<炉物理部会賞受賞記念寄稿>

空間依存動特性方程式の数値解法の高度化

株式会社 東芝 磯子エンジニアリングセンター 原子力安全システム設計部 炉心設計担当 伴 雄一郎

1. はじめに

「空間依存動特性方程式の数値解法の高度化」の研究に関して、本年度の炉物理部会 賞の受賞の栄に預かり、誠にありがとうございます。本研究成果は、私が名古屋大学在 学中に得られたもので、山根義宏名誉教授、山本章夫教授、遠藤知弘助教のお力に寄る ところが大きいです。(もちろん、私も本研究に関してかなりの努力をしたつもりです が。)

本研究に関して思い返すと、本当に色々と大変なことがありました。後述しますが、本研究の過程で3つの空間依存動特性方程式の数値解法を開発することができました。しかし、個人的に最も思い出深いのは数値解法を開発した過程ではなく、入社後の論文執筆でした。3つ目の数値解法がしっかりと形になったのは修了間際であったため、投稿論文にまとめることができず、入社後に論文執筆を行なっていました。しかし、この入社後の論文執筆が大変でした。

本研究は通常業務と関係ありませんので、もちろん、会社の就業時間には論文を執筆できません¹。そのため、先生方や論文査読者のコメントに対応するために、論文の執筆は会社から寮に帰宅してからの時間や、土日を利用して執筆を行なっておりました。正直、精神的にも身体的にも辛い時が多々ありましたが、そんな時に私の支えになったのは、Direct Neutron Path Linking 法を考案されたS.K氏の「まさに日本のサラリーマンの鑑である」¹¹という言葉でした。この言葉のおかげで、自分はなんて素晴らしい日本のサラリーマンの鑑なのだろうと、自分に言い聞かせて奮起させていました。頑張れ、日本の戦うサラリーマンや研究者。さて、そろそろ本題の本研究についてお話したいと思います。

2. 本研究の概要

本章では、説明上どうしても数式を使わざるを得ない部分がありますが、ご容赦下さい。K.K 先生のお言葉を拝借すれば、「<u>数学の知識無しに炉物理理論を展開することは不可能なことである。</u>」¹⁾ですので、最後まで頑張ってお読み頂ければ幸いです。また、下記の文章では分かりやすさを優先して、いくつか正確ではない表記があります。参考

¹ 大学在学中に得られた研究成果なので、所属は名古屋大学として論文を投稿しました。

文献には、(当たり前ですが)正確な表記で記載されておりますので、詳しくは参考文献 をご覧ください。

本研究の初めは、燃焼計算に用いられている Krylov(クリロフ)部分空間法を動特性方程式にも適用し、高速かつ高精度に計算できるかを確認するところから始まりました。 核種の燃焼計算も動特性方程式も式を簡略化して表記しますと、次式のような常微分方程式に帰着します。

$$\frac{d\vec{\phi}(t)}{dt} = \mathbf{A}\vec{\phi}(t) \tag{1}$$

ここで、

A :係数行列(動特性方程式の場合:各空間メッシュの断面積)

 $ec{\phi}(t)$:ベクトル(動特性方程式の場合:時刻tの各空間メッシュの中性子束)

です。

(1)式は解析的に解を得ることができ、解析解は次式となります。

$$\vec{\phi}(t) = \exp(\mathbf{A}t)\vec{\phi}(0) \tag{2}$$

(2)式は指数部に行列がある、指数行列になっております。燃焼計算では(2)式に Krylov 部分空間法を使うことで、高精度かつ高速に計算出来ることが分かっております $^{2)}$ 。 そのため、この Krylov 部分空間法を動特性方程式に適用することによって、動特性方程式を高速かつ高精度に計算できるのではないかと考えたのが研究の発端です。Krylov 部分空間法の数学的内容に関しては、高度な線形代数の専門知識が必要となりますので、詳細は専門書や論文 $^{2),3)}$ をご覧ください。

早速、拡散方程式の動特性計算コードを組んで Krylov 部分空間法を適用したところ、計算が途中から急激に発散する現象を散見しました。最初は自作コードのバグかなと思い、何回もコードを見直しましたが、バグらしいバグが見当たりませんでした。様々な検討の結果、動特性方程式固有の中性子速度の大きさが原因であることが分かりました。エネルギー群構造にもよりますが、エネルギー2 群について考えると、熱群の中性子速度は 10⁵cm/s、高速群に至っては 10⁷cm/s という大きな値になります。この大きな数字が、数値計算にはかなりの厄介者でして、この結果として、Krylov 部分空間法の特有のパラメータである「部分空間数」というものを非常に大きく取らないと、安定して計算ができないことが分かりました。なお、部分空間数を大きくすると、数値安定性と計算精度は向上しますが、計算コストはその分増加します。Krylov 部分空間法に関する多くの論文を読みましたが、数値計算の分野でもこのような発散現象の報告はどこにもなく、原因を見つけるのに労力を要しました。

(1)式の表記では、係数行列 $\bf A$ に時間依存性が含まれておりません。しかし、実機炉心について考えると、フィードバック効果等によって断面積は時間依存性をもっていますので、本来ならば(1)式は(3)式になるはずです。

$$\frac{d\vec{\phi}(t)}{dt} = \mathbf{A}(t)\vec{\phi}(t) \tag{3}$$

しかし、(3)式は非線形方程式であり、(2)式のような解析解を得ることが困難です。断面積の時間依存性がある場合、本来ならばタイムステップ内の断面積変化を考慮しなければなりません。しかし、(2)式を用いる Krylov 部分間法は、タイムステップ内の断面積変化を考慮できません。そのため、Krylov 部分空間法では詳細タイムステップを用いて(2)式を計算することで、(3)式を近似的に計算します。Krylov 部分空間法は数学的には非常に面白い方法ですが、動特性方程式にはさほど有効ではありませんでした。本件についてご興味がある方は参考文献 3)をご覧下さい。

Krylov 部分空間法の次に私が取り掛かったのは、周波数変換法(Frequency transform method)の改良でした。周波数変換法は、国内外の様々な動特性計算コードに採用されており、現在の主流な方法の1つです。

1点炉動特性方程式の解析解は、次式のように、指数関数の重ね合わせになります。

$$\phi(t) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \exp(w_n t)$$
 (4)

ここで、

C: 展開係数

w:逆時間方程式の根

です。

逆時間方程式を考えれば分かりますが、ステップ状に正の反応度が投入された後は、(4) 式の最大の根 w 以外の項は急激に減衰します。そのため、中性子の時間依存性は、指数 関数の単項式に漸近します。この性質を利用して周波数変換法では、(5)式に示しますように、中性子束の時間依存性を時間に強く依存する指数部とその他の部分に分離します。

$$\phi(t) = \exp(\omega t)\varphi(t) \tag{5}$$

ここで、

$$\omega = \frac{1}{\phi(t)} \frac{d\phi(t)}{dt} = \frac{d}{dt} \ln(\phi(t))$$
 (6)

です。

(6)式の ω は動的周波数(dynamic frequency)と言われ、ペリオド時間の逆数に相当します。 このような式変形をすることにより、周波数変換法では中性子束の時間変化を強制的に 指数関数状にさせることで、粗タイムステップ幅でも高精度な計算を目指しております。

ここで、(6)式の動的周波数は時間依存性を有しているのにもかかわらず、(5)式の動的周波数には時間依存性が含まれていないことに、勘の良い方なら気付かれると思います。つまり、従来の周波数変換法は、タイムステップ内の動的周波数の時間依存性を無視していることになります。そこで、タイムステップ内での動的周波数の時間依存性を考慮すれば、周波数変換法の計算精度が向上するのではないかと思いつきました。この方法は、学食で昼食を食べているときの先生との会話で思いついたのですが、思いつい

た時は「自分って天才かも」と心の底から思いました²。いても立ってもいられなくなり、直ぐに研究室に戻り、頭の中の考えを数式に書き起こしました。

従来の周波数変換法と考案した手法の最終的な式を、(7)式と(8)式に示します。

従来の周波数変換法:
$$\frac{1}{v}\frac{d}{dt}\varphi(t) = \left(A - \frac{\omega(t)}{v}\right)\varphi(t)$$
 (7)

考案した周波数変換法:
$$\frac{1}{v}\frac{d}{dt}\varphi(t) = \left(A - \frac{\omega(t) + \omega'(t)\Delta t}{v}\right)\varphi(t)$$
 (8)

(7)式と(8)式を比較すると分かりますが、新たに考案した(8)式は動的周波数の時間微分値を考慮しており、従来法を拡張した形であることが分かります。このため、本手法は周波数変換法と比較して、計算精度が向上すると思いました。

本手法では動的周波数の時間微分値を用いるので、動的周波数の時間微分値を求める必要があります。本研究では、動的周波数の関数形を理論的に考えることにしました。 1点炉動特性方程式について考えますと、(4)式を(6)式に代入すれば、(9)式に示す動的周波数の理論式を得ることができます。

$$\omega(t) = \frac{\sum_{n=1}^{\infty} C_n w_n \exp(w_n t)}{\sum_{n=1}^{\infty} C_n \exp(w_n t)}$$
(9)

しかし、(9)式の有理多項式には多くの未知数があり、未知数の決定が困難です。そこで本研究では、(9)式より動的周波数の時間依存性は指数関数で表現できることに注目して、(9)式の指数関数の有理多項式を、次式のように単項の指数関数として近似しました。なお、 α と β はフィッティングパラメータです。

$$\omega(t) \approx \alpha \exp(\beta t) \tag{10}$$

上述した通り、本手法は周波数の時間依存性を関数近似した方法ですので、周波数関数 近似法と名付けました。今思えば、安易な名前を付けたものだなと思いますが。

周波数関数近似法を自作動特性コードに実装し、TWIGL ベンチマーク問題 ⁴⁾に対して、同計算条件で解析を行った結果を表 1 に示します。表 1 の結果は、初期(0.0sec)の炉心出力を 1 として規格化した時の結果を表しております。表 1 より、今回新たに提案した周波数関数近似法は、従来の周波数変換法よりも計算精度が向上していることが確認できます。

.

² 残念ながら、結局はただの気のせいでした。

	参照解	, , , , , , , , , , , , , , , , , , , ,	文変換法 来法)	周波数関数近似法 (考案手法)	
Time[s]	炉心相対 出力	炉心相対 出力	相対差異[%]	炉心相対 出力	相対差異[%]
0.0	1.000	1.000	0.00	1.000	0.00
0.1	1.308	1. 312	0.26	1.308	0.03
0.2	1.959	1.973	0.69	1.960	0.01
0.3	2.076	2.077	0.07	2.077	0.05
0.4	2.093	2.097	0.19	2.097	0.18
0.5	2. 111	2. 115	0.20	2.115	0.19

表 1 TWIGL ベンチマーク問題の計算結果 ⁵⁾

しかし、周波数関数近似法にも欠点があります。周波数関数近似法は周波数変換法を基本としているので、中性子束の時間変化が指数関数状に変化しない時(例えば、即発跳躍)には、計算精度が悪化する場合があります。この問題を解決するために、再度、新しい動特性解析手法の開発に着手しました。

動特性解析手法の一つで、改良準静近似法という手法があります。この手法は(11)式のように、中性子束を時間tのみに強く依存する項n(t)と、時間に弱く依存及び空間 \mathbf{r} に強く依存する項 $\varphi(\mathbf{r},t)$ に分離する方法です。計算コストが少なく時間に強く依存する項n(t)を詳細タイムステップで計算し、計算コストが高く時間に弱く依存する項 $\varphi(\mathbf{r},t)$ を粗タイムステップで計算を行います。このようにすることで、改良準静近似法では計算精度と計算コストの両立を目指しております。

$$\phi(\mathbf{r},t) = n(t)\phi(\mathbf{r},t) \tag{11}$$

改良準静近似法は時間に強く依存する項(以下、振幅関数)を1点炉動特性方程式としているので、時間依存性を数値的に適切に求めております。しかし、空間に関しては考慮しておらず、局所的に摂動が加わった時には計算精度が低下する恐れがあります。

一方、周波数変換法の場合、(5)式では動的周波数の空間分布を便宜的に無視しましたが、実際には空間を考慮しておりますので、厳密には(5)式は(12)式になります。周波数変換法の振幅関数は指数関数としているため、時間依存性を近似的に取り扱っておりますが、空間分布は適切に考慮しております。

$$\phi(\mathbf{r},t) = \exp(\omega(\mathbf{r})t)\phi(\mathbf{r},t) \tag{12}$$

そこで本研究では、改良準静近似と周波数変換法の良い部分を取って、(13)式のような分離方法を考案しました。

$$\phi(\mathbf{r},t) = n(\mathbf{r}_{coarse},t)\phi(\mathbf{r},t)$$
(13)

(13)式の振幅関数は空間依存性を粗メッシュで考慮しており、時間依存性も数値的に適切に考慮することで、非常に高精度な計算が期待できます。このように、新しく考案した手法は、振幅関数 $n(\mathbf{r}_{course},t)$ が粗メッシュ単位で計算されるため、Multigrid Amplitude

Function 法(MAF法)と名付けました。

MAF 法の振幅関数の計算方法については、Coarse Mesh Difference Method (CMFD)法を時間領域に拡張した、Time-dependent CMFD(TCMFD)を新たに考案しました。参考文献 6)でも本手法と似た手法が考案されていますが、従来法 ⁶は振幅関数の結合係数が空間メッシュの二乗に比例するのに対して、本考案手法は線形に比例しますので、計算コストの観点から優れております。MAF 法の詳細を記載するには、私に与えられた本紙面では足りないため、詳細は参考文献 7)をご覧下さい。

新たに考案した MAF 法の有用性を確認するために、LRA ベンチマーク問題 $^{7,8)}$ で検証計算を実施しました。LRA ベンチマーク問題は図 1 に示すように、炉心平均出力密度と燃料平均温度を計算します。周波数変換法、 θ 法、MAF 法の 3 つの手法で同条件の計算を行ったところ、約 1 秒程度に発生する第 1 出力ピークにおいて、周波数変換法の計算精度が優れていないことが分かりました。周波数変換法の計算精度が優れないのは、出力ピーク部分はフィードバック効果によって、中性子束の時間変化が指数関数状に変化しないためと考えられます。

 θ 法と MAF 法の計算結果を図 2 に示します。図 2 に示しますように、新たに考案した MAF 法は従来の θ 法に比べて、一桁程度も出力分布の差異が小さくなっており、また、RMS も一桁小さく非常に高精度に計算ができていることが確認できます。

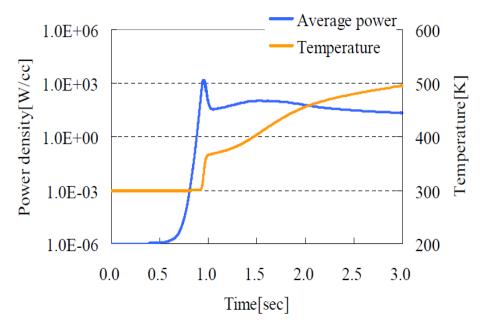


図1 LRA ベンチマーク問題の計算結果

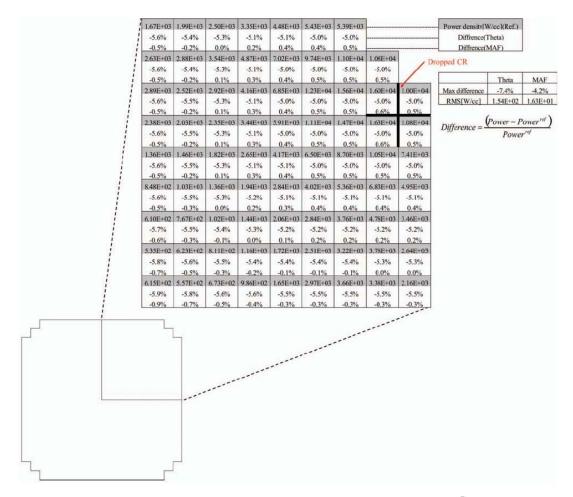


図 2 LRA ベンチマーク問題の第 1 出力ピークの出力分布 ⁷⁾ (1/4 炉心部分の結果のみ抜粋)

TWIGL 問題 ⁴⁾や LMW 問題 ⁹⁾のベンチマーク問題でも、従来法に比べて MAF 法は一桁優れた計算結果を得ることが確認できました ⁷⁾。また、幸運なことに、この MAF 法について研究室の後輩たちが引き続き研究を行なってくれて、加速器駆動未臨界炉 (ADSR)のような外部中性子源がある体系や、Method of Characteristics(MOC)などの輸送計算方法にも有効であることが分かってきております。

3. さいごに

学生の時は(今も)、当時 Studsvik(現在、MIT 教授)の K.S 氏に憧れておりました。K.S 氏の修士論文 ¹⁰⁾は、動特性関連の論文でよく引用されておりますが、そのページ数はなんと 299 ページにもなります。私は"勝手に"この修士論文に対し対抗心を燃やして、301 ページの修士論文を書き上げました。論文の内容はともかくとして、ページ数だけは、なんとか超えることができました。このように、真剣に研究に没頭でき、また幸運にも研究成果まで得られたのは、ご指導して頂いた先生方のお力によるものだと思っております。この場をお借りして、御礼申し上げます。また会社入社後には、業務の合間

を縫って行っている(?) 学術的な活動に対して、寛大な心でご配慮をいただいている職場の方々に対しても、この場をお借りして御礼申し上げます。

炉物理の世界に飛び込んでからまだまだ日は浅く、炉物理の面白さをほんの少し垣間 見たばかりです。少しでも多くの炉物理の深淵なる世界を味わえるように、精進してい こうと思います。

4. 参考文献

- 1) 日本原子力学会 炉物理部会, 炉物理の研究 54 号, (2002).
- 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, 147-154 (2007).
- 3) Y. Ban, T. Endo, A. Yamamoto, Y. Yamane, "Explicit time integration scheme using Krylov subspace method for reactor kinetic equation," *J. Nucl. Sci. Technol.*, **48**, 1-13 (2011).
- 4) L.A. Hageman and 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**, 8-32 (1969).
- 5) 伴雄一郎, 遠藤知弘, 山本章夫, "空間依存動特性方程式における周波数関数近似法 の 開発", 日本原子力学会 秋の大会, 北海道大学, 9 月 15 日-17 日, 2010, (2010).
- 6) Y. Nagaya, K, Kobayashi, "Solution of 1-D multi-group time-dependent diffusion equation using coupled reactor theory," *Ann. Nucl. Energy*, **22**, 421-440 (1995).
- 7) Y. Ban, T. Endo, A. Yamamoto, "A unified approach for numerical calculation of space-dependent kinetic equation," *J. Nucl. Sci. Technol.*, **49**, 496-515 (2012).
- 8) Argonne Code Center, Benchmark Problem Book, ANL-7416, Suppl. 2, (1977).
- 9) S. Langenbuch, W. Maurer, and W. Werner, "Coarse-mesh flux-expansion method for the analysis of space-time effects in large light water reactor cores," *Nucl. Sci. Eng.*, **63**, 437-456 (1977).
- 10) K. Smith, "An analytical nodal method for solving the two-group, multidimensional, static and transient neutron diffusion equation," Nuclear engineer and Master of Science, Massachusetts institute of technology, (1976).