一次元平板体系における中性子拡散方程式及び輸送方程式の離散化手法とその精度[1]

2025/7/15　千葉　豪

1　拡散方程式の場合

一次元の中性子拡散方程式は以下のように記述される。

$$-\frac{d}{dz}\left\{D(z)\frac{d\phi(z)}{dz}\right\}+\sigma(z)\phi(z)=q(z) \tag{1}$$

この式では、$\phi(z)$ 及び $D(z)\frac{d\phi(z)}{dz}$ が微分可能であることが暗黙の前提となっていることから、これらは空間的に連続な関数であると言える[2]。$D(z)\frac{d\phi(z)}{dz}$ が連続であるということは、D の値が一定となる（もしくは連続的に変化する）領域では $\frac{d\phi(z)}{dz}$ も連続となるため $\phi(z)$ は滑らかとなるが、D の値が異なる領域が接する境界上では $\phi(z)$ は滑らかとはならないことを意味している。

D の値が一定となる領域毎に考えた場合、各領域の拡散方程式は以下のように書き直すことができる。

$$-D(z)\frac{d^2\phi(z)}{dz^2}+\sigma(z)\phi(z)=q(z) \tag{2}$$

ここで、D が異なる領域間の境界では $\phi(z)$ と $D\frac{d\phi(z)}{dz}$ の連続条件が満たされなければならないことに留意する必要がある。

さて、$\phi(z)$ が z_0 周りで滑らかな関数であるとするならば、$\phi(z_0+\Delta z)$ に対して、以下のテーラー展開が良い近似を与えることが期待される。

$$\phi(z_0+\Delta z)=\phi(z_0)+\left.\frac{d\phi(z)}{dz}\right|_{z_0}\Delta z+\frac{1}{2!}\left.\frac{d^2\phi(z)}{dz^2}\right|_{z_0}(\Delta z)^2+\frac{1}{3!}\left.\frac{d^3\phi(z)}{dz^3}\right|_{z_0}(\Delta z)^3+O((\Delta z)^4) \tag{3}$$

同様に以下の式も成り立つ。

$$\phi(z_0-\Delta z)=\phi(z_0)-\left.\frac{d\phi(z)}{dz}\right|_{z_0}\Delta z+\frac{1}{2!}\left.\frac{d^2\phi(z)}{dz^2}\right|_{z_0}(\Delta z)^2-\frac{1}{3!}\left.\frac{d^3\phi(z)}{dz^3}\right|_{z_0}(\Delta z)^3+O((\Delta z)^4) \tag{4}$$

z_0 における $\phi(z)$ の一階微分に対する二次精度の差分式は、式 (3) から式 (4) を引くことにより以下のように得られる。

$$\left.\frac{d\phi(z)}{dz}\right|_{z_0}=\frac{\phi(z_0+\Delta z)-\phi(z_0-\Delta z)}{2\Delta z} \tag{5}$$

同様に、z_0 における $\phi(z)$ の二階微分に対する二次精度の差分式は、式 (3) と式 (4) を足すことにより以下のように得られる。

$$\left.\frac{d^2\phi(z)}{dz^2}\right|_{z_0}=\frac{\phi(z_0+\Delta z)-2\phi(z_0)+\phi(z_0-\Delta z)}{(\Delta z)^2} \tag{6}$$

さらに、z_0 における $\phi(z)$ は、$\phi(z_0+\Delta z)$ と $\phi(z_0-\Delta z)$ の値を用いて二次の精度で以下のように近似することができる。これも式 (3) と式 (4) を足すことによって得られる。この式は「ダイヤモンド差分近似」に相当するものである。

$$\phi(z_0)=\frac{\phi(z_0+\Delta z)+\phi(z_0-\Delta z)}{2} \tag{7}$$

[1] /Document/Education/SpatialError

[2] $D\frac{d\phi}{dz}$ は P_N 方程式における角度中性子束の 1 次モーメントに対応する物理量であり連続関数である。

1.1　有限体積法による空間の離散化

D 及び σ の値が各メッシュで一定となるように、また全てのメッシュの長さが同一となるように、空間のメッシュ分割を行うものとする。メッシュ境界を $z_{i-1/2}$、$z_{i+1/2}$ とした i 番目のメッシュについて拡散方程式 (2) を積分すると以下が得られる。

$$-D(z_i)\left.\frac{d\phi(z)}{dz}\right|_{z_{i+1/2}}+D(z_i)\left.\frac{d\phi(z)}{dz}\right|_{z_{i-1/2}}+\sigma(z_i)\int_{z_{i-1/2}}^{z_{i+1/2}}\phi(z)dz=\int_{z_{i-1/2}}^{z_{1+1/2}}q(z)dz \tag{8}$$

$\phi(z)$ と $q(z)$ を z_i 周りの 1 次のテーラー展開で近似することで、式 (8) の左辺第 3 項と右辺は二次精度で以下のように書き直せる。

$$-D(z_i)\left.\frac{d\phi(z)}{dz}\right|_{z_{i+1/2}}+D(z_i)\left.\frac{d\phi(z)}{dz}\right|_{z_{i-1/2}}+\sigma(z_i)\phi(z_i)\Delta z=q(z_i)\Delta z \tag{9}$$

仮にメッシュi と接しているメッシュ$(i-1)$、$(i+1)$ の D がメッシュi と同じ値であるとするならば、$\phi(z)$ はメッシュ$(i-1)$ から $(i+1)$ にわたって滑らかとなるため、式 (9) は、一階微分項に対して二次精度である差分式 (5) を導入することで以下のように離散化することが出来る。

$$-D(z_i)\frac{\phi(z_{i+1})-2\phi(z_i)+\phi(z_{i-1})}{\Delta z}+\sigma(z_i)\phi(z_i)\Delta z=q(z_i)\Delta z \tag{10}$$

これまでの議論から明らかなように、この離散化された方程式は二次精度となる。また、この式は後述する有限差分法のものと一致する。

一方、隣接メッシュ間で D が異なる場合は、メッシュ間の境界周りの $\phi(z)$ の 1 次のテーラー展開を考える。例えば、$\left.\frac{d\phi(z)}{dz}\right|_{z_{i+1/2}}$ の場合は以下の近似を導入する。

$$\phi(z_i)=\phi(z_{i+1/2})-\frac{\Delta z}{2}\left.\frac{d\phi(z)}{dz}\right|_{z_{i+1/2}}+O((\Delta z)^2) \tag{11}$$

従って、$z_{i+1/2}$ における一階微分項の差分式は一次精度で以下のように書ける。

$$\left.\frac{d\phi(z)}{dz}\right|_{z^-_{i+1/2}}=\frac{\phi(z_{i+1/2})-\phi(z_i)}{\Delta z/2} \tag{12}$$

なお、この一階微分項は D が異なるメッシュの境界では連続とはならないため、隣接するメッシュ$(i+1)$ でも別に定義される。それと区別するため、ここでは $z_{i+1/2}$ に対して肩添字 $-$ を導入している。メッシュ$(i+1)$ で定義されるこの一階微分項の差分式は以下のように記述される。

$$\left.\frac{d\phi(z)}{dz}\right|_{z^+_{i+1/2}}=\frac{\phi(z_{i+1})-\phi(z_{i+1/2})}{\Delta z/2} \tag{13}$$

$D\frac{d\phi(z)}{dz}$ がメッシュ境界で連続であること、すなわち

$$D(z_i)\left.\frac{d\phi(z)}{dz}\right|_{z^-_{i+1/2}}=D(z_{i+1})\left.\frac{d\phi(z)}{dz}\right|_{z^+_{i+1/2}} \tag{14}$$

の関係式より、$\phi(z_{i+1/2})$ を $\phi(z_{i+1})$ と $\phi(z_i)$ で記述することが出来るので、式 (9) はメッシュ中点での $\phi(z)$ のみを用いた離散化方程式となる。なお、この離散化方程式の精度は一次になるものと考えられる。

以上で述べた方法が有限体積法と呼ばれ、D の値が異なる媒質が複数存在するような体系への適用が比較的容易であるという利点を有する。

1.2　有限差分法による空間の離散化

D の値が一定の領域における拡散方程式 (2) に対しては、差分式 (6) を直接適用すればよい。これが有限差分法に該当し、離散化後の式として以下が得られる。

$$-D(z_i)\frac{\phi(z_{i+1})-2\phi(z_i)+\phi(z_{i-1})}{(\Delta z)^2}+\sigma(z_i)\phi(z_i)=q(z_i) \tag{15}$$

前述した通り、これは式 (10) と同一となる。

一方、D の値が異なる媒質が複数存在する体系に対しては、$\phi(z)$ が滑らかな関数とならないため、差分式 (6) を直接適用する場合には大きな誤差が生じるものと考えられる。

2　輸送方程式の場合

一次元の中性子輸送方程式は以下のように記述される。

$$\mu\frac{\partial f(z,\mu)}{\partial z}+\sigma f(z,\mu)=q(z,\mu) \tag{16}$$

ここで、μ は着目方向と z 軸とがなす角の余弦を示す。この微分方程式の解析解は形式的に以下で与えられる。

$$f(z,\mu)=\exp\left(-\frac{\sigma}{\mu}z\right)\int q(z,\mu)\exp\left(\frac{\sigma}{\mu}z\right)dz+C\exp\left(-\frac{\sigma}{\mu}z\right) \tag{17}$$

この式より、$f(z,\mu)$ について、ある μ の値における z に対する分布を考えると、σ が異なる領域では異なる指数関数に従うため、z について滑らかな関数とはならないことが分かる。

以降では、メッシュ分割を拡散方程式の場合と同様に行うものとする。また、簡単のため、$f(z_i,\mu)$ を f_i と示すこととする。

メッシュ i の源が空間的に一定である場合、輸送方程式 (16) の解析解は下のように得ることができる。

$$f_{i+1/2}=f_{i-1/2}\exp(-\tau)+\frac{1}{\sigma}\left(1-\exp(-\tau)\right)q_i \tag{18}$$

ここで、

$$\tau=\sigma\Delta z/\mu \tag{19}$$

である。

また、メッシュ内の源が一次関数 $(p_i(z-z_i)+q_i)$ として記述できる場合には、解析解は以下となる。

$$f_{i+1/2}=f_{i-1/2}\exp(-\tau)+\frac{1}{\sigma}\left(1-\exp(-\tau)\right)q_i+\frac{p_i}{\sigma}\left\{\frac{\Delta z}{2}\left(1+\exp(-\tau)\right)-\frac{\mu}{\sigma}\left(1-\exp(-\tau)\right)\right\} \tag{20}$$

なお、式 (18) や (20) の導出においては、メッシュ内の源分布のみに仮定が導入されていることを繰り返しとなるが述べておく。

2.1　有限体積法による空間の離散化

式 (16) を $[z_{i-1/2},z_{i+1/2}]$ で積分すると以下の式を得る。

$$\mu f_{i+1/2}-\mu f_{i-1/2}+\sigma\int_{z_{i-1/2}}^{z_{i+1/2}}f(z,\mu)dz=\int_{z_{i-1/2}}^{z_{i+1/2}}q(z,\mu)dz \tag{21}$$

ここで、メッシュ i における f、q について**一次のテーラー展開で近似できるとするならば**、式 (21) はメッシュ中点における値 f_i、q_i を用いて以下のように書き直せる。

$$\mu f_{i+1/2}-\mu f_{i-1/2}+\sigma f_i\Delta z=q_i\Delta z \tag{22}$$

また、メッシュ中点の値 f_i は端点の値 $f_{i+1/2}$、$f_{i-1/2}$ を用いて以下のように書ける。

$$f_i = \frac{f_{i+1/2} + f_{i-1/2}}{2} \tag{23}$$

その結果、式 (22) は次のように書き直せる。

$$f_{i+1/2} = \frac{1-\tau/2}{1+\tau/2} f_{i-1/2} + \frac{1}{1+\tau/2}\frac{\tau q_i}{\sigma} \tag{24}$$

これが有限体積法とダイヤモンド差分近似を導入した輸送方程式の離散化後の式であり、近似精度は二次となる[3]。

2.2 有限差分法による空間の離散化

$f(z,\mu)$ が滑らかとなる領域、すなわち σ が一定である領域内については、輸送方程式の微分項に対して差分式を直接適用することができる。ここではメッシュ端で離散化する場合の例を示す。

z_i における微係数 $\left.\dfrac{\partial f(z,\mu)}{\partial z}\right|_{z_i}$ は二次精度で以下のように記述できる。

$$\left.\frac{\partial f(z,\mu)}{\partial z}\right|_{z_i} = \frac{f_{i+1/2} - f_{i-1/2}}{\Delta z} \tag{26}$$

また、f_i についても $f_{i+1/2}$、$f_{i-1/2}$ を用いて二次精度で以下のように記述できる。

$$f_i = \frac{f_{i+1/2} + f_{i-1/2}}{2} \tag{27}$$

z_i における源 q_i についても同様である。この結果、有限体積法で得られた離散化後の式 (24) と同一のものを得ることが出来る。

3 まとめ

以上の議論をまとめると以下となる。

- 拡散方程式を有限体積法で解く場合、拡散係数 D が一定である領域に対しては二次精度であるが、D が異なる領域の境界付近では一次精度となる。
- 輸送方程式をダイアモンド差分で解く場合は二次精度である。

本メモに対して名古屋大学の遠藤知弘氏から貴重なご助言、ご示唆をいただいた。ここに深い謝意を表する。

[3]ここでは、離散化後の方程式 (24) と、源分布に仮定が与えられたときの解析解 (18)(20) との関係について、パーデ近似を用いて整理する。

式 (24) を以下のように変形する。

$$f_{i+1/2} = f_{i-1/2}\frac{1-\tau/2}{1+\tau/2} + \frac{1}{\sigma}\frac{(1+\tau/2)-(1-\tau/2)}{1+\tau/2} q_i \tag{25}$$

メッシュi における源の分布が一定であるとした場合の解析解は式 (18) で与えられる。ここで、式 (25) の項 $(1-\tau/2)/(1+\tau/2)$ は指数関数 $\exp(-\tau)$ に対する [1/1] 次のパーデ近似となっていることから、これを指数関数で近似すると、式 (25) は式 (18) と一致する。

$\exp(-\tau)$ に対する [1/1] 次のパーデ近似の誤差は τ の二乗に比例することから、源がメッシュ内で一定である場合には式 (24) は二次精度となっていることが分かる。また、源分布が一次関数で近似できる場合でも、解析解 (20) の右辺第三項の指数関数に対して [1/1] 次のパーデ近似を適用するとこの項はゼロとなることから、式 (24) は同様に二次精度になっていると言える。