

中性子拡散の計算に対する TF-BCGSTAB 法の適用

TF-BCGSTAB Method Applied to Neutron Diffusion Computations

曾谷勝義

Katsuyoshi SOTANI

NECソフトウェア関西

A numerical simulation for the neutron diffusion equation, which is one of the nuclear codes, consists of the eigenvalue problem. Although we solved the original version by using the SLOR method that is commonly used in computational physics, in this paper, we applied an improved version of the TF-BCGSTAB method that obtains the TF-method's preconditioning for the BCGSTAB method. As a result of our investigation of the total programming balance, we report on having achieved simulations that are nearly three times faster than the conventional method as a whole. We also report on the practicality of a compositional alteration as an application, and a result on the control stability problem support.

Key Words: Neutron Diffusion Equation, Eigenvalue Problem, Computational Physics, Partial Differential Equation, Nuclear Numerical Application, Fast Numerical Simulation

1. 緒言

固有値問題は様々な工学分野で現れる。例として構造物の動力学系に用いられているスクリー等の振動や構造物振動の共振周波数を求める問題、もう一つは基礎物理学系の分子軌道計算の問題や、多変量解析学の空間軸の重み付け等であり、更に一つは原子炉の臨界値を決定する問題がある。ここではこの3番目の問題を取り扱いたい。

原子力コードのうちの1つ中性子拡散方程式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[1]。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非対称規則疎行列となる。共役勾配法(CG法)から発展し、クリロフ部分空間解法として注目されているBCGSTAB法では、安定収束と言う面から、これに適した最新の解法として注目されてきた。これに対して、与えられたマトリックスに於いて適切な前処理(TF法)[2]の考えを導入し、基礎反復としてBCGSTAB法を適用する事により、より高速で安定収束を実現させる事が出来た。その結果、改良版ではハードウェアが同一条件のもとで、実用上の許容範囲の水準において、問題により3倍近い高速性が得られた点、及びアプリケーションとしての実用面、更に制御安定性の問題等への成果を述べる。

2. 中性子拡散方程式に基づく臨界計算の流れ

2.1 概要

差分近似による中性子拡散コードとして開発したSHARP-XY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)に分けており、目標固有値が実現できる様に原子炉の材料組成等を調整することにある。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、実用的精度で計算を打ち切り終了させている。(Fig.1 参照)

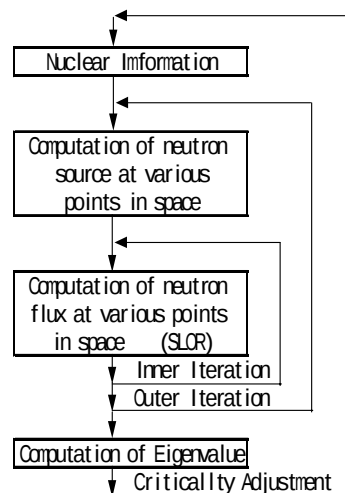


Fig.1 Program Structure.

2.2 システムの特徴

当システムでは、差分近似による多群拡散燃焼計算コードとして開発された専用コード[3]をもとにして、二次元用コードとして開発されたものである。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[4]。

ライブラリ名：核データファイル JENDL3.2

入力情報：核データファイル JENDL3.2 から処理ルーチンにて、当コードに対応する評価ライブラリを作成する。

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.
 実用的マトリックスサイズ：35,000 × 35,000
 計算：倍精度

3 . 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期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。この式は楕円形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。この固有値問題を原子炉設計に用いられる複雑なモデルに適用させる事が出来るが、今回の事例研究では二次元形状、2群問題を対象とする。

3.1 中性子拡散方程式の表現

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

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

但し、 $\mathbf{S}$ は次式で表現される。

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

$\mathbf{F}$: 中性子源係数

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期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(1)で表現される。これを計算上、式(1)と式(2)を合わせて、 $\mathbf{B}$ 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、 $\mathbf{F}$ は核分裂による生成演算子として表現する事も出来る[1].

3.2 固有値問題への展開

式(1)と式(2)から次式が定義できる。

$$\mathbf{B}^{-1} \mathbf{F} \Phi = k_e \Phi \quad (3)$$

と表現することにより、この式は $\mathbf{B}^{-1} \mathbf{F}$ 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。この時の最大固有値を実効増倍率と呼ぶ。

3.3 最大固有値の意味

原子炉内の核分裂連鎖反応が定期的に進行する場合は「漏れ+吸収=発生」の中性子バランスの関係が成り立つ。ボルツマンの輸送方程式ないし中性子拡散方程式は、この中性子バランスから導かれたものである。ここで、

最大固有値 < 1 の場合、漏れ + 吸収 $>$ 発生 :
 未臨界となる。

最大固有値 > 1 の場合、漏れ + 吸収 $<$ 発生 :
 超過臨界となる。

3.4 固有値問題の解法

式(3)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。

$$\Psi^{(t+1)} = \mathbf{B}^{-1} \mathbf{F} \Phi^{(t)} \quad (4)$$

$$k_e^{(t+1)} = \frac{[\mathbf{F} \Psi^{(t+1)}]}{[\mathbf{F} \Phi^{(t)}]} \quad (5)$$

$$\Phi^{(t+1)} = \frac{1}{k_e^{(t+1)}} \Psi^{(t+1)} \quad (6)$$

ここで、式(5)の例えば $[\mathbf{F} \Phi^{(t)}]$ はベクトル $\mathbf{F} \Phi^{(t)}$ の総和を表す。式(4)を解く際に、 $\mathbf{F} \Phi^{(t)}$ の計算値を $\mathbf{C}^{(t)}$ で表し、これに $\Phi^{(0)} = 1$ を与え、

$$\mathbf{C}^{(t)} = \mathbf{F} \Phi^{(t)} \quad (7)$$

$$\mathbf{B} \Psi^{(t+1)} = \mathbf{C}^{(t)} \quad (8)$$

として、式(7),(8)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(4),(5),(6)の反復で Φ の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、全体を繰り返し、原子炉の組成等による臨界度を求めている。

4 . 従来法による解法の概要

4.1 反復と収束方法

SLOR 法に基づく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用いている。この時、内側反復において、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打ち切りをして、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。

外側反復収束条件 ; $\phi_i^{(t)}$ は中性子束 $\Phi^{(t)}$ の要素、 ε_1 , ε_2 各収束判定パラメータ[5].

$$\left| \frac{\phi_i^{(t+1)} - \phi_i^{(t)}}{\phi_i^{(t+1)}} \right| < \varepsilon_1, \quad \left| \frac{k_e^{(t+1)} - k_e^{(t)}}{k_e^{(t+1)}} \right| < \varepsilon_2 \quad (9)$$

このコードを構成しているモデルの性格上、式(9)に見る外側反復における収束パラメータ ' $\varepsilon_i, (i=1,2)$ ' 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)[1]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方式をとっている。パラメータ ς, η を外挿係数とすると、式(2)を用いて中性子源外挿法は、次式で表現している。

$$\mathbf{S}^{(t)} = \mathbf{S}^{(t-1)} + \varsigma \left(\frac{1}{k_e^{(t)}} \mathbf{F}\Phi^{(t)} - \mathbf{S}^{(t-1)} \right) + \eta \left(\mathbf{S}^{(t-1)} - \mathbf{S}^{(t-2)} \right) \quad (10)$$

但し、 $0 \leq \varsigma \leq 2, 0 \leq \eta \leq 1$

こうした外側反復の動きを重点的に捉え、反復計算の加速に依存した考え方は、理論上は計算の効率性を追求しているが、精度良く解を求めるには、長い時間を必要とする問題がある。

4.2 改良版に向けての検討

式(3)は大規模非対称行列として導かれる。

- (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、中性子拡散計算を内側反復と外側反復で構成し、ある系の固有値を求める臨界計算をする事にある。臨界計算では、内側反復を少なくする方法で収束の効率化を追求し、これに外側反復では中性子源外挿法を用いて高速化、高精度化を目指して計算させている。ここで内側外側の反復数は反比例である。
- (2) 一般オリジナル版において、一定の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(近似解)の妥協点を求めているものと考えられる。一般オリジナル版作成者は、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、外側反復に対して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 P_0 点を選択している。ここで P_s 点は外側反復の最小限必要回数) しかしこの方法による考えとして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。

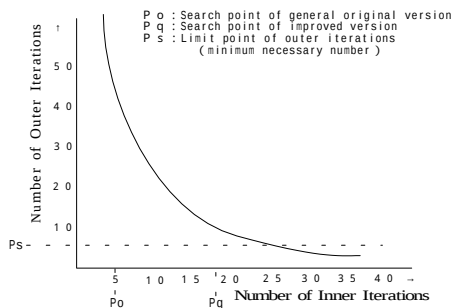


Fig.2 Relation between Inner and Outer Iterations.
(Residual norm 10^{-4} level)

5. 数値計算の高速化技術における改良方法

5.1 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[6]. 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。

5.2 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[7]. 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。前処理法として TF 法(三項対角近似因子分解法)を用いた理由と、その基礎反復として非対称行列に安定求解を施す解法として提案された BCGSTAB 法を選定した点を述べる。

5.3 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。

$$\mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{b} \quad (11)$$

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[2]に詳細が記載されているが、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[8]では、 $\mathbf{A}$ 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 $\mathbf{L}$ と、上三角行列 $\mathbf{U}$ を用いて $\mathbf{A}$ の近似行列

$$\mathbf{M}_{LU} = \mathbf{L} \mathbf{U} \quad (12)$$

の非零要素部分が $\mathbf{A}$ のそれと等しくなる様に構成する。ここで $\mathbf{LU}$ 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。(Fig.3 参照) この前進消去を展開すると次式となる。

$$v_{i,j} = (g_{i,j} - l_{i,j-1} \cdot v_{i,j-1} - l_{i-1,j} \cdot v_{i-1,j}) / l_{i,j}$$

5.4 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、二次元 5 点差分係数行列の形で構成される。この時、行列 $\mathbf{A}$ に対してその対角行列を $\mathbf{D}$ 、 x 方向の微分に関する副対角要素から構成される行列を $\mathbf{A}_x$ 、同じく y 方向の行列を $\mathbf{A}_y$ として分離する。

$$\mathbf{A} = \mathbf{D} + \mathbf{A}_x + \mathbf{A}_y \quad \text{で表現出来る。}$$

この時の前処理行列 $\mathbf{M}_{TF}$ は次式で定義される。

$$\mathbf{M}_{TF} = (\mathbf{D} + \mathbf{A}_x) \mathbf{D}^{-1} (\mathbf{D} + \mathbf{A}_y) \quad (13)$$

式(13)の場合の逆行列計算は、計算上各因子毎に行い、例えば x 方向因子は

$$(\mathbf{D} + \mathbf{A}_x) \mathbf{v} = \mathbf{g} \quad (14)$$

の形をとり、この式(14)はy方向n本の独立した形で、x方向に計算を行う事を意味している。つまり TF 前処理法に対する計算の並列性は、計算ノードがx方向並列計算として効率良く進む。(Fig.4 参照)

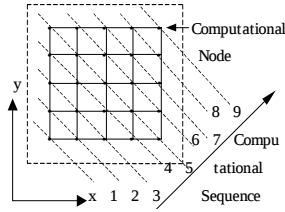


Fig.3. Parallelism for ILU Preconditioner.

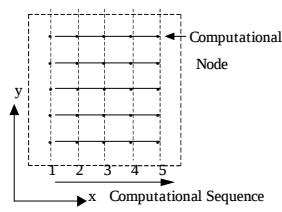


Fig.4. Parallelism for TF Preconditioner.

5.5 BCGSTAB 法の概要

BCG 法が非対称行列の求解として提案されたのに対して、これに対する高速求解としての自乗共役法である CGS 法が考案されたが、この CGS 法は残差の効率的収束の追求から研究された解法であり高い収束性が期待されるが、解法の特徴である自乗性による非収束の拡散性の問題点がある[9]. BCGSTAB 法はこの欠点を回避し、比較的高速で安定収束を保持させる様に工夫されている[10]. BCGSTAB 法の残差多項式を $R_k(\lambda)$ で表現する。

クリロフ部分空間 $\text{Span}\{\mathbf{r}_0, \mathbf{A}\mathbf{r}_0, \dots, \mathbf{A}^{n-1}\mathbf{r}_0\}$ を定義し、その中で Hermite 行列に対して、ガレルキン条件 (Galerkin condition) $\mathbf{r}_{n+1} \perp K_{n+1}(\mathbf{A} : \mathbf{r}_0)$ を満たす残差を導く。この残差にグラムシュミットの直交化法 (Gram-Schmidt orthogonalization) を施すことで式を導き出す事が出来る。これにランチョス・プロセスにみる3項漸化式により2つのパラメータ α_k, β_k を導く。

$$R_0(\lambda) = 1 \quad (15)$$

$$R_1(\lambda) = 1 - \alpha_0 \lambda \quad (16)$$

$$R_{k+1}(\lambda) = \left(1 + \alpha_k \frac{\beta_{k-1}}{\alpha_{k-1}} - \alpha_k \lambda\right) R_k(\lambda) \quad (17)$$

$$- \alpha_k \frac{\beta_{k-1}}{\alpha_{k-1}} R_{k-1}(\lambda), \quad k=1,2,\dots$$

ここでパラメータ ω_k を用いて

$$Q_k(\mathbf{A}) = (1 - \omega_1 \mathbf{A})(1 - \omega_2 \mathbf{A}) \dots (1 - \omega_k \mathbf{A}) \quad (18)$$

とおく。式(18)より BCGSTAB 法の残差ベクトルは次の形で表現出来る。

$$\mathbf{r}_k^S = Q_k(\mathbf{A})R_k(\mathbf{A})\mathbf{r}_0 \quad (19)$$

2つのパラメータ α_k, β_k の計算方法

$$\alpha_k = \frac{(\mathbf{r}_0^*, \mathbf{r}_k^S)}{(\mathbf{r}_0^*, \mathbf{A}\mathbf{r}_k^S)}, \quad \beta_k = \frac{\alpha_k}{\omega_k} \frac{(\mathbf{r}_0^*, \mathbf{r}_{k+1}^S)}{(\mathbf{r}_0^*, \mathbf{r}_k^S)} \text{ 等で表現出来る。}$$

但し、 $\mathbf{r}_0^*$ は初期値のベクトル。

6 . 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問題について条件を述べる。

6.1 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

領域数 : 3(燃料体領域1, 燃料体領域2, 反射体領域)

定数 : 核データファイルによる。

メッシュサイズ : 375 × 375

数式モデル : 非対称行列, 5点差分形式

座標 式(1)の二次元問題として、座標系(X - Y)又は(R - Z)

を代表して(X - Z)で表現し、

$$0 \leq X \leq R_x, 0 \leq Z \leq R_z \text{ とする。}$$

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

メモリ 32GB

6.2 計算対象

原子炉の内部は燃料体領域 1, 燃料体領域 2, 反射体領域等幾つかの領域に分けることが出来る。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。二次元問題、境界条件 ϕ の変数を $\mathbf{r}$ 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 $\phi(\mathbf{r})$ は至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。

7 . TF-BCGSTAB 法による数値シミュレーション

改良版では、前処理法としては三項対角近似因子分解法(TF法)を使用し、基礎反復には非対称問題に可能な BCGSTAB 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。

7.1 改良版へのプロセスと計算結果

(1)内側反復の反復数を徐々に増加させる事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。(Table 1, Table 2, Fig.5 参照) ここで内側反復数(JT)の有効回数 4 JT 25, Fig.5 での計算時間最小点として求めた内側反復数の Pi 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、固有値の変化による物理量等に注目した。内側外側の反復数は反比例する所から、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。(Fig.2, Fig.5 参照)

(3) 改良版は TF-BCGSTAB 法を用いると共に、式(11)の近似解を $\bar{\mathbf{x}}$ とし、残差を $\mathbf{r} = \mathbf{b} - \mathbf{A}\bar{\mathbf{x}}$ とする事で相対残差

ノルムを n_r で表す。ここで内側反復の相対残差ノルム

$n_r = \mathbf{r}_2 / \mathbf{b}_2$ を定義し、そのときの打ち切り誤差を求めている。

(4) その結果、改良版では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ことが出来た。(Table 3 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。(Table 4 参照) (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%)

(5) 事例研究とした二次元 2 群の固有値問題では、ハードウェアが同一条件のもとで、従来の方法に比べて 2.99 倍の高速性 (残差ノルム $n_r = 10^{-4}$ 時点) 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 (残差ノルム $n_r = 10^{-6}$ 時点) の高精度解においては、従来の方法に比べて 3.98 倍の高速性が得られた。(Table 5 参照)

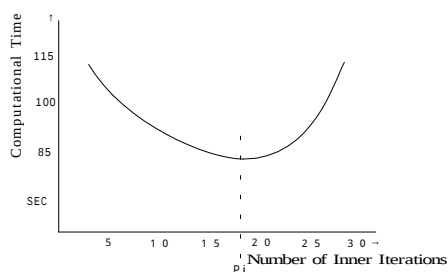


Fig.5 Relation between Number of Inner Iterations and Computational Time. (Residual norm 10^{-4} level)

Table 1 Relative Table for the Number of Inner Iterations and Outer Iterations. (sample)

Comparative Sample No	Number of Inner Iterations	Number of Outer Iterations
1	3	70
2	4	53
3	5	42
4	8	26
5	10	21
6	12	18
7	15	14
8	18	12
9	20	11
10	22	10
11	25	9
12	27	8

Table 2 Computational Time for the Number of Inner Iterations.

JT number	time sec	JT number	time sec
3	104.946	16	86.519
4	102.284	17	86.246
5	99.822	18	86.121
6	97.557	19	86.182
7	95.587	20	86.381
8	94.016	21	86.835
9	92.674	22	87.573
10	91.455	23	88.718
11	90.348	24	90.332
12	89.366	25	92.337
13	88.468	26	94.674
14	87.669	27	99.833
15	86.953		

Table 3 Comparative Table of Executive Time.

Relative Residual	Improved version(sec)	General original version(sec)
1 0 -1	39.632	57.742
1 0 -2	50.487	102.535
1 0 -3	74.083	191.297
1 0 -4	89.904	268.906
1 0 -5	93.887	322.388
1 0 -6	96.629	384.698
1 0 -7	103.546	486.149
1 0 -8	127.794	691.309
1 0 -9	134.329	878.971
1 0 -10	157.223	1207.465

Table 4 Comparative Table of Computational Value.

Computational Sample Case	The Maximum Eigenvalue	
	SLOR method	TF-BCGSTAB method
1	0.975108	0.975898
2	0.975874	0.976112
3	0.976734	0.977416
4	0.977546	0.978451
5	0.978658	0.979218
6	0.979807	0.980475
7	0.980674	0.981653

Table 5 Comparative Table of Computational Results.

Present level		
Residual norm 10-4 level	Time	Measured ratio
General original version SLOR	268.9sec	/
Improved version TF-BCGSTAB	89.9sec	2.99 times
Exact solutions' level		
Residual norm 10-6 level	Time	Measured ratio
General original version SLOR	384.7sec	/
Improved version TF-BCGSTAB	96.6sec	3.98 times

(6) 計算結果の比較図

〔スーパーコンピュータ SX5/1CPU 測定〕 (倍精度)

中性子束の各計算水準と計算結果の比較図を示す。(Fig.6 参照)

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。[近似解] 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。

一般オリジナル版 (SLOR), ベクトル化率 89%

改良版 (TF-BCGSTAB), ベクトル化率 91%

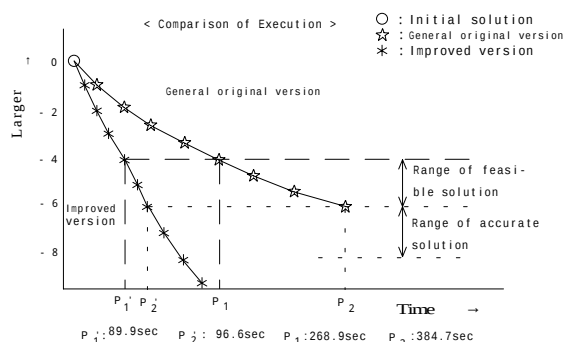


Fig.6 Comparative Illustration.

7.2 固有値問題に対する原子炉組成変更の場合における検討

(1) ここ迄の Fig.6 においては、ある時点の組成において、一般オリジナル版と改良版による収束時間を比較検討したが、次の Fig.7 では一般オリジナル版と改良版による組成変更時の外側反復数の変化に重点をおいて検討している点である。

(2) 一般オリジナル版は、内側反復数を少なくして実用的な計算精度を得る為の打ち切り値に頼っている所から、計算対象とする条件が大きく変更された場合、数値計算上 収束にバラツキが生じる。これを外側反復の増加により全体をバランスして補う形をとっていると考えられる。

(3) つまりこのことは、計算方法として次の形になっている。実効増倍率 k_e は、核分裂(生成演算子)中性子源項の推定値 $F\Phi$ の積分値と、漏れと吸収の(消滅演算子) B を係数とした中性子束項 $B\Phi$ の積分値との比で構成される。この比が一定の値で収束する形をとっている。中性子拡散方程式シミュレーションコードの計算方式では、組成が変わった時、 k_e も変化する。これを一定に収束させる為に、(内側反復も少し変動するが)外側反復に大きく依存している。ここで収束時間は内外反復のバランスのもとに存在する。これを内側反復数が小さい条件で、外側反復数を大きくとるオリジナルの考えによると、組成変更による計算条件が変わった時、数値計算上 収束させる為に、結果的に外側反復数を大きく変動させている事になると考えられ、改良版にみる内側反復数を大きくとり、外側反復数を小さくとる方式では、組成が変化しても比較的安定した形になり得る事が判明した。

(4) 従って以下の言葉に集約出来る。原子炉の組成変更を行って異なる各ケースについて実行してみた所、一般オリジナル版は外側反復数に大きな変動が見られるが、改良版はほぼコンスタントな値をとる事が証明できた点である。この事は改良版がアプリケーションとしての有用性があり、十分に実用的である事を表している。

(5) 上記にみる組成変更時の外側反復数の動きに関して、合わせて時間変化の点から考察したい。ここでは原子炉の組成変更の場合について、一般オリジナル版と改良版の収束時間を表示する。いずれのケースにおいても、一般オリジナル版と改良版の収束時間比率はほぼ一定 (約 1/3 程度) している事が認められた。(Fig.8 参照)

(6) Fig.7 及び Fig.8 での値はいずれも残差ノルム 10^{-4} 時点の値である。

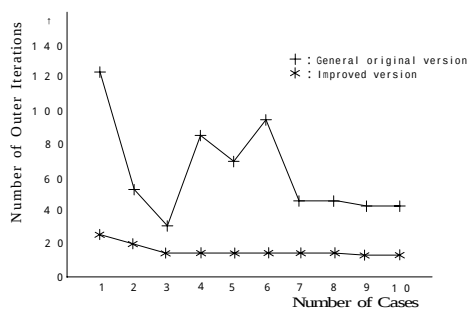


Fig.7 The Relation between Number of Cases and Outer Iterations.

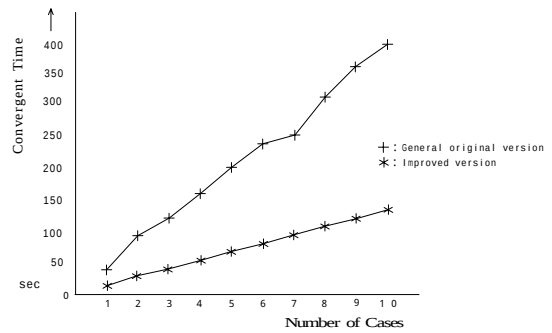


Fig.8 The Relation between Number of Cases and Convergent time.

7.3 固有値間隔に対する原子炉制御安定性守問題への対応

改良版では、更に原子炉制御安定性問題への対応に関する計算を付加した。固有値間隔に関する点で、式(3)は本来最大固有値である実効増倍率と、基本モードの中性子束分布を求める為のものであるが、近年大型原子炉の制御安定性の問題と関連して、1次以上の高次固有値についても解析の必要性が生じている。核的な制御安定性の指標として、以下にみる式 (20)で定義される固有値間隔がしばしば用いられる。この固有値間隔が大きければ、中性子の伝播は炉心全体に及んで安定な中性子束基本モードが形成される。一方、固有値間隔が小さいと高次モードが現れやすく、中性子束分布は歪みをもった不安定なものとなる場合があるので、原子炉制御および炉心管理上、細心の注意が必要である。

固有値間隔を δ_i ($i = 1, 2, \dots$) とおくことで、炉心管理に対応出来る。

$$\delta_i = \frac{1}{k_{e_i}} - \frac{1}{k_{e_0}} \quad (20)$$

ここで $k_{e_0} : \phi_0$ で求まる 0 次モード基本固有値、

$k_{e_i} : \phi_i$ ($i = 1, 2, \dots$) で求まる高次モード固有値

この δ_i が小さいほど炉心は中性子結合度が弱く、特に運転管理に注意が必要とされる。

ここで計算結果によると、原子炉内の炉心寸法と固有値間隔の関係では、固有値の次数が高次になるに従って固有値の間隔比率は高くなる傾向を示しており、又同じ次数である場合においては、炉心寸法が大きくなるに従って固有値間隔の比率は小さくなって行く傾向が見られる。

これらの事から原子炉が大型炉心になるに従って、振動問題に対して出力が敏感に変動する事が予想される。

(Fig.9 参照)

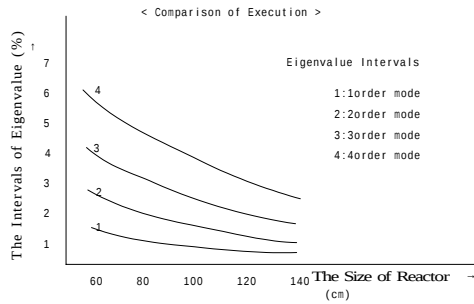


Fig.9 Illustration of Eigenvalue Intervals.

8. 結言

今回の改良版では、高速安定解法を目指す方向として、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BCGSTAB法を基礎反復に、その前処理としてTF法を選定して組み合わせた。プログラムを構成する内側反復外側反復の反復バランスも考慮し、収束の判定基準としては相対残差ノルムを定義した。この考えによると、原子炉の組成を変更した場合でも、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、更に改良版では、計算上で原子炉制御安定性問題への対応と予想も含めて考察する事も出来た。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改良版は、実用化への期待に大きいものがある。

参考文献

[1] 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.

[2] 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, スパース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.

[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] T.Nakagawa : Summary of JENDL-3.2 General Purpose File, JAERI-M.1998.

[5] 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.

[6] R.S.Varga, Matrix Iterative Analysis, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N.J. 1962.

[7] M. R. Hestenes, E. Stiefel, Methods of conjugate gradients for solving linear systems, J. Res. Nat. Bur. Standard vol. 49, (1952), pp.33-53.

[8] 村田健郎, 小国力, 唐木幸比古, スパースマトリクス, 丸善,

[9] 張紹良, 藤野清次, ランチョス・プロセスに基づく積型反復解法, 日本応用数学会論文誌, VOL.5, No.4, (1995), pp.343-360.

[10] 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.

[11] A.E. Walter, A. B. Reynolds, "FAST BREEDER REACTORS", Pergamon Press, 1981.

[12] 浅井忠一他著, 原子力ハンドブック(新版), オーム社, 1989.

[13] 堀雅夫, 基礎高速炉工学, 基礎高速炉工学編集委員会, 日刊工業新聞社, 1993.

[14] R.Froehlich, in Mathematical Models and Computational Techniques for Analysis of Nuclear Systems, USAEC CONF-730414-P2, (1973), V-1.