

空間依存動特性計算に関する ROM

(株)原子力エンジニアリング

辻田 浩介

1. はじめに

Reduced Order Model (ROM)は、近年、共鳴計算や燃焼計算、動特性計算等、原子炉物理学分野における数値解析への応用が幅広く検討されている。特に空間動特性計算においては、炉心・プラントシミュレータ等のリアルタイム性が求められる応用がある一方、時間と空間に際して詳細な離散化を行った場合には計算コストが極めて膨大となるため、大規模体系におけるリアルタイム解析の実現は困難である。一方で、動特性計算そのものに着目すると、

- ・ 動特性計算中に計算体系自体が大きく変化することはない。
- ・ 反応度の添加方法はある程度限定されている。
- ・ 中性子束の振幅と形状の分離性が良い。

等の特徴があり、中性子束分布の形状やその時間変化が、体系そのものや制御棒操作等の摂動条件による制約を受ける場合が多い。これらの特徴は次元圧縮との親和性が高く、特に Proper Orthogonal Decomposition (POD)を用いた ROM は空間依存動特性計算のリアルタイム化を十分実現し得るものとなっている。

本資料では、空間依存動特性計算に対する POD の適用を例に、その基礎理論の導出と計算例を通じて、以下の2つを理解することを目的とする。

- ① POD を用いた動特性計算の基礎理論を理解する。
- ② 動特性計算への応用を例に POD の特徴や対象となる問題の向き・不向きを理解する。

2. 空間依存動特性方程式の解法

本章では、POD の空間依存動特性計算への適用を行う前に、まずはその前段の基礎理論である空間依存動特性方程式の離散化について述べる。

まず外部中性子源無しの多群の空間依存動特性方程式を以下に示す。

$$\frac{1}{v_g} \frac{\partial \phi_g(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\nabla \cdot \vec{J}_g(\vec{r}, t) - \Sigma_{r,g}(\vec{r}, t) \phi_g(\vec{r}, t) + Q_g(\vec{r}, t), \quad (1)$$

$$Q_g(\vec{r}, t) = (1 - \beta) \chi_g^p \sum_{g'} v \Sigma_{f,g'}(\vec{r}, t) \phi_{g'}(\vec{r}, t) + \sum_{g' \neq g} \Sigma_{s,g' \rightarrow g}(\vec{r}, t) \phi_{g'}(\vec{r}, t) + \sum_m \chi_{m,g}^d \lambda_m C_m(\vec{r}, t), \quad (2)$$

$$\frac{\partial C_m(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\lambda_m C_m(\vec{r}, t) + \sum_{g'} \beta_m v \Sigma_{f,g'}(\vec{r}, t) \phi_{g'}(\vec{r}, t), \quad (3)$$

$$\beta = \sum_m \beta_m . \quad (4)$$

ここで、それぞれの変数の意味は以下の通りである。なお、 g, m はエネルギー群、遅発中性子先行核群に対する添え字である。

\vec{r}	: 位置ベクトル	t	: 時間
ϕ_g	: 中性子束	\vec{J}_g	: 正味の中性子流
$\Sigma_{r,g}$: 除去断面積	$\nu\Sigma_{f,g}$: 生成断面積
$\Sigma_{s,g' \rightarrow g}$: 散乱断面積	χ_g^p	: 即発核分裂スペクトル
C_m	: 先行核密度	λ_m	: 崩壊定数
β_m	: 遅発中性子割合	$\chi_{m,g}^d$: 遅発核分裂スペクトル
v_g	: 中性子速度		

これを数値的に解くために、まずは時間に関する離散化を行う。(1)式に対して完全陰解法^[1]を適用すると

$$\frac{1}{v_g} \frac{\phi_g^n(\vec{r}) - \phi_g^{n-1}(\vec{r})}{\Delta t} = -\nabla \cdot \vec{J}_g^n(\vec{r}) - \Sigma_{r,g}^n(\vec{r})\phi_g^n(\vec{r}) + Q_g^n(\vec{r}) , \quad (5)$$

ここで、 n はタイムステップの添え字であり、各変数の意味はそれぞれ以下の通りである。

$$\phi_g^n(\vec{r}) \equiv \phi_g(\vec{r}, t_n), \quad (6)$$

$$\vec{J}_g^n(\vec{r}) \equiv \vec{J}_g(\vec{r}, t_n), \quad (7)$$

$$Q_g^n(\vec{r}) \equiv Q_g(\vec{r}, t_n), \quad (8)$$

$$\Sigma_{r,g}^n(\vec{r}) \equiv \Sigma_{r,g}(\vec{r}, t_n), \quad (9)$$

$$C_m^n(\vec{r}) \equiv C_m(\vec{r}, t_n), \quad (10)$$

$$\Delta t \equiv t_n - t_{n-1} . \quad (11)$$

(5)式を整理すると

$$\nabla \cdot \vec{J}_g^n(\vec{r}) + \left(\Sigma_{r,g}^n(\vec{r}) + \frac{1}{v_g \Delta t} \right) \phi_g^n(\vec{r}) = Q_g^n(\vec{r}) + \frac{1}{v_g \Delta t} \phi_g^{n-1}(\vec{r}) , \quad (12)$$

$$Q_g^n(\vec{r}) = (1 - \beta) \chi_g^p \sum_{g'} \nu \Sigma_{f,g'}^n(\vec{r}) \phi_{g'}^n(\vec{r}) + \sum_{g' \neq g} \Sigma_{s,g' \rightarrow g}^n(\vec{r}) \phi_{g'}^n(\vec{r}) + \sum_m \chi_{m,g}^d \lambda_m C_m^n(\vec{r}) . \quad (13)$$

ここで、(13)式の右辺第三項の遅発中性子先行核密度については(3)式から求められる。一般的には、(3)式の右辺第二項の生成反応率がタイムステップ間で線形に変化すると仮定した際の(3)式の解析解^[1]として下式が広く用いられる。(詳細については参考文献^[1]を参照するとよい。)

$$C_m^n(\vec{r}) = \mu_m C_m^{n-1}(\vec{r}) + \eta_m \sum_{g'} \nu \Sigma_{f,g'}^{n-1}(\vec{r}) \phi_{g'}^{n-1}(\vec{r}) + \xi_m \sum_{g'} \nu \Sigma_{f,g'}^n(\vec{r}) \phi_{g'}^n(\vec{r}) , \quad (14)$$

ただし、

$$\begin{aligned}
\mu_m &= e^{-\lambda_m \Delta t} , \\
\eta_m &= \frac{\beta_m}{\lambda_m} \left(\frac{1 - \mu_m}{\lambda_m \Delta t} - \mu_m \right) , \\
\xi_m &= \frac{\beta_m}{\lambda_m} \left(1 - \frac{1 - \mu_m}{\lambda_m \Delta t} \right) ,
\end{aligned} \tag{15}$$

である。ここで、(14)式を(13)式に代入し、(12)、(13)式を整理すると、空間依存動特性計算を定常状態の固定源計算問題に焼き直すことができる。*

$$\nabla \cdot \vec{j}_g^n(\vec{r}) + \left(\Sigma_{r,g}^n(\vec{r}) + \frac{1}{v_g \Delta t} \right) \phi_g^n(\vec{r}) = \hat{Q}_g^n(\vec{r}) + S_g^{n-1}(\vec{r}) , \tag{16}$$

$$\hat{Q}_g^n(\vec{r}) = \gamma_g \sum_{g'} v \Sigma_{f,g'}^n(\vec{r}) \phi_{g'}^n(\vec{r}) + \sum_{g' \neq g} \Sigma_{s,g' \rightarrow g}^n(\vec{r}) \phi_{g'}^n(\vec{r}) , \tag{17}$$

$$\gamma_g \equiv (1 - \beta) \chi_g^p + \sum_m \chi_{m,g}^d \lambda_m \xi_m , \tag{18}$$

$$S_g^{n-1}(\vec{r}) = \frac{\phi_g^{n-1}(\vec{r})}{v_g \Delta t} + \sum_m \chi_{m,g}^d \lambda_m \left(\mu_m C_m^{n-1}(\vec{r}) + \eta_m \sum_{g'} v \Sigma_{f,g'}^{n-1}(\vec{r}) \phi_{g'}^{n-1}(\vec{r}) \right) . \tag{19}$$

さらに(16)式を体系内の各メッシュ領域*i*について平均化すると、

$$\sum_{j \neq i} \frac{J_{g,i \rightarrow j}^n S_{ij}}{V_i} + \left(\Sigma_{r,g,i}^n + \frac{1}{v_g \Delta t} \right) \phi_{g,i}^n = \hat{Q}_{g,i}^n + S_{g,i}^{n-1} , \tag{20}$$

ただし、 V_i は当該メッシュの体積、 S_{ij} はメッシュ*i*に隣接するメッシュ*j*との隣接面の面積である。また、上式では任意のパラメータ $f(\vec{r})$ のメッシュ内平均値を f_i として記載している。メッシュ内平均値には以下の通り体積重み平均を用いるものとする。

$$f_i^{\square} \equiv \frac{1}{V_i} \int_{\vec{r} \in i} f(\vec{r}) dV , \tag{21}$$

次に、漏洩項に関しては Fick の法則より

$$J_g(\vec{r}) \approx -D_g \nabla \phi_g(\vec{r}) , \tag{22}$$

に有限差分法を用いることで、下式で表される。

$$\frac{J_{g,i \rightarrow j}^n S_{ij}}{V_i} \approx A_{g,i,j}^n (\phi_{g,j}^n - \phi_{g,i}^n) , \tag{23}$$

ここで、 $A_{g,i,j}^n$ は隣接するメッシュ*i,j*における拡散係数とメッシュの幾何形状に応じて決まる係数[†]である。(23)式を(20)式に代入すると

* 「定常状態の固定源計算問題に焼きなおす」というのは、(19)式が前ステップの物理量から計算される既知のパラメータであり、これを既知の外部中性子源項と見なすと、(16)式の形が外部中性子源を含む固定源計算問題の形と同形になる、という意味である。

† 本係数はメッシュの幾何形状にも依存する。Appendix A に 3次元体系・構造メッシュの場合の定義式をまとめているため、そちらも参照するとよい。

$$\sum_{j \neq i} A_{g,i,j}^n (\phi_{g,j}^n - \phi_{g,i}^n) + \left(\Sigma_{r,g,i}^n + \frac{1}{v_g \Delta t} \right) \phi_{g,i}^n = \hat{Q}_{g,i}^n + S_{g,i}^{n-1}, \quad (24)$$

より、これを整理することで時間・空間の離散化後の中性子のバランス式は最終的に以下の式で表される。

$$\sum_{j \neq i} A_{g,i,j}^n \phi_{g,j}^n + \left(A_{g,i,i}^n + \frac{1}{v_g \Delta t} \right) \phi_{g,i}^n = \hat{Q}_{g,i}^n + S_{g,i}^{n-1}, \quad (25)$$

$$A_{g,i,i}^n \equiv \Sigma_{r,g,i}^n - \sum_{j \neq i} A_{g,i,j}^n. \quad (26)$$

なお、POD を適用するにはこれらの式を行列形式で記載しておくこと記載しやすい。まず中性子束分布、先行核密度分布は体系の端から端までのメッシュの中性子束、先行核密度を列ベクトルとして

$$\vec{\phi}_g^n = (\dots \phi_{g,i}^n \dots)^T, \quad (27)$$

$$\vec{C}_m^n = (\dots C_{m,i}^n \dots)^T, \quad (28)$$

で表す。なお、この列ベクトルの大きさは体系内のメッシュ数に等しい。この時、(25)式と、(17)–(19)式は行列形式で以下のように表される。

$$\left(\mathbf{A}_g^n + \frac{1}{\Delta t} \mathbf{V}_g^{inv} \right) \vec{\phi}_g^n = \vec{Q}_g^n + \vec{S}_g^{n-1}, \quad (29)$$

$$\vec{Q}_g^n = \gamma_g \sum_{g'} \mathbf{v} \Sigma_{f,g'}^n \vec{\phi}_{g'}^n + \sum_{g' \neq g} \Sigma_{s,g' \rightarrow g}^n \vec{\phi}_{g'}^n, \quad (30)$$

$$\vec{S}_g^{n-1} = \frac{1}{\Delta t} \mathbf{V}_g^{inv} \vec{\phi}_g^{n-1} + \sum_m \chi_{m,g}^d \lambda_m \left(\mu_m \vec{C}_m^{n-1} + \eta_m \sum_{g'} \mathbf{v} \Sigma_{f,g'}^{n-1} \vec{\phi}_{g'}^{n-1} \right), \quad (31)$$

$$\vec{C}_m^n = \mu_m \vec{C}_m^{n-1} + \eta_m \sum_{g'} \mathbf{v} \Sigma_{f,g'}^{n-1} \vec{\phi}_{g'}^{n-1} + \xi_m \sum_{g'} \mathbf{v} \Sigma_{f,g'}^n \vec{\phi}_{g'}^n, \quad (32)$$

ここで、各係数行列の意味は以下の通りである。

$$\mathbf{A}_g^n = [A_{g,i,j}^n], \quad (33)$$

$$\mathbf{V}_g^{inv} = \frac{1}{v_g} \mathbf{I}, \quad (34)$$

$$\mathbf{v} \Sigma_{f,g}^n = \text{diag}(\dots v \Sigma_{f,g,i} \dots), \quad (35)$$

$$\Sigma_{s,g' \rightarrow g}^n = \text{diag}(\dots \Sigma_{s,g' \rightarrow g,i} \dots), \quad (36)$$

$$\gamma_g = \text{diag}(\dots \gamma_g \dots), \quad (37)$$

$$\chi_{m,g}^d = \text{diag}(\dots \chi_{m,g}^d \dots), \quad (38)$$

空間依存動特性計算では、(29)–(32)式を用いて各タイムステップにおける中性子バランスの計算を行う。計算フローを図 1 および以下に示す。

- 1) 中性子束および遅発中性子先行核密度の初期値を与える。
- 2) (31)式より、固定中性子源に相当する \vec{S}_g^{n-1} を更新する。

- 3) 時刻 t_n における炉心状態に合わせて係数行列 \mathbf{A}_g^n を更新する。
- 4) (30)式より、中性子源項 \vec{Q}_g^n を更新する。
- 5) 2)、3)で(29)式の右辺が既知となるため、(29)式を解き中性子束 $\vec{\phi}_g^n$ を更新する。
- 6) 中性子束が十分収束するまで、4)、5)を繰り返す。(各タイムステップにおける中性子バランスの計算)
- 7) 当該ステップの中性子束が十分収束したら、(32)式で当該ステップの先行核密度 \vec{C}_m^n を更新する。
- 8) タイムステップを更新し、最終ステップでなければ次のタイムステップの計算として2)に戻る。

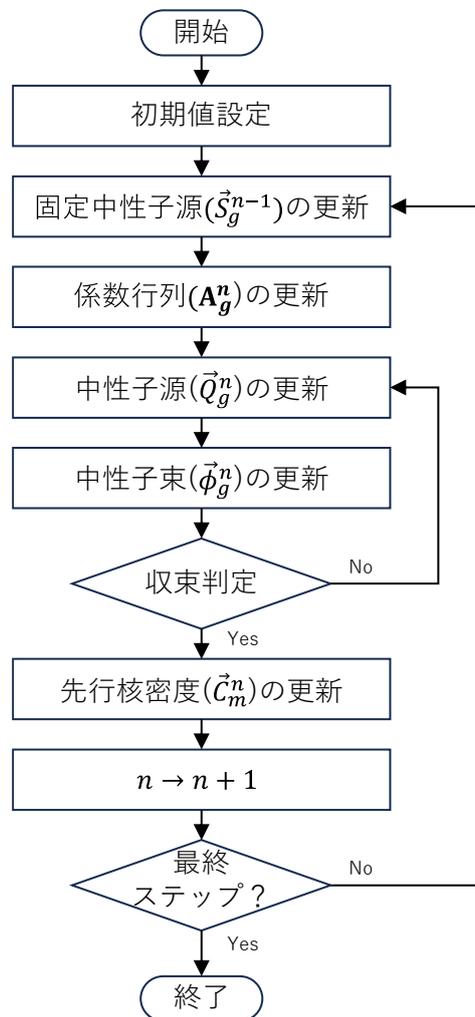


図 1 動特性計算の計算フロー

なお、計算条件にもよるが、一般に中性子束および遅発中性子先行核密度の初期値には未摂動状態の固有値計算結果を用いることが多い。具体的には、(1)式の時間微分項をゼロとし、

$$0 = -\nabla \cdot \vec{J}_g(\vec{r}) - \Sigma_{r,g}(\vec{r})\phi_g(\vec{r}) + Q_g(\vec{r}), \quad (39)$$

また、固有値計算とすることから k_{eff} は実効倍率として中性子源項は

$$Q_g(\vec{r}) = \frac{\chi_g}{k_{\text{eff}}} \sum_{g'} v\Sigma_{f,g'}(\vec{r})\phi_{g'}(\vec{r}) + \sum_{g' \neq g} \Sigma_{s,g' \rightarrow g}(\vec{r})\phi_{g'}(\vec{r}), \quad (40)$$

である。ただし、核分裂スペクトルは遅発中性子割合を考慮し、核分裂スペクトルは

$$\chi_g = (1 - \beta)\chi_g^p + \sum_m \beta_m \chi_{m,g}^d, \quad (41)$$

である。(39)–(40)式に空間の離散化を加えると、最終的に離散化された固有値方程式は以下のようになる。

$$\sum_j A_{g,i,j}^n \phi_{g,j}^n = \frac{\chi_g}{k_{\text{eff}}} \sum_{g'} v\Sigma_{f,g',i} \phi_{g',i} + \sum_{g' \neq g} \Sigma_{s,g' \rightarrow g,i} \phi_{g',i}, \quad (42)$$

ただし、(2)式の $v\Sigma_{f,g'}(\vec{r}, t)$ と(41)式の $v\Sigma_{f,g',i}/k_{\text{eff}}$ は $t = 0$ secにおいて整合している必要がある。(=初期状態と過渡変化間での連続性の確保ため。)ゆえに、固有値計算で初期状態を求めた後、生成断面積を

$$\frac{v\Sigma_{f,g',i}}{k_{\text{eff}}} \rightarrow v\Sigma_{f,g',i} \Big|_{t=0} \quad (43)$$

として、実効倍率で規格化することで両者の整合性を確保する。なお、この時の遅発中性子先行核密度については、(3)式で時間微分項を0とし

$$0 = -\lambda_m C_m(\vec{r}) + \sum_{g'} \beta_m v\Sigma_{f,g'}(\vec{r})\phi_{g'}(\vec{r}), \quad (44)$$

として、さらに空間の離散化を加えて

$$C_{m,i} = \frac{\beta_m}{\lambda_m} \sum_{g'} v\Sigma_{f,g',i} \phi_{g',i}, \quad (45)$$

を得る。ただし、この時の生成断面積は(43)式の規格化後のものである点に留意してほしい。

以上を行列表現すると、

$$\mathbf{A}_g \vec{\phi}_g = \frac{1}{k_{\text{eff}}} \chi_g \sum_{g'} v\Sigma_{f,g'} \vec{\phi}_{g'} + \sum_{g' \neq g} \Sigma_{s,g' \rightarrow g} \vec{\phi}_{g'}, \quad (46)$$

$$\vec{C}_m^n = \frac{\beta_m}{\lambda_m} \sum_{g'} v\Sigma_{f,g'} \vec{\phi}_{g'}^n. \quad (47)$$

である。

図1に示したように、動特性計算では、タイムステップ毎に前ステップの中性子束や先行核密度から現在のステップの中性子束を計算するための反復計算を行う。ゆえに、時間や空間の離散化が詳細になるほど、動特性計算の計算コストは極めて膨大となる。‡

‡ 軽水炉の設計に使用されている現行の炉心計算コードでは、計算コストの低減のために、近代ノード法^[2]や周波数変換法^[3]等を用いることにより、空間に関するメッシュ幅を粗く、タイムステップ幅を粗くしても、良好な計算精度と計算速度が確保されるような工夫が採用されている。

3. 空間依存動特性方程式に対する POD の適用

前章でも述べた通り、一般に空間依存動特性計算は計算コストが高く、大規模かつ詳細な計算条件では膨大な計算コストを要する。そこで、当該計算コストを大幅に低減し、実時間解析にも応用可能な方法として POD を用いた ROM が提案されている。本章では、空間依存動特性計算に対する POD の適用方法について記載する。

POD では、中性子束分布の直交基底展開を行い、各メッシュにおける中性子のバランス方程式を、直交基底の展開係数に関する方程式に変換し、自由度の削減を行う。例として、図 2 に示すような 2 次元平面内の中性子束分布があった場合、X/Y 方向に空間メッシュを切り、それぞれのメッシュについて中性子バランス式を立てて解くのが従来法である。この時の体系全体のメッシュ数を N とすると、未知数の数は N に等しい。

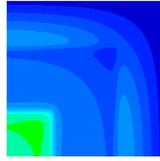


図 2 中性子束分布

一方で POD では、上記の中性子束分布を精度良く展開可能な直交基底を予め求めておき、中性子束分布を直交基底の展開係数で表現する。例として、中性子束分布が図 3 に得示するような 3 つの正規直交基底ベクトル \vec{u}_0 、 \vec{u}_1 、 \vec{u}_2 の重ね合わせで表現できることが予め分かっている場合、元の中性子束分布を表現するためには、それぞれの基底ベクトルに対応する展開係数 φ_0 、 φ_1 、 φ_2 さえ分かれば良い。つまりこの場合、未知数の数は 3 となり、大幅な未知数の削減 (= 自由度の削減) が可能である。

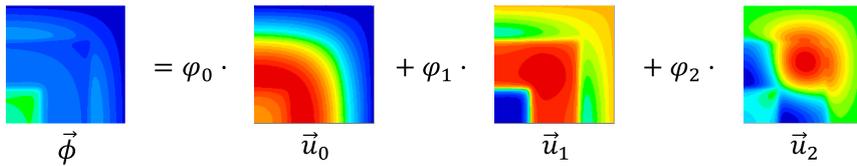


図 3 中性子束分布の直交基底展開

これをより一般的な形式で表すと、 g 群の中性子束分布の直交基底展開を

$$\vec{\phi}_g^n = \varphi_{g,0}^n \vec{u}_{g,0} + \varphi_{g,1}^n \vec{u}_{g,1} + \dots + \varphi_{g,k}^n \vec{u}_{g,k} , \quad (48)$$

として表す。ここで、 $\vec{u}_{g,k}$ は g 群の中性子束分布に対する k 番目の正規直交基底ベクトルであり、

$$\vec{u}_{g,k} \cdot \vec{u}_{g,k'} = \delta_{kk'} , \quad (49)$$

を満たすものとする。 $\delta_{kk'}$ はクロネッカーのデルタである。ここで、(48)式を行列で表すと

$$\vec{\phi}_g^n = (\vec{u}_{g,0} \quad \dots \quad \vec{u}_{g,k}) \begin{pmatrix} \phi_{g,0}^n \\ \vdots \\ \phi_{g,k}^n \end{pmatrix} = \mathbf{U}_g \vec{\phi}_g^n, \quad (50)$$

となる。(50)式を離散化後の動特性方程式((29)式)に代入し、両辺に直交基底の転置行列を左から掛けると

$$\mathbf{U}_g^T \left(\mathbf{A}_g^n + \frac{1}{\Delta t} \mathbf{V}_g^{inv} \right) \mathbf{U}_g \vec{\phi}_g^n = \mathbf{U}_g^T \vec{Q}_g^n + \mathbf{U}_g^T \vec{S}_g^{n-1}, \quad (51)$$

より、これを整理して

$$\left(\hat{\mathbf{A}}_g^n + \frac{1}{\Delta t} \hat{\mathbf{V}}_g^{inv} \right) \vec{\phi}_g^n = \vec{Q}_g^n + \vec{S}_g^{n-1}, \quad (52)$$

を得る。ここで各係数行列とベクトルはそれぞれ以下の通りである。

$$\hat{\mathbf{A}}_g^n = \mathbf{U}_g^T \mathbf{A}_g^n \mathbf{U}_g, \quad (53)$$

$$\hat{\mathbf{V}}_g^{inv} = \mathbf{U}_g^T \mathbf{V}_g^{inv} \mathbf{U}_g, \quad (54)$$

$$\vec{Q}_g^n = \mathbf{U}_g^T \vec{Q}_g^n, \quad (55)$$

$$\vec{S}_g^{n-1} = \mathbf{U}_g^T \vec{S}_g^{n-1}. \quad (56)$$

中性子源項についても同様に整理すると

$$\begin{aligned} \vec{Q}_g^n &= \mathbf{U}_g^T \vec{Q}_g^n \\ &= \mathbf{U}_g^T \gamma_g \sum_{g'} \nu \Sigma_{f,g'}^n \mathbf{U}_{g'} \vec{\phi}_{g'}^n + \sum_{g' \neq g} \mathbf{U}_g^T \Sigma_{s,g' \rightarrow g}^n \mathbf{U}_{g'} \vec{\phi}_{g'}^n \\ &= \mathbf{U}_g^T \gamma_g \sum_{g'} \nu \Sigma_{f,g'}^n \mathbf{U}_{g'} \vec{\phi}_{g'}^n + \sum_{g' \neq g} \hat{\Sigma}_{s,g' \rightarrow g}^n \vec{\phi}_{g'}^n, \end{aligned} \quad (57)$$

より、散乱断面積行列の圧縮係数行列は

$$\hat{\Sigma}_{s,g' \rightarrow g}^n = \mathbf{U}_g^T \Sigma_{s,g' \rightarrow g}^n \mathbf{U}_{g'}, \quad (58)$$

で表される。散乱断面積行列の右側には g' 群の中性子束分布に対する直交基底、左側は g 群の中性子束分布に対する直交基底となる点に注意してほしい。(散乱断面積の右側は g' 群の中性子束分布の空間だが、それが $g' \rightarrow g$ 群への散乱を経て g 群の中性子束分布に関する方程式として解くことになるため、散乱行列の左側は g 群の中性子束分布の直交基底となる。)

次に、(57)式の右辺第一項の核分裂源項についても圧縮するため、生成反応率分布に関する直交基底を導入する。つまり、生成反応率のエネルギー積分値を \vec{P} 、その空間分布に対する直交基底を \mathbf{U}_{FR} 、展開係数を $\vec{\phi}_{FR}$ としたとき

$$\vec{P} = \sum_{g'} \nu \Sigma_{f,g'}^n \vec{\phi}_{g'}^n = \mathbf{U}_{FR} \vec{\phi}_{FR}, \quad (59)$$

を満たす直交基底展開を考える。

さらに、 $\mathbf{U}_{\text{FR}}\mathbf{U}_{\text{FR}}^T = \mathbf{U}_{\text{FR}}^T\mathbf{U}_{\text{FR}} = \mathbf{I}$ [§]より、(57)式の右辺第一項の核分裂源項は以下のように整理できる。

$$\begin{aligned}\mathbf{U}_g^T\boldsymbol{\gamma}_g \sum_{g'} \nu\Sigma_{f,g'}^n \mathbf{U}_{g'} \vec{\varphi}_{g'}^n &= \mathbf{U}_g^T\boldsymbol{\gamma}_g \mathbf{U}_{\text{FR}} \mathbf{U}_{\text{FR}}^T \sum_{g'} \nu\Sigma_{f,g'}^n \mathbf{U}_{g'} \vec{\varphi}_{g'}^n \\ &= \mathbf{U}_g^T\boldsymbol{\gamma}_g \mathbf{U}_{\text{FR}} \sum_{g'} \mathbf{U}_{\text{FR}}^T \nu\Sigma_{f,g'}^n \mathbf{U}_{g'} \vec{\varphi}_{g'}^n \\ &= \hat{\boldsymbol{\gamma}}_g \sum_{g'} \hat{\nu}\Sigma_{f,g'}^n \vec{\varphi}_{g'}^n.\end{aligned}\tag{60}$$

ここで

$$\hat{\boldsymbol{\gamma}}_g = \mathbf{U}_g^T\boldsymbol{\gamma}_g \mathbf{U}_{\text{FR}}^T,\tag{61}$$

$$\hat{\nu}\Sigma_{f,g'}^n = \mathbf{U}_{\text{FR}}^T \nu\Sigma_{f,g'}^n \mathbf{U}_{g'},\tag{62}$$

である。核分裂スペクトル行列と生成断面積行列も散乱断面積行列と同様、掛け合わせるべき左右の直交基底が異なる点に留意してほしい。(57)式に(60)式を代入すると中性子源項は最終的に以下のように整理できる。

$$\vec{Q}_g^n = \hat{\boldsymbol{\gamma}}_g \sum_{g'} \hat{\nu}\Sigma_{f,g'}^n \vec{\varphi}_{g'}^n + \sum_{g'} \hat{\Sigma}_{s,g' \rightarrow g}^n \vec{\varphi}_{g'}^n,\tag{63}$$

また、先行核等の固定中性子源項は同様にして

$$\begin{aligned}\vec{S}_g^{n-1} = \mathbf{U}_g^T \vec{S}_g^{n-1} &= \frac{1}{\Delta t} \mathbf{U}_g^T \mathbf{V}_g^{inv} \mathbf{U}_g \vec{\varphi}_g^{n-1} \\ &+ \sum_m \mathbf{U}_g^T \boldsymbol{\chi}_{m,g}^d \lambda_m \left(\mu_m \vec{C}_m^{n-1} + \eta_m \sum_{g'} \nu\Sigma_{f,g'}^{n-1} \mathbf{U}_{g'} \vec{\varphi}_{g'}^{n-1} \right).\end{aligned}\tag{64}$$

[§] 厳密には、正規直交基底 \mathbf{U} に対して $\mathbf{U}\mathbf{U}^T = \mathbf{I}$ が成立するのは \mathbf{U} が正則な場合のみであり、一般にPODで扱う直交基底は正則行列ではないため、(60)式の式変形には展開誤差が含まれる。 $(\mathbf{U}_{\text{FR}}\mathbf{U}_{\text{FR}}^T)$ の部分の演算により、生成反応率分布の基底空間に射影されたのち、当該直交基底で元の空間に再構成する形となるため、生成反応率分布の基底空間で表現仕切れない分の展開誤差が発生する。本式変形にて生成反応率分布に関する直交基底を用いるのは、その展開誤差を最小化するためである。)

ここで遅発中性子先行核密度分布が生成反応率の直交基底で展開可能と仮定すると**

$$\vec{C}_m^{n-1} = \mathbf{U}_{\text{FR}} \vec{\zeta}_m, \quad (65)$$

より、(60)式の導出と同様にして

$$\begin{aligned} \vec{S}_g^{n-1} &= \frac{1}{\Delta t} \widehat{\mathbf{V}}_g^{inv} \vec{\varphi}_g^{n-1} \\ &+ \sum_m \mathbf{U}_g^T \widehat{\boldsymbol{\chi}}_{m,g}^d \mathbf{U}_{\text{FR}} \lambda_m \left(\mu_m \mathbf{U}_{\text{FR}}^T \mathbf{U}_{\text{FR}} \vec{\zeta}_m^{n-1} + \eta_m \sum_{g'} \mathbf{U}_{\text{FR}}^T \mathbf{v} \Sigma_{f,g'}^{n-1} \mathbf{U}_{g'} \vec{\varphi}_{g'}^{n-1} \right) \\ &= \frac{1}{\Delta t} \widehat{\mathbf{V}}_g^{inv} \vec{\varphi}_g^{n-1} + \sum_m \widehat{\boldsymbol{\chi}}_{m,g}^d \lambda_m \left(\mu_m \vec{\zeta}_m^{n-1} + \eta_m \sum_{g'} \widehat{\mathbf{v}} \Sigma_{f,g'}^{n-1} \vec{\varphi}_{g'}^{n-1} \right), \end{aligned} \quad (66)$$

を得る。ここで

$$\widehat{\boldsymbol{\chi}}_{m,g}^d = \mathbf{U}_g^T \boldsymbol{\chi}_{m,g}^d \mathbf{U}_{\text{FR}}, \quad (67)$$

である。

最後に、先行核密度の展開係数についても、(32)式に(50)式を代入し、両辺に生成反応率分布の直交基底の転置行列 \mathbf{U}_{FR}^T を掛けることで下式を得る。

$$\begin{aligned} \vec{\zeta}_m^n &= \mathbf{U}_{\text{FR}}^T \vec{C}_m^n \\ &= \mu_m \mathbf{U}_{\text{FR}}^T \vec{C}_m^{n-1} + \eta_m \sum_{g'} \mathbf{U}_{\text{FR}}^T \mathbf{v} \Sigma_{f,g'}^{n-1} \mathbf{U}_{g'} \vec{\varphi}_{g'}^{n-1} + \xi_m \sum_{g'} \mathbf{U}_{\text{FR}}^T \mathbf{v} \Sigma_{f,g'}^n \mathbf{U}_{g'} \vec{\varphi}_{g'}^n \\ &= \mu_m \vec{\zeta}_m^{n-1} + \eta_m \sum_{g'} \widehat{\mathbf{v}} \Sigma_{f,g'}^{n-1} \vec{\varphi}_{g'}^{n-1} + \xi_m \sum_{g'} \widehat{\mathbf{v}} \Sigma_{f,g'}^n \vec{\varphi}_{g'}^n, \end{aligned} \quad (68)$$

以上の式変形をまとめると、PODの基礎式は以下ようになる。

PODの基礎式

$$\left(\widehat{\mathbf{A}}_g^n + \frac{1}{\Delta t} \widehat{\mathbf{V}}_g^{inv} \right) \vec{\varphi}_g^n = \vec{Q}_g^n + \vec{S}_g^{n-1}, \quad \text{【再掲】} \quad (52)$$

$$\vec{Q}_g^n = \widehat{\mathbf{Y}}_g \sum_{g'} \widehat{\mathbf{v}} \Sigma_{f,g'}^n \vec{\varphi}_{g'}^n + \sum_{g' \neq g} \widehat{\boldsymbol{\Sigma}}_{s,g' \rightarrow g}^n \vec{\varphi}_{g'}^n, \quad \text{【再掲】} \quad (63)$$

$$\vec{S}_g^{n-1} = \frac{1}{\Delta t} \widehat{\mathbf{V}}_g^{inv} \vec{\varphi}_g^{n-1} + \sum_m \widehat{\boldsymbol{\chi}}_{m,g}^d \lambda_m \left(\mu_m \vec{\zeta}_m^{n-1} + \eta_m \sum_{g'} \widehat{\mathbf{v}} \Sigma_{f,g'}^{n-1} \vec{\varphi}_{g'}^{n-1} \right), \quad \text{【再掲】} \quad (66)$$

$$\vec{\zeta}_m^n = \mu_m \vec{\zeta}_m^{n-1} + \eta_m \sum_{g'} \widehat{\mathbf{v}} \Sigma_{f,g'}^{n-1} \vec{\varphi}_{g'}^{n-1} + \xi_m \sum_{g'} \widehat{\mathbf{v}} \Sigma_{f,g'}^n \vec{\varphi}_{g'}^n. \quad \text{【再掲】} \quad (68)$$

これを2章で導出した従来法での動特性計算の基礎式（以下、「Full Order Model (FOM)の基礎式」として再掲）と上式を見比べると、PODではFOMにおける「中性子／先行核のバラ

** 本仮定は展開誤差を含むことになるが、先行核密度の空間分布は基本的に生成反応率分布とほぼ同形であるため、計算結果に対する影響は少ない。詳細は3章にて述べる。

ンス式」を「中性子束分布／先行核密度分布の展開係数に関する方程式」に変換していることが分かる。

FOM の基礎式

$$\left(\mathbf{A}_g^n + \frac{1}{\Delta t} \mathbf{V}_g^{inv}\right) \vec{\phi}_g^n = \vec{Q}_g^n + \vec{S}_g^{n-1}, \quad \text{【再掲】 (29)}$$

$$\vec{Q}_g^n = \gamma_g \sum_{g'} \mathbf{v} \Sigma_{f,g'}^n \vec{\phi}_{g'}^n + \sum_{g'} \Sigma_{s,g' \rightarrow g}^n \vec{\phi}_{g'}^n, \quad \text{【再掲】 (30)}$$

$$\vec{S}_g^{n-1} = \frac{1}{\Delta t} \mathbf{V}_g^{inv} \vec{\phi}_g^{n-1} + \sum_m \chi_{m,g}^d \lambda_m \left(\mu_m \vec{C}_m^{n-1} + \eta_m \sum_{g'} \mathbf{v} \Sigma_{f,g'}^{n-1} \vec{\phi}_{g'}^{n-1} \right), \quad \text{【再掲】 (31)}$$

$$\vec{C}_m^n = \mu_m \vec{C}_m^{n-1} + \eta_m \sum_{g'} \mathbf{v} \Sigma_{f,g'}^{n-1} \vec{\phi}_{g'}^{n-1} + \xi_m \sum_{g'} \mathbf{v} \Sigma_{f,g'}^n \vec{\phi}_{g'}^n. \quad \text{【再掲】 (32)}$$

さらに、両者の違いは未知数の削減の観点からは極めて大きな意味を持つ。通常、FOM における未知数は体系内の各メッシュの中性子束であり、非常に大きな数の未知数が存在する。一方で、POD における未知数は、中性子束分布の展開係数である。一般に、直交基底を用いる場合、体系内のメッシュ数よりも極めて少ない数の展開次数で中性子束分布を表現することができるため、求めるべき未知数の数は一般的に POD の方が圧倒的に少ない。以下に例を示すが、FOM で 10,000 メッシュ分の中性子束分布を 10 個の直交基底ベクトルで展開できる場合、FOM では

漏洩・吸収行列 \mathbf{A}_g	:	10,000×10,000
中性子束ベクトル $\vec{\phi}_g$:	10,000×1
中性子束の直交基底 \mathbf{U}_g	:	10,000×10

であるが、POD では圧縮係数行列と展開係数ベクトルのサイズは

漏洩・吸収圧縮係数行列 $\hat{\mathbf{A}}_g (= \mathbf{U}_g^T \mathbf{A}_g \mathbf{U}_g)$:	10×10
中性子束の展開係数 $\vec{\phi}_g (= \mathbf{U}_g^T \vec{\phi}_g^n)$:	10×1

となる。ゆえに、POD の方が圧倒的に計算コストは低くて済む。なお、両者のもう一つの違いとして、従来法では係数行列が基本的に大規模粗行列であるのに対して、POD の圧縮係数行列は基本的に小規模密行列となるため、LU 分解法等の直接解法も十分利用可能である。

上記の例からも分かるように、POD では用いる直交基底次第で大幅な未知数の削減が可能な分、「計算精度を落とすこと無く、いかに少ない展開次数で対象の問題に最適な直交基底を構築できるか」が重要である。次章では、直交基底の構築方法について述べる。

4. 直交基底の構築方法

前章でも述べた通り、POD では、対象の問題に適した直交基底を予め求めておくことで、問題を表現するための自由度を大幅に削減し、計算コストを低減する。ここで、「対象の問題に適した直交基底」とはどのようなものだろうか。本章では、空間依存動特性計算の特徴も含め、直交基底の構築方法について考える。

まず、これから解析しようとする問題として 2 次元拡散計算コードの検証に広く使用される TWIGL ベンチマーク問題を解析すること例に考えよう。TWIGL ベンチマーク問題の計算体系を図 4 に示す。

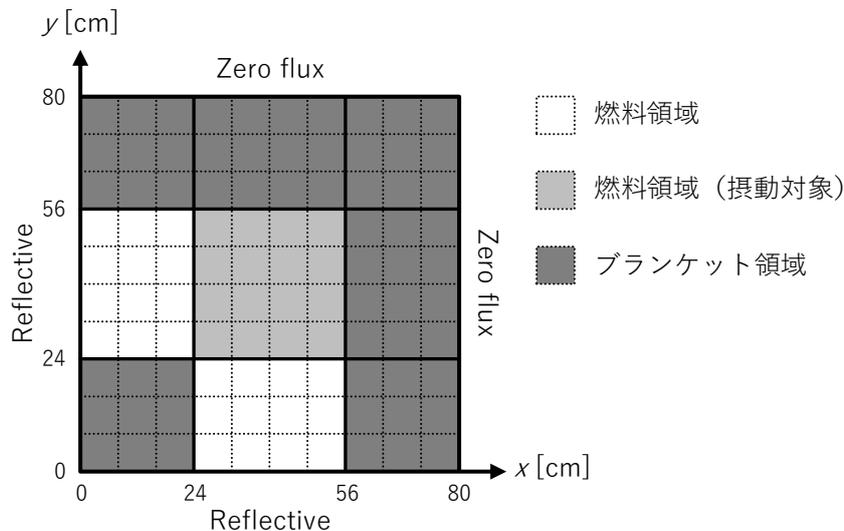


図 4 TWIGL ベンチマーク問題の計算体系

TWIGL ベンチマーク問題は、図 4 における摂動対象領域の 2 群巨視的吸収断面積に対し、以下の摂動を加えたときの炉心出力の変化を計算する問題である。なお、どちらの摂動でも最終的な投入反応度は同じである。

$$\text{ステップ状摂動} \quad : \quad \Sigma_{a,2}^{PS}(t) = \Sigma_{a,2}^{PS}(0) - 0.0035 \quad (t > 0), \quad (69)$$

$$\text{ランプ状摂動} \quad : \quad \Sigma_{a,2}^{PS}(t) = \begin{cases} \Sigma_{a,2}^{PS}(0)(1 - 0.116667t) & (t \leq 0.2) \\ 0.976666\Sigma_{a,2}^{PS}(0) & (t > 0.2) \end{cases}. \quad (70)$$

このとき、炉心出力の変化はそれぞれ図 5 のようになる。

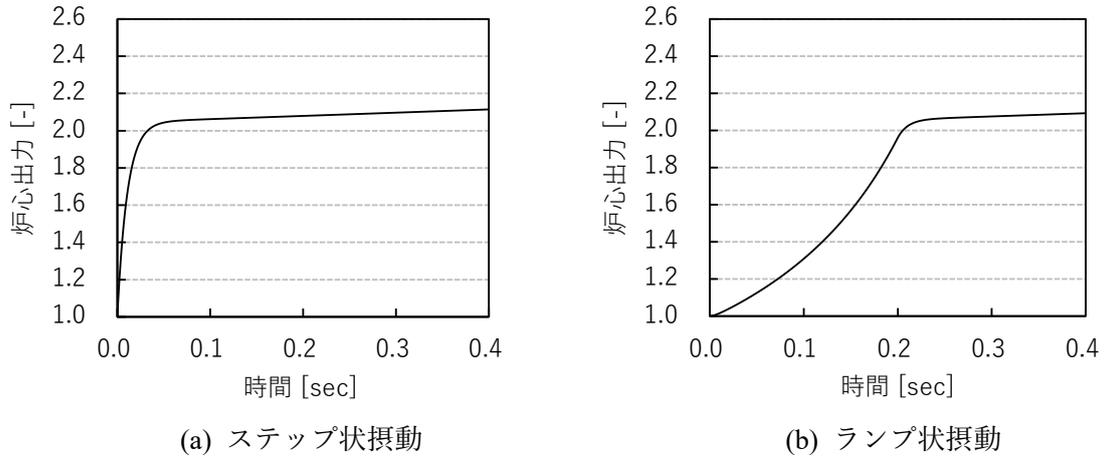


図 5 TWIGL ベンチマーク問題の解析結果

さて、この問題をよく表現する直交基底を作るのだが、本例のように FOM の解析結果が既に存在する場合は、各タイムステップの中性子束分布のスナップショットを取得し、そこから直交基底を構築するのが一般的である。例としてランプ状摂動条件での $t = 0.0, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4$ sec における各群の中性子束分布を示すと図 6 のようになる。

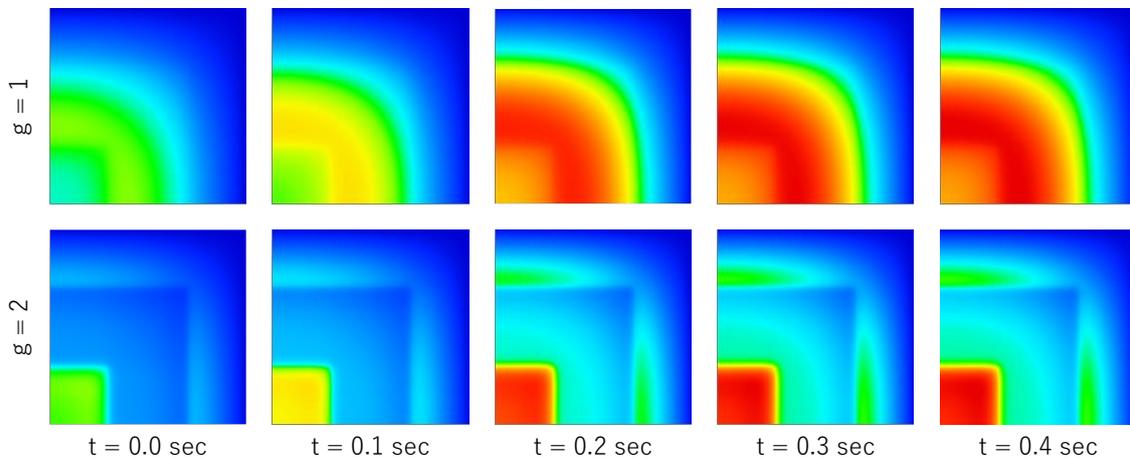


図 6 TWIGL ベンチマーク問題における中性子束分布

ここで、図 6 の各群 5 つの中性子束分布を $\vec{\phi}_g^n$ ($n = 0 \sim 4$) として表し、

$$\mathbf{M}_g \equiv (\vec{\phi}_g^0 \quad \vec{\phi}_g^1 \quad \vec{\phi}_g^2 \quad \vec{\phi}_g^3 \quad \vec{\phi}_g^4) \quad (71)$$

を定義すると、行列 \mathbf{M}_g の列ベクトルで張られる空間 (行列 \mathbf{M}_g の列空間) は g 群の中性子束分布の解空間を表すこととなる。ここで、行列 \mathbf{M}_g の特異値分解を考えると、

$$\mathbf{M}_g = \mathbf{U}_g \mathbf{S}_g \mathbf{V}_g^T \quad (72)$$

より、解空間を左特異ベクトル \mathbf{U}_g 、特異値行列 \mathbf{S}_g 、右特異ベクトル \mathbf{V}_g^T の積で表すことができる。また、左特異ベクトルは数学的に、元の行列 \mathbf{M}_g の「列空間の正規直交基底」である。

ここで、行列 \mathbf{M}_g の列空間は g 群の中性子束分布に対する解空間なのだから、 \mathbf{U}_g は図 6 に示す中性子束分布を表現可能な直交基底であることが分かる。本例の場合の中性子束分布の直交基底を図 7 に示す。

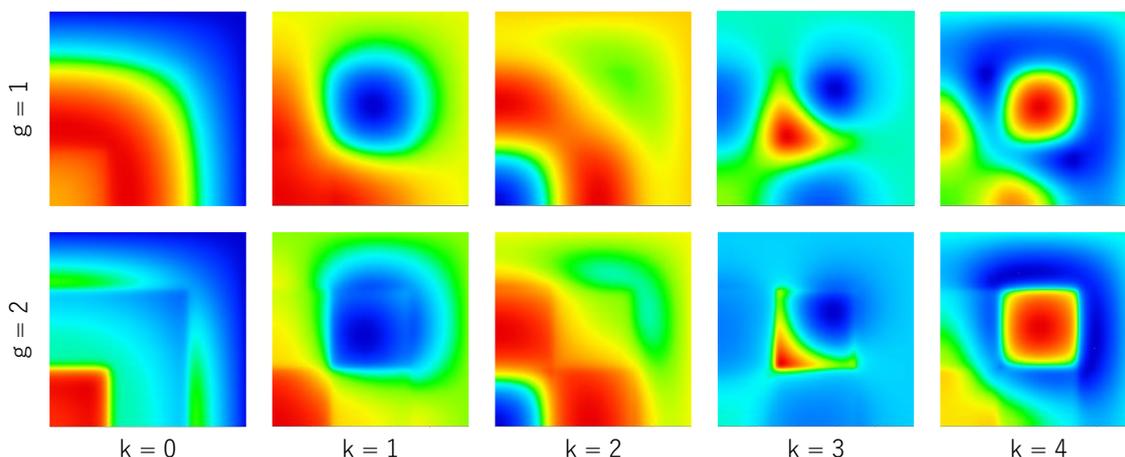


図 7 TWIGL ベンチマーク問題における正規直交基底ベクトルの形状

なお、これは 2 章で用いた生成反応率に関する直交基底を計算する場合でも同様であり、各時刻におけるスナップショットから生成反応率の解空間を構築し、それを特異値分解することで直交基底を得る。

基本的には以上が直交基底の構築方法であるが、いくつかノウハウが存在する。

1 つ目は、対象とするパラメータの空間分布にあった直交基底を用いて展開を行うことである。本資料では、先行核密度分布の直交基底展開や即発・遅発核分裂スペクトル行列の圧縮の際に生成反応率の直交基底を用いたが、これは直交基底展開による展開誤差を低減するためである。例として、TWIGL ベンチマーク問題におけるランプ状摂動条件での生成反応率および先行核密度の空間分布を図 8 に示す。

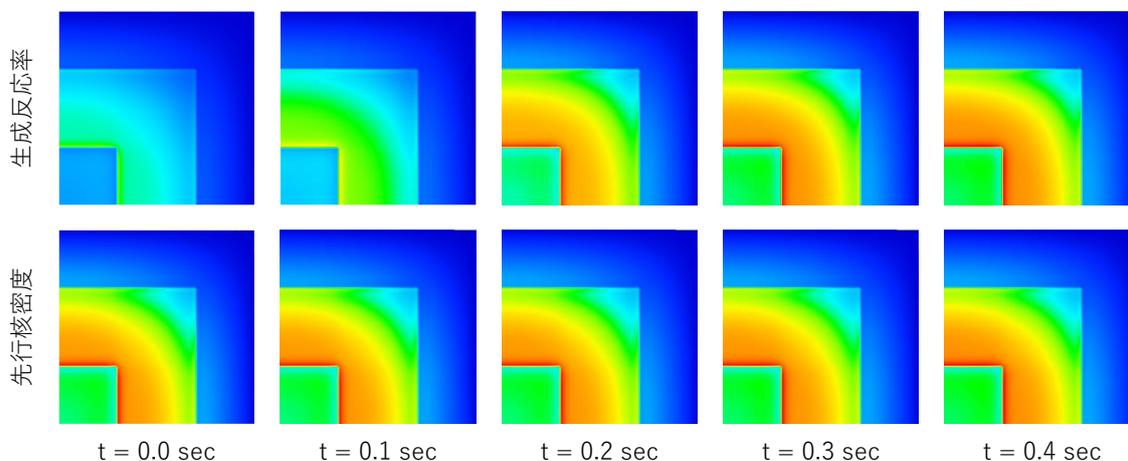


図 8 TWIGL ベンチマーク問題における生成反応率分布および先行核密度分布

図 6 と図 8 を見比べると分かりやすいが、中性子束分布は物質境界での空間分布の形状がやや滑らかな、“拡散した”形状となっている一方で、先行核密度分布は物質境界での空間分布の変化がよりシャープな形状である。これは物質間で生成断面積が異なることと、先行核密度が生成反応率から計算されることに起因するものであるが、このシャープな分布形状を中性子束分布の直交基底(図 7)で表現することは困難である。ゆえに先行核密度の直交基底展開には、より形状の類似性が高く、式変形の観点からも整合性の取りやすい生成反応率分布を用いている。

2 つ目として、本資料では特に断りなくエネルギー群毎に直交基底を分けて POD の基本式の導出を行ったが、例えば解空間行列を

$$\mathbf{M} \equiv (\vec{\phi}_1^0 \ \vec{\phi}_1^1 \ \vec{\phi}_1^2 \ \vec{\phi}_1^3 \ \vec{\phi}_1^4 \ \vec{\phi}_2^0 \ \vec{\phi}_2^1 \ \vec{\phi}_2^2 \ \vec{\phi}_2^3 \ \vec{\phi}_2^4) \quad (73)$$

として、全エネルギー群の中性子束分布の解空間を定義したとする。さらにこれを特異値分解することで「全エネルギー群の中性子束分布を表現するための直交基底」を構築するとしよう。このようにすれば、エネルギー群毎に直交基底を分ける必要はない。また、散乱行列も

$$\hat{\Sigma}_{s,g' \rightarrow g}^n = \mathbf{U}^T \Sigma_{s,g' \rightarrow g}^n \mathbf{U} , \quad (74)$$

で表され、一見すると散乱断面積行列も他の断面積行列の圧縮方法と同形となり、非常に分かりやすい。本資料では意図してこの定義を採用していないが、なぜだろうか？ こうした場合に何か問題となるのだろうか？

結論としては、特段計算精度上の問題は起きないが、次元圧縮の効率が悪化する。理由は、解空間が広がることによる自由度の増加である。図 6 を見直すと分かるように、高速群と熱群では中性子束分布の形状が大きく異なるため、その双方を 1 つの直交基底で表そうとすると、必然的により多くの自由度が必要となる。ゆえに、効率性の観点では解空間の形状が似通ったエネルギー群毎に分けて直交基底を作る方が効率がよい。言い換えると、解空間の範囲(variety)が狭まるほど、空間分布を表現するために必要な自由度は少なくて済む。

3 つ目は動特性計算特有の話であるが、解空間の列ベクトル間の振幅の差が過度に大きくならないことである。例として、図 9 に示す即発臨界事象を考える。(y軸を対数軸としているため、炉心出力が指数関数的に変化していることに留意すること。)

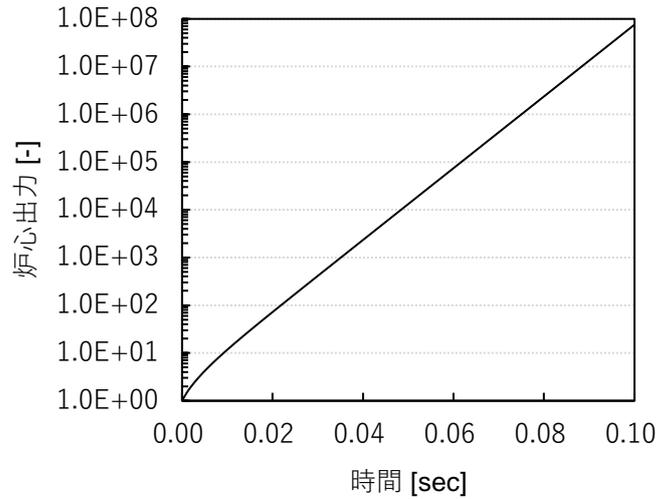


図 9 即発臨界事象の炉心出力の変化

このとき、 $t = 0.0, 0.02, 0.04, 0.06, 0.08, 0.10$ sec における中性子束分布を取得し、それぞれ $\vec{\phi}_g^n$ ($n = 0 \sim 5$) と置いて解空間行列

$$\mathbf{M}_g \equiv (\vec{\phi}_g^0 \quad \vec{\phi}_g^1 \quad \vec{\phi}_g^2 \quad \vec{\phi}_g^3 \quad \vec{\phi}_g^4 \quad \vec{\phi}_g^5) \quad (75)$$

を考えると、第 1 列と第 5 列の間で中性子束の絶対値（以下、振幅と記載）に約 10^8 オーダーの差がある。この状態で特異値分解を行った場合、振幅が大きい成分だけが重点的に基底ベクトルで表現され、振幅の小さい成分を適切に表現できなくなる恐れがある。また、それは POD における計算精度の悪化として計算結果に表れる。

ただし、この問題は動特性計算の特徴を踏まえると解決に繋がる可能性がある。動特性計算は一般に中性子束の振幅と形状(相対的な空間分布)の分離性が良く、改良準静近似法や MAF 法^[3]のように中性子束を振幅関数と形状関数に分離して解く手法が開発されてきた。例として改良準静近似法では、一点炉動特性方程式の解を振幅関数 $P(t)$ 、形状関数を $\varphi_g(\vec{r}, t)$ とし、以下に示すように中性子束分布を両者の積で表す。

$$\phi_g(\vec{r}, t) = P(t) \cdot \varphi_g(\vec{r}, t). \quad (76)$$

つまりは、振幅関数が一点炉動特性方程式で炉心全体の出力の挙動 (= 中性子束の振幅成分) を捉え、形状関数が中性子束分布の相対的な形状を捉える役割を担っている。例として図 9 の $t = 0.0$ sec と $t = 0.1$ sec における中性子束分布の相対的な形状を図 10 に示すが、両時刻における中性子束分布の相対的な形状の違いは、振幅の変化 ($\sim 10^8$ オーダーの変化) に比べ非常に小さい。

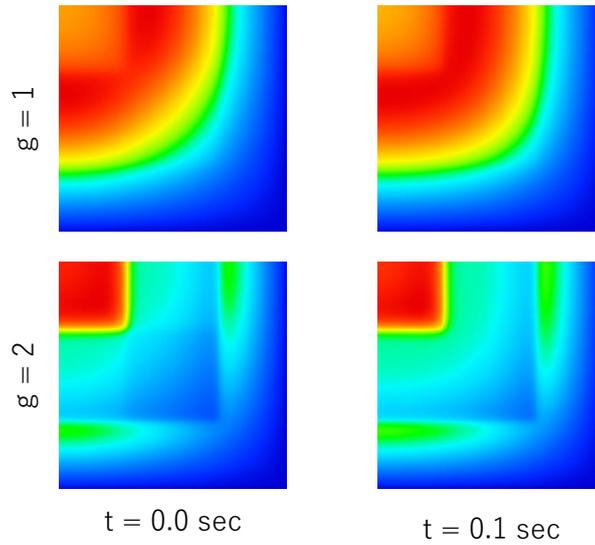


図 10 即発臨界時の中性子束分布の相対的な形状の変化

これ踏まえて POD における直交基底の役割に立ち戻ると、直交基底の役割は中性子束の相対的な形状を司る形状関数に近く、振幅関数に近い役割を持つのは、各基底ベクトルに対応する展開係数である。よって、振幅の値域が極端に大きな問題を対象とする場合には、解空間は n をタイムステップ、 p^n を当該タイムステップにおける炉心出力として、(77)式に示すように振幅を規格化した中性子束で解空間を構築し、中性子束の相対的な形状に関する直交基底を構築する方が望ましい。

$$\mathbf{M}_g \equiv \left(\dots \frac{1}{p^n} \vec{\phi}_g^n \dots \right). \quad (77)$$

さらに、応用的な観点からは、この特徴は直交基底を構築するための計算を簡略化するためにも使うことができる。本章では、(71)式で直交基底を構築した際、“FOM の計算結果が存在する場合には”と前置きをしたが、通常は FOM の計算コストが非常に大きいため POD を適用したいのであって、対象の問題における FOM の厳密な計算結果（中性子束分布）が都合良く得られているケースはほぼ存在しない。ゆえに、直交基底は、模擬対象となる FOM の解析よりも計算コストの低い計算から取得した中性子束分布を使って構築する必要がある。

ここで仮に、直交基底を構築するための中性子束分布として時間と空間の離散化誤差を十分に低減したものが必要な場合、どうなるだろうか。当然、直交基底を作るための中性子束分布を得るための計算自体に膨大な計算コストがかかる。一方で、「中性子束分布の相対的な形状さえ分かれば良い」という状況であればどうだろうか。この場合は、上述と同様に空間の離散化は詳細なものが必要だが、時間の離散化に関しては振幅関数と形状関数の特徴を踏まえると別の見方ができる。具体的には、

- ・ 振幅関数：時間に対して強く依存、空間に対して弱く依存する関数

- ・ 形状関数：時間に対して弱く、空間に対して強く依存する関数

であり、中性子束分布の相対的な形状は形状関数の時間依存性が小さい分、時間の離散化が粗くてもある程度正確な値を知ることができる。つまり、動特性計算用の直交基底は粗いタイムステップの動特性計算で得られた相対的な中性子束分布の形状からでも十分求めることが可能である。これは直交基底を構築するための計算コストの低減にも繋がることから、動特性計算用の直交基底を構築する上で非常に有利な特徴である。

4つ目は、直交基底で表現される解空間の大きさと自由度のトレードオフに対する理解である。一般に、POD は事前に用意している直交基底で表現できない形状の分布は表現することができない。かと言って、ありとあらゆる分布を表現できる直交基底を事前に構築しようとする、直交基底の形状は基底モードを除き最終的に固有関数のようにいくつもの節を持つ関数型に収束する。こうなると POD を使う意義は薄れ始める。なぜならば、これはあくまで体系の固有関数を数値的に求められているだけで、対象の中性子束分布を表現するために必要な自由度の数はある程度大きな数必要となるためである。(実質的に固有関数相当の関数を使うことになるのであれば、最初から固有関数展開を使う方法もあり、敢えて POD を積極的に使用する意義が薄れる。)

5つ目は、低ランク近似の適用である。特異値分解を行った際、各基底に対応する特異値を見ると、特異値が非常に小さい基底が存在する場合がある。図 11 に例を示すが、本例の場合は 51 個目の基底以降で急激に特異値が減少しており、基底の寄与率が低いことが分かる。この場合、51 個目以降の基底に対して低ランク近似を適用することで、計算効率の改善が期待できる。(基底ベクトル 61 個のうち 50 個使うことになるので、圧縮係数行列のサイズも 61×61 から 50×50 に縮小となる。)

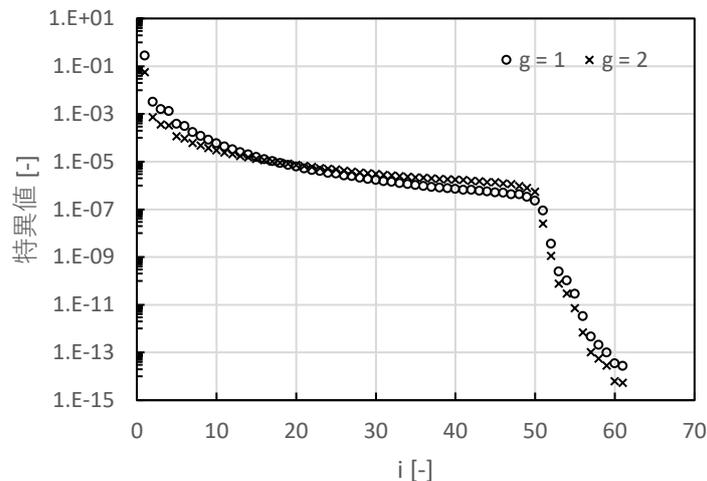


図 11 各エネルギー群の中性子束に対する特異値分布

以上を振り返ってみると、POD をうまく活用し、少ない自由度で問題を解く上での共通項があることに気づく。それは、「直交基底を用いて表現する解空間を、適切に絞り込んでおくこと」である。一般に、大きく複雑な解空間を表現するためには、それ相応の自由度が必要となる。POD を用いて少ない自由度で問題を表現するためには、対象となる問題の解空間の特徴を適切に捉え、空間を絞ることで、より少ない自由度で対象の問題を表現できる軸を構築することに尽きる。

5. 圧縮係数行列の内挿

前章までで、対象の動特性計算に適した直交基底を構築することができた。ただし、POD を用いて動特性計算を行うためには、動特性計算中の各時刻における圧縮係数行列も必要である。本章では、圧縮係数行列のテーブル化と任意時刻における圧縮係数行列の計算方法について述べる。

まず3章で求めた POD の基礎式は以下の通りであり、これらを用いて動特性計算を実施するには、 $\widehat{\mathbf{A}}_g^n$ 、 $\widehat{\mathbf{V}}_g^{inv}$ 、 $\widehat{\mathbf{v}}_{f,g'}^n$ 、 $\widehat{\mathbf{\Sigma}}_{s,g' \rightarrow g}^n$ 等の圧縮係数行列が既知である必要がある。

POD の基礎式

$$\left(\widehat{\mathbf{A}}_g^n + \frac{1}{\Delta t} \widehat{\mathbf{V}}_g^{inv} \right) \vec{\varphi}_g^n = \vec{Q}_g^n + \vec{S}_g^{n-1}, \quad \text{【再掲】 (52)}$$

$$\vec{Q}_g^n = \widehat{\mathbf{Y}}_g \sum_{g'} \widehat{\mathbf{v}}_{f,g'}^n \vec{\varphi}_{g'}^n + \sum_{g' \neq g} \widehat{\mathbf{\Sigma}}_{s,g' \rightarrow g}^n \vec{\varphi}_{g'}^n, \quad \text{【再掲】 (63)}$$

$$\vec{S}_g^{n-1} = \frac{1}{\Delta t} \widehat{\mathbf{V}}_g^{inv} \vec{\varphi}_g^{n-1} + \sum_m \widehat{\chi}_{m,g}^d \lambda_m \left(\mu_m \vec{s}_m^{n-1} + \eta_m \sum_{g'} \widehat{\mathbf{v}}_{f,g'}^{n-1} \vec{\varphi}_{g'}^{n-1} \right), \quad \text{【再掲】 (66)}$$

$$\vec{s}_m^n = \mu_m \vec{s}_m^{n-1} + \eta_m \sum_{g'} \widehat{\mathbf{v}}_{f,g'}^{n-1} \vec{\varphi}_{g'}^{n-1} + \xi_m \sum_{g'} \widehat{\mathbf{v}}_{f,g'}^n \vec{\varphi}_{g'}^n. \quad \text{【再掲】 (68)}$$

拡散計算の場合、これらの係数行列は体系内の物質配置から決まる断面積情報と直交基底から事前に計算しておくことが可能である。ゆえに、これらの圧縮係数行列は POD の動特性計算に入る前に事前に計算しておく。なぜならば、ある時刻点における圧縮係数行列を計算するだけでも、ある程度計算コストの高い計算をする必要があるためである。(例として、体系のメッシュ数が 10,000 メッシュの場合、係数行列 \mathbf{A}_g^n は基本的に $10,000 \times 10,000$ の大規模粗行列であり、これに直交基底を左右から掛け合わせる計算を行うこととなる。)

$$\widehat{\mathbf{A}}_g^n = \mathbf{U}_g^T \mathbf{A}_g^n \mathbf{U}_g, \quad \text{【再掲】 (53)}$$

$$\widehat{\mathbf{V}}_g^{inv} = \mathbf{U}_g^T \mathbf{V}_g^{inv} \mathbf{U}_g, \quad \text{【再掲】 (54)}$$

$$\widehat{\mathbf{\Sigma}}_{s,g' \rightarrow g}^n = \mathbf{U}_g^T \mathbf{\Sigma}_{s,g' \rightarrow g}^n \mathbf{U}_{g'}, \quad \text{【再掲】 (58)}$$

$$\widehat{\mathbf{Y}}_g = \mathbf{U}_g^T \mathbf{Y}_g \mathbf{U}_{FR}, \quad \text{【再掲】 (61)}$$

$$\widehat{\mathbf{v}}_{f,g'}^n = \mathbf{U}_{FR}^T \mathbf{v}_{f,g'}^n \mathbf{U}_{g'}, \quad \text{【再掲】 (62)}$$

例として、TWIGL ベンチマーク問題のランプ状摂動条件の解析、POD を用いて行うことを考えよう。まず FOM の TWIGL ベンチマーク問題の解析結果を以下に示す。

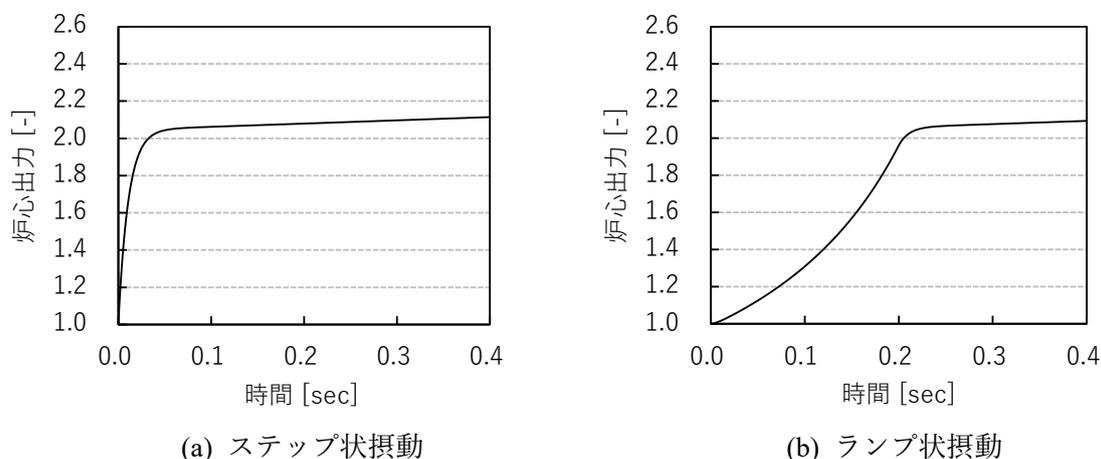


図 5 TWIGL ベンチマーク問題の解析結果 (再掲)

ここで、圧縮係数行列を事前に求めておく時刻点としては、直交基底を構築したときと同じく $t = 0.0, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4 \text{ sec}$ としよう。この選定は、対象の過渡事象によっても変わり得るため何か定量的な指標があるわけではないが、元々直交基底を作った際、これらの時刻点は「この事象を解析する上での典型的な中性子束分布が現れる点の一つ」として選定していたはずである。ゆえに、係数行列（ \equiv 断面積）についても同様に考え、対象の事象の中で典型的な断面積を表す点として考えれば良い。††

圧縮係数行列を作る時刻点が決めれば、(53)、(54)、(58)、(61)、(62)式を使って当該時刻点の圧縮係数行列を算出する。今回の場合は、 $t = 0.0, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4 \text{ sec}$ の圧縮係数行列が既知の値となる。もちろん POD を用いた動特性計算のタイムステップ幅によっては、 $t = 0.01 \text{ sec}$ 等、その他の時刻点についても圧縮係数行列の値が必要になることから、それらの時刻点については圧縮係数行列の値が既知なタイムステップ間で内挿することで圧縮係数行列の値を近似的に求めればよい。‡‡

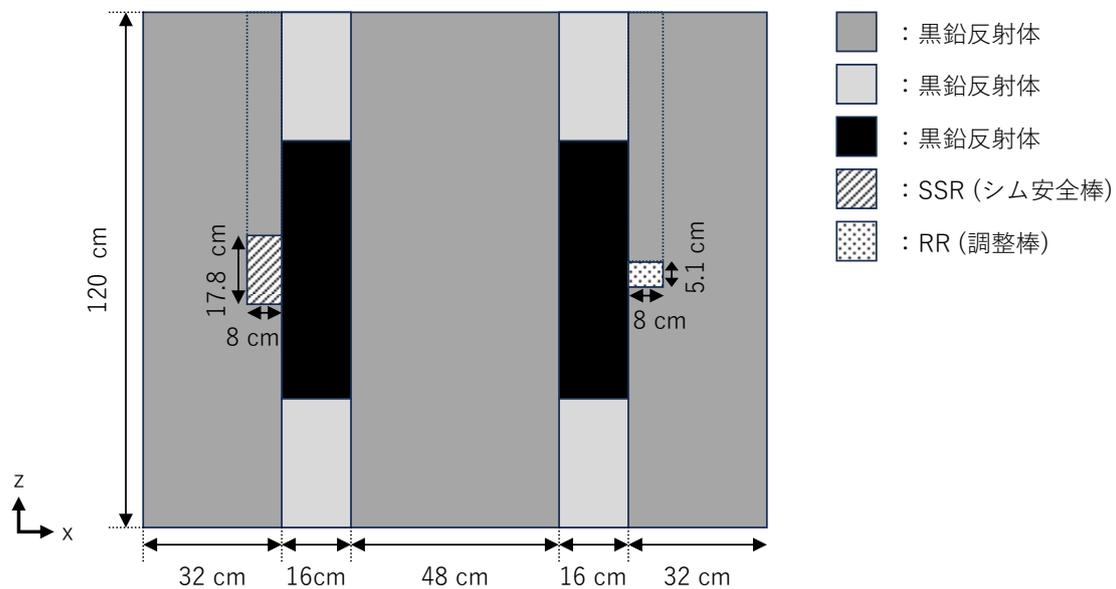
以上が基本的な圧縮係数行列の取り扱い方法だが、上記は「時間」を軸に圧縮係数行列をテーブル化しており、予め解析対象となる事象の時間進展が決まっているような問題にしか適用できない。そこで次はより応用的な例として、時間変数以外を軸に圧縮係数行列のテーブル化を行うことを考える。

例として、POD に基づく三次元炉心シミュレータ Ikaros3D^[4]でも使用されている近畿大

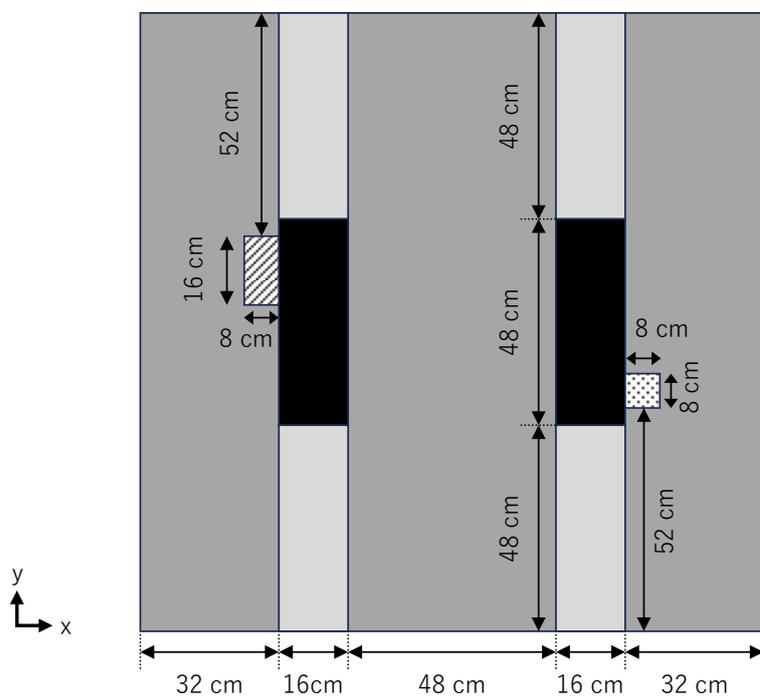
†† 何より、「過渡事象中の特徴をよく捉えた典型的な時刻点の断面積と中性子束分布を使って ROM を構築する」という考え自体は非常にシンプルなものである。

‡‡ 計算コストの観点から、あくまで「圧縮後の係数行列を内挿」していることに留意すること。

学原子炉(UTR-KINKI)の簡略化体系において、制御棒の挿入位置を軸にテーブル化を行うことを考えよう。UTR-KINKI の簡略化体系を図 12 に示す。



(a) 軸方向マテリアル配置



(b) 径方向マテリアル配置

図 12 UTR-KINKI 簡略化体系^[4]

図 12 に示す通り、UTR-KINKI にはシム安全棒(Shim Safety Rod : SSR)と調整棒(Regulating Rod : RR)があり、それぞれ軸方向に 17.8cm、5.1cm の分の吸収材が配置されているものとする。ここで、SSR と RR については、炉心頂部を $z=0$ cm として制御棒の挿入量でその位置を表現するものとする。この時の圧縮係数行列のテーブル化を最もシンプル考えるならば、SSR と RR の挿入量をそれぞれ Z_{SSR} 、 Z_{RR} で表したときの圧縮係数行列を $\hat{\mathbf{A}}_g(Z_{SSR}, Z_{RR})$ として、以下のようなテーブルを準備すればよい。

表 1 圧縮係数行列のテーブル化の例

		RR 挿入量 [cm]		
		0 cm	...	120 cm
SSR 挿入量 [cm]	0 cm	$\hat{\mathbf{A}}_g(0,0)$...	$\hat{\mathbf{A}}_g(0,120)$
	:	:		:
	120 cm	$\hat{\mathbf{A}}_g(120,0)$...	$\hat{\mathbf{A}}_g(120,120)$

ただし、これでは制御棒位置が増えた場合に挿入位置の組み合わせが非常に複雑となり、データ量や圧縮係数行列の計算量の観点から現実的なテーブル化ではない。この点を Ikaros3D では以下のように解決している。まず、圧縮係数行列は元々

$$\hat{\mathbf{A}}_g(Z_{SSR}, Z_{RR}) = \mathbf{U}_g^T \mathbf{A}_g(Z_{SSR}, Z_{RR}) \mathbf{U}_g, \quad (78)$$

で表されている。さらに、ある基準点を決めた際の基準点の係数行列を \mathbf{A}_g^{BASE} 、そこから SSR と RR の挿入量を変化させたときの SSR と RR からの寄与分をそれぞれ $\Delta \mathbf{A}_g^{SSR}$ と $\Delta \mathbf{A}_g^{RR}$ で表したとき、圧縮前の係数行列の間に以下の線形結合の関係があると仮定する。§§

$$\mathbf{A}_g(Z_{SSR}, Z_{RR}) = \mathbf{A}_g^{BASE} + \Delta \mathbf{A}_g^{SSR}(Z_{SSR}) + \Delta \mathbf{A}_g^{RR}(Z_{RR}). \quad (79)$$

(79)式を(78)式に代入すると、圧縮係数行列も基準行列と SSR/RR の挿入位置に応じた差分項の線形結合で表現される。

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{A}}_g(Z_{SSR}, Z_{RR}) &= \mathbf{U}_g^T \mathbf{A}_g^{BASE} \mathbf{U}_g + \mathbf{U}_g^T \Delta \mathbf{A}_g^{SSR}(Z_{SSR}) \mathbf{U}_g + \mathbf{U}_g^T \Delta \mathbf{A}_g^{RR}(Z_{RR}) \mathbf{U}_g \\ &= \hat{\mathbf{A}}_g^{BASE} + \hat{\Delta \mathbf{A}}_g^{SSR}(Z_{SSR}) + \hat{\Delta \mathbf{A}}_g^{RR}(Z_{RR}), \end{aligned} \quad (80)$$

ただし

$$\hat{\mathbf{A}}_g^{BASE} = \mathbf{U}_g^T \mathbf{A}_g^{BASE} \mathbf{U}_g, \quad (81)$$

$$\hat{\Delta \mathbf{A}}_g^{SSR}(Z_{SSR}) = \mathbf{U}_g^T \Delta \mathbf{A}_g^{SSR}(Z_{SSR}) \mathbf{U}_g, \quad (82)$$

$$\hat{\Delta \mathbf{A}}_g^{RR}(Z_{RR}) = \mathbf{U}_g^T \Delta \mathbf{A}_g^{RR}(Z_{RR}) \mathbf{U}_g, \quad (83)$$

である。この場合、制御棒の数が増えたとしても制御棒の挿入による線形独立な差分項 ($\hat{\Delta \mathbf{A}}_g^{SSR}$ 、 $\hat{\Delta \mathbf{A}}_g^{RR}$) を追加するだけで済み、表 1 のようなテーブル化に比べ大幅なデータ量・

§§ 制御棒の挿入によって拡散係数が変わらないと仮定すると、 $\Delta \mathbf{A}_g^{SSR}$ と $\Delta \mathbf{A}_g^{RR}$ はそれぞれの制御棒を挿入した際の各メッシュ領域の吸収断面積の増加量を格納した行列である。輸送計算等を対象とする場合は制御棒挿入により巨視的全断面積 $\Sigma_{t,g}$ が変化することで漏洩項もその影響を受けることから、 $\Delta \mathbf{A}_g^{SSR}$ と $\Delta \mathbf{A}_g^{RR}$ が単純な吸収断面積の増分にはならないため、本資料ではこの点を「仮定」としている。

計算量の削減が期待される。なお、各 SSR/RR 挿入位置での断面積の差分項 $\widehat{\Delta A}_g^{SSR}$ 、 $\widehat{\Delta A}_g^{RR}$ も離散的なデータ点でしか値が既知でないことから、時間を軸に圧縮係数行列をテーブル化した際と同様、動特性計算の際は離散点の間は内挿処理によって圧縮係数行列の値を求めるのが一般的である。

6. POD を用いた動特性計算のフロー

本章では、3-5 章で示した内容を踏まえ、POD を用いた動特性計算のフローを示す。POD では、事前に直交基底や圧縮係数行列を求めておく準備解析が必要である。準備解析の主な流れは図 13 に示す通りである。

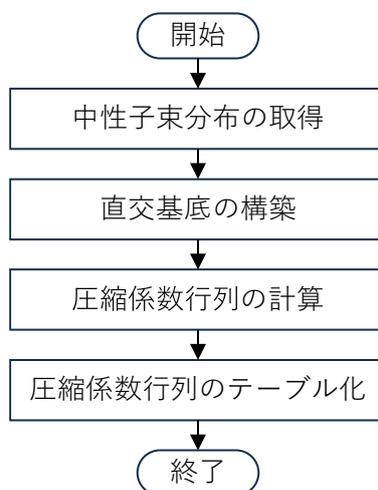


図 13 POD を用いた動特性計算までの準備解析に関する計算フロー

本準備解析は基本的に FOM と同じ数の自由度を取り扱うため、いずれも FOM のメッシュ数や取得したサンプル数（直交基底や圧縮係数行列のために FOM の計算結果をサンプリングしたデータ点数）が多くなるほど計算コストがかかる。また、直交基底や圧縮係数行列を事前に準備しておくという性質上、

- ・ 事前に構築した直交基底で表現不可能な中性子束分布、生成反応率分布
- ・ 事前のテーブル化範囲を超えた条件での圧縮係数行列の外挿

はいずれも後続の POD の計算において数値計算誤差として現れる。

逆に、事前に準備した範囲を超えない場合は、POD の解析結果と FOM の解析結果との間の誤差要因は、

- ・ 直交基底の低ランク近似に起因する誤差
- ・ 圧縮係数行列のテーブル化における内挿誤差

である。これは POD の基礎方程式の導出において、特段新たな近似の導入は行っていない

ためである。***

以上の準備解析が終われば、図 14 に示すフローで動特性計算を行う。3 章でも既に示したが、POD では解くべき方程式が展開係数に関する式になっているだけで、動特性計算自体の全体的なフローは従来の動特性計算と何ら変わらない。なお、それは動特性計算の初期値を固有値計算で求めた場合に、初期状態と動特性計算の連続性を確保するために生成断面積の規格化する処理についても同様である。(POD の場合は、圧縮生成断面積行列を k_{eff} で規格化する。)

POD の基礎式

$$\left(\widehat{\mathbf{A}}_g^n + \frac{1}{\Delta t} \widehat{\mathbf{V}}_g^{inv} \right) \vec{\varphi}_g^n = \vec{Q}_g^n + \vec{S}_g^{n-1}, \quad \text{【再掲】 (52)}$$

$$\vec{Q}_g^n = \widehat{\mathbf{Y}}_g \sum_{g'} \widehat{\mathbf{v}}_{f,g'}^n \vec{\varphi}_{g'}^n + \sum_{g' \neq g} \widehat{\mathbf{\Sigma}}_{s,g' \rightarrow g}^n \vec{\varphi}_{g'}^n, \quad \text{【再掲】 (63)}$$

$$\vec{S}_g^{n-1} = \frac{1}{\Delta t} \widehat{\mathbf{V}}_g^{inv} \vec{\varphi}_g^{n-1} + \sum_m \widehat{\chi}_{m,g}^d \lambda_m \left(\mu_m \vec{\zeta}_m^{n-1} + \eta_m \sum_{g'} \widehat{\mathbf{v}}_{f,g'}^{n-1} \vec{\varphi}_{g'}^{n-1} \right), \quad \text{【再掲】 (66)}$$

$$\vec{\zeta}_m^n = \mu_m \vec{\zeta}_m^{n-1} + \eta_m \sum_{g'} \widehat{\mathbf{v}}_{f,g'}^{n-1} \vec{\varphi}_{g'}^{n-1} + \xi_m \sum_{g'} \widehat{\mathbf{v}}_{f,g'}^n \vec{\varphi}_{g'}^n. \quad \text{【再掲】 (68)}$$

*** 基本的に POD が行っているのは、対象の物理現象を変えずに（解くべき方程式は同じ状態で）直交基底を軸に展開係数の次元で対象の問題を表現することであり、筆者の印象では射影変換のイメージが最も近い。

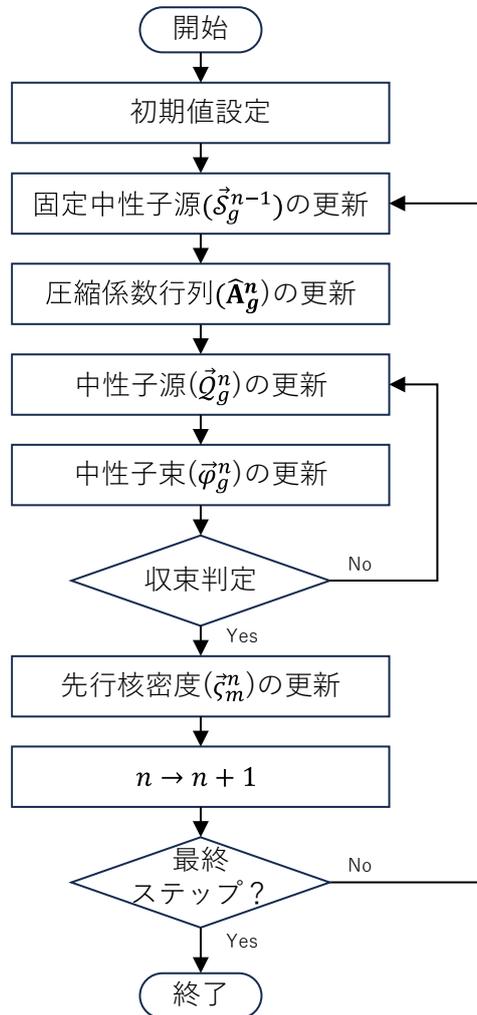


図 14 POD を用いた動特性計算の計算フロー

($\vec{s}_g^{n-1}, \vec{Q}_g^n, \vec{\varphi}_g^n, \zeta_m^n$ のいずれも直交基底の展開係数の次元であることに注意)

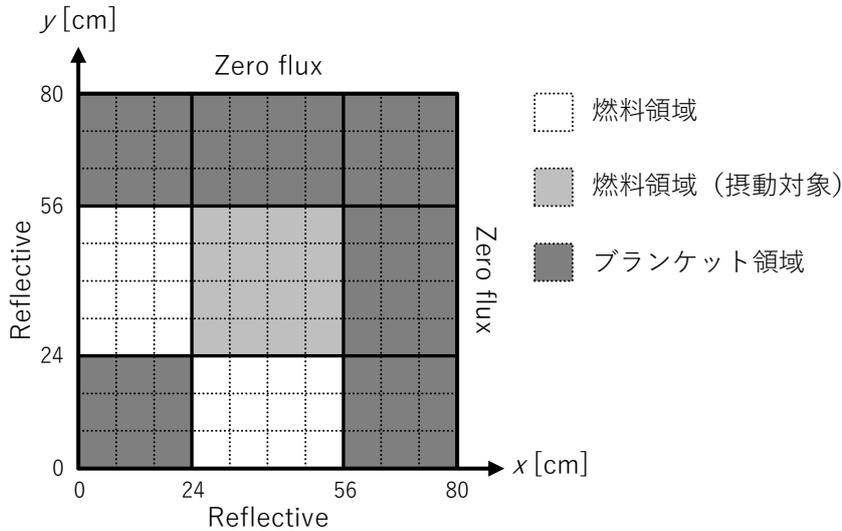
なお、図 14 に示すフローでは、いずれの計算も圧縮後の次元(展開係数の自由度)で行われる点には留意してほしい。POD を適用する多くの問題では「FOM のメッシュ数 \gg POD の展開次数」であることが一般的であり、図 14 の POD の計算中に FOM の体系の中性子束分布を再構成する等して、元の FOM が持っていた自由度分の変数を取り扱おうとすると、その部分の計算コストが一気にボトルネックとなる。ゆえに、やむを得ずそのような処理が必要となる場合は、できる限りその頻度を減らすことで POD の持つ高速性を活用できる。(特に \vec{Q}_g^n や $\vec{\varphi}_g^n$ の計算を行うループの深い位置での空間分布の再構成は計算効率を劇的に悪化に繋がるため注意が必要である。)

7. 解析結果

本章では、POD を用いた動特性計算の具体例を示す。

7.1. TWIGL ベンチマーク問題

本節では、TWIGL ベンチマーク問題^[5]の解析結果を示す。TWIGL ベンチマーク問題は 2次元体系における動特性計算ベンチマーク問題として広く使用されるベンチマーク問題である。体系図は 4 章でも示したが、再掲すると図 4 に示すように燃料領域とそれを囲むブランケット領域からなる 2次元体系である。



【再掲】図 4 TWIGL ベンチマーク問題の計算体系

各領域の断面積および遅発中性子先行核定数を表 2 に示す。

表 2 TWIGL ベンチマーク問題における断面積および遅発中性子先行核定数

物質	エネルギー群	D_g (cm)	$\Sigma_{a,g}$ (1/cm)	$\nu\Sigma_{f,g}$ (1/cm)	χ_g (1/cm)	$\Sigma_{s,1\rightarrow 2}$ (1/cm)
燃料領域 (非摂動領域)	1	1.4	0.010	0.007	1.0	0.01
	2	0.4	0.150	0.200	0.0	
燃料領域 (摂動領域)	1	1.4	0.010	0.007	1.0	0.01
	2	0.4	0.150	0.200	0.0	
ブラン ケット領域	1	1.3	0.008	0.003	1.0	0.01
	2	0.5	0.050	0.060	0.0	
	ν	ν_1 (cm/sec)	ν_2 (cm/sec)	β (-)	λ (1/sec)	
	2.43	10^7	2×10^5	0.0075	0.08	

摂動領域の熱群断面積($\Sigma_{a,2}^{PS}$)に与える摂動としては、(84)、(85)式に示す通りステップ状摂動とランプ状摂動の2つが用意されている。ただしどちらも $t=0.2$ sec 後の断面積は同じである。

$$\text{ステップ状摂動} \quad : \quad \Sigma_{a,2}^{PS}(t) = \Sigma_{a,2}^{PS}(0) - 0.0035 \quad (t > 0), \quad (84)$$

$$\text{ランプ状摂動} \quad : \quad \Sigma_{a,2}^{PS}(t) = \begin{cases} \Sigma_{a,2}^{PS}(0)(1 - 0.116667t) & (t \leq 0.2) \\ 0.976666\Sigma_{a,2}^{PS}(0) & (t > 0.2) \end{cases}. \quad (85)$$

以上の条件の下、直交基底を構築するために使用する中性子束分布、生成反応率分布を表 3 に示す条件にて計算するものとする。

表 3 直交基底構築用の FOM 計算条件

計算条件	設定値
メッシュ構造	1 cm × 1 cm 正方メッシュ (全 6400 メッシュ)
タイムステップ幅	0.1 sec
収束判定条件	Fission : 10^{-8} , flux : 10^{-8}
空間離散化	有限差分法
時間離散化	完全陰解法

また、参照解とする FOM の計算条件を表 4 に示す。

表 4 FOM 参照解の計算条件

計算条件	設定値
メッシュ構造	1 cm × 1 cm 正方メッシュ (全 6400 メッシュ)
タイムステップ幅	1 msec
収束判定条件	Fission : 10^{-8} , flux : 10^{-8}
空間離散化	有限差分法
時間離散化	完全陰解法

表 3、4 に示す通り、直交基底を構築するための中性子束分布は、直交基底の構築に関する計算時間の短縮の観点から、ランプ状摂動条件における粗タイムステップ計算結果から求めるものとする。なお、完全陰解法でタイムステップ幅 0.1 sec という条件は TWIGL ベンチマーク問題からすると比較的粗い計算条件であり、図 15 にも示す通り、参照解と粗タイムステップ計算の間には炉心出力で約 1.5%程度の差異が現れる条件である。

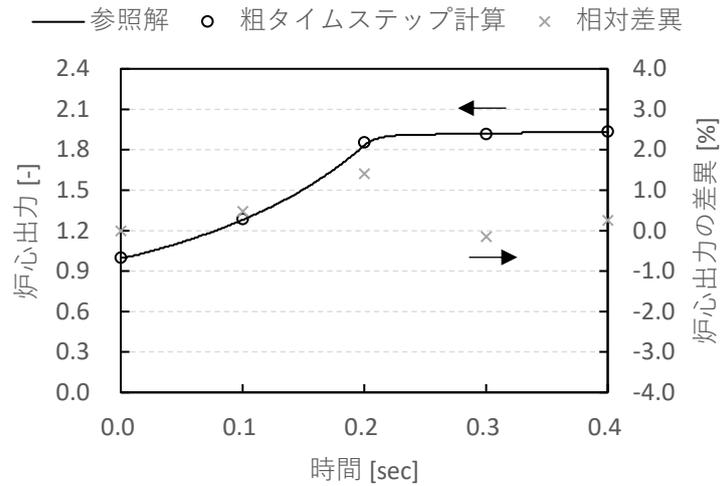


図 15 参照解と粗タイムステップ計算の差異

粗タイムステップ計算からは $t = 0.0, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4$ sec の中性子束分布および生成反応率分布のスナップショットを取得できる。取得した各パラメータの空間分布を図 16 に示す。

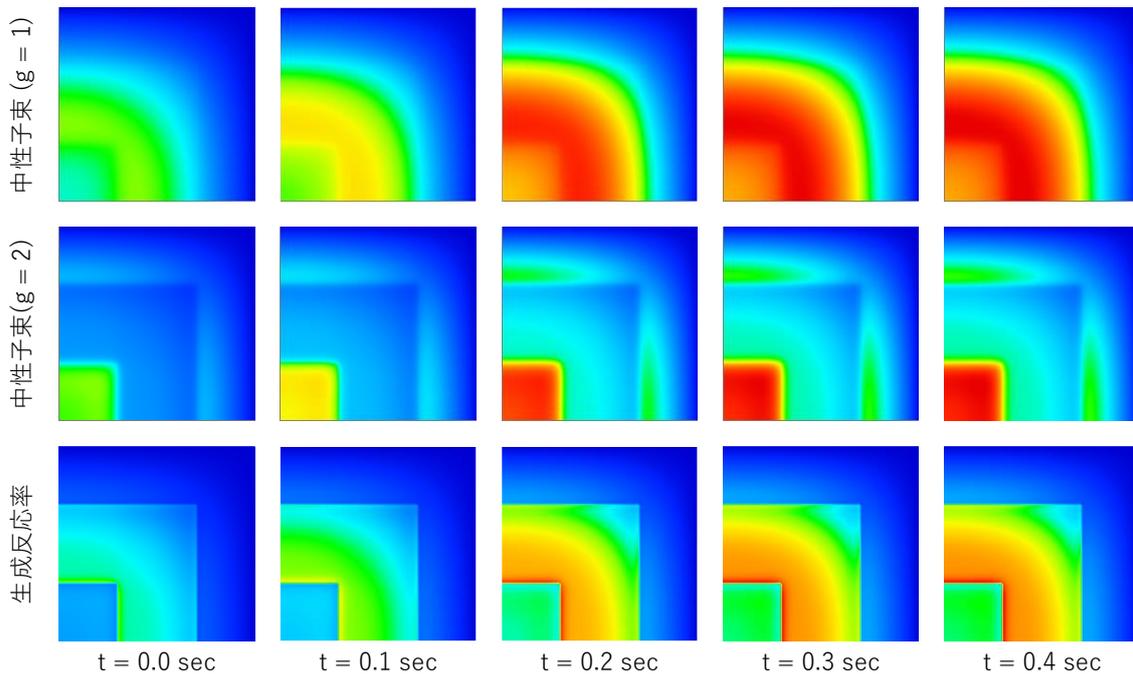


図 16 粗タイムステップ計算から取得した中性子束分布／生成反応率分布

これらの空間分布をもとに各群の中性子束分布と生成反応率分布の解空間をそれぞれ 6400×5 (=メッシュ数 \times スナップショット数) の行列で表し、それを特異値分解することで作成した直交基底を図 17 に示す。(なお、直交基底も 6400×5 の行列で表される。)

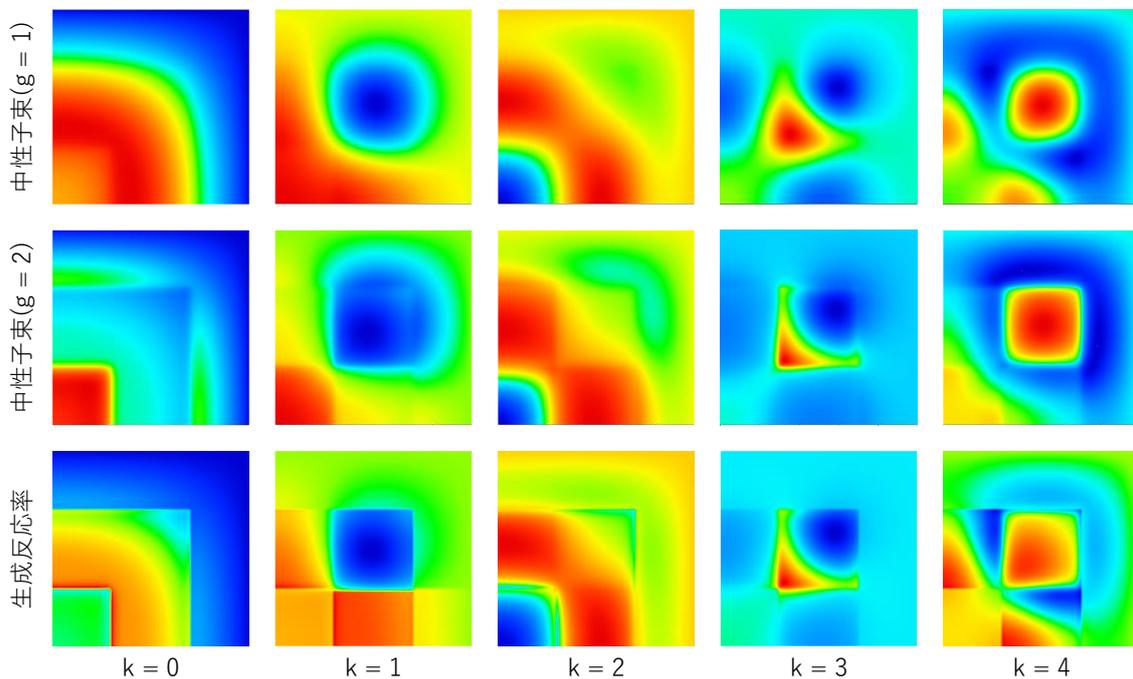


図 17 粗タイムステップ計算結果から作成した中性子束分布／生成反応率分布
に対する直交基底

また、この時の各直交基底に対応する特異値は図 18 に示す通りである。なお、本計算条件
では直交基底自体のサイズも十分小さいことから低ランク近似は適用しないものとする。

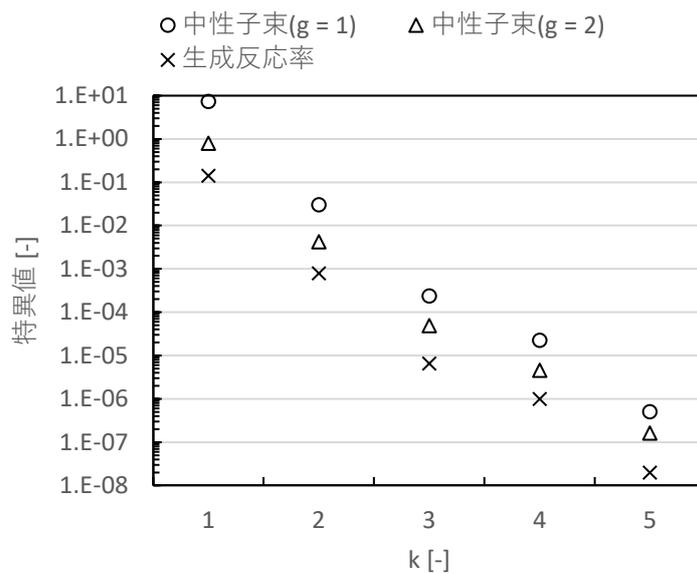


図 18 各群の中性子束分布と生成反応率の直交基底に対応する特異値

また、各種断面積や漏洩項を示す係数行列については、直交基底と同様に粗タイムステップ $t = 0.0, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4$ sec における値をサンプリングするものとする。ただし本検証ではランプ状摂動条件における各種係数行列をサンプリングしており、ステップ状摂動条件での粗タイムステップ計算は行っていないため、ランプ状摂動条件における粗タイムステップ計算結果から算出した $t = 0.0, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4$ sec における圧縮係数行列をそれぞれ XS0, XS1, ..., XS4 として、表 5 に示すように圧縮係数行列の線形内挿を行うものとする。(TWIGL ベンチマーク問題では、ステップ状摂動とランプ状摂動条件では、摂動終了後の断面積の値は同じであるため。)

表 5 各摂動条件における圧縮係数行列の内挿方法

区間 [sec]	ステップ状摂動条件	区間 [sec]	ランプ状摂動条件
$0.0 \leq t < 0.001$	XS0 と XS4 の内挿	$0.0 \leq t < 0.1$	XS0 と XS1 の内挿
$0.001 \leq t < 0.4$	XS4 を使用	$0.1 \leq t < 0.2$	XS1 と XS2 の内挿
		$0.2 \leq t < 0.3$	XS2 と XS3 の内挿
		$0.3 \leq t < 0.4$	XS3 と XS4 の内挿

本計算条件における圧縮前後の行列サイズと未知数の数をおさらいしておこう。まず FOM 計算の係数行列と中性子束ベクトルのサイズは以下の通りである。

$$\begin{aligned} \text{漏洩・吸収行列 } \mathbf{A}_g & : 6,400 \times 6,400 \\ \text{中性子束の } \vec{\phi}_g^{\text{ref}} & : 6,400 \times 1 \end{aligned}$$

また、本計算条件で POD を適用した場合の中性子束分布の直交基底、圧縮係数行列、展開係数ベクトルのサイズは

$$\begin{aligned} \text{中性子束の直交基底 } \mathbf{U}_g & : 6,400 \times 5 \\ \text{漏洩・吸収圧縮係数行列 } \hat{\mathbf{A}}_g (= \mathbf{U}_g^T \mathbf{A}_g \mathbf{U}_g) & : 5 \times 5 \\ \text{中性子束の展開係数 } \vec{\phi}_g (= \mathbf{U}_g^T \vec{\phi}_g^{\text{ref}}) & : 5 \times 1 \end{aligned}$$

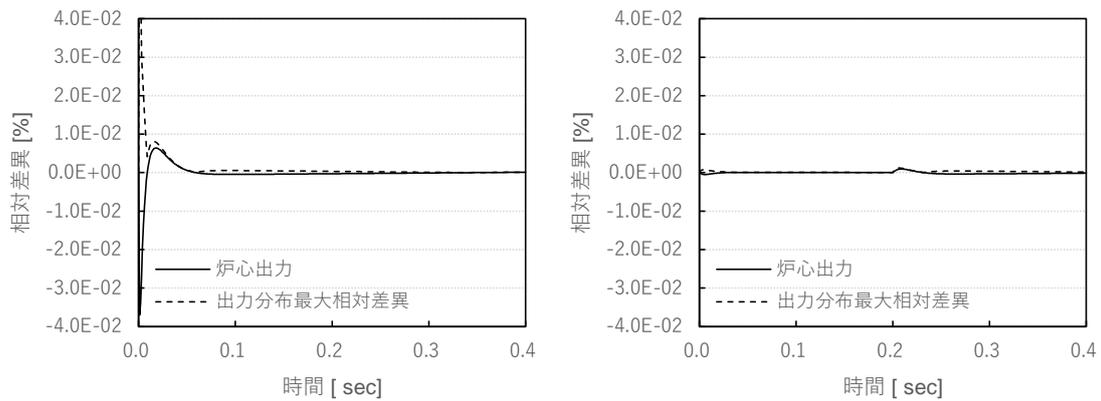
であり、問題の自由度(=未知数の数)は 6,400 個から 5 個に低減される。

POD の計算結果と FOM の参照解との比較として、図 19 に両者の炉心出力の相対差異、出力分布の最大相対差異を示す。なお、炉心出力の相対差異、出力分布の最大相対差異はそれぞれ下式で計算するものとする。

$$\frac{CP^{POD} - CP^{REF}}{CP^{REF}}, \quad (86)$$

$$\max \left| \frac{P_i^{POD} - P_i^{REF}}{P_i^{REF}} \right|, \quad (87)$$

ここで、 CP は炉心出力、 P_i は FOM のメッシュ i における核分裂出力とし、添え字 POD 、 REF はそれぞれ POD の計算結果、参照解を示す。



(a) ステップ状摂動条件 (b) ランプ状摂動条件

図 19 TWIGL ベンチマーク問題における POD の計算精度

図 19 に示す通り、ランプ状摂動条件に関しては、炉心出力、出力分布共に FOM の参照解を極めて良く再現している。ステップ状摂動条件については、解空間をランプ状摂動条件の計算結果から構築している関係上、ランプ状摂動条件の時よりも計算精度の悪化が見られるが、それでもなお参照解との差異は 0.1%未満であり、良い一致と言える。

次に準備解析を含めた計算時間を見てみよう。表 6 に直交基底や圧縮係数行列の計算に必要な粗タイムステップ計算の計算時間、直交基底および圧縮係数行列の算出に必要な準備解析にかかった時間を示す。表 7 は POD を用いた動特性計算本体の計算時間である。さらに、参考として表 8 に FOM の参照解の計算時間を示す。いずれの計算も intel® Core™ i9-12900、メモリ 32GB のマシン上でシングルスレッド計算により実施した結果である。

表 6 ROM 構築のための準備解析

項目	計算時間
粗タイムステップ動特性計算	390 msec
直交基底の算出	14 msec
圧縮係数行列の算出	47 msec
合計	451 msec

表 7 POD 動特性計算の計算時間

摂動条件	計算時間
ステップ状摂動条件	102 msec
ランプ状摂動条件	96 msec

表 8 FOM 参照解の計算時間

摂動条件	計算時間
ステップ状摂動条件	11697 msec
ランプ状摂動条件	14831 msec

表 6～8 に示す通り、動特性計算自体の計算速度は参照解と比べても POD の方が圧倒的に高速である。また、準備解析を含めてなお、約 20～30 倍 POD を用いた場合の方が高速な解析を実現できている。この要因としては、以下の 2 点による寄与が大きい。

- ・ 解析対象の問題が予め決められており、それに特化することで大幅な自由度の削減(6400→5)を実現できている。
- ・ 粗タイムステップ計算により対象の問題の解空間の形状を十分正確に捉えられており、準備解析の計算コストを大幅に低く抑えられている。

次節では、より複雑な三次元体系における POD の計算精度、計算時間の検証結果を示す。

7.2. LMW ベンチマーク問題

本節では、LMW ベンチマーク問題^[6]の解析結果を示す。LMW ベンチマーク問題は核熱フィードバックを含まない 3 次元体系における動特性計算ベンチマーク問題として広く使用されるベンチマーク問題である。体系図を図 20 に示す。

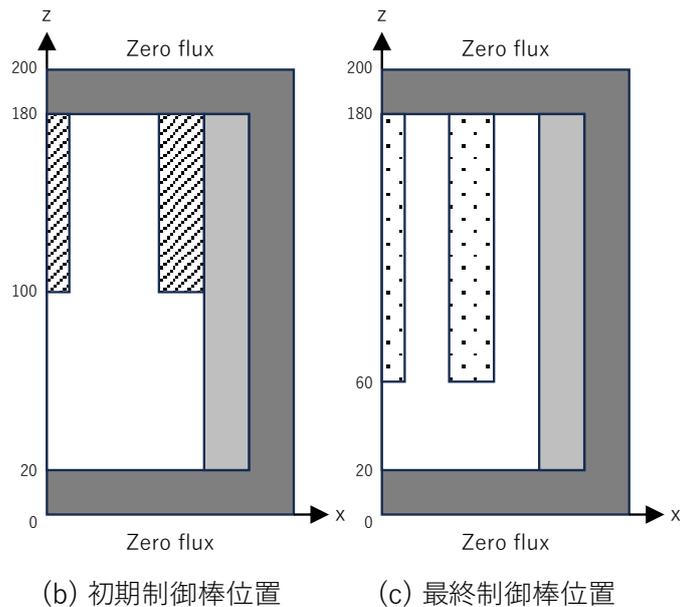
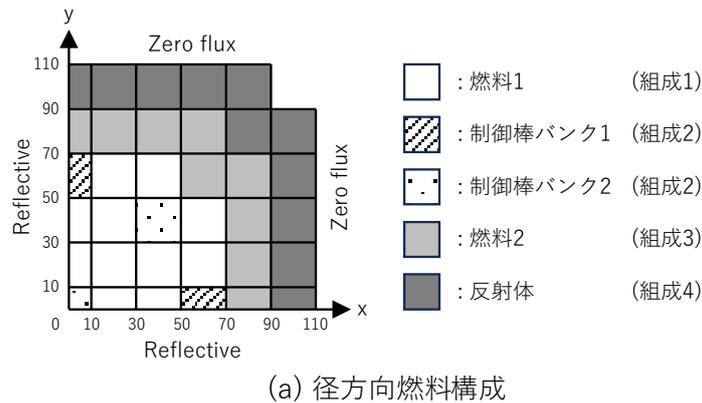


図 20 LMW ベンチマーク問題の計算体系

図 20 に示す通り体系内には 2 つの制御棒バンクがある。LMW ベンチマーク問題は、各バンクを以下のように操作した際の炉心出力の変化を求める問題である。

制御棒バンク 1: 毎秒 3.0 cm で引抜 ($0.0 \text{ sec} < t < 26.666 \text{ sec}$)

制御棒バンク 2: 毎秒 3.0 cm で挿入 ($7.5 \text{ sec} < t < 47.5 \text{ sec}$)

各組成に対する断面積と遅発中性子先行核定数を表 9、10 に示す。エネルギー群は 2 群、遅発中性子先行核は 6 群で与えられている。

表 9 LMW ベンチマーク問題における断面積

組成	エネルギー群	D_g [cm]	$\Sigma_{a,g}$ [1/cm]	$\nu\Sigma_{f,g}$ [1/cm]	$\Sigma_{s,1\rightarrow 2}$ [1/cm]
1	1	1.423913	0.01040206	0.006477691	0.0175555
	2	0.356306	0.08766217	0.1127328	
2	1	1.423913	0.01095206	0.006477691	0.0175555
	2	0.356306	0.09146217	0.1127328	
3	1	1.425611	0.01099263	0.007503284	0.01717768
	2	0.350574	0.09925634	0.1378004	
4	1	1.634227	0.002660573	0.0	0.02759693
	2	0.264002	0.04936351	0.0	
	ν	ν_1 [cm/sec]	ν_2 [cm/sec]	χ_1 [-]	χ_2 [-]
	2.5	1.25×10^7	2.5×10^5	1.0	0.0

表 10 LMW ベンチマーク問題における遅発中性子先行核定数

先行核群	β_m [-]	λ_m [1/sec]
1	0.0002470	0.0127
2	0.0013845	0.0317
3	0.0012220	0.115
4	0.0026455	0.311
5	0.0008320	1.40
6	0.0001690	3.87

直交基底および圧縮係数行列を構築に使用する中性子束分布、生成反応率分布、各種係数行列は表 3 に示す条件での動特性計算結果からサンプリングしたものをを用いる。なお、本計算では比較のためサンプリング間隔を変えた 2 ケース分 ROM を構築するものとする。

表 11 直交基底構築用の FOM 計算条件

計算条件	ケース 1	ケース 2
メッシュ構造	1 辺 2 cm の立方メッシュ(全 302500 メッシュ)	
タイムステップ幅*	2 sec	1 sec
収束判定条件	Fission : 10^{-8} , flux : 10^{-8}	
空間離散化	有限差分法	
時間離散化	完全陰解法	

* 26.6666 sec, 47.5 sec にも 1 ステップずつ追加する。

表 11 に示す通り、ケース 1 ではタイムステップ幅 1 sec の粗タイムステップ計算結果から初期状態も合わせて 63 ステップ分、ケース 2 ではタイムステップ幅 2 sec の粗タイムステップから 33 ステップ分の中性子束分布を取得し、それぞれ直交基底を求める。(制御棒動作が止まった時刻もタイムステップを刻んでいる。) また、圧縮係数行列については、前節と同様時刻におけるテーブル化を行うものとし、中性子束分布のサンプリングと同じく粗タイムステップ計算での各時間ステップにおける断面積から算出するものとする。本計算条件の場合、ケース 2 よりもケース 1 の方が詳細に解空間を網羅しており、かつ、圧縮係数行列の内挿誤差も小さくなることが予想される。

以上の条件の下、ケース 1、2 の直交基底に対応する特異値を図 21 に示す。

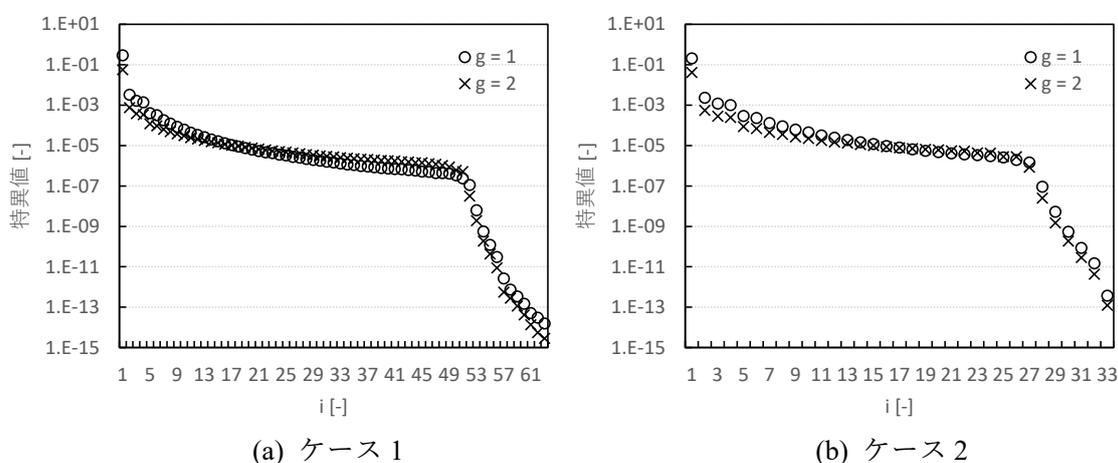


図 21 中性子束分布の解空間の特異値分解結果

図 21 を見ても分かるように、ケース 1、2 共に特異値はどちらも十分低い値となっているが、ケース 1 では特異値が急激に減少し出すのが 53 番目の基底からであるのに対して、ケース 2 では 28 番目の基底からである。この場合、ケース 2 の直交基底は一見特異値が小さくなっているため問題無さそうに見えるが、ケース 1 と見比べながらより詳細に見ていくと解空間全体を表現するためにはより多くの自由度が必要であると言える。ゆえにケース 2 の直交基底では LMW ベンチマークの解空間を正確に表現できず、計算精度が悪化する可能性がある。特異値分解結果はあくまで、サンプリング結果から構築された解空間を表現する際の各基底の寄与率を示すものであるため、サンプリング間隔をより細かく取った計算を行う等して、使用する直交基底が対象の問題を適切に表現できるか否かを見るとよい。

本検証計算では、低ランク近似も適用するものとし、図 21 で特異値が 10^{-8} 未満の基底については無視することとする。これにより直交基底と圧縮係数行列はそれぞれ表 12 に示す大きさとなる。なお、前節の TWIGL ベンチマークの時と比べ直交基底の列数が多いのは、LMW ベンチマーク問題で現れる中性子束分布の形状変化が、TWIGL ベンチマーク問題よりも複雑なためである。(特に LMW ベンチマーク問題では 2 つの制御棒バンクが三次元的

に動く分、過渡変化中の中性子束分布の形状が TWIGL ベンチマークよりも複雑化する。)

表 12 低ランク近似後の直交基底と圧縮係数行列のサイズ

行列	ケース 1	ケース 2
直交基底 \mathbf{U}_g	302500×53	302500×28
圧縮係数行列 $\hat{\mathbf{A}}_g$	53×53	28×28

以上の条件の下、FOM で LMW ベンチマーク問題の炉心出力の時間変化の解析結果を参照解として、各ケースの炉心出力との相対差異を比較した。結果を図 22 に示す。なお、FOM、POD 共にタイムステップ幅は 0.1 sec で固定している。

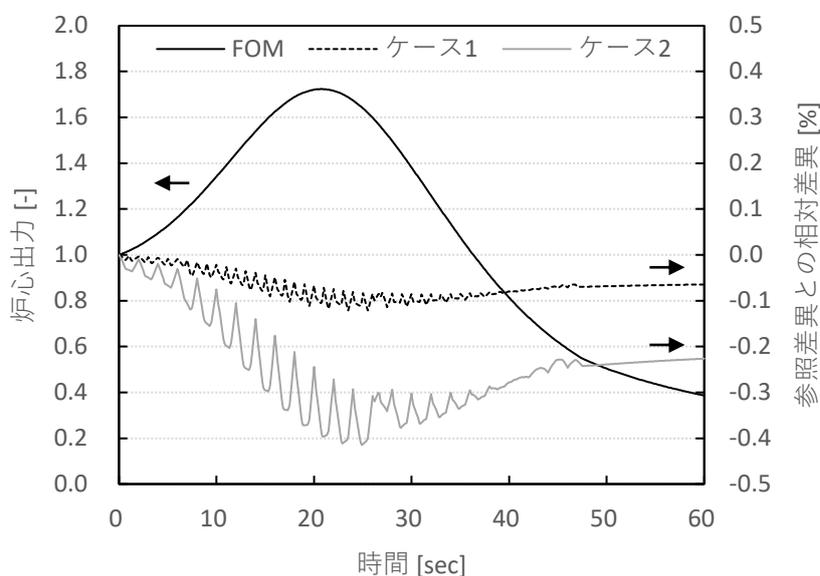


図 22 LMW ベンチマーク問題における FOM と POD の炉心出力の比較

図 22 に示すように、予想通り、ケース 1 とケース 2 では解空間の表現が詳細なケース 1 の方が良好な計算精度を示している。これはケース 2 の直交基底では適切に LMW ベンチマーク問題の解空間を表現できておらず、展開誤差の分だけ異なる中性子バランスに収束するためである。またケース 1、2 共に参照解との相対差異が時刻ステップ間でたわんだ形状となっているが、これは圧縮係数行列の内挿誤差による影響である。タイムステップ間で圧縮係数行列を線形内挿しているため、線形内挿でカバーできない高次成分がサンプリング点同士の間で誤差として現れ、内挿誤差の大きいケース 2 の方が影響が大きい。

最後に各ケースの計算時間を表 13 に示す。いずれの計算も intel® Core™ i9-12900、メモリ 32GB のマシン上でシングルスレッド計算により実施した結果である。

表 13 LMW ベンチマーク問題の計算時間

	参照解	ケース 1	ケース 2
FOM 粗タイムステップ計算	—	461.8 sec	259.1 sec
直交基底算出／圧縮係数行列計算	—	245.2 sec	89.6 sec
動特性計算	2504.7 sec	26.6 sec	24.9 sec

表 13 に示す通りケース 1、2 共に POD を用いた動特性計算自体の計算速度は FOM に比べ極めて高速である。またそれは ROM 構築のための準備解析を考慮しても同様である。なお、本計算は 60 秒間の中性子束分布の時間変化を計算する動特性ベンチマーク問題であるが、表 13 に示す通り、FOM では粗タイムステップ計算ですら実時間よりも多くの計算時間を要する。一方で、POD を用いた場合は、60 秒間・600 ステップ分の動特性計算を約 30 秒未満で計算できており、リアルタイム解析を十分実現する性能を有していることが分かる。

以上のように、POD は、解析対象の事象がある程度決まっており、直交基底を事前に構築することが可能な場合は、大幅な計算効率の改善を図ることができる。これは POD の大きな強みである。一方で、直交基底で解空間の範囲を限定することで大幅な自由度の削減を実現している関係上、解空間の範囲を限定できないような任意の分布を表現する必要がある場合には、POD の恩恵を得られ辛い。空間依存動特性計算はその観点からは、

- ・ (制御棒動作を除き)動特性計算中は計算体系が変わらない。
- ・ 反応度の添加方法はある程度限定されている。
- ・ 中性子束の振幅と形状の分離性が良く、中性子束分布の形状という狭い範囲に解空間を制限しやすい。

等の特徴がいずれも解空間の範囲を制限する方向に働きやすく、POD との相性が比較的良い部類の解析であると言えよう。

8. まとめ

本資料では、空間依存動特性計算に関する ROM として、POD の動特性方程式への適用方法について述べた。POD の動特性計算への応用例としては、Ikaros3D^[4]での三次元詳細メッシュの動特性解析への応用のほか、熱的フィードバックを含む問題への応用^[7]、輸送動特性計算への応用^[8]等も提案されている。また、本稿の Appendix には本文中では余白の都合上記載しきれなかった補足事項や更なる高速化を実現するための方法についてまとめているため、これらも参考になれば幸いである。

9. 参考文献

- [1] W. M. Stacey, *Nuclear reactor physics*, John Wiley & Sons, New York, (2001).
- [2] 奥村啓介, “近代ノード法と不連続因子の基礎”, 第36回炉物理夏期セミナーテキスト, 日本原子力学会 (2004).
- [3] 伴 雄一郎, “空間依存動特性方程式の統一的解法の開発”, 名古屋大学大学院工学研究科 修士論文 (2011).
- [4] 伊藤魁人, “空間依存性を考慮した教育用リアルタイム炉心シミュレータ開発”, 名古屋大学大学院工学研究科 修士論文 (2023).
- [5] 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**, pp. 8–32 (1969).
- [6] S. Langenbunch, W. Maurer, W. Werner, “Coarse-mesh nodal diffusion method for the analysis of space-time effects in large light water reactors,” *Nucl. Sci. Eng.*, **63**, pp. 437–456 (1977).
- [7] R. Elzohery, J. Roberts, “Application of model-order reduction of non-linear time-dependent neutronics via POD-Galerkin projection and matrix discrete empirical interpolation,” *Ann. Nucl. Energy*, **179** (2022).
- [8] K. Tsujita, T. Endo, A. Yamamoto, "Fast reproduction of time-dependent diffusion calculations using the reduced order model based on the proper orthogonal and singular value decompositions," *J. Nucl. Sci. Technol.*, **58**, pp.173-183 (2021).
- [9] 山本章夫, “拡散方程式の数値解法の基礎”, 第36回炉物理夏期セミナーテキスト, 日本原子力学会, pp. 47–80 (2004).
- [10] 小林啓祐, 原子炉物理, コロナ社 (1996).
- [11] T. M. Sutton, “Wielandt iteration as applied to the nodal expansion method,” *Nucl. Sci. Eng.*, **98**, pp. 169–173 (1988).
- [12] 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**[2], pp. 1–13 (2011).
- [13] K. S. Smith, “Nodal method storage reduction by nonlinear iteration,” *Trans. Am. Nucl. Soc.*, **44**, p. 265 (1983).
- [14] M. Tatsumi and 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).
- [15] A. Yamamoto, Y. Kitamura, T. Ushio, N. Sugimura, “Convergence improvement of coarse mesh rebalance method for neutron transport calculations,” *J. Nucl. Sci. Technol.*, **41**[8], pp. 781–789 (2004).

Appendix

A. 空間離散化後の拡散方程式の行列表現

本資料では漏洩・吸収項の表現を

$$A_{g,i \rightarrow i}^n = \Sigma_{t,g,i}^n + \frac{1}{v_g \Delta t} - \sum_{j \neq i} A_{g,i \rightarrow j}^n, \quad (88)$$

としていたが、この書き方は非構造メッシュにも対応可能な一般化した表現を使っており、一般的な原子炉物理学のテキストでの表記と若干記載方法が異なるため、本添付資料にて一般的な構造メッシュでの表記方法との整合性が取れていることを補足する。なお、より一般的な構造メッシュでの記載に関しては、参考文献^[9]の参照を薦める。

構造メッシュの場合は

$$V_i = \Delta x_i \Delta y_i \Delta z_i \quad (89)$$

であり、メッシュ $i \rightarrow j$ への正味の漏洩に関する係数 $A_{g,i \rightarrow j}^n$ は、着目方向 (x, y, z 方向) におけるメッシュ幅を Δh_i とし、以下のように表される。 ($i \rightarrow j$ が x 方向に隣接するメッシュ間の漏洩の場合は $\Delta h_i \rightarrow \Delta x_i$ と置き換えればよい。また、その時、境界面の面積 S_{ij} は、 $S_{ij} = \Delta y_i \Delta z_i$ である。)

$$A_{g,i \rightarrow j}^n \approx - \frac{2D_{g,j}^n D_{g,i}^n}{(D_{g,i}^n \Delta h_j + D_{g,j}^n \Delta h_i) \Delta h_i}, \quad (90)$$

例として 1 次元体系の場合は $\Delta h_i \rightarrow \Delta x_i$ 、 $S_{ij}/V_i = 1/\Delta x_i$ より、

$$\sum_j \left. \frac{J_{g,i \rightarrow j}^n S_{ij}}{V_i} \right|_{1D} = \frac{J_{g,i \rightarrow i+1} + J_{g,i \rightarrow i-1}}{\Delta x_i} \quad (91)$$

$$\begin{aligned} &= A_{g,i \rightarrow i+1}^n (\phi_{g,i+1}^n - \phi_{g,i}^n) + A_{g,i \rightarrow i-1}^n (\phi_{g,i-1}^n - \phi_{g,i}^n), \\ A_{g,i \rightarrow i+1}^n &= - \frac{2D_{g,i+1}^n D_{g,i}^n}{(D_{g,i}^n \Delta x_{i+1} + D_{g,i+1}^n \Delta x_i) \Delta x_i}, \\ A_{g,i \rightarrow i-1}^n &= - \frac{2D_{g,i-1}^n D_{g,i}^n}{(D_{g,i}^n \Delta x_{i-1} + D_{g,i-1}^n \Delta x_i) \Delta x_i}, \end{aligned} \quad (92)$$

となる。

B. POD の計算効率の更なる改善策

POD を用いた応用例の多くでは、問題の解空間を適切に限定することで大幅な自由度の削減を実現しているが、対象とする解空間が複雑になるほど（表現したい分布の variety が増加するほど）展開係数も当然多くなる。ゆえに、より応用的な観点からは、「POD 自体の計算効率の改良」も重要な視点である。そこで本節では、従来法でも広く用いられてきた各種収束加速法を応用した POD の計算効率改善方法について紹介する。

従来の収束加速法として代表的なものには以下のものがある。

- Successive Over-Relaxation (SOR)法 ^[10]
- Wielandt 加速法 ^[11]
- Simplified Fixed Source Scaling Factor 法 ^[12]
- Coarse Mesh Finite Difference (CMFD)法 ^[13, 14]
- Generalized Coarse Mesh Rebalance (GCMR)法 ^[15]

SOR 法は外挿を用いた比較的シンプルな収束加速法である。POD を用いた反復計算に適用する場合は、 n 回目の反復における中性子束の展開係数と固有値の値をそれぞれ $\vec{\phi}_g^{(n)}$ 、 $k_{eff}^{(n)}$ で表すとして、固有値方程式

$$\hat{\mathbf{A}}_g^{\square} \vec{\phi}_g^{(n)} = \frac{1}{k_{eff}^{(n)}} \hat{\chi}_g \sum_{g'} \hat{\mathbf{v}}_{f,g'}^{\square} \vec{\phi}_{g'}^{(n)} + \sum_{g' \neq g} \hat{\Sigma}_{s,g' \rightarrow g}^{\square} \vec{\phi}_{g'}^{(n)}, \quad (93)$$

を解いた後に

$$\vec{\phi}_g^{(n-1)} + \omega (\vec{\phi}_g^{(n)} - \vec{\phi}_g^{(n-1)}) \rightarrow \vec{\phi}_g^{*(n)}, \quad (94)$$

として、前回反復での中性子束の展開係数の値 $\vec{\phi}_g^{(n-1)}$ と今回の反復での中性子束の展開係数の値 $\vec{\phi}_g^{(n)}$ の差を加速因子 ω で強調することで、新たな推定値 $\vec{\phi}_g^{*(n)}$ を求めればよい。(ただし、 $1 < \omega < 2$ である。)

Wielandt 加速は固有値計算のみで適用可能な加速法であり、(93)式のような固有値方程式に対して固有値の推定値 λ を用いて

$$\left(\hat{\mathbf{A}}_g^{\square} - \frac{1}{\lambda} \hat{\mathbf{v}}_{f,g'}^{\square} \right) \vec{\phi}_g^{(n)} = \left(\frac{1}{k_{eff}^{(n)}} - \frac{1}{\lambda} \right) \hat{\chi}_g \sum_{g'} \hat{\mathbf{v}}_{f,g'}^{\square} \vec{\phi}_{g'}^{(n)} + \sum_{g' \neq g} \hat{\Sigma}_{s,g' \rightarrow g}^{\square} \vec{\phi}_{g'}^{(n)}, \quad (95)$$

を解くことで、外部反復の収束性を高める手法である。本手法についても、POD の適用有無によらず中性子束の展開係数ベースで計算できるため、POD でも同様に適用可能である。

一方で、Simplified Fixed Source Scaling Factor 法は固定源計算のみで適用可能な加速法である。固定源計算では、 n 回目の反復における中性子の吸収・漏洩項を $\mathbf{A}_g^{\square} \vec{\phi}_g^{(n)}$ 、生成を $\mathbf{M}_g^{\square} \vec{\phi}_g^{(n)}$ 、外部中性子源を \vec{S}_g^{\square} とすると、これらの間には本来以下の関係が成立すべきである。

$$\mathbf{A}_g^{\square} \vec{\phi}_g^{(n)} = \mathbf{M}_g^{\square} \vec{\phi}_g^{(n)} + \vec{S}_g^{\square}, \quad (96)$$

ただし、中性子束が厳密に収束仕切っていない n 回目の反復計算では、必ずしも上式は成立しない。ここで(96)式の生成項を移項して

$$\mathbf{A}_g^{\square} \vec{\phi}_g^{(n)} - \mathbf{M}_g^{\square} \vec{\phi}_g^{(n)} = \vec{S}_g^{\square}, \quad (97)$$

とすると、(97)式の右辺は外部中性子源項で既知（固定値）、左辺がまだ正確な値が分からない未知の項となる。Simplified Fixed Source Scaling Factor 法では、この両辺を全位相空間でそれぞれ積分し、以下に示す補正係数で中性子束分布 $\vec{\phi}_g^{(n)}$ を規格化することで収束を加速する方法である。（ $\vec{\phi}_g^{(n)}$ が真値に漸近するとき、補正係数 f も1に収束する。）

$$f = \frac{\langle \vec{S}_g^{\square} \rangle}{\langle \mathbf{A}_g^{\square} \vec{\phi}_g^{(n)} \rangle - \langle \mathbf{M}_g^{\square} \vec{\phi}_g^{(n)} \rangle}, \quad (98)$$

ただし、 $\langle \rangle$ は空間・エネルギーを含む全位相空間の積分である。POD を用いた動特性計算に対して本手法を適用しようとした場合は、この「全位相空間の積分」に関わる計算コストが問題となる。具体的には、POD 計算中の n 回目の反復計算における中性子束の展開係数ベクトルを $\vec{\varphi}_g^{(n)}$ としたとき、 $\langle \mathbf{A}_g^{\square} \vec{\phi}_g^{(n)} \rangle$ を求めるには

$$\langle \mathbf{A}_g^{\square} \vec{\phi}_g^{(n)} \rangle = \sum_g \vec{\Delta} \cdot \mathbf{A}_g^{\square} \mathbf{U}_g \vec{\varphi}_g^{(n)}, \quad (99)$$

$$\vec{\Delta} = (\dots V_i \dots), \quad (100)$$

として、まず直交基底を用いて中性子束の空間分布の再構成を行い、反応率を計算して、メッシュ体積も考慮した体積積分を行う必要がある。（ $\vec{\Delta}$ は体積に関するベクトルである。）しかし、POD の計算中にそのような操作を行うと、元の空間メッシュ数分の変数を取り扱うことになり、計算コストが一気に増大する。そこで、POD においてこのような体系全体の体積積分を行う場合には、事前に空間や反応に関する重みベクトルとして

$$\vec{w}_g \equiv \vec{\Delta} \mathbf{A}_g^{\square} \mathbf{U}_g, \quad (101)$$

を計算しておき^{†††}、(102)式に示すように圧縮した次元内での内積演算のみで全位相空間積分を計算できるように工夫する必要がある。

$$\langle \mathbf{A}_g^{\square} \vec{\phi}_g^{(n)} \rangle = \sum_g \vec{w}_g \cdot \vec{\varphi}_g^{(n)}, \quad (102)$$

以上を踏まえ、POD を用いた動特性計算に対して Simplified Fixed Source Scaling 法を適用するには、事前に重み演算子として

$$\vec{w}_g^A = \vec{\Delta} \mathbf{A}_g^{\square} \mathbf{U}_g, \quad (103)$$

$$\vec{w}_g^M = \vec{\Delta} \mathbf{M}_g^{\square} \mathbf{U}_g, \quad (104)$$

$$\vec{w}_g^{\Delta} = \vec{\Delta} \mathbf{U}_g, \quad (105)$$

を計算しておき、補正係数を

$$f = \frac{\langle \vec{S}_g^{\square} \rangle}{\langle \mathbf{A}_g^{\square} \vec{\phi}_g^{(n)} \rangle - \langle \mathbf{M}_g^{\square} \vec{\phi}_g^{(n)} \rangle} = \frac{\sum \vec{w}_g^{\Delta} \cdot \vec{S}_g^{\square}}{\sum (\vec{w}_g^A \cdot \vec{\varphi}_g^{(n)} - \vec{w}_g^M \cdot \vec{\varphi}_g^{(n)})}, \quad (106)$$

^{†††} (101)式の場合、次元圧縮前の体系のメッシュ数を M 、展開係数の数 m とすると \vec{w}_g のベクトルのサイズとしては $(1 \times M) * (M \times M) * (M \times m)$ の行列の掛け算より、 $(1 \times m)$ となることが分かる。この大きさであれば、事前のテーブル化や POD 計算中の積分処理も比較的容易である。

で計算して、 n 回目の反復における中性子束の展開係数を規格化すればよい。なお、本手法は事前のテーブル化の段階での実装が簡略であると共に計算効率に対する効果も比較的大きい。例として 7.2 節で示した LMW ベンチマーク問題で本加速法の適用しない場合、POD 計算の各タイムステップにおける反復計算は 800~1300 回程度の反復計算を要するのに対して、本加速法の適用後では反復回数は各タイムステップにおける反復回数は 60~110 回となり大幅な削減が実現できる。(この時の総計算時間も約 34 秒→約 25 秒と約 3 割の計算時間削減となる。)

一方で、CMFD 法、GCMR 法のように、粗メッシュ体系のように体系内の部分的な平均値を必要とする手法と POD の相性はかなり悪い。理由としては、以下の 2 点である。

- ・ POD の反復計算の収束性を加速するには粗メッシュ計算自体が POD より高速である必要がある。(現実的には難しい。)
- ・ 粗メッシュ中性子束や粗メッシュ断面積等の計算コストが POD 計算よりも圧倒的に計算コストが高い。(特に交基底による空間分布の再構成→均質化と、収束加速因子の適用→展開係数への反映、の部分の計算コストが高い。)

もちろん後者に関しては、体積ベクトルを粗メッシュ単位で以下のように行列化し^{***}

$$\Delta_{CM} \equiv \begin{pmatrix} V_1 & V_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & V_3 & V_4 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & V_{N-1} & V_N \end{pmatrix}, \quad (107)$$

として、重み行列を以下のように定義することで、粗メッシュ内での積分(もしくは平均化)処理は可能であるが、粗メッシュ毎に異なる加速因子を POD の展開係数に適用すること自体にもハードルがあるため、筆者の知る限りでは現状有効な方策は存在しない。

$$\mathbf{w}_g \equiv \Delta_{CM} \mathbf{A}_g^{\square} \mathbf{U}_g, \quad (108)$$

以上をまとめると、従来炉物理分野で広く適用されてきた、CMFD 加速法や GCMR 加速法等の高機能な加速計算の適用は現状困難である一方で、SOR 加速や Wielandt 加速については POD でも問題なく使用できる。また、固定源計算では Simplified Fixed Source Scaling 加速法のように体系積分値ベースで炉心全体の中性子束の高さを規格化する手法では、事前に体積積分に関する重み演算子を計算しておくことで計算コストを抑えつつ加速法の恩恵を得ることも可能である。

^{***} 本例の場合、詳細メッシュ領域 1,2 を合わせたものが 1 番目の粗メッシュ、3,4 を合わせたものが 2 番目の粗メッシュ領域となる。