Phi^{(t)} \end{bmatrix} }$$

(2.5)
$$\Phi^{(t+1)} = \frac{1}{k_{a}^{(t+1)}} \Psi^{(t+1)}$$

ここで、式(2.4)の例えば 〔 F $\Phi^{(t)}$ 〕 はベクトル F $\Phi^{(t)}$ の総和を表す。式(2.3)を解 く際に、 F $\Phi^{(t)}$ の計算値を S^(t) で表し、これに $\Phi^{(0)} = 1$ を与え、

(2.6)
$$S^{(t)} = F \Phi^{(t)}$$

(2.7) **B**
$$\Psi^{(t+1)} = \mathbf{S}^{(t)}$$

として、式(2.6),(2.7)の反復から $\Psi^{(t+1)}$ を求める。これらは式(2.2)を差分近似することによ り第一群から順に第 G 群迄計算される。 各群の中性子束を ϕ^{g} で表現すれば、 $\phi^{g}_{(t+1)}$ を 繰り返し法で中性子束の群の各値を求める事を内側反復 ' Inner Iteration 'と呼ぶ。これ に対して、式(2.3),(2.4),(2.5)の反復で $\Phi^{(1)}, \Phi^{(2)}, \dots, \Phi^{(t)}$ と繰り返して最大固有値を求める ことを外側反復 ' Outer Iteration 'と呼ぶ。

以上の計算で、最大固有値 k_e がある値に収束するまで、全体(外側反復の外部)を繰り返し、原子炉の組成等による臨界度を求めている。

3.対象シミュレーションコード

中性子拡散方程式シミュレーションコード(SHARP-XY)は、米国原子力研究機関(オークリッジ国立研究所) で研究開発され実用化されている。このコードの特徴は中性子拡散の構造を内側反復(中性子束 の計算)と外側反復(中性子源の計算)に分けており、全体で臨界度を求めている。連立一次 方程式の解法では SLOR 法を用いており、ある適当な反復数により計算を打ち切り終了させて いる点にある。

3.1 対象シミュレーションコード流れ



3.2 リリース

ー般オリジナル版の開発着手をしたものは、実用的精度(許容解)で数値解法を進めており、そ こでリリースされたものはベクトル化版になっている。

3.3 中性子拡散方程式シミュレーションコード従来(一般オリジナル版)の解法の所見

一般オリジナル版はシミュレーションコードを内側反復と外側反復に分け、連立一次方程式を反復解法 として、加速緩和法系の SLOR 法を用いており、その時の加速パラメータを最良にして、適当な反 復回数による実用的精度で、効率良く計算を終了させる形になっている。これは連立一次方程 式を求める内側反復において、少しでも速く収束させる為、行方向、列方向1組による中性子 束 ϕ の計算を、ある一定値に達した所で強制的に収束させ、必要な内側(中性子束)の計算精度 は外側反復で補う形をとっている。この時外側反復収束条件としての判定を次に定義している。 $\phi_i^{(t)}$ は中性子束 $\Phi^{(t)}$ の要素とし、 ε_1 , ε_2 は各収束判定 l° ラメータ とすると、外側反復 収束条件は次の形で与える[6]。

(3.1) $\left| \frac{\phi_{i}^{(t+1)} - \phi_{i}^{(t)}}{\phi_{i}^{(t+1)}} \right| < \varepsilon_{1}$, $\left| \frac{k_{e}^{(t+1)} - k_{e}^{(t)}}{k_{e}^{(t+1)}} \right| < \varepsilon_{2}$

ここで判定の対象としている ϕ は、内側反復で計算させている全ての ϕ ではなく、計算対象領域中で燃料棒の存在する部分にのみ限定されている。このコードを構成しているモデルの性格上、式(3.1)に見る外側反復における収束パラメータ ' $\mathcal{E}_{k_+(k=1,2)}$ 'だけでコントロールすると、性能と精度の関係でどうしても限界がある。そこで外側(中性子源)の計算力向上を目指し、この収束の加速と計算の効率化推進の為、中性子源外挿法と呼ばれる外挿パラメータ(チェビシェフ補間法)[8]を導入する事により、繰り返しを少なくして計算を加速させる事を狙っている。従来のこうした外側反復の動きを重点的に捉え、反復計算の加速だけに依存した考え方は、確かに理論上は計算の効率性を追求しており、かなりの反復計算が出来る形を意味している。しかしこの方法を用いると、実際(数値計算結果)には計算解が許容解への近傍付近迄は比較的接近が容易であるが、ある程度精度良い解を求めたい時、つまり高精度解に達するには長い時間がかかってしまう問題点がある。

3.4 改良版に向けての検討

- (1) 一般オリジナル版の中性子拡散方程式シミュレーションコードは、多群拡散理論を用いて作成されている。 中性子拡散計算を内側反復と外側反復で構成し、実用的な計算精度である系の固有値を求め る臨界計算をする事にある。全体の臨界計算の中で、中性子拡散構造の内側反復と外側反復 の関係に関して、内側反復は収束の効率化と計算の高速化、外側反復は計算の高精度化を目 指して開発されている。この時、内側反復を少なくする方法で収束の効率化を追求し、これ に外側反復の繰り返しを、中性子源外挿法を用いて少しでも高速化、高精度化を目指して計 算させている。(Fig.1.参照)
- (2) 中性子拡散方程式シミュレーションコードの構造を検討すると、内側反復数と外側反復数が反比例の 形をとっている。但し、内側反復、外側反復による空間上の各点の中性子束、中性子源の計 算を行う上で、ある一定の計算精度を保って解を得る必要がある為、いずれも最小限ある回 数以上の反復数を必要としている。(Fig.2.参照、ここで Ps 点は外側反復の最小限必要回数)
- (3) 一般利ジナル版において、実用的な計算精度を得る為の打ち切り値と内側反復の反復数は、計算時間と解の精度(許容解)の妥協点を求めているものと考えられる。一般利ジナル版作成者は、経験上内側反復をある適当な打ち切り値で、適切な反復数を得ていると考え、外側反復を増倍率等を含めた外挿パ ラメータの導入により高精度計算の実現を目指している。(Fig.2.参照、そこで最適点として Po 点を選択している。)内側反復における中性子項が外側反復と共に更新されるので、外側反復の少ないうちは内側反復の収束の速さを意識し、その効率性だけを追求する方法をとるのは、あまり得策ではない事が推測出来る。



Fig.2. Relation between Inner and Outer Iterations. (Approximation)

4.数値計算の高速化技術における改良方法

この節では一般オリジナル版に対して、数値計算の高速化技術における改良方法を述べる。

4.1 一般オリジナル版に用いられた SLOR 法

1950 年 Young と Frankel はが ウスザ イデ イル法に加速パラメータを加味し漸近収束率を高め、高速 収束を目指した SOR 法を提唱した[14]。この解法はその後いろいろな分野に対する研究対象と して改良され、修正版として SLOR 法、SSOR 法、Point Block SOR 法、2-Line SOR 法、 Odd-EvenSOR 法他があり全体として SOR 法系を構成している。SOR 法系は計算物理の分野 に見受けられ、これはマトリックスが対称、非対称にかかわらず適用できる長所があり、更に条件数 が大きくても安定的に比較的高速性を保って確実に収束する方法である。

4.2 改良版に採用した解法の概要

1952 年 Hestenes と Stiefel は一次独立なベクトルを定義し、空間内を直交性を保って探索する 考え方として共役勾配法(CG 法)を提唱した[18]。この解法は、その後各種の前処理 (Preconditioning)を施す事で計算の効率化を目指した CG 法系として発展し、現在は幾つもの 種類が存在している[16]。これは与えられたマトリックスに対して、適切な前処理により少しでも密 集固有値形に導き、条件数を改良するアプローチ方法である。当論文では従来の TF 法に対して、 複数の加速パラメータを加味した TF パラメータ法(三項対角近似因子分解パラメータ法)を提案し、その基礎 反復法として非対称行列にも対応可能な BCG 法(双対共役勾配法)を選定する。改良版としての TFBCG パラメータ法は、非対称大規模疎行列の解法に効果を発揮する事が期待出来る。

4.2.1 前処理付き反復法を持つ三項対角近似因子分解法(TF法)

(Tridiagonal Approximate Factorization Method)

規則、疎な非対称行列として、解くべきn元連立一次方程式を次に定義する。

(4.1) A x = b

三項対角近似因子分解の計算における考え方について、参考文献[3]に詳細が記載されているが、 後述の提案への理解を促すためここで簡単に紹介したい。 前処理として一般に使用されている不完全LU分解法[10]では、Aの下三角、上三角とそれぞれ同じ非零要素パターンを持つ下三角行列Lと上三角行列Uの年用いてAの近似行列

$$\mathbf{(4.2)} \qquad \mathbf{M}_{\mathrm{ILU}} = \mathbf{L}\mathbf{U}$$

の非零要素部分が A のそれと等しくなる様に構成する。

ここで LU の前進消去を $\mathbf{v} = \mathbf{L}^{-1}\mathbf{g}$ で表す。この計算による考えでは、計算ノードが斜め方 向並列計算として進む事が分かっている。

4.2.2 三項対角近似因子分解法の基本形式

中性子拡散方程式からなる数式モデルは、2次元5点差分係数行列の形で構成される。この時、行列Aに対してその対角行列をD、×方向の微分に関する副対角要素から構成される行列を A_x 、同じくy方向の行列を A_y として分離する。 $A = D + A_x + A_y$ で表現出来る。 この時の前処理行列 M_{TE} は次式で定義される。

(4.3) $\mathbf{M}_{\text{TF}} = (\mathbf{D} + \mathbf{A}_{x}) \mathbf{D}^{-1} (\mathbf{D} + \mathbf{A}_{y})$

式(4.3)の場合の逆行列計算は、計算上各因子毎に行い、例えば×方向因子は、

(4.4) $(D + A_x)v = g$

の形をとり、これは×方向の連立した n_y 本の独立した n_x 元の連立一次方程式となる。 TF 前処理法に対する計算の並列性は、計算 /-ト が×方向並列計算として進む。つまり TF 法 は[^] かl計算機の各計算/-ト 間を効率よく使用出来る方法である。 (Fig.3.参照)



Fig.3. Parallelism for TF Preconditioner.

4.2.3 複数パラメータの提案と工夫

当論文における今回の提案は、式(4.3)に対する従来の TF 法に 2 つのパ ラメータ ω_1 , ω_2 を 導入する事により、加速パ ラメータとして収束を高める工夫をした点にある。ここに、従来方法で は解法の拡張としての単一パ ラメータの考え方は存在していたが、数値シミュレーション実験は行っていな かった[3]。 いま \mathbf{A}_x には ω_1 を \mathbf{A}_y には ω_2 を導入する。 ここで、TF 加速パ ラメータ付き前処理行列を \mathbf{M}_{TEO} として、

(4.5)
$$\mathbf{M}_{\text{TFO}} = (\mathbf{D} + \boldsymbol{\omega}_1 \mathbf{A}_x) \mathbf{D}^{-1} (\mathbf{D} + \boldsymbol{\omega}_2 \mathbf{A}_y)$$

を定義する。

4.2.4 BCG 法(Biconjugate Gradient Method)概要

BCG 法は式(4.1)に対して、双対な方程式 $A^T x^* = b^*$ を組み合わせた 2 n 元連立一次方程 式を定義して計算する。 $2n \times 2n$ 行列と 2n 次ベクトル

$$\widetilde{\mathbf{A}} = \begin{bmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{A}^{\mathrm{T}} \end{bmatrix}$$
, $\widetilde{\mathbf{x}} = \begin{bmatrix} \mathbf{x} \\ \mathbf{x}^{*} \end{bmatrix}$, $\widetilde{\mathbf{b}} = \begin{bmatrix} \mathbf{b} \\ \mathbf{b}^{*} \end{bmatrix}$ として、次の方程式を定義する。

(4.6)

) $\widetilde{A} \ \widetilde{x} = \widetilde{b}$ ここで $H = \begin{bmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{bmatrix}$ を用いて、次の双一次形式を定義する。 $\langle \widetilde{x}, \widetilde{y} \rangle_{H} \equiv (\widetilde{x}, H\widetilde{y}) = (H\widetilde{x}, \widetilde{y})$, ここで H は正定値ではない。 H \widetilde{A} は対称となる為、この場合 \widetilde{A} は H に関して自己随伴

 $<\!\!\widetilde{x},\widetilde{A}\widetilde{y}\!\!>_{_{H}} = <\!\!\widetilde{A}\widetilde{x},\widetilde{y}\!\!>_{_{H}} \quad \texttt{TTAS}.$

従って関数
$$f(\tilde{\mathbf{x}}) = \frac{1}{2} < \tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{A}}\tilde{\mathbf{x}} >_{\mathbf{H}} - < \tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{b}} >_{\mathbf{H}}$$
 を停留にする $\tilde{\mathbf{x}}$ が式(4.6)の解となる[12]。

5.サンプル問題

本章では、今回の数値実験で採用したサンプル問題について述べる。

5.1 数値シミュレーションの実験条件

対象データ

炉タイプ	:	沸騰水型軽水炉(BWR)
幾何形状	:	円柱(R - Z)体系
エネルギー群数	:	2
領域数	:	3(燃料体領域、減速材領域、反射体領域)
定数	:	中性子束 Φ で平均化されて求められる [1]。
メッシュサイス゛	:	155 × 155
数式モデル	:	非対称行列 、 5 点差分形式

座標

式(2.2)の 2 次元問題として、座標系(X - Y)又は(R - Z)を代表して(X - Z)で 表現し、 $0 \le X \le R_x$, $0 \le Z \le R_z$ とする。

境界条件

$$\frac{\partial}{\partial X} \phi(X,Z)|_{x=0} = 0, \phi(R_x,Z) = 0, \phi(X,0) = \phi(X,R_z) = 0$$

計算機環境

5.2 計算対象

原子炉の内部は燃料体領域、減速材領域、反射体領域等幾つかの領域に分けることが出来る。 式(2.2)で表現出来る係数や断面積は、それらの領域毎にある定数で与えられる。原子炉を第4 象限で 1/4 の形として各長方形の組み合わせで近似させる場合、領域の境界(内部境界)では 中性子束とその流れも連続である。2次元問題、境界条件 ϕ の変数を r で表現する。ここで $\phi(\mathbf{r})$,及び $-D(\mathbf{r})\nabla\phi(\mathbf{r})$ は連続であるとする。また $\phi(\mathbf{r})$ はいたる所で有限な値を持ち、 各領域の内部では2階偏微分可能であるとする。

6.数値シミュレーション

この章では第4章 4.2節 改良版に採用した解法の概要の具体的な説明として TFBCG 法における最適なパラメータを決め、改良版へ向けてのプ 弛みと計算結果迄を順次説明する。

6.1 TFBCG パラメータ法による数値シミュレーション

前処理法としては三項対角近似因子分解パラメータ法を使用し、基礎反復には非対称問題に可能 な BCG 法を適用する。双対共役勾配法を用いている為、行列 A が非対称であっても解が得 られ汎用性に富み、安定性の高い反復解法である。ここで $\tilde{\mathbf{r}}$ を式(4.6)から導かれる残差とし て、相対残差/IMを $n_r = \tilde{\mathbf{r}}_2 / \tilde{\mathbf{b}}_2$ で定義して打ち切りを行う。各計算ステップ(BCG 法)で得られる1つ前の計算と今回の計算との差を修正量 e_{ij} とする。 いま $Nr = \sum |e_{ij}|$ と おく。 A の最大固有値を λ 、加速パラメータを $\omega_{k,(k=1,2)}$ 、この時、反復による Nr の減少比 率を $\mu_{k,(k=1,2)}$ で近似する。パラメータ法を活かす為に、最適な加速係数の選定を行う上で、David Young の理論[19]から次式を引用する。

(6.1) $\mu_{k} = (\frac{1}{2}\omega_{k}\lambda + \frac{1}{2})\omega_{k}^{2}\lambda^{2} - 4(\omega_{k} - 1))^{2} , \quad (k = 1, 2)$

式(6.1)の $\mu_{k,(k=1,2)}$ は積型であり、2つの値は近くて安定であるから、ここでは幾何平均

 $\mu = \sqrt{\mu_1 \mu_2}$ を定義し、この μ の min を数値実験により求める。

〔(注)今回は数値シミュレーションを行う上で幾つかのケースを仮定した。減少比率の効果は影響が十 分に大きくなく一定と考え、これに対応したパラメータの変化を組み合わせる考え方。一方で減少 比率は個別に行いそれぞれに対して、パラメータを組み合わせる等の考え方がある。今回は前者の パターンの上で、数値シミュレーションを実行した。〕

式(4.3)では一定の刻み幅で収束して行くが、式(4.5)の加速パラメータを追加する事により、加速性が幾分認められる。 (Fig.4.参照)

A の非対称性がやや大きい場合の、今回の中性子拡散方程式数式 f ルでは、 y_1 レ- y_2 ン結果 ω_1 = 1.35 近く、 ω_2 = 1.20 近くが適していた。 (Table 1., Fig.5.参照)

この複数パラメータの方式では、安定収束には $\omega_1 \ge \omega_2$ が必要とされることも判明した。

〔(注)加速パラメータは今回のモデルで有効であり、安定収束が不変的なものではなく、状況によって、変化させる必要があると考えられる[15]。〕

TF 複数パラメータω 組み合わせ状況と収束過程 (1部サンプル例) (Fig.4.参照) (ω_1 < ω_2 では収束せず。) $\omega_1 \ge \omega_2$ で収束。 $\omega_1=\omega_2$ (=1.3) $\omega_1 = 1.4$; $\omega_2 = 1.1$, $\omega_1 = 1.5$; $\omega_2 = 1.2$ $\omega_1 = 1.6$; $\omega_2 = 1.3$ $\omega_1 = 1.8$; $\omega_2 = 1.5$ $\omega_1 = 1.7$; $\omega_2 = 1.4$, $\omega_1 = 1.9$; $\omega_2 = 1.6$ パ ラメータ変動による収束過程における極値 ω_2 を固定、 ω_1 を変動させる。 (Fig.5.参照) $\omega_2 = 1.0$; $\omega_1 = 1.0 \sim 2.0$, $\omega_2 = 1.1$; $\omega_1 = 1.1 \sim 2.0$ $\omega_2 = 1.3$; $\omega_1 = 1.3 \sim 2.0$ $\omega_2 = 1.2$; $\omega_1 = 1.2 \sim 2.0$, $\omega_2 = 1.4$; $\omega_1 = 1.4 \sim 2.0$, $\omega_2 = 1.5$; $\omega_1 = 1.5 \sim 2.0$ $\omega_2 = 1.6$; $\omega_1 = 1.6 \sim 2.0$ ここで数値シミュレーション結果(一部)を示す。

Table 1. Numerical Simulation.

Variable	Parameter						
2=1.00		2=1.10		2=1.20		2=1.30	
1	μ	1	μ	1	μ	1	μ
1.00	0.76291	1.10	0.66018	1.20	0.48023	1.30	0.37505
1.05	0.75034	1.15	0.58137	1.25	0.39762	1.35	0.34002
1.10	0.70372	1.20	0.51926	1.30	0.31860	1.40	0.31128
1.15	0.62637	1.25	0.42960	1.35	0.29099	1.45	0.30014
1.20	0.55914	1.30	0.38174	1.40	0.30125	1.50	0.30189
1.25	0.48746	1.35	0.36297	1.45	0.36997	1.55	0.37745
1.30	0.44319	1.40	0.40103	1.50	0.41168	1.60	0.38169
1.35	0.42113	1.45	0.43671	1.55	0.45816	1.65	0.42293
1.40	0.45207	1.50	0.49352	1.60	0.50297	1.70	0.46315
1.45	0.50914	1.55	0.50895	1.65	0.56039	1.75	0.50114
1.50	0.53976	1.60	0.57830	1.70	0.58039	1.80	0.51988
1.55	0.57841	1.65	0.61139	1.75	0.63487	1.85	0.54870
1.60	0.60393	1.70	0.63023	1.80	0.64776	1.90	0.59263

TF 複数パラメータ収束過程 最短収束の組み合わせ例を示す。



800

6.2 改良版へのプロセス

この節では改良版への考え方について説明する。

〔(注) 当論文全体の説明において、Table 3. における Comparative Table of Executive Time.

890 C

860

830

TF 複数パラメータ数値シミュレーション

1, 2 パラメータ変動による µ の極値を示す。





Fig.8. Comparative Illustration.及び Table 4.の Comparative Table of Computational Results. で求めている高精度解以外において、各ゲラフ上で表現されている値は、一般利ジ 11版 との比較対照の上で許容解の範囲を計算対象としている。〕

〔数値シミュレーション実施による検討〕

(1) 数値シミュレーションを行う上で内側反復と外側反復の関係を重視したい。一般オリジナル版より内側 反復の少ない点から内側反復を徐々に増やして行くと、それに応じて外側反復は少なくなる。 但し、少なくしても外側反復のある限界点までが最小限必要である。内側反復と外側反復の 関係から、内側反復の反復数を徐々に増加させる事(内側反復の打ち切り値を徐々に小さく、 外側反復を徐々に大きく)により数値シミュレーションを行い、全体の計算時間の変化を求めた。そ れによると、ある一定の所迄は計算時間が緩やかに減少して最小になり、その後幾分急に計 算時間が増大した。(Table 2., Fig.6.参照)

(但し、この Table 2.による計算時間は、TFBCG パラメータ法に改良して全体の臨界計算も行って測定済み。) Table 2.では Fig.2.より内側反復数の有効回数(第3章 3.4節(2)項目による)は次式の範囲となる。内側反復数(JT)の有効回数 4 JT 25、Fig.6.での計算時間最小点として求めた内側反復数の P i 点は Fig.2.の内側反復数 Pq 点の位置に該当する。

(2)数値シミュレーション実行中に、与えられた組成に対して実効増倍率の変化による物理量、制御材の数値的変化に着目した。改良版として内側反復における収束性の影響を考慮すれば、従来の外挿パラメータの高速性だけに頼る方法より結果的に改良版は高速になり、外側反復数も結果として少なくなり、全体として収束が効率的になって行く事が分かる。つまり数値シミュレーション結果として、外側反復よりも内側反復の計算をやや重視する考え方の計算方法が良いと判断した。一般オリジナル版と改良版における解への接近方法の概念図を表現したい。(Fig.7.参照、外側反復数をITで表す。)

〔改良版の要点〕

- (3) 一般オリジナル版は内側反復における連立一次方程式の解法に SLOR 法を用いて、一般的な 打ち切り計算による計算精度になっている。改良版では 式(4.1)の許容解を $\bar{\mathbf{x}}$ とし、残差 を $\mathbf{r} = \mathbf{b} - \mathbf{A} \, \bar{\mathbf{x}}$ とする事で相対残差/IAを n_r で表す。 ここで内側反復の相対残差/IA $n_r = \mathbf{r}_2 / \mathbf{b}_2$ を定義し、そのときの打ち切り誤差を求める事にある。(但し、 ここの $\bar{\mathbf{x}}$ は BCG 法を使う為、実際には 式(4.6)の $\tilde{\mathbf{x}}$ の許容解である。) これにより数 式行 ILの可変にかかわらず収束が一様で、計算の安定性を向上させる事が出来た。そして 内側反復の解の高精度化により、全体として外側反復の反復数を減少させる事が出来た。
- (4) この時の改良版における内側反復にみる連立一次方程式の解法は、高速性を発揮する TF BCG パラメータ法を用いた。全体として一般オリジナル版に比べて改良版は高精度解へ急速に収束 し、より少ない時間で高精度な解を得る出来た。(Table 3., Fig.8.参照) この時、一般オリジナ ル版と改良版との各計算における最大誤差は 0.1%以内であった。(改良したベクトル版において、 固有値問題計算比率(CPU)は全体の約 55%)

〔結果〕

(5)この方法を今回採り上げた2次元2群サンプル問題に適用した結果、ハードウエアが同一条件のもと

で、従来の方法に比べて 3.12 倍の高速性 (相対残差/ $M_r = 10^{-4}$) を実現する事が出来た。 これを更に計算精度を高めた場合 (相対残差/ $M_r = 10^{-6}$)の高精度解においては、従来 の方法に比べて 4.13 倍の高速性が得られた。(Fig.8.参照)

JT	CPU time	JT	CPU time	JT	CPU time
num	ber sec	num	ber sec	numb	oer sec
3	42.778	11	36.833	19	35.124
4	41.694	12	36.431	20	35.205
5	40.691	13	36.056	21	35.394
6	39.770	14	35.732	22	35.698
7	38.963	15	35.454	23	36.163
8	38.324	16	35.265	24	36.821
9	37.776	17	35.152	25	37.642
10	37.279	18	35.101	26	38.594
				27	40.695

Table 2. Computational Time for the Number of Inner Iterations.





< Steps for approaching to approximate and exact solutions >



Fig.7. Conceptual Illustration.

Table 3. Comparative Table of Executive Time.

	Immoved	General original	< Comparison of Execution >	〇 :Initial solution ☆ :General original version
	version (sec)	version (sec)		st : Improved version
1 0-1	20.327	23.538	Larger General original version	
10-2	27.249	41.799	- 2 * *	
10-3	32.681	77.976		
10-4	35.101	109.612		
10-5	36.424	131.417		Range of feasi-
10-6	37.919	156.801		ble solution
10-7	43.359	198.152	- 6 Improved 🦎	£¥·
10-8	57.684	281.784	version , *	Range of accurate
10-9	68.783	358.229	- 8	solution
1 0-10	87.074	492.108		1
L			P ₁ , P ₂ , P ₁ F	2 CPU time
			P ₁ ': 35.1sec P ₂ ': 37.9sec P ₁ : 109.6	sec P ₂ :156.8sec

Fig.8. Comparative Illustration.

〔補足説明〕

Fig.7.においては 2 つの解法の概念図を示している。一般オリジナル版は内側反復よりも外側反 復からの影響力を重視した解法であり、SLOR 法を用いている所から、特徴としてその解法ステ ップの進み方は、そのイタレーションを行う毎に少しづつ収束解に接近する事を表現している。改良版 は内側反復からの影響力を重視した解法であり、外側反復数は少なく且つ TFBCG パラメータ法を 用いた解法ステップの進み方は、1回づつの計算(イタレーション)が高速に収束解へ接近する事を表現し ている。

Fig.8.において P_1 点は一般オジナル版の打ち切り 10^{-4} での測定値、 P_2 点は一般オジナル版の打ち切り 10^{-6} での測定値、 $P_1^{'}$ 点は改良版の打ち切り 10^{-4} での測定値、 $P_2^{'}$ 点は改良版 の打ち切り 10^{-6} での測定値である。

6.3 計算結果

改良後の各計算水準と計算結果の比較表を示す。

〔\[1-N° -1)L° 1-9 SX4/1C 測定〕(倍精度)

- 現状の水準 : 中性子拡散方程式の解として実用上の許容範囲。 [許容解] ここでは 10⁻⁴ レベルの収束と設定。
- 高精度解の水準: 実用上の許容範囲に比べて真の解により近く、細かな物理現象が解明 可能な範囲。 ここでは 10⁻⁶ レベルの収束と設定。

Table 4.で Tuning of grammar for supercomputer はスーパーコンピュータ向けに適した文法に書 き換えた事を意味している。Vectorized ratio はスーパーコンピュータ用のベクトル化比率である。

Present level (Feasible solution)			Accurate solution's level		
Version	Time	Actually measured ratio	Version	Time	Actually measured ratio
General original version (Tuning of grammar for supercomputer) Vectorized ratio 89% p ₁ point	109.6sec		General original version (Tuning of grammar for supercomputer) Vectorized ratio 89% p ₂ point	156.8sec	
Improved version Changing algorithm (Tuning of grammar for supercomputer) Vectorized ratio 91% p ₁ point	35.1sec	/ 3.12times	Improved version Changing algorithm (Tuning of grammar for supercomputer) Vectorized ratio 91% p'_ point	37.9sec	/ 4.13times

Table 4. Comparative Table of Computational Results.

7.まとめ

中性子拡散方程式の固有値問題を解く事に関して、一般オリジナル版における数値計算では、適 当な反復数による実用的精度を用いて効率よく計算を終了させる等の教科書的な基本方法であ るが、中性子束の計算、中性子源の計算とも計算物理の解法としては、確実な考え方であり、 且つ合理的な解法で、本来優れたシミュレーションコードであると言える。これを更に改良しようと試み るにあたり、このシミュレーションコードの全体構成を考えてみた。今回対象とした2群拡散問題の解法 において、計算途中で中性子項の計算ステップの動きや、物理量、制御材の変化に着目した。更に コードを構成する内側反復と外側反復の関連に気付いた。合わせて、従来から原子力コードに広く 用いられている SLOR 法に対して、幾つもの数値解法を研究して行く中で、更に高速性をもた らすであろうと考えられる三項対角近似因子分解法の加速パジータを考慮した最適な前処理法と、 この時の基礎反復として非対称行列に適した双対共役勾配法を用いることにより、安定した高 速数値解法を実現する事であった。また収束の判定基準として、収束の一様性をもたらす相対 残差川ムを定義している。 高速数値解法に加えて、シミュレーションコード全体の最適な構成を意識して 内側外側の反復方法を合わせて考慮している改良版のこの計算方法では、幾つもの数値シミュレーシ 3ン結果、計算精度を高めたり、あるいはメッシュの細分化、及び多群拡散理論への適用等により、 問題が複雑になればなる程その差(一般オリジナル版と今回の改良版の計算時間比)が更に大きく なって行く傾向が見られた。今回の研究における成果として、この改良版に見る如く、最適な 数値シミュレーションとは数値解法の種類の選択だけではなく、計算過程におけるプログラム全体のバランス の効率化を追求して行く事も重要である事が証明出来た。

参考文献

- [1] 安成弘,原子力工学シリース 10,原子炉の理論と設計,東京大学出版会,(1980),pp.132-143.
- [2] 土肥俊,原田紀夫,非対称系のためのスーパーコン向き前処理法, Advances in Numerical Method for Large Sparse Sets of Linear Equations,3,KeioUniversity,(1987),pp.1-8.
- [3] 土肥俊,原田紀夫,三項対角近似因子分解による前処理共役勾配法,スーパーコン向き非対称 連立一次方程式解法,航空宇宙技術研究所特別資料7号1-18,(1987),pp.143-149.
- [4] 原田裕夫,石黒美佐子,3次元中性子拡散コート CITATION の ^ かれん,日本原子力学会誌, Vol.27,No.11,(1985),pp.1047-1055.
- [5] H.A. Van Der Vorst, BICGSTAB: A fast and smoothly converging variant of Bi-CG for the solution of non-symmetric linear systems, SIAM J. Sci. Comput., 13 (1992), pp.631-644.
- [6] 磯田和男,大野豊, FORTRAN による数値計算ハンドブック, オーム社, (1982),pp.261-309.
- [7] J. A. Mejerink and van der Vorst,H.A., An Iterative Solution Method for Linear Systems of which the Coefficient Matrix is a Symmetric M-matrix, Math. of Comp., 31(1977), pp.148-162.
- [8] James J. Duderstadt and Louis J. Hamilton,成田正邦,藤田文行共訳, 原子炉の理論と解析,上,現代工学社,(1982),pp.211-216.
- [9] James J. Duderstadt and Louis J. Hamilton,成田正邦,藤田文行共訳, 原子炉の理論と解析,下,現代工学社,(1987),pp.312-324.
- [10] 村田健郎,小国力,唐木幸比古,スーパーコンピュータ,丸善,(1985),pp.136-153.

[11] 村田健郎, 小国力, 三好俊郎, 小柳義夫, 工学における数値シミュレーション, 丸善,(1988),

pp.64-66,311-313.

- [12] 村田健郎 , 名取亮 , 唐木幸比古 , 大型数値シミュレーション , 岩波書店 , (1990),pp.121-124.
- [13] M. R. Hestenes, E. Stiefel, Methods of conjugate gradients for solving linear systems, J. Res. Nat. Bur. Standard vol. 49, (1952),pp.33-53.
- [14] R.S.Varga 著,渋谷政昭他訳,計算機による大型行列の反復解法,サイエンス社,(1972),

pp.52-117.

- [15] 標宣男,鈴木正昭,石黒美佐子,寺坂晴夫,数値流体力学,朝倉書店,1994.
- [16] 曽谷勝義, 効率的前処理による反復法計算物理への適用例, 第6回ユーザー会コンファレンス, 日本ビジュアルニューメリックス, IMSL,1995.
- [17] 高橋亮一,応用数値解析,朝倉書店,(1993),pp.135-155.
- [18] 戸川隼人, 共役勾配法, 教育出版, 1977.
- [19] 山内二郎, 森口繁一, 一松信, 電子計算機のための数値計算法 , 培風館,(1967),

pp.163-172.



曽谷勝義 〒540-8551 大阪市中央区城見一丁目4-24 (NEC 関西ビル). S22年生、甲南卒. NEC 日本電気㈱入社、NECソフトウェア関西 NEC 専門 SE、 技術計算コンサルティング マネージ ャー. 日本応用数理学会、情報処理学会、日本統計学 会、日本OR学会 各会員.