

拡散型微分方程式への微分解析機への応用

渡辺 勝・安達 芳夫・新井 義男・渡部 弘之

一般に偏微分方程式を微分解析機で解く場合、一つの変数だけ残して、他は偏微係数を定差係数の形におきかえねばならぬ。拡散型方程式の場合

- (i) 時間座標について Δt おきの解を求めるか
- (ii) 空間座標について Δx ごとの点について解を求めるか

の二通りの方法がある⁽¹⁾⁽²⁾。(ii)の方法では分けた点の数だけの連立方程式が得られ、精度をおとさないためには、分割すべき点の数が多くなり、したがって積分機も多数必要である。方程式自身の形や境界条件が複雑であると、さらに数が増える。ただしこの方法が使えるならば、解が一度に決まるので能率的ではある。

(i)の方法は微分方程式の数値計算法と同様に、ステップごとの解を一つ一つ求めてゆかねばならないから、時間はかかるが、少ない装置の場合には適当した方法である。

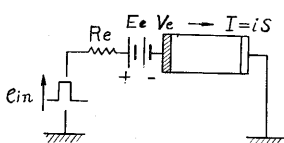
最近このような問題の依頼を受けて、方法(i)を用いて解く機会をもったので、その結果をまとめて報告する。

はじめの例は半導体内の少数キャリアの拡散の問題で正しく偏微分方程式で良い例である。あとの原子炉の場合は偏微分方程式ではないが、取扱いがよく似ているので参考になると思われる。

1. ゲルマニウム・ダイオードの蓄積時間の計算

ゲルマニウム・ダイオードの少数キャリア蓄積時間(minority carrier storage time)を実験的に測定し、これを半導体内の少数キャリアの拡散によるものとして説明し、拡散方程式を実験条件で決められる境界条件のもとに解いて得られる計算値と比較しようというのであって、安達助教の依頼によって行った計算である。

(1) 拡散方程式と境界条件



第 1 図 ゲルマニウムダイオードの蓄積時間測定の実験原理図

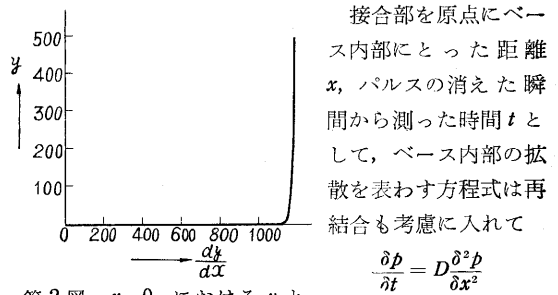
図に示すような p-n ジャンクションの p 側に負のバイアス電源 E_e を接続しておく。直列抵抗 R_e を介して正の脉冲 e_{in} を加え

ると、ジャンクションを通して p 側から n 側に少数キャリア(正孔)が送りこまれ、ベース(n領域)内部に正孔の分布を生ずる。パルスが消えた後は、正孔は拡散に

よって両端から流出し、一部は電子との再結合により減少する。直列抵抗 R_e を通る電流を観測すれば、分布が消滅するまでの時間が分る。

以下説明に必要な記号とその値をまとめておく。

- p : ベース内部の正孔密度
- p_0 : 同じく熱平衡状態における正孔密度 $= 2.5 \times 10^{12}$ [cm⁻³]
- D : 正孔の拡散係数 $= 45$ [cm² sec⁻¹]
- τ : 正孔の平均寿命 $= 10^{-4}$ [sec]
- $A = q/kT = 40$ [ボルト]
- T : 絶対温度
- k : ボルツマン常数 $= 0.857 \times 10^{-4}$ [電子ボルト/度]
- q : 電子の電荷 $= 1.6 \times 10^{-19}$ [クーロン]
- E_e : バイアス電圧 $= -3$ [ボルト]
- R_e : 直列抵抗 $= 10^3$ [Ω]
- S : ジャンクションの断面積 $= 10^{-2}$ [cm²]
- w : ベースの厚み $= 10^{-2}$ [cm]
- e_{in} : 入力パルスの高さ ~ 10 [ボルト]
- V_e : ジャンクションに加わる電圧
- I_e : ジャンクションに流れこむ電流



第 2 図 $x=0$ における y と

$$\frac{\delta y}{\delta x} \text{ の関係。(2) 式参照}$$

$$\frac{\delta p}{\delta t} = D \frac{\delta^2 p}{\delta x^2}$$

$$\frac{p-p_0}{\tau}$$

両端における正孔密度はボルツマンの法則に従って

$$x=0 \quad p(0, t) = p_0 e^{AV_e} = p_0 e^{A(E_e - R_e I_e)}$$

$$= p_0 e^{A\{E_e + qDSR_e \frac{\delta p}{\delta x}(0, t)\}}$$

$$x=w \quad p(w, t) = p_0$$

これらの式に変換 $(p-p_0)/p_0 = y$, $t/\tau = t'$, $x/L = x'$ ($L^2 = D\tau$) を行って無次元化し、 t' , x' を改めて t , x とおけば

$$\frac{\delta y}{\delta t} = \frac{\delta^2 y}{\delta x^2} - y \tag{1}$$

$$x=0 \quad y(0, t) = e^{\Delta(E_0 + \alpha \frac{\partial y}{\partial x}(0, t))} - 1, \quad (2)$$

$$\alpha = qDSR_e p_0 / L$$

$$x=w' = \frac{w}{L} \quad y(w', t) = 0 \quad (3)$$

前記の数値を用いて α, w' を求めると

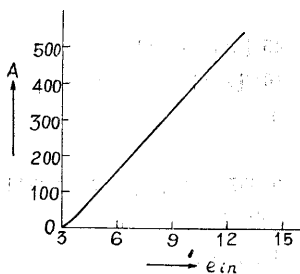
$$\alpha = 2.68 \times 10^{-3} \quad w' = 0.149$$

つぎに初期条件を求めよう。それには上の式で

$\delta y / \delta t = 0, E_0 \rightarrow E_0 + e_{in}$ において得られる分布を用いばよい。

$$t=0 \quad y(x, 0) = A \frac{\text{sh}(w' - x)}{\text{sh} w'} \quad (4)$$

ただし A は $A = e^{\Delta(E_0 + e_{in} - (\text{coth } w') \alpha A)} - 1$ を解いて求められる。 A と e_{in} の関係は第2図から分るよう



第3図 A と e_{in} との関係

に、ほぼ直線的であるとみなせる。以下の計算では $A=500$ とした。

以上で計算に必要な式(1)~(4)がすべて求められた。解くべき式(1)は線型であるが、境界条件(2)が非線型で、少し面倒である。このま

までも機械にかけられるが、取扱いを楽にするため、さらに $y = \eta e^{-t}$ と変換して

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = \frac{\partial^2 \eta}{\partial x^2} \quad (5)$$

境界条件の方は(2)の y のところを ηe^{-t} とすればよい。

(2) 計算方法と結果

(5) を t_{n-1} から $t_n = t_{n-1} + \Delta t$ まで積分すれば

$$\int_{t_{n-1}}^{t_n} \frac{\partial \eta}{\partial t} dt = \int_{t_{n-1}}^{t_n} \frac{\partial^2 \eta}{\partial x^2} dt$$

右辺の積分を梯形則によって近似すれば

$$\eta(t_n) - \eta(t_{n-1}) = \frac{1}{2} \left\{ \left(\frac{\partial^2 \eta}{\partial x^2} \right)_{t_n} + \left(\frac{\partial^2 \eta}{\partial x^2} \right)_{t_{n-1}} \right\} \Delta t \quad (6)$$

この式は $(\Delta t)^2$ を省略する近似において正しい。そして $\eta(x, t_{n-1})$ が知っている時、 $\eta(x, t_n)$ を求める微分方程式とみなすことができる。したがって初期分布 $\eta(x, t_0)$ が与えられれば、順次 $\eta(x, t_1) \rightarrow \eta(x, t_2) \dots \eta(x, t_n)$ を求めることができる。

近似を高めるには積分の近似値として梯形則の代りに Simpson 則またはさらに高い近似式を用いばよい。ただし $\eta(x, t_n)$ を求めるのに $\eta(x, t_{n-1})$ だけでなく $\eta(x, t_{n-2}) \dots$ を必要とするので、演算装置および操作がよけいに入用となる。これらに関しては詳しい研究もあるから参照されるとよい⁽³⁾⁽⁴⁾。

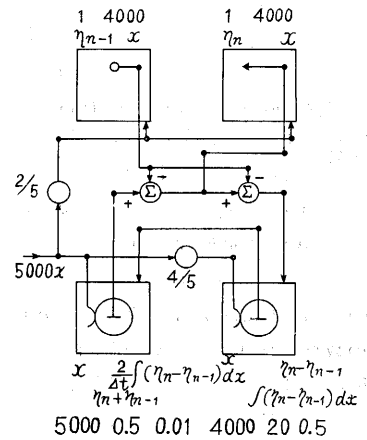
(6)を実際に機械の上で結線するには、これを2回積分

した形で表わした方がよい。以下 $\eta(x, t_{n-1}) = \eta_{n-1}(x), \eta(x, t_n) = \eta_n(x)$ と書いて

$$\eta_n(x) + \eta_{n-1}(x) = \iint \left[\frac{\partial^2}{\partial t^2} \right] \{ \eta_n(x) - \eta_{n-1}(x) \} dx dx$$

結線図は第4図に示される。

Δt のとり方は近似を悪くしない程度に大きくとった方がよい。この問題では $\Delta t = 0.001$ にとった。 Δt の適当な大きさが推定し難い時は、 $\eta(x=0)$ に適当な変化を与えて解が存在するような Δt を逆算するのも一方法である。



第4図 $\frac{\partial \eta}{\partial t} = \frac{\partial^2 \eta}{\partial x^2}$ を step-by-step

結線図において右側の積分機の

に解く結線図

‘初期条件’は、 $x=0$ における $\eta_n - \eta_{n-1}$ 、左側では $\frac{\partial \eta_n}{\partial x}$

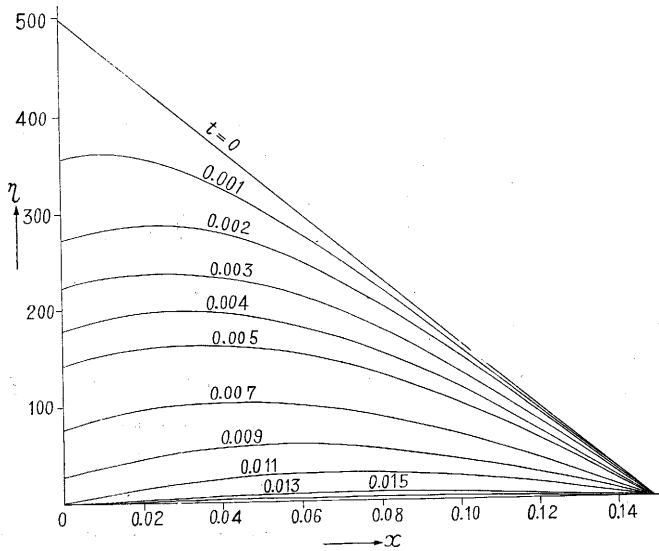
+ $\frac{\partial \eta_{n-1}}{\partial x}$ であり、この際 η_n と $\frac{\partial \eta_n}{\partial x}$ は独立でない。変換前の非線型関係式(2)で決められる y と $\delta y / \delta x$ に対し e^t を掛けて $\eta, \delta \eta / \delta x$ が決まる。 y と $\delta y / \delta x$ の関係は第2図に示されるように、はじめは $\delta y / \delta x$ がほぼ一定で y だけが減少し、 y が0近くなると、逆に $\delta y / \delta x$ が急に減る。こういう関係で結局、 $x=0$ では $\eta, \delta \eta / \delta x$ のうち一方だけが自由に変えられるから、これを調節して、 $x=0.149$ で $\eta=0$ になるように trial で求めることになる。

一区切の計算で得た η_n は、次のステップの入力に使われる。解を書かせる時は方眼紙を用いた方が便利であるが、これをそのまま入力に使うと、自動追従装置に方眼紙の目盛線が感ずるため、解の書かれた紙を裏返して、硝子板上で裏側から光をあてて、透しながらトレースし墨書する手段をとった。

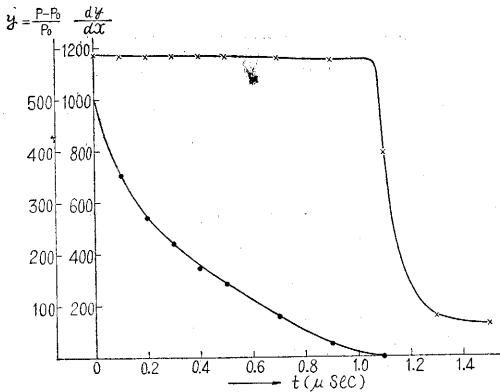
以上のようにして得られた結果を第5図に示す。また実験との比較のため、 $x=0$ における $y, \delta y / \delta x$ を t についてプロットすれば第6図のようになる。

(3) 不連続性についての注意

計算中に気付いた注意をのべておこう。第5図から分かるように、この問題では出初めに $\left(\frac{\partial \eta}{\partial x} \right)_{x=0}$ が不連続な変り方をする。これが原因となって、初期分布の場合の $\delta^2 \eta_0 / \delta x^2$ とつぎの $\delta^2 \eta_1 / \delta x^2$ 、つまり曲線の曲り具合が大きく変化している。すなわち $\delta^2 \eta_0 / \delta x^2 \approx 0$ なのに、 $\delta^2 \eta_1 /$

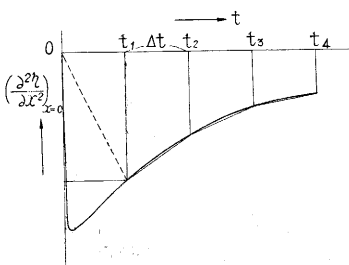


第 5 図 正孔分布の時間的变化



第 6 図 $x=0$ における y (正孔密度) と $\frac{dy}{dx}$ (電流) の時間的变化

δx^2 はかなり大きい。 $\delta^2 \eta / \delta x^2$ を t に対してもみれば第 7 図のようになっていよう。それで最初のステップで



第 7 図 イニシャルステップの近似における梯形則と矩形則の比較
この誤差が伝播する可能性が生ずる。そもそも第 7 図のような曲線で急激な立上りを示す部分の近似積分に梯形則を使うのが無理なので、ここはむしろ

$$\frac{\delta^2 \eta_1}{\delta x^2} = \frac{1}{\Delta t} (\eta_1 - \eta_0)$$

近似式

$$\frac{\delta^2 \eta_1}{\delta x^2} + \frac{\delta^2 \eta_0}{\delta x^2} = \frac{2}{\Delta t} (\eta_1 - \eta_0)$$

を不用意に使うと $\delta^2 \eta_1 / \delta x^2$ は大きく出過ぎ、つぎのステップで $\delta^2 \eta_2 / \delta x^2$ が小さく出過ぎ、

として矩形近似をとった方がよいと思われる。実際の計算でもはじめの一回だけはこの式を使い、以後普通の方法に従った。

物理的に考えると、 $t < 0$ の時加えてあったパルスが $t=0$ で急になくなったとしたために上記 $(\delta \eta / \delta x)_{x=0}$ の不連続がおきたので、パルスが $e^{-t/T}$ のように尾を引くと考えれば、上のべた不連続性も解消するものと思う。

2. 球形原子炉の燃焼度計算

電気試験所電力部の発電研究室において、天然ウラン黒鉛型原子炉の燃焼度の計算を行うのに、生研の微分解析機を利用することを計画された。以下にその依頼によって行った計算を紹介する。

(1) 中性子の拡散方程式

与えられた炉とバックリングの等しい球形の原子炉を考え、その燃焼度を計算する。球形とみなせば中性子束分布を決める式が常微分方程式となり、微分解析機が容易に利用でき燃焼計画に必要な、燃料の交換、配置換え等も理想化された状態で容易に行うことができる。

球形原子炉の中性子の拡散方程式は

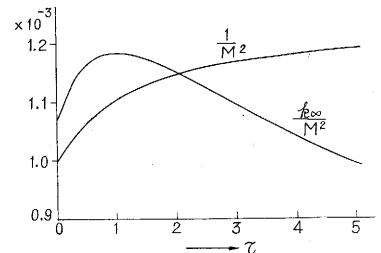
$$\frac{d^2 \phi}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d\phi}{dr} + B^2 \phi = 0 \quad (7)$$

$$B^2 = \frac{\alpha k_{\infty}(\tau) - 1}{M^2(\tau)}, \quad \tau = \int_0^t \phi dt$$

ここに τ は中性子照射量 (10^{21}cm^{-2} 単位)、 k_{∞} は増倍係数、 M^2 は移動面積。

原子炉は運転開始前は炉内で一様な組成をもっているが、運転開始後は各場所のうけた中性子照射量に応じて組成が変わってくる。このことを表すために上の式で k_{∞} や M^2 を τ の関数の形に書いてあり、その関係は燃料の核反応の過程を計算して求められるもので、第 8 図に示してある。

上の方程式で α は境界条件を満足するように決められるべき固有値であるが、その物理的意味は次の通りである。実際の炉では反応度に余裕を持たせて

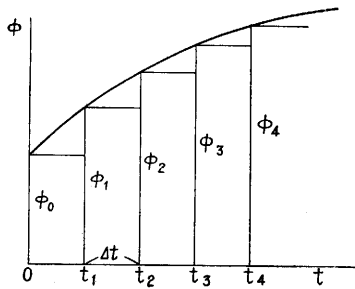


第 8 図 中性子照射量 τ に対する $1/M^2$, k_{∞}/M^2 の変化

作ってある。つまり炉を臨界の大いさより大きく作っておき、適当な吸収体を挿入して平衡を保たせる。このことに対応して炉内の特性を変えずに、分裂当りに発生する中性子数が減ったものと考え、解 ϕ が存在するように

α を調整する. k_{∞} は実効倍率とでもいってよからう.

(7)を解くにあたり, 運転を始めてから, 一定時間 Δt おきの解を求める. この際その時刻においては系は定常であるとみなすわけで, 一種の断熱的取扱いを行っていることに相当する. この場合 k_{∞} , M^2 などを場所の関数として決めるために, 各点のその時刻までの中性子照射量 $\tau = \int_0^t \phi dt$ を算出しなければならない. この積分値を $\tau = \sum_{i=0}^{n-1} \phi_i \Delta t$ によって近似する(第9図).



第9図 $\tau = \int_0^t \phi dt$ の計算に用いた近似法

$$r = \frac{R_s}{2} \text{ で } \frac{d\phi}{dr} = 0 \quad (8)$$

$$r = R_s \text{ で } \phi = 0 \quad (9)$$

また ϕ の規格化条件を次のように決めた(本章の終参照)

$$r = \frac{R_s}{2} \text{ で } \phi = 1 \quad (10)$$

こうすると中心部の照射量は Δt ごとに一定量ずつ増加する. この増加量を $\Delta\tau = 0.3$ にとった. 中心部の中性子束 $1.8 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2} \text{ sec}^{-1}$ とすれば, $\Delta t \sim 0.5$ 年に相当する.

(2) 計算方法

微分解析機で(7)を解く際, 第2項の $\frac{d\phi}{dr}$ の演算は専用の割算機があれば問題ないが, 積分機だけを行うには, いわゆるフィードバック接続を用いなければならぬ($r=0$ まで求める場合). この方法は結線を不用意に行くと不安定を生ずることが報告もされ, われわれの所でも経験した. それで取りあえず以下にのべる変換によって, これをさけた. しかし計算完了後, 試験的に実施した結果ではその心配はなかったので, 今後の計算には活用できると思う.

ところでわれわれの問題では, $r=0$ のところまで解く必要はないから, 独立変数に対数スケールを用

いて

$$\rho = \log r \quad (11)$$

もとの式は次のように変換される.

$$\frac{d^2\phi}{d\rho^2} + \frac{d\phi}{d\rho} + e^{2\rho} \frac{\alpha k_{\infty} - 1}{M^2} \phi = 0 \quad (12)$$

結線に容易な形に積分すれば

$$\frac{d\phi}{d\rho} + \phi + \int \phi d \left(\frac{\alpha k_{\infty}}{M^2} - \frac{1}{M^2} \right) d \left(\frac{e^{2\rho}}{2} \right) = 0$$

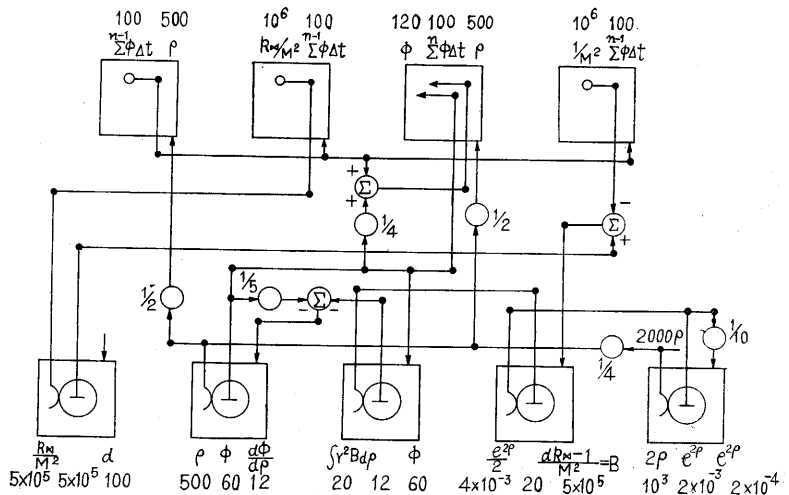
結線図を第10図に示す. この結線で上式を解くと同時に $\tau_{n+1} = \int_0^{t_{n+1}} \phi dt = \sum_{i=0}^n \phi_i \Delta t = \sum_{i=0}^{n-1} \phi_i \Delta t + \phi_n \Delta t$ を求める. 次のステップの際の入力に用いる. $\phi_n \Delta t$ を加える際, 中心部で $\Delta\tau = 0.3$ にとったので, ギャ比を $0.3 \times \frac{100}{60} \times \frac{1}{2} = \frac{1}{4}$ にとってある. 解を求める時 ρ の大きい方から内側にむかって解いた. これは $e^{2\rho}$ による誤差の累積を防ぐ意味でやむを得ないが ϕ を規格化するための手間が一回余分に必要になる.

機械の結線の誤りその他を確かめる意味で, $t=0$ の時の解を求めて解析解と比較した. また規格化のための解を求める時に, 精度(再現性の意味での)を調べてみたが, 固有関数で 0.5%, 固有値で 0.1% 程度のバラツキがあった.

(3) 種々の燃焼計画に対する方法と結果

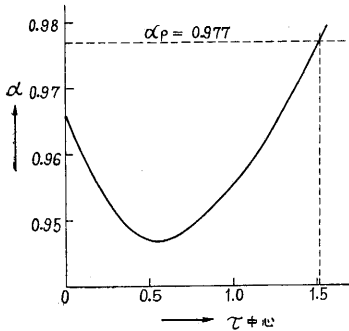
燃焼計画に応じて次の三通りの計算を行った.

- 1) 燃料の交換を行わず, 出力がとれなくなるまで, 燃焼を続けた場合
- 2) 燃料がある所まで燃えたならば, これを取り除いて新しい燃料と交換し燃焼させた場合
- 3) 燃料がある値まで燃して, 炉の中心と外側の部分を反転し, 燃焼を続けた場合



第10図 $\frac{d^2\phi}{d\rho^2} + \frac{d\phi}{d\rho} + \frac{\alpha k_{\infty}(\tau) - 1}{M^2(\tau)} e^{2\rho} \phi = 0, \tau = \sum_{i=0}^{n-1} \phi_i \Delta t$ を step-by-step に解く結線図

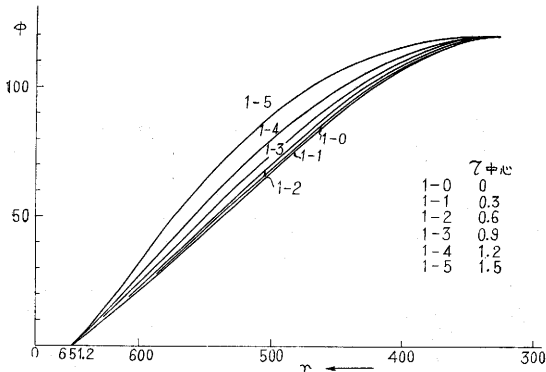
1) についてはすでにのべたスケジュールで計算を進めればよい。固有値 α の変化を求め、これが Xe, Sm による妨害作用に打ち勝てなくなる所で燃焼が終るとした。すなわち $\alpha > \alpha_p = 0.977$ になる所までである (第 11 図)。また中性子束の変り方を第 12 図に示す。運転



第 11 図 燃焼進行にともなう固有値 α の変化

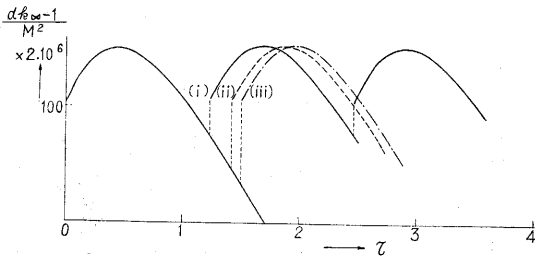
の初期は、内側の k_{∞} が増加するため中性子束が一時急になり、後 k_{∞} の減少とともに平坦化する傾向を示す。

2), 3) にのべた交換操作は入力卓に工夫を施すだけで、簡単に実施できる。まず 2)



第 12 図 燃料進行に伴う中性子分布の変化

の場合である。これは中性子照射量がある値に達した部分を、順次新燃料と交換してゆくという理想化操作を考えれば、入力卓に第 13 図のような曲線を用いて実現で



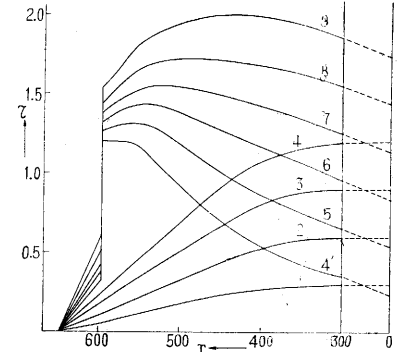
第 13 図 燃焼交換操作をあらわす入力曲線

きる。図の (i) (ii) (iii) はそれぞれ $\tau = 1.23, 1.42, 1.50$ の時に新燃料と交換することを示す。これらの計算は 1) の計算の途中から行ったのであるが、交換後の計算は簡単のため、 $\alpha = 0.977$ すなわち Xe, Sm の妨害作用を乗り切るだけの反応度を持たせて行った。このため中性子束の平坦になる点が移動するが、その点が炉の半径の半分以内に入らぬ限り、燃焼は続くものとすれ

ば、燃料交換の時期が上記のいずれであっても、燃焼は可能である。

3) の燃料の反転は次のように行った。中心部の $\tau = 1.2$ の所までは (1) の計算を用い、ここで反転を行う。この際反転前の座標 r の部分は、反転後 ($R_0^3 - r^3$) に移ったとする。ただし R_0 は実際の炉の半径。その結果、炉内各点の中性子照射量は第 14 図に示す 4 の曲線から、4' の状態に変わる。

このように反転した曲線を第 10 図の左上の入力卓に用い、反転直後の中性子束を求める。以後はこれまでと同じ方法で進める。その結果炉内の燃焼がかなり均一に行われることが分る。



第 14 図 燃料反転前後における炉内各点の中性子照射量 (4→4' が反転を示す)

なおこれらの計算すべてについて、中性子束中の規格化条件は、正確にいえば(10)の代りに $\int \phi \sum_f r^2 dr$ でおきかえるべきである (熱出力一定の条件)。われわれの解析機では $\sum_f(\tau)$ を導入するための入力卓が不足して実現できなかったのは残念である。しかしこのように規格化条件を変えても、各段階の解 ϕ は全体として常数が掛かるだけである (ϕ の方程式が線型だから)。それ故前の計算で dt を一定にとって計算を進めた際、 dt も一定とした考え方を変えて、 dt は一定だが、 dt は ϕ の規格化常数に逆比例して長くなるとみなせば、前の計算はそのまま生きる。この場合中心部の τ は運転時間 t と比例しないことに注意を要する。

§ 2 の計算に対しては、電気試験所後藤所長、山田部長、竹越氏ら電力部の方々のご協力を得たことを厚く感謝する。
(1958. 1. 16)

文 献

- (1) Hartree, D. R. *Calculating Instruments and Machines*, Cambridge University Press, 1950.
- (2) Crank, J. *The Differential Analyser*, Longmans Green & Co., London, 1947.
- (3) Fisher, M. E. : Proceedings of the International Analogy Computation Meeting, Bruxelles, 1956, p. 208.
- (4) " : Journal of the A. C. M., 3, No. 4, 1956, p. 325.