

&lt;第 41 回炉物理夏季セミナー報告&gt;

若手研究会報告

## 空間依存動特性方程式への Krylov 部分空間法の適用

名古屋大学大学院 工学研究科 マテリアル理工学専攻  
修士課程 1年(山根研究室) 伴 雄一郎

## 1 序論

原子炉の過渡解析を正確に行うことは、炉心の安全評価のために非常に重要な項目の一つである。1960年代初頭には計算機資源の面から、動特性方程式を直接解くのではなく、空間依存性を近似して扱う 1 点炉モデルがよく用いられてきた。しかし、1 点炉モデルは解析体系によって計算値の不確定性が大きくなる場合がある<sup>[1]</sup>。従って、実機原子炉に対する安全評価解析においては、解析条件に対して保守的な設定を考慮することで、1 点炉動特性モデルの不確定性を補う場合もある。しかし、この解析条件が過度に保守的になると、安全評価に基づき決定される原子炉の運転条件及び炉心設計が制約され、原子炉の経済性を低下させる可能性がある。炉心の安全性を保ちつつ経済性を向上させるために、空間依存の近似を行わない、より解析精度が高い空間依存動特性モデルが現在の炉心設計に導入されている。しかし、空間依存動特性モデルの計算コストは高いのが一般的である。

空間依存性を考慮した原子炉の動特性解析手法としては、陰解法<sup>[2]</sup>、一般化ルンゲ・クッタ法<sup>[2],[3]</sup>、 $\theta$ 法<sup>[2],[4]</sup>、周波数変換法<sup>[4],[5]</sup>や SCM 法<sup>[2],[6],[7]</sup>が用いられている。近年、計算理工学の分野で一階の常微分方程式の高速計算手法として、Krylov 部分空間法<sup>[8],[9],[10]</sup>が注目されている。Krylov 部分空間法を動特性方程式に用いることによって、既存の方法よりも、高速に計算できる可能性がある。そこで本研究では、Krylov 部分空間法の動特性方程式への適用性を検討する。

## 2 従来法

空間に関して離散化した空間依存動特性方程式を簡易的に表記すると、(2.1)式のような行列形式で表記することができる。

$$\frac{d\vec{\psi}(t)}{dt} = \mathbf{A}(t)\vec{\psi}(t) \quad (2.1)$$

ここで、

$\vec{\psi}(t)$  : 時刻  $t$  における中性子束と遅発先行核密度からなるベクトル

$\mathbf{A}(t) \in \mathbf{R}^{n \times n}$  : 時刻  $t$  における係数行列(行列サイズが  $n \times n$ )

$n$  :  $n = (\text{number of mesh})^{\text{dimension}} \times G + (\text{number of mesh})^{\text{dimension}} \times M$

$G$  : エネルギー群数

$M$  : 遅発先行核種数

である。

一般化ルンゲ・クッタ法、陰解法、 $\theta$ 法など、現在主に用いられている空間依存動特性の解法は、(2.1)式の左辺を差分化することで、(2.1)式の計算を行う。本研究では、従来法の代表として  $\theta$ 法を用いている。 $\theta$ 法の差分方法を(2.2)式に示す。

$$\frac{d\vec{\psi}(t)}{dt} \approx \frac{\vec{\psi}(t+\Delta t) - \vec{\psi}(t)}{\Delta t} = \theta \mathbf{A}(t+\Delta t)\vec{\psi}(t+\Delta t) + (1-\theta)\mathbf{A}(t)\vec{\psi}(t) \quad (2.2)$$

$\theta$  法はおおざっぱに言うと、陽解法と陰解法の平均をしたものである。 $\theta=1$  では陰解法になり、 $\theta=0$  では陽解法になる。また、 $\theta=0.5$  では、クランク・ニコルソン法になる。

(2.2)式を見ると、常微分方程式が連立一次方程式に帰着していることが分かる。このため、空間依存動特性方程式の計算時間は連立一次方程式の計算時間に強く依存している。連立一次方程式の計算時間を短くするために様々な加速法が考案され、本研究でもこれらの手法を用いている。

### 3 Krylov 部分空間法

Krylov 部分空間法は、空間依存動特性方程式の連立一次方程式の解法としてよく用いられている。しかし、本研究で用いる Krylov 部分空間法は、以下に示す指数行列の計算方法として用いるものであり、従来の連立一次方程式への適用とは異なる。

従来法は、時間微分を差分化することで計算を行っている。しかし、Krylov 部分空間法は(2.1)式の左辺を差分化せずに、(2.1)式を解析的に解いた(3.1)式を用いる。

$$\vec{\psi}(t+\Delta t) = \exp[\Delta t \mathbf{A}] \vec{\psi}(t) \quad (3.1)$$

ここで、

$$\exp[\Delta t \mathbf{A}] : \text{係数行列の指数行列(タイムステップ幅: } \Delta t \text{)}$$

である。

指数行列は(3.2)式のような無限級数で定義される。

$$\exp[\Delta t \mathbf{A}] \equiv \mathbf{I} + (\Delta t \mathbf{A}) + \frac{(\Delta t \mathbf{A})^2}{2!} + \dots = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(\Delta t \mathbf{A})^k}{k!} \quad (3.2)$$

指数行列の計算方法としては、テイラー展開、Padé 近似法、Schur 分解などがあるが、これらは主に小規模密行列の適用に適している。一方、空間依存動特性方程式に現れる大規模疎行列の取扱には Krylov 部分空間法の適用が有効である<sup>[8], [9], [10]</sup>。指数行列に適用された Krylov 部分空間法は、様々な分野で用いられ、各分野で成功を収めている<sup>[11], [12]</sup>。

Krylov 部分空間法は以下の2つの利点を持っている。

1. 空間に関する反復計算の必要がない (連立一次方程式を解く必要がない)
2. 大規模疎行列を小規模密行列に変換することができる

一つの目の Krylov 部分空間法の利点は陽解法の特徴と似ており、Krylov 部分空間法は陽解法と同様に、空間・エネルギーに関する反復計算を行わず、従って、収束加速法を用いる必要はないことがわかる。(なお、陽解法自体はタイムステップ幅  $\Delta t$  を非常に小さくしないと正しい解が得られないので、空間依存動特性方程式の解法としては用いられることは少ない。) 二つ目の Krylov 部分空間法の利点について、例えば本研究では、行列の要素が  $96000 \times 96000$  の行列を、Krylov 部分空間法を用いて  $240 \times 240$  の行列に変換している。

部分空間数  $m$  の Krylov 部分空間は、(3.3)式のように行列  $\Delta t \mathbf{A}$  とベクトル  $\vec{\psi}(t)$  の積からなる空間である。

$$K_m(\Delta t \mathbf{A}, \vec{\psi}(t)) = \text{Span}\{\vec{\psi}(t), (\Delta t \mathbf{A})\vec{\psi}(t), (\Delta t \mathbf{A})^2 \vec{\psi}(t), \dots, (\Delta t \mathbf{A})^{m-1} \vec{\psi}(t)\} \quad (3.3)$$

ここで、

$K_m$  : 部分空間数  $m$  の Krylov 部分空間

$\text{Span}$  : ベクトル空間における基底ベクトル

である。

Krylov 部分空間法の計算手順は大まかに以下の3つに分けることができる。また、Krylov 部分空間法の計算手順の概念図を図 3.1 に示す。

1. 部分空間への変換 (大規模疎行列を小規模密行列に圧縮)
2. 部分空間内の指数行列の計算 (小規模密行列の指数行列の計算)
3. 元の空間への変換 (小規模密行列の展開)

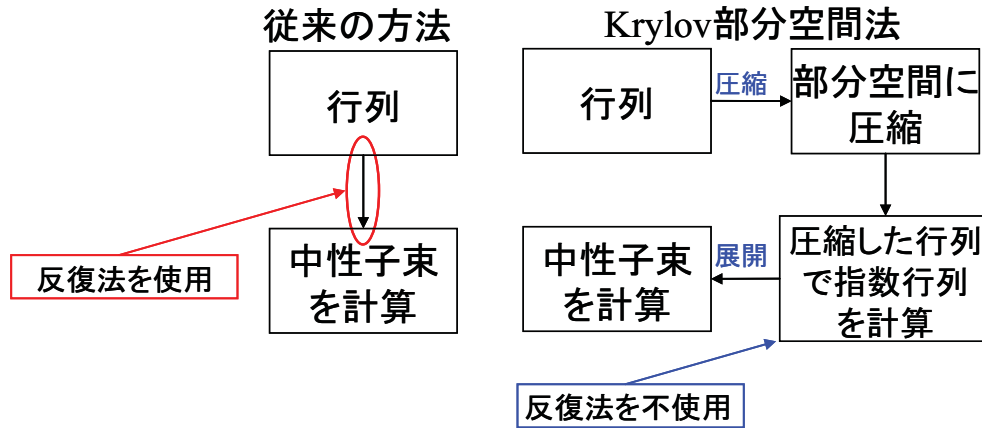


図 3.1 Krylov 部分空間法と従来法の計算手順の違い

本文章ではページの都合上、各部分の計算理論は省略する。詳細は参考文献[8]を参照のこと。

本研究で開発した計算コードの特徴を以下に示す。

1. Krylov 部分空間法による動特性計算
2. Krylov 部分空間内の計算は Padé 近似と scaling and squaring 法を使用
3.  $\theta$  法による動特性計算 (Krylov 部分空間法との計算時間・計算精度の比較のため)
4. Coarse mesh finite difference 法<sup>[13]</sup>と fixed source scaling factor 法<sup>[14]</sup>による  $\theta$  法の加速
5. 有限差分法による三次元炉心計算

## 4. 検証計算

Krylov 部分空間法の計算精度及び計算時間を検討するために TWIGL ベンチマーク問題<sup>[15]</sup>を検証計算に用いる。TWIGL ベンチマーク問題はステップ状とランプ状の反応度の投入方法があるが、本研究ではステップ状のみを用いる。TWIGL ベンチマーク問題は図 4.1 に示すような 2 次元のベンチマーク問題である。しかし、本研究では各手法の体系の大きさに伴う計算時間の増加の傾向についても検討を行うために、TWIGL ベンチマーク問題を多少変更した図 4.2~図 4.4 の場合についても計算を行った。図 4.2 は、オリジナルの 1/4 炉心を全炉心に拡張をしたものである。このとき、境界条件を変更することで、元の TWIGL ベンチマーク問題の計算結果と等しくなるようにした。図 4.3 及び 4.4 は 3 次元 1/4 と全炉心である。この計算体系も上端と下端を反射条件とすることで、元の TWIGL ベンチマーク問題と計算結果が等しくなるようにした。

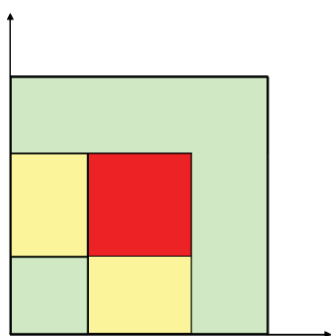


図 4.1 TWIGL ベンチマーク問題

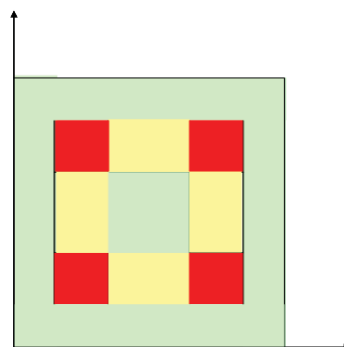


図 4.2 2次元全炉心 ver.

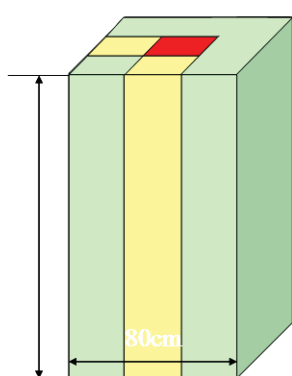


図 4.3 3次元 1/4 炉心 ver.

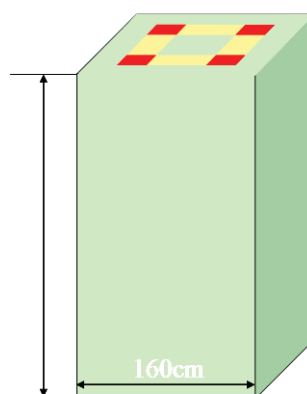


図 4.4 3次元全炉心 ver.

各計算体系のメッシュ幅は  $\Delta x : \Delta y : \Delta z = 4\text{cm} : 4\text{cm} : 10\text{cm}$  とし、空間の離散化の方法は有限差分法を用いている。また、計算には倍精度浮動小数点を用いた。

Krylov 部分空間法の部分空間数  $m$  とタイムステップ幅  $\Delta t$  は、それぞれ 240 と 10ms に設定した。この値は、事前に感度解析を行った結果に基づいている。 $\theta$  法のタイムステップ幅はこの時の Krylov 部分空間法 ( $\Delta t = 10\text{ms}$ ,  $m = 240$ ) の計算精度と同等にするために感度解析の結果、0.5ms とした。Krylov 部分空間法と  $\theta$  法の図 4.1 の計算結果を表 4.1 に示す。なお、筆者が作成した Krylov 部分空間法の計算部分には、メモリアクセスのストライドが十分に小さくなっていないところが数箇所あるので、そこを改善すればさらに計算時間を短縮できる可能性が十分にある。

表 4.1 TWIGL ベンチマーク問題の計算結果 (計算体系：図 4.1)

	AETNA[5] Expicit method	$\theta$ method ( $\theta=0.5$ )	Krylov ( $m=240$ )
メッシュ数	10×10	20×20	20×20
タイムステップ幅(ms)	0.2	0.5	10
相対出力			
0.0s	1.000	1.000	1.000
0.1s	2.061	2.062	2.062
0.2s	2.079	2.079	2.079
0.3s	2.096	2.096	2.096
0.4s	2.114	2.114	2.114
0.5s	2.131	2.132	2.132
相対計算時間	-	1	2.8

表 4.1 より、多項式解析的ノード法に基づいた AETNA コードの計算結果[5]と、自作の計算コードの計算結果が良く一致していることが分かる。このことから、自作の計算コードの妥当性を確認できた。図 4.1 の計算体系では、Krylov 部分空間法は  $\theta$  法にくらべ、タイムステップ幅を大きく出来ているにもかかわらず、計算時間を多く必要としている。

次に、計算体系を大型化した図 4.2~4.4 の計算結果を図 4.5 に示す。

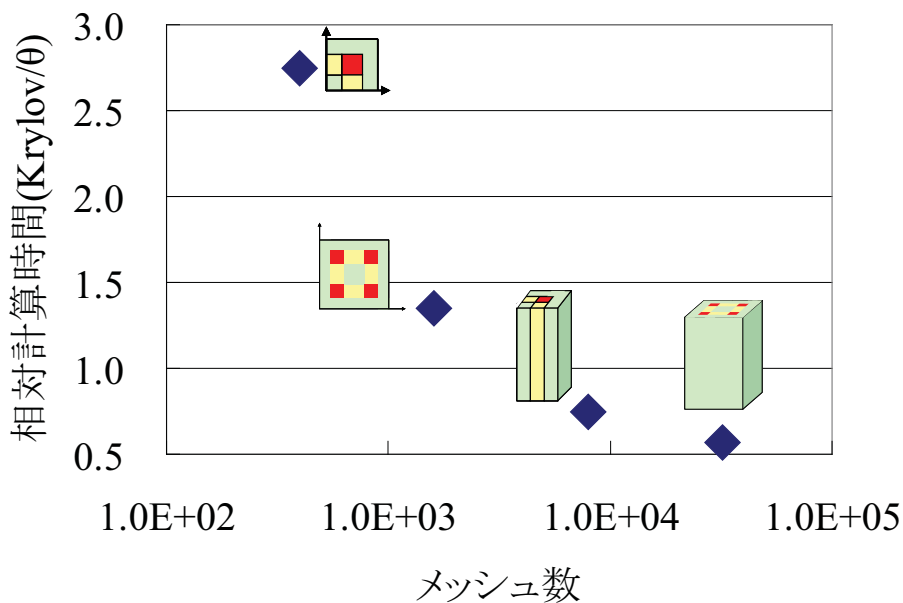


図 4.5 体系の大型化に伴う Krylov 部分空間法と  $\theta$  法の計算時間の比の変移

図 4.5 より、Krylov 部分空間法は  $\theta$  法に比べ、計算体系の大型化に伴う計算時間の増加量が小さいことが分かり、図 4.4 の 3 次元全炉心の計算体系では、 $\theta$  法の約半分程度の時間で計算出来ていることが分かる。このことから計算体系が大型化した時は、 $\theta$  法よりも Krylov 部分空間法の方が短い時間で解が得られる可能性があることが分かった。なお、この相対計算時間の結果は、今回開発したコードの Krylov 部分空間法のメモリアクセスを改良することにより、Krylov 部分空間法の計算時間がさらに短くなる可能性が十分にある。

Krylov 部分空間法の計算時間は、主に大規模疎行列から小規模密行列に変換する部分と部分空間内の指数行列の計算の2つに分けられる。このとき、部分空間内の指数行列の計算は、Krylov 部分空間数  $m$  のみに依存する。それゆえに、Krylov 部分空間法の計算時間は部分空間数にも依存する。Krylov 部分空間法の計算誤差の上界を(4.1)式に示す<sup>[12], [16]</sup>。

$$Error \leq \begin{cases} 10 \|\bar{\psi}(t)\|_2 \exp\left(\frac{-4m^2}{5\rho\Delta t}\right) & (\sqrt{\rho\Delta t} \leq m < \frac{1}{2}\rho\Delta t) \\ \frac{40}{\rho\Delta t} \|\bar{\psi}(t)\|_2 \exp\left(\frac{-\rho\Delta t}{4}\right) \left(\frac{e\rho\Delta t}{4m}\right)^m & (m \geq \frac{1}{2}\rho\Delta t) \end{cases} \quad (4.1)$$

ここで、

$\rho$  : 行列  $\mathbf{A}(t)$  の固有値の最大絶対値

$e$  : ネイピア数

である。

(4.1)式から分かるように、Krylov 部分空間法の計算誤差は元の行列の大きさには依存せず、元の行列のスペクトル半径に依存する。一般的に、離散化された動特性方程式行列のスペクトル半径は、メッシュ幅の逆数に比例する。メッシュ数が大きくなったとしてもメッシュ幅が変化しないのであれば、スペクトル半径はほとんど変化しない。つまり、メッシュ幅が変化しないのであれば、(4.1)式より計算精度は変わらないので、部分空間数を増やさなくてもよい。このことから、Krylov 部分空間法の部分空間内の指数行列の計算コストは、メッシュ幅が同じであれば計算体系に依存しないことになる。よって、計算体系の大型化に伴う計算時間の増加が  $\theta$  法より小さいことがいえる。

前述したようにスペクトル半径はメッシュ幅の逆数に比例するので、メッシュ幅が大きくなるとスペクトル半径は小さくなる。その結果、少ない部分空間数で精度よく計算できることになる。このことから、Krylov 部分空間法はメッシュ幅が大きくすることができる近代ノード法を用いることで、 $\theta$  法よりもより効率的に計算することが出来ると推定される。

TWIGL ベンチマーク問題で検証計算を行っているとき、いくつかの計算条件で Krylov 部分空間法の数値不安定性を確認した。若手研究会の発表時にはこの原因がはっきりとは分かっていなかったが、研究の結果、数値不安定性の原因と抑制条件が分かった。この結果は学会にて発表する予定なので、本文章では割愛させていただく。

## 5. まとめ

本研究では、Krylov 部分空間法を空間依存動特性方程式に適用した。Krylov 部分空間法は従来法のように、時間に関する微分を差分化して扱うのではなく、微分方程式の解析解である指数行列を直接計算する。Krylov 部分空間法には空間に関して反復が必要ない点と、大規模疎行列問題を小規模密行列に変換できる特徴がある。このことから、Krylov 部分空間法は従来法よりも高速に計算できる可能性がある。Krylov 部分空間法の有用性を検証するために、TWIGL ベンチマーク問題で検証計算を行った。検証計算を行った結果、Krylov 部分空間法は計算精度・計算時間の観点から、従来法よりも優れている場合があることを確認した。

Krylov 部分空間法は計算手順上、多くの行列積演算がある。一方、 $\theta$  法の実際の計算ではベクトルの演算しか行わない。BLAS のような数値計算ライブラリを用いることによって、行列積の演算は、

ベクトルの計算よりも高速に実行することが出来る。そのため、数値計算ライブラリを用いることによって、Krylov 部分空間法の計算速度をより高速化できる可能性がある。

また、Krylov 部分空間法の計算時間は係数行列のスペクトル半径に依存しているので、大規模な計算体系に適していることが分かった。

## 6. 参考文献

1. L. M. Grossman, J. P. Hennart, "Nodal diffusion methods for space-time neutron kinetics," *Progress in Nuclear Energy*, **49**, pp.181-216 (2007).
2. W. M. Stacey, *Nuclear Reactor Physics*, Wiley-VCH, Federal Republic of Germany (2007).
3. B. N. Aviles, T. M. Sutton, D. J. Kelly, III, *A variable Timestep Generalized Runge-Kutta Method for the Numerical Integration of the Space-Time Diffusion Equations*, General Electric Company, Knolls Atomic Power Laboratory, Schenectady, New York (1991).
4. T. Downar, D. Lee, Y. Xu et al., *PARCS v2.6 U.S NRC Core Neutronics Simulator THEORY MANUAL*, School of Nuclear Engineering Purdue University (2004).
5. M. Tamitani, T. Iwamoto, B. R. Moore, "Development of Kinetics Model for BWR Core Simulator AETNA," *J. Nucl. Sci. Technol.*, **40**, pp.201-212 (2003).
6. Y. A. Chao, A. Attard, "A Resolution of the Stiffness Problem of Reactor Kinetics," *Nucl. Sci. Eng.*, **90**, pp.40-46 (1985).
7. Y. A. Chao, P. Huang, "Theory and performance of the fast-running multidimensional pressurized water reactor kinetics code, SPNOVA-K," *Nucl. Sci. Eng.*, **103**, pp.415-419 (1989).
8. R. B. Sidje, "EXPOKIT: Software package for computing matrix exponentials," *ACM Trans. Math. Softw.*, **24**, pp.130-156 (1998).
9. C. Moler, C.V.Loan, "Nineteen Dubious Ways to Compute the Exponential of a Matrix, Twenty-Five Years Later\*," *SIAM review*, **45**, pp.3-49 (2003).
10. N. J. Hibham, *Functions of Matrices*, SIAM, Philadelphia (2008).
11. A. Yamamoto, M. Tatsumi, N. Sugimura, "Numerical Solution of Stiff Burnup Equation with Short Half Lived Nuclides by the Krylov Subspace Method," *J. Nucl. Sci. Technol.*, **44**, pp.147-154 (2007).
12. 則竹渚宇, 今倉暁, 山本有作, 張紹良, "行列の指数関数に基づく連立線形常微分方程式の大粒度並列解法とその評価", 日本応用数学会論文誌, **19**[3], pp.293-312 (2009).
13. M. Tatsumi, A. Yamamoto, "Advanced PWR Core Calculation Based on Multi-group Nodal-transport Method in Three-dimensional Pin-by-Pin Geometry," *J. Nucl. Sci. Technol.*, **40**, pp.376-387 (2003).
14. P. J. Turinsky, R. M. K. AL-Chalabi, P. Engrand et al., *NESTLE Few-group neutron diffusion equation solver utilizing the nodal expansion method for eigenvalue, adjoint, fixed-source steady-state and transient problems*, Electric Power Research Center, North Carolina State University (1994).
15. L. A. Hageman, J. B. Yasinsky, "Comparison of alternating direction time differencing method with other implicit method for the solution of the neutron group diffusion equations," *Nucl.Sci.Eng.*, **38**, pp.8-32 (1969).
16. M. Hochbruck, C. Lubich, "On Krylov subspace approximations to the matrix exponential operator," *SIAM J. Numer. Anal.*, **34**, pp.1911-1925 (1998).