

偏微分方程式の高速数値解法

曾谷勝義
NEC ソフトウエア関西
論文番号 940308

はじめに

偏微分方程式はその形状に関して、楕円型、放物型や双曲型に分類する事が可能である。偏微分方程式の中で楕円型は、ポテンシャル論に代表されるラプラス方程式やポアソン方程式、炉物理等で表現される中性子拡散方程式があり、物体の平衡状態を記述する時に用いられる事が多い。その多くが境界値問題として扱われている。境界条件の与え方により、その数値解が変化する事が知られている。ディリクレ、ノイマン等の条件を閉境界線上で与えると、解は一意的に求められる。楕円型偏微分方程式の数値解は、滑らかで求めやすい特徴がある。この方程式は差分法で近似すると、多くの未知数からなる連立一次方程式として表現される。差分法は基本的な考え方として、未知の関数に定義域を格子網で覆い、その全ての格子点上における近似値を求める事を意味する。その格子が細かくなればなるほど近似解は厳密解に近づいて行くことが知られている。

今回事例として採りあげた原子力コードとして代表される中性子拡散方程式は、大型行列の高速数値解法として、研究対象となってきた。この中性子拡散方程式から導かれる行列は、2次元5点差分の非対称行列として表現される。従来中性子拡散方程式の数値解法は、直接解法、反復解法各種等幾つもの数値解法が研究されてきた。近年大型行列の高速数値解法として、様々な数値解法が提案されている。そのうちの1つであるMRTR法を適用して研究してみたい。

1. 偏微分方程式の一般形

偏微分方程式の一般形として2次元偏微分方程式 2階線形問題は次の形に表現できる。

$$(1 \cdot 1) \quad A \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + 2H \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + B \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = D(x, y) \frac{\partial u}{\partial x} + E(x, y) \frac{\partial u}{\partial y} + F(x, y)u + G(x, y)$$

式 (1・1) で $H^2 - AB > 0$ 楕円型、 $H^2 - AB = 0$ 放物型、 $H^2 - AB < 0$ 双曲型

となる。

それぞれの代表例は以下の様なものである。

楕円型： ラプラス方程式 $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0$

$$\text{放物型: 热伝導方程式} \quad \frac{\partial \theta}{\partial t} = a^2 \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2}$$

$$\text{双曲型: 波動方程式} \quad c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}$$

の3つの型が標準である。

ここで楕円型の偏微分方程式を取り上げると、形式は $\mathbf{A}\mathbf{u} + \mathbf{d} = \mathbf{0}$ の形となる。

$\mathbf{A}\mathbf{u} = -\mathbf{d}$ 、この $-\mathbf{d}$ を右辺ベクトル \mathbf{b} とおき、 \mathbf{A} を正方行列 \mathbf{u} を未知ベクトルとして \mathbf{x} と表現することで、 $\mathbf{A} = (a_{ij})$ として n 次の正則行列として

$$(1 \cdot 2) \quad \mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$$

の形に導く事が出来る。ここで \mathbf{x} , \mathbf{b} を n 次のベクトルとする。

楕円型偏微分方程式の差分式への展開

2変数の楕円型偏微分方程式について、差分近似式を導く。さらに定義領域の形や境界条件が一般的な場合について述べる。

$$(1 \cdot 3) \quad -\frac{\partial}{\partial x} \left(P(x, y) \frac{\partial}{\partial x} U(x, y) \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(P(x, y) \frac{\partial}{\partial y} U(x, y) \right) + q(x, y) U(x, y) = S(x, y)$$

$$(x, y) \in \Omega \quad , \quad \Omega : 0 \leq x \leq R_x \quad , \quad 0 \leq y \leq R_y$$

境界 Γ 上では、

$$(1 \cdot 4) \quad U(x, y) = 0 \quad , \quad (x, y) \in \Gamma$$

として、

$P(x, y)$, $q(x, y)$, $S(x, y)$ は、ともに連続で $P(x, y) > 0$, $q(x, y) > 0$ とする。

区間 $[0, R_x]$, $[0, R_y]$ をそれぞれ $I+1$, $J+1$ 等分し、その時の分割点を

$$x_i = ih \quad (0 \leq i \leq I+1) \quad , \quad y_j = jk \quad (0 \leq j \leq J+1) \quad \text{とする。}$$

但し、 $h = \frac{R_x}{(I+1)}$, $k = \frac{R_y}{(J+1)}$ である。

式 (1・3) を長方形で積分する。

$$(1 \cdot 5) \quad w_{ij} \begin{cases} x_i - \frac{h}{2} \leq x \leq x_i + \frac{h}{2} \\ y_j - \frac{k}{2} \leq y \leq y_j + \frac{k}{2} \end{cases}$$

$$\begin{aligned}
(1 \cdot 6) \quad & - \int \int_{w_{ij}} \frac{\partial}{\partial x} \left(P(x, y) \frac{\partial}{\partial x} U(x, y) \right) dx dy = - \int_{y_j - k/2}^{y_j + k/2} \left(P(x, y) \frac{\partial}{\partial x} U(x, y) \right)_{x=xi+h/2} dy \\
& + \int_{y_j - k/2}^{y_j + k/2} \left(P(x, y) \frac{\partial}{\partial x} U(x, y) \right)_{x=xi-h/2} dy \\
\approx \frac{k}{h} & \left[\left(-U(x_i + h, y_j) + U(x_i, y_j) \right) \times P(x_i + \frac{h}{2}, y_j) + \left(U(x_i, y_j) - U(x_i - h, y_j) \right) \times P(x_i - \frac{h}{2}, y_j) \right]
\end{aligned}$$

同様に

$$\begin{aligned}
(1 \cdot 7) \quad & - \int \int_{w_{ij}} \frac{\partial}{\partial y} \left(P(x, y) \frac{\partial}{\partial y} U(x, y) \right) dx dy \approx \frac{h}{k} \left\{ \left(-U(x_i, y_j + k) + U(x_i, y_j) \right) \times P(x_i, y_j + \frac{k}{2}) \right. \\
& \left. + \left(U(x_i, y_j) - U(x_i, y_j - k) \right) \times P(x_i, y_j - \frac{k}{2}) \right\}
\end{aligned}$$

$$(1 \cdot 8) \quad \int \int_{w_{ij}} q(x, y) U(x, y) dx dy \approx h k U(x_i, y_j) q(x_i, y_j)$$

$$(1 \cdot 9) \quad \int \int_{w_{ij}} S(x, y) dx dy \approx h k S(x_i, y_j)$$

$$u_{i,j} = U(x_i, y_j) \quad , \quad s_{i,j} = S(x_i, y_j) \quad , \quad q_{i,j} = q(x_i, y_j)$$

$$p_{i+1/2,j} = P(x_i + h/2, y_j) \quad , \quad p_{i,j+1/2} = P(x_i, y_j + k/2)$$

$$p_{i-1/2,j} = P(x_i - h/2, y_j) \quad , \quad p_{i,j-1/2} = P(x_i, y_j - k/2)$$

式 (1・3) に対する差分近似式が $I \times J$ 元連立一次方程式として得られる。

$$\text{ここで境界条件 } u_{0,j} = u_{i+1,j} = 0 \quad (0 \leq j \leq I+1) \quad , \quad u_{i,0} = u_{i,j+1} = 0 \quad (0 \leq i \leq I+1)$$

まとめると

$$(1 \cdot 10) \quad d_{i,j} u_{i,j} - l_{i,j} u_{i-1,j} - r_{i,j} u_{i+1,j} - b_{i,j} u_{i,j-1} - t_{i,j} u_{i,j+1} = \bar{s}_{i,j} \quad (1 \leq i \leq I, 1 \leq j \leq J)$$

但し、

$$\begin{aligned}
(1 \cdot 11) \quad & l_{i,j} = \frac{k}{h} p_{i-1/2,j} \quad , \quad r_{i,j} = \frac{k}{h} p_{i+1,j} \quad , \quad b_{i,j} = \frac{h}{k} p_{i,j-1/2} \quad , \quad t_{i,j} = \frac{h}{k} p_{i,j+1/2} \quad , \\
& d_{i,j} = l_{i,j} + r_{i,j} + b_{i,j} + t_{i,j} + \bar{g}_{i,j} \quad , \quad \bar{g}_{i,j} = h k g_{i,j} \quad , \quad \bar{s}_{i,j} = h k s_{i,j}
\end{aligned}$$

一般的な境界条件

$$(1 \cdot 12) \quad \alpha(x, y) u(x, y) + \beta(x, y) \frac{\partial u(x, y)}{\partial n} = \gamma(x, y) \quad , \quad (x, y) \in \Gamma$$

$\frac{\partial u}{\partial n}$ は法線に添った外向きの微係数を示し、 $\alpha(x, y) \geq 0$, $\beta(x, y) \geq 0$

$\alpha(x, y) + \beta(x, y) > 0$ とする。

積分記号内の偏微分を

$$(1 \cdot 13) \quad \frac{\partial u(x, y)}{\partial n} = \frac{1}{\beta(x, y)} (\gamma(x, y) - \alpha(x, y)u(x, y))$$

で置き換えれば、同じく連立一次方程式を得る。

定義領域が長方形でない場合、x 方向、y 方向の分割を $h_i = x_{i+1} - x_i$, $k_j = y_{j+1} - y_j$

として、境界 Γ_1 に対して分割点を含んだ多角形 Γ_p で置き換え、境界線上の分割点を 1 つの頂点とする三角形 Δ 上での式 (4.1) の積分を次の様に行う。

ガウスの定理を用いて

$$(1 \cdot 14) \quad - \int \int \left((Pu_x)_x + (Pu_y)_y \right) dx dy = - \int_{\Delta c} (Pu_x dy - Pu_y dx)$$

Δc は Δ の境界で、積分の方向は正の向きとする。 $p_1 \rightarrow p_2 \rightarrow p_3 \rightarrow p_4$ の順に積分する。

X 軸、Y 軸に平行な $p_1 \rightarrow p_2$ の積分は上記の通りであるが、 $p_2 \rightarrow p_3$ の積分は、次の形とする。

t をパラメータとして、

$$x = x_{i+1/2} - t \sin \theta \quad , \quad y = y_{j-1/2} + t \cos \theta \quad , \quad dx = -\sin \theta dt \quad , \quad dy = \cos \theta dt$$

$$(1 \cdot 15) \quad - \int_{p_2}^{p_3} (Pu_x dy - Pu_y dx) = - \int_0^t P(u_x \cos \theta + u_y \sin \theta) dt$$

$$= - \int_0^t P \frac{\partial u}{\partial n} dt$$

$$= - \int_0^t P \left(\frac{\gamma(t) - \alpha(t)u(t)}{\beta(t)} \right) dt$$

$$= -P(x_i, y_j) \cdot \left(\frac{\gamma_{i,j} - \alpha_{i,j}u_{i,j}}{\beta_{i,j}} \right) \cdot l$$

$$l \quad \text{は} \quad \overrightarrow{p_2 p_3} \quad \text{の長さで} \quad \left((h_i/2)^2 + (k_j/2)^2 \right)^{1/2}$$

$P(x, y), q(x, y), S(x, y)$ は連続であると仮定して式を導いたが、 $P(x, y), q(x, y), S(x, y)$

は区別的に連続である時、 $P(x, y)$ の不連続点で $P(x, y) \partial/\partial x \cdot u(x, y)$ 、 $P(x, y) \partial/\partial y \cdot u(x, y)$ は連続であるとして、分割点の集合

$\{(x_i, y_j); 0 \leq i \leq I+1, 0 \leq j \leq J+1\}$ は、 $P(x, y), Q(x, y), S(x, y)$ の不連続点を全て含む様にしておく。

u_{xx} と u_{yy} の係数が異なる時、式 (1・3) の代わりに

$$(1 \cdot 16) \quad -\frac{\partial}{\partial x} \left(P(x, y) \frac{\partial}{\partial x} u(x, y) \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(Q(x, y) \frac{\partial}{\partial x} u(x, y) \right) + q(x, y) u(x, y) = S(x, y) \quad (x, y) \in \Omega_1$$

ここで $P(x, y) > 0, Q(x, y) > 0, q(x, y) > 0$

式 (1・3) において、 $b_{i,j} = h/2 \cdot k \cdot Q_{i,j-1/2}, t_{i,j} = h/2 \cdot k \cdot Q_{i,j+1/2}$

式 (1・15) において

$$b_{i,j} = \frac{1}{2k_{j-1}} \cdot (Q(+,-)h_i + Q(-,-)h_{i-1}), t_{i,j} = \frac{1}{2k_j} \cdot (Q(+,+)h_i + Q(-,+)h_{i-1})$$

境界上で $\beta(x, y) = 0$ の時、あるいは境界がすべての Γ_p の様に X 軸、Y 軸のどちらにも平行でない部分があるとき、式 (1・12) の境界条件では解けない。この場合、次式の線積分が求められる境界条件でなければならない。

$$(1 \cdot 17) \quad \int \left(P(x, y) \frac{\partial}{\partial x} u(x, y) \cos \theta + Q(x, y) \frac{\partial}{\partial y} u(x, y) \sin \theta \right) dt$$

式 (1・10) の係数行列を $I = J = 3$ とおくと

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \mathbf{D}_1 & \mathbf{F}_1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{E}_2 & \mathbf{D}_2 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \mathbf{F}_{j-1} \\ \mathbf{0} & \mathbf{E}_j & \mathbf{D}_j \end{pmatrix}, \quad \mathbf{D}_j = \begin{pmatrix} d_{1j} & -r_{1j} & \cdot & \mathbf{0} \\ -l_{2j} & d_{2j} & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & -r_{I-1,j} \\ \mathbf{0} & \cdot & -l_{I,j} & d_{I,j} \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{E}_j = \begin{pmatrix} -b_{1j} & & \mathbf{0} \\ & -b_{2j} & \\ & & \cdot \\ \mathbf{0} & & -b_{I,j} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F}_j = \begin{pmatrix} -t_{1j} & & \mathbf{0} \\ & -t_{2j} & \\ & & \cdot \\ \mathbf{0} & & -t_{I,j} \end{pmatrix}$$

この時 $\mathbf{D}_j (1 \leq j \leq J)$ は三重対角行列で $\mathbf{E}_j (2 \leq j \leq J)$, $\mathbf{F}_j (1 \leq j \leq J-1)$ は対角行列である。式 (1・1)、式 (1・15) から分かる様に

$$r_{i,j} = l_{i+1,j} (1 \leq i \leq I-1, 1 \leq j \leq J), t_{i,j} = b_{i,j+1} (1 \leq i \leq I, 1 \leq j \leq J-1)$$

であり、 $P(x, y) > 0$, $q(x, y) > 0$, $\alpha(x, y) \geq 0$, $\beta(x, y) \geq 0$

から $r_{i,j}, l_{i,j}, t_{i,j}, b_{i,j}$ はすべて正である。

ここで \mathbf{A} は正の定符号である。つまり \mathbf{A} の固有値は全て正である。このことは、解の安定性や収束の割合に重要な意味を持つ。

$\mathbf{A} = (a_{ij})$ を n 次の正則行列として

式 (1・2) $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ を考える。

行列 \mathbf{A} について、次の 3 つの形に分離する

$$\mathbf{D}_p = \begin{pmatrix} a_{11} & & \mathbf{0} \\ & a_{22} & \\ & & \ddots \\ \mathbf{0} & & a_{nn} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{L}_p = -\begin{pmatrix} 0 & & \mathbf{0} \\ a_{21} & 0 & \\ \ddots & & \ddots \\ a_{n1} & \ddots & a_{n,n-1} & 0 \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{U}_p = -\begin{pmatrix} 0 & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ 0 & & \ddots & \\ \mathbf{0} & & \ddots & a_{n-1,n} \\ & & & 0 \end{pmatrix}$$

とおくと

$\mathbf{A} = \mathbf{D}_p - \mathbf{L}_p - \mathbf{U}_p$ この形で表現できる。

SLOR 法による計算の方法

式 (1・10) にみる $u_{i,j}$ に隣接した 4 点 $u_{i-1,j}, u_{i+1,j}, u_{i,j-1}, u_{i,j+1}$ の関係から 1 点を求めるものをボイント法と称し、一直線に並ぶ点を纏めて解く方法をブロック法と称する。

ブロック型の SOR 法は SLOR 法 (Successive line overexertion iterative method) と呼ばれる。

$$\mathbf{D}_i \mathbf{y}_i^{(m+1)} = -(\mathbf{E}_i \mathbf{x}_{i-1}^{(m)} + \mathbf{F}_i \mathbf{x}_{i+1}^{(m)}) + \mathbf{b}_i$$

$$\mathbf{x}_i^{(m+1)} = (1 - \omega) \mathbf{x}_i^{(m)} + \omega \mathbf{y}_i^{(m+1)}$$

から

$$(1 \cdot 18) \quad \mathbf{x}_i^{(m+1)} = (1 - \omega) \mathbf{x}_i^{(m)} - \omega \mathbf{D}_i^{-1} (\mathbf{E}_i \mathbf{x}_{i-1}^{(m+1)} + \mathbf{F}_i \mathbf{x}_{i+1}^{(m)}) + \omega \mathbf{D}_i^{-1} \mathbf{b}_i$$

すなわち

$$(1 \cdot 19) \quad \mathbf{x}^{(m+1)} = (\mathbf{D} - \omega \mathbf{E})^{-1} ((1 - \omega) \mathbf{D} + \omega \mathbf{F}) \mathbf{x}^{(m)} - \omega (\mathbf{D} - \omega \mathbf{E})^{-1} \mathbf{b}$$

この時の反復行列

$$(1 \cdot 20) \quad \mathbf{M}_{J,B,\omega} = (\mathbf{D} - \omega \mathbf{E})^{-1} ((1 - \omega) \mathbf{D} + \omega \mathbf{F})$$

で表す事が出来る。 $\omega = 1$ の時、ブロックガウスザイデイル法である。

ポイント法とブロック法の比較

行列 \mathbf{A} を次式の形に分解する。

$$(1 \cdot 21) \quad \mathbf{A} = \mathbf{B} - \mathbf{C}$$

\mathbf{B}, \mathbf{C} は \mathbf{A} と同じ次数であり、正則行列とする。

ブロックヤコビ法では $\mathbf{B} = \mathbf{D}$, $\mathbf{C} = \mathbf{E} + \mathbf{F}$

SLOR 法では $\mathbf{B} = \frac{1}{\omega}(\mathbf{D} - \omega\mathbf{E})$, $\mathbf{C} = \frac{1}{\omega}((1-\omega)\mathbf{D} + \omega\mathbf{F})$ であるから

$$(1 \cdot 22) \quad \mathbf{X}^{(m+1)} = \mathbf{B}^{-1}\mathbf{C}\mathbf{X}^{(m)} + \mathbf{B}^{-1}\mathbf{b}$$

と表現できる。

$$\mathbf{B}^{-1} \geq 0 \quad \text{であれば} \quad \rho(\mathbf{B}^{-1}\mathbf{C}) = \frac{\rho(\mathbf{A}^{-1}\mathbf{C})}{1 + \rho(\mathbf{A}^{-1}\mathbf{C})} < 1$$

が成立し、繰り返し法である式 (1・22) は収束する。

$$\mathbf{A}^{-1} > 0 \quad \text{であるとし} \quad \mathbf{A} = \mathbf{B}_1 - \mathbf{C}_1 = \mathbf{B}_2 - \mathbf{C}_2 \quad , \quad \mathbf{C}_2 \geq \mathbf{C}_1 \geq 0 \quad , \quad (\mathbf{C}_2 \neq \mathbf{C}_1)$$

$$(1 \cdot 23) \quad \begin{aligned} 0 < \rho(\mathbf{B}_1^{-1}\mathbf{C}_1) &< \rho(\mathbf{B}_2^{-1}\mathbf{C}_2) < 1 \\ 0 < R_\infty(\mathbf{B}_2^{-1}\mathbf{C}_2) &< R_\infty(\mathbf{B}_1^{-1}\mathbf{C}_1) \end{aligned}$$

\mathbf{B} が正則であること、そして \mathbf{A} の逆行列の各要素が正である。つまりブロック法の方が従来型のポイント法より速く収束することが分かる。

2. 偏微分方程式の応用事例、中性子拡散方程式

研究テーマとして採り上げた中性子拡散方程式は、楕円型偏微分方程式の代表である。この中性子拡散方程式のシミュレーションコードとしては、原子炉内の核分裂反応に関するアプリケーションであり、高い実用性がある。米国で開発されたオリジナルな数値解法に対して、最近研究してきた新しい数値解法MRTR法を適用してその効果を検証した。

2-1. 中性子拡散方程式のシミュレーションコード

楕円型偏微分方程式の一つとして中性子拡散方程式がある。その中性子拡散方程式のシミュレーションコードは、固有値問題として構成されている。中性子拡散方程式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非対称規則疎行列となる。この数値解法の収束解への接近の仕方として、如何に効率良く理論構成させるかによる所が重要である。この残差に対して、最小条件、直交条件を用いたクリロフ(Krylov)部分空間解法は、行列の次数が大きくなると特性方程式が複雑になる為、これを簡素な式にして数値解を目指すものとして注目される。考え方として、ベクトル列においてはグラムシュミットの直交化を施し、直交系を用いることがある。数値解法で広く用いられているランチョスプロセスに基づいて共役勾配法においてMRTR法で数値解析を行う。

2-2. 中性子拡散方程式の概要

偏微分方程式の応用として、橢円型偏微分方程式となる原子炉に関する固有値問題を探り上げる。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。原子炉内の中性子が、ある所から他の所への輸送問題を拡散過程として考える。ここで拡散係数を用いて、空間 V 内の任意の点での吸収密度の時間率と併せて、中性子拡散方程式が導かれる。その中性子拡散方程式に核分裂を含めた核分裂中性子源をとり入れ、臨界条件を定義する。つまり中性子拡散方程式にパラメータ k_e を導入することで、臨界寸法と臨界組成を選ぶための計算を繰り返す。この臨界固有値方程式を数値計算で解くことになる。

2-3. 中性子拡散方程式に基づく臨界計算の流れ

[1] シミュレーションコード全体の流れ

差分近似による中性子拡散シミュレーションコードは、その特徴として、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)に分けている。内側反復となる連立一次方程式の解法では SLOR 法を用いる。 (Fig.1 参照)

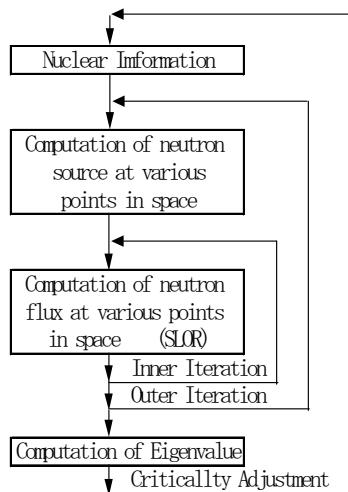


Fig.1 シミュレーションコードの構成。

[2] システムの特徴

原子炉の計算は、格子計算から炉心計算へと 2 段階に分けて計算を行う。そして原子炉計算に必要な定数は、外部ライブラリより引用している。ここでは炉心計算の為、2 群に集約した格子内均質化定数を作成する。炉心計算で使用する反射体領域の 2 群断面積は、ライブラリ内臓の漸近スペクトルによる集約で作成する。ここで作成した評価ライブラリ 2 群均質化定数を使用して、R-Z 体系の炉心計算を行う。計算では反射境界条件で、水平方向は 1/4 炉心の体系を扱う事にする。

記述言語 : FORTRAN about 12,000 step. マトリックスサイズ : $60,000 \times 60,000$ 、 計算 : 倍精度

[3] 中性子拡散方程式による固有値問題

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。原子炉内の中性子が、ある所から他の所への輸送問題を拡散過程として考え、中性子拡散方程式として表現する。この式は橢円型偏微分方程式の固有値問題となる。そしてこの固有値を数値シミュレーションとして求める。

[4] 一般式による表現

橢円型偏微分方程式の中性子拡散方程式は、一般式の表現として具体的に次の形となる。

$$(2.1) \quad -D^g(\mathbf{r})\nabla^2\Phi^g(\mathbf{r}) + \sum_T^g(\mathbf{r})\Phi^g(\mathbf{r}) = \frac{1}{k_e}\chi^g \sum_{g=1}^G \nu \sum_f^{g'}(\mathbf{r})\Phi^{g'}(\mathbf{r}) + \sum_{g < g'} \sum_{\gamma}^{g' \leftarrow g}(\mathbf{r})\Phi^{g'}(\mathbf{r})$$

ここで $\sum_T^g(\mathbf{r}) = \sum_a^g(\mathbf{r}) + \sum_{g < g'} \sum_{\gamma}^{g' \leftarrow g}(\mathbf{r}) + D^g B^2(\mathbf{r})$

式 (2.1) にみる拡散係数を $D(\mathbf{r})$ で表現すると、これは負の密度勾配に比例する。指標 g は中性子のエネルギーを組分けしたときの番号であり、群として定義される。小さい番号ほど高いエネルギーを表すものとして、G 組の群を定義する。

Φ^g , D^g , \sum_f^g , \sum_a^g , $\sum_{\lambda}^{g' \leftarrow g}$, ν , B は、それぞれ g 群の中性子束、拡散係数、核分裂断面積、吸収断面積、 g から g' 群への散乱除去断面積であり、 ν は1回の核分裂により放出される中性子の平均個数、 B は幾何学的(縦方向)バックリングを表す。

ここで χ^g は分裂中性子のスペクトルを表現する。これは $\sum_g^G \chi^g = 1$ を満たす。

境界条件

原子炉の内部は燃料体領域、減速材領域、反射体領域など幾つかの領域に分けられ、式 (2.1) の係数や断面積は、それらの領域毎に定数で与えられる場合が多い。式 (2.1) を二次元問題として、座標系を X-Y 座標、または R-Z 座標とする。(X-Y)、(R-Z) を代表して (X-Z) で表す。

ここで $0 \leq X \leq R_x$, $0 \leq Z \leq R_z$ とする。境界条件は

$$(2.2) \quad \frac{\partial}{\partial X} \phi(X, Z) |_{X=0} = 0 \quad , \quad \phi(R_x, Z) = 0 \quad , \quad \phi(X, 0) = \phi(X, R_z) = 0$$

内部境界(領域の境界)では $\phi(\mathbf{r})$, $-D(\mathbf{r})\nabla \cdot \phi(\mathbf{r})$ は、連続であるとする。 $\phi(\mathbf{r})$ は有限な値であり、領域内部は2階偏微分可能で負にはならないとする。

[5] 臨界固有値方程式の演算子法による表現

橢円型偏微分方程式の中性子拡散方程式を臨界固有値方程式として導く。

$$(2.3) \quad \mathbf{B} \cdot \Phi = \frac{1}{k_e} \mathbf{S}$$

B : 中性子輸送散乱吸収係数
Φ : 中性子束
 k_e : 実効増倍率
S : 中性子源

式 (2.3) は次式で表現出来る。

$$(2 \cdot 4) \quad \mathbf{A} \Phi = \frac{1}{k_e} \mathbf{F} \Phi + \mathbf{R} \Phi$$

ここで $\mathbf{B} = \mathbf{A} - \mathbf{R}$ とおく。この \mathbf{B} は 中性子輸送散乱吸収係数となる。

式 (2・3) における中性子源 \mathbf{S} は、中性子源係数 \mathbf{F} と中性子束 Φ の積として表現され、 \mathbf{S} は次式で表される。

$$(2 \cdot 5) \quad \mathbf{S} = \mathbf{F} \Phi$$

\mathbf{F} : 中性子源係数

従って、次に見る臨界固有値方程式の演算子法として式 (2・6) で表現される。

$$(2 \cdot 6) \quad \mathbf{B} \Phi = \frac{1}{k_e} \mathbf{F} \Phi$$

ここで各群の中性子の空間移動(輸送)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、定常拡散方程式として式 (2・1) で表現される。これを計算上、式 (2・1) と式 (2・2) を合わせて、式 (2・3) の \mathbf{B} は原子炉の漏れと吸収の合計からなる消滅演算子であり、式 (2・5) の \mathbf{F} は核分裂による生成演算子として表現する事も出来る。これは臨界固有値方程式の演算子法として式 (2・6) として表現できる。

[8] 固有値問題への展開

式 (2・6) は

$$(2 \cdot 7) \quad \mathbf{B}^{-1} \mathbf{F} \Phi = k_e \Phi$$

の形に表現出来る。

式 (2・3) 式 (2・6) よる表現により、式 (2・7) は $\mathbf{B}^{-1} \mathbf{F}$ 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。ここでは k_e を固有値とする。この固有値を必要な値に近づける様に組成と寸法を調整し、計算を繰り返し続ける事になる。原子炉の臨界計算は臨界固有値問題となり、これら固有値の集合の中で、固有値の最大値は至る所で非負の中性子束分布、つまり臨界原子炉に対応している。

[10] 最大固有値及び連立一次方程式の解法

式 (2・1) は差分近似により離散化され、その最大固有値を求める。 k_e を推定する為に、式 (2・6) の核分裂中性子を全空間で積分すると、 k_e は核分裂中性子数の比 (①核分裂生成の中性子源項の推定からなる積分値、②漏れと吸収の中性子束からなる積分値の比、①/②) で表され、次に表す式 (2・9) の形が導かれる。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。

$$(2 \cdot 8) \quad \Psi^{(t+1)} = \mathbf{B}^{-1} \mathbf{F} \Phi^{(t)}$$

$$(2 \cdot 9) \quad k_e^{(t+1)} = \frac{[\mathbf{F} \Psi^{(t+1)}]}{[\mathbf{F} \Phi^{(t)}]}$$

$$(2 \cdot 10) \quad \Phi^{(t+1)} = \frac{1}{k_e^{(t+1)}} \Psi^{(t+1)}$$

ここで、式 (2・9) の $[\mathbf{F} \Psi^{(t+1)}]$ 及び $[\mathbf{F} \Phi^{(t)}]$ は、それぞれベクトル $\mathbf{F} \Psi^{(t+1)}$ 及び $\mathbf{F} \Phi^{(t)}$ のすべての要素の和を表す。 $\mathbf{B} \geq 0$ であることから $\mathbf{B}^{-1} \mathbf{F} \geq 0$ となり、初期ベクトル $\Phi^{(0)} > 0$ に対して $\mathbf{B}^{-1} \mathbf{F}$ を計算させても、 $\Phi^{(n)}$ の要素は負にはならない。つまり $\mathbf{B}^{-1} \mathbf{F}$ の最大固有値と、その対応するベクトル要素は全て正である。

式 (2・8) を解く際に、例えば $\mathbf{F} \Phi^{(i)}$ の計算値を $\mathbf{C}^{(i)}$ で表し、これに $\Phi^{(0)} = 1$ を与え、

$$(2 \cdot 11) \quad \mathbf{C}^{(i)} = \mathbf{F} \Phi^{(i)}$$

$$(2 \cdot 12) \quad \mathbf{B} \Psi^{(i+1)} = \mathbf{C}^{(i)}$$

ここで式 (2・12) は連立一次方程式となる。この連立一次方程式を効率良く解くことが課題となる。この式 (2・11) 式 (2・12) の反復から Ψ を求める。これらの式から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・8)、(2・9)、(2・10) の反復で Φ の最大固有値を求める事を外側反復 ‘Outer Iteration’ と呼ぶ。

以上の計算で、最大固有値 k_e が特別な場合を除いて、ある値「1」に収束する迄、全体を繰り返し、原子炉の組成変更等による臨界度を求めていく。

[2] 改良版に向けての検討

式 (2・12) の連立一次方程式は、大規模非対称行列として導かれる点である。これをオリジナル版としての解法から、最近注目された新しい数値解法へ変換することにある。

3. 数値計算の高速化技術における改良方法

[1] 一般オリジナル版に用いられた SLOR 法

1950 年 Young と Frankel は、ガウスザイデ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。改良として 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。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。

[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、空間内において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。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。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固有値を密集させた形に導き、条件数を改良する方法である。行列 \mathbf{A} が非対称な場合は、双対共役法としての BCG 法が考えられており、これは残差に対して最小条件、直交条件を用いるクリロフ(Krylov)部分空間解法として導き出す事が出来る。その後にクリロフ部分空間解法の安定化、高速化を目指して、自乗共役としての CGS 法等がある。つまりこのことは Lanczos 多項式と初期残差との積で表現が可能である。ここでは残差が初期残差と、加速多項式との積で定義される

解法が満たされる三項漸化式から導出することを試みる。これは MRTR 法と呼ばれる。これを使って数値解法を試みる。

[3] MRTR 法 (Minimized Residual Method based on the Three-term Recurrence formula)

数値解法的に残差の最小化条件に重点をおいた CR 法と同じ形式である。この時の残差は三項漸化式で生成される多項式として表現される。実際の収束計算も CR 法に近い値をとる。数値の誤差の面からは丸め誤差に頑健である長所が知られている。

[4] MRTR 法

MRTR 法アルゴリズム

初期ベクトル \mathbf{x}_0 、収束判定値 eps 、 $\mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}_0$

$$\mathbf{y}_0 = -\mathbf{r}_0, \quad \nu_0 = (\mathbf{y}_0, \mathbf{y}_0)$$

while $\|\mathbf{x}_k\|_2 > \text{eps} * \|\mathbf{b}\|_2$ do , ($k=0,1,2,\dots$)

$$\mu_k = \frac{\nu_k(\mathbf{A}\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_k)}{\nu_k(\mathbf{A}\mathbf{r}_k, \mathbf{A}\mathbf{r}_k) - (\mathbf{y}_k, \mathbf{A}\mathbf{r}_k)(\mathbf{A}\mathbf{r}_k, \mathbf{y}_k)},$$

$$\nu_k = \frac{-(\mathbf{y}_k, \mathbf{A}\mathbf{r}_k)(\mathbf{A}\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_k)}{\nu_k(\mathbf{A}\mathbf{r}_k, \mathbf{A}\mathbf{r}_k) - (\mathbf{y}_k, \mathbf{A}\mathbf{r}_k)(\mathbf{A}\mathbf{r}_k, \mathbf{y}_k)},$$

$$\text{if } k=0, \text{ then } \mu_k = \frac{(\mathbf{A}\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_k)}{(\mathbf{A}\mathbf{r}_k, \mathbf{A}\mathbf{r}_k)}, \quad \nu_k = 0$$

$$\tau_{k+1} = \nu_k(\mathbf{A}\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_k),$$

$$\mathbf{p}_k = \mathbf{r}_k + \frac{\mu_{k-1}}{\mu_k} \nu_k \mathbf{p}_{k-1},$$

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \mu_k \mathbf{p}_k,$$

$$\mathbf{y}_{k+1} = \nu_k \mathbf{y}_k + \nu_k \mathbf{A}\mathbf{r}_k,$$

$$\mathbf{r}_{k+1} = \mathbf{r}_k - \mathbf{y}_{k+1}$$

4. 数値計算例の問題設定

今回の数値実験で採用した二次元形状問題について条件を述べる。

[1] 計算対象の概要

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。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 群、二次元形状、境界条件 ϕ の変数を \mathbf{r} で表現する。ここで $\phi(\mathbf{r})$ 及び中性

子全体の変化 $-D(\mathbf{r}) \nabla \cdot \phi(\mathbf{r})$ は、連続であるとする。また $\phi(\mathbf{r})$ は至る所で有限な値を持つ。

[2] 数値シミュレーションの実験条件

対象データ

形状 : (R-Z)体系

エネルギー群数 : 2 (1群; 高速中性子, 2群; 熱中性子)

領域数 : 3 (燃料体領域, 減速材領域, 反射体領域)

定数 : 核データファイルによる。

マトリックスサイズ : $60,000 \times 60,000$

数式モデル : 非対称行列, 5点差分形式

座標 : 式 (2・2) の二次元形状問題として、座標系(X-Y)又は(R-Z) を代表して(X-Z) で表現し、 $0 \leq X \leq R_x, 0 \leq Z \leq R_z$ 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 : スーパーコンピュータ SX5/1CPU
倍精度, メモリ 32GB

[3] MRTR 法による数値シミュレーション

改良版へのプロセスと計算結果を述べる。改良版では、MRTR 法を適用し、プログラムバランスを追求した事例を説明する。そして改良版へのプロセスと、計算結果について述べる。

Table 1. Comparative Table of Executive Time.

Relative Residual	General original version(sec) SLOR法	Improved version(sec) MRTR法
10-1	133.119	127.989
10-2	236.387	163.045
10-3	441.023	239.247
10-4	620.333	290.521
10-5	743.709	303.393
10-6	887.451	312.253
10-7	1122.186	334.814
10-8	1595.761	413.221
10-9	2028.947	434.305
10-10	2787.215	508.378

Table 2. Comparative Table of Computational Results.

Present level		
Residual norm 10-4 level	Time	Measured ratio
General original version SLOR	① 620.333sec	①/②
Improved version MRTR	② 290.521sec	2.135 times
Exact solutions' level		
Residual norm 10-6 level	Time	Measured ratio
General original version SLOR	③ 887.451sec	③/④
Improved version MRTR	④ 312.253sec	2.842 times

5. まとめ

偏微分方程式の一般形から、差分式に導き出し、中性子拡散方程式によるシミュレーションコードに対して、その中で計算の多くのを占める連立一次方程式の解法に対して高速安定解法を目指す為、大規模非対称行列に安定解が得られる目的で開発された MRTR 法を適用させた。シミュレーションコードの改良により、改良版の収束計算は、実用的レベルで約 2.13 倍速くなった。この改良版では、安定した計算結果を得る事が可能である等、実用上の重要な知見を得る事が出来、そしてアプリケーションとしての有用性が十分であることが示された。中性子拡散方程式シミュレーションコードの高速化された今回の改良版により、新しい数値解法の MRTR 法が有効であった点が判明した。

参考文献

- [1] A.E. Walter, A. B. Reynolds, "FAST BREEDER REACTORS", Pergamon Press, 1981.
- [2] 浅井忠一他著, 原子力ハンドブック(新版), オーム社, 1989.
- [3] 安成弘, 原子力工学シリーズ 10, 原子炉の理論と設計, 東京大学出版会,(1980),pp.132-143.
- [4] 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.
- [5] 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.
- [6] 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, (1982).
- [7] 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.
- [8] R.S.Varga, Matrix Iterative Analysis ,Prentice- Hall, Englewood Cliffs, N.J. 1962.