変分ノード法の発見

築城　諒
IFE, OECD Halden Reactor Project
Makoto.Tsuiki@hrp.no

１．はじめに

表題は大げさである。申し訳ない。「変分ノード法（ＶＮＥＭ）」に関してはＮＳＥの０２年７月号に掲載された筆者の論文に詳しい。それは群拡散方程式を変分によって解く新しい方法であり、集合体の非均質性を「集合体不連続因子（これが素晴らしいアイデアであることには全面的に同意する）」よりは多少理論的にすっきりしたやり方で計算に入れようとする。この方法をめぐるあれやこれやを書けというのが編集部の注文である。最大限努力はするが、残念ながら「Ｅｕｒｅｋａ！」などと叫ぶような感動的な場面は無い。

何にせよこのような手法の研究は、国内外で原子力産業界からの需要が一貫して絶えない。また、筆者自身の職場も含めて、若い研究者の参入も見受けられて嬉しいことである。

２．動機と目標

現在、軽水炉の炉心設計・炉心管理においては、単一集合体無限格子計算により集合体均質化少数群核定数を算出し、それをノード法コードに入力して全炉心計算を行うという核計算の方式が一般である。格子計算による均質化と称する手段は、群縮約の方法と共に驚くほど大胆なものであるが、最終結果の精度は、その大胆さからは想像できないほど一般に良好である。もし、炉物理七不思議、というようなものを選定するとするならば、筆者は第一にこの事実を挙げたい。

もし常にこのように精度が良好であれば、核計算の研究など必要ないであろう。が、実はそうでない場合、それも大変にそうでない場合を経験して打ちのめされたことが、筆者の場合、核計算法研究の強い動機付けになっている。（また、良好とは言っても、核計算コードのユーザーが要求する空想的とも言うべき精度に比べると、必ずしも満足できるものとは言えない。）

さて、いろいろな偶然が重なって、筆者の担当はたまたま長い期間ノード法コードの部分であったので、もし「核計算の誤差の要因はもはやノード法コードの側には無く、全て格子計算コードにある」と言えるようになれば大変気持ちがよい。そのため、目標を

「格子計算コードで全炉心を計算した場合と同じ結果がノード法によって得られる」

ことにした。このことは、ＶＮＥＭによって、燃焼履歴を含まない群拡散理論の範囲ではほぼ実現した。

３．開発の日々

精度が理論的に保証されるためには、方法は数理的なものでなければならない。数理的ノード法の分野では、京大の小林（啓）がグリーン関数を用いる方法や有限フーリエ変換法などを提案している。また、ＮＡＩＧの青木（克）が局所適合法を提案している。これらは全て１次元体系では全く同じ形のノード方程式に帰着する。変分法によってもこれと同じ形の方程式が導けることを筆者が発見したのは２０年以上も前のことである。

事情があって変分法のアイデアはその後眠っていたが、最近になって、この方法によってノードの非均質性を容易に取り込めることに気がついた。詳しくは前掲の論文に書いたが、考えついたことのポイントを列記すると、

「変分ノード法では、ノード内の中性子束を試験関数によって展開する。従来は試験関数として例えば直交多項式のような関数を用いた。均質なノードでは比較的少数の項により精度良い展開が可能であろう。しかしながら、非均質のノードではそうはいかない。そこで試験関数を、格子計算の副産物として数値的に作ることにする。そうすることによって、ノードの非均質性を試験関数に含めてしまえるのではないか」。

「全炉心計算では、格子計算と異なり中性子束の全炉心的な、あるいは集合体間の組成ミスマッチによるところの大局的変化を考えに入れなければならない。このような大局的変化をノード毎に直交多項式で表す」。

すなわち中性子束の、ノード内の非均質性に起因する微細構造を格子計算から引継ぎ、大局的な滑らかな変動を直交多項式で表現する。考えてみればこれほど当たり前の、何の特別な工夫も無い、素直な（あるいは愚直な）方法があろうか。

一旦これらを認めれば、以下、古典とも言えるＲｉｔｚの方法を使ってノード方程式の導出までは一直線である。特に論文にまとめてしまうと、必然の坂道を一気に駆け下りたように自分でも暗示にかけられてしまう。しかしながら開発の実際的な過程ではもちろん多くの困難な問題があって、それらを解決してきたのである。ところが振り返ると、解決済みの問題は実に簡単なことに思えて、何故その解決にあれほど時間がかかったのか理解できない。自分の無能さに溜息が出るばかりである。

そのような問題のひとつがＢＷＲにおける制御棒である。制御棒が挿入されたＢＷＲの集合体の、制御棒の挿入された側の境界に沿う中性子束、特に熱中性子束は、あたかもステップ関数のような空間的形状をしているため、多項式近似を受け付けない。そこで誰でも考えるのが、格子計算によって得られる中世子束分布を使えばいい、ということであろう。ところがそうすると、ノード境界で中性子束の連続性が保証できない。異なる集合体の格子計算の結果はノード境界で同一になる保証は無いからである。これも炉物理七不思議のひとつだが、いかなる計算においても、中性子のバランス、あるいは中性子束の連続性のような、是が非でも保持しないと結果が思わしくなくなる（逆に言えば、それを保持していると非常に大胆なことをしても結果は悪くない）ものがあり、変分法における中性子束連続の条件はそのひとつであった。かなり悩んだ末、中性子束の境界平均値を連続にするという、驚くほど平凡な手段によりこの困難は回避できた。

もうひとつの問題は必要な多項式の項数である。ＶＮＥＭでは、多項式の項数さえ増やせば、何の工夫をせずとも計算精度は自動的に向上する、というのが売りである。ただし、項数を増やす順序によって、精度の向上の程度に大差があることが（長い愚かな紆余曲折の後に）分った。すなわち、一方向に多項式の次数を増やすより、クロスターム（２次式同士の積より双１次式）を導入した方が精度の向上により大きく寄与する。今考えると、

前掲の論文にこのことを記載すべきであった。実際にはその結果を踏まえて多項式の順序がさりげなく書かれているので誰もその重要性には気づかないだろう。

かように開発の日々は感動に乏しいものであった。若い人がこれを読んで（実は読むとはあまり考えられないのであるが）気を落とすことの無いように、このような情けない状況は、ひとえに筆者の無能によるものであることを注意しておく。

４．将来

現在ＶＮＥＭを輸送方程式に応用しようと試みている。理論的にはＰＬ法輸送方程式に対する応用は、拡散理論におけると全く同様で問題は無い。また、試験関数の作成は、角度中性子束さえ計算できれば方法は問わない（例えばモンテカルロ法であってもかまわない）。そのため、集合体内の非均質性だけでなく、幾何学的形状をも正確に扱える。しかし実際的にはやはり多くの問題が解決を待ち受けていて、それらは炉物理的には拡散理論の場合よりはるかに面白い。いずれ現在の苦闘の日々と自身の愚かさを、余裕を持って回顧できる時が来ることを期待したい。

０２年８月２３日記