数理解析研究所講究録
第37巻 1968年 97-113

中性子拡散計算における収斂加速法と時間依存拡散方程式

日立中研　野田隆

原子炉計算の中で，定常状態での拡散方程式の数値解がよく計算され，多くの拡散コード（プログラム）が作られている。拡散方程式を差分近似して数値解を求める問題は，大きい次数の行列の最大固有値とそのときの固有ベクトルを求めることである。固有値を求めるためのくり返し（outer iteration）と各々のouter iterationでの連立一次方程式を解くくり返し（inner iteration）があり，各々の収斂を早めるためいろいろな試みがなされてきた。outer iterationの方法としてはpower法，Chebyshev多項式加速法があり，inner iterationの方法としてはSOR法，ADI法等がある。outer iterationとしてのWielandt法の適用は，Wachspress[4]によって一次元問題について行われ，つづいて二次元問題へと進んでいった。[5][6] その頃我々もWielandt法を試み，Wielandt法からWielandt法の変形へと進んだ。[7][8] ここでは，我々が試みたWielandt法とその変形ならびにそのときのinner iterationについてのべる。更に，時間依存一次元拡散計算でのimplicit，Crank-Nicolson法の安定性についてふれる。

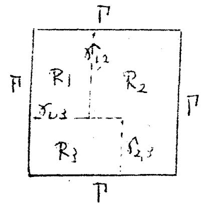
§1. 定常状態での中性子拡散方程式と拡散差分方程式

1.1 定常状態での中性子拡散方程式

原子炉で占める2次元領域Rを有界連結領域R_eの有限個から構成される

ものとし，Rの境界をΓ，R_ℓと$R_{\ell'}$の接する内部境界を$\gamma_{\ell,\ell'}$とする。(図1)

エネルギーをK組に分けたとき，定常状態での拡散方程式は次式で与えられる。



(図1)

$$-\mathrm{div}\left(D^i(\vec{r})\cdot\mathrm{grad}\,\phi^i(\vec{r})\right)+\sigma^i(\vec{r})\cdot\phi^i(\vec{r}) \qquad (1.1)$$
$$=\frac{\chi^i}{\lambda}\sum_{j=1}^{K}\nu\Sigma_f^j(\vec{r})\cdot\phi^j(\vec{r})+\sum_{j=1}^{i-1}\sigma_r^{j\to i}(\vec{r})\phi^j(\vec{r})$$
$$(\ \vec{r}\in R_\ell\ ,\quad 1\leqq i\leqq K\ )$$

ここで，

$\phi^i(\vec{r})$；エネルギー組i番目の中性子束

$D^i(\vec{r})$；拡散係数，$D^i(\vec{r})>0$　$\vec{r}\in\bar{R}=R+\Gamma$

$\sigma^i(\vec{r})$；全断面積，$\sigma^i(\vec{r})>0$　$\vec{r}\in\bar{R}$

$\sigma_r^{j\to i}(\vec{r})$；エネルギー組$j$から$i$への減速断面積，$\sigma_r^{i-1\to i}(\vec{r})>\delta>0$　$\vec{r}\in\bar{R}$

$\nu\Sigma_f^i(\vec{r})$；分裂断面積に関する量，$\nu\Sigma_f^i(\vec{r})\geqq 0$　$\vec{r}\in\bar{R}$

χ^i；分裂スペクトル，$\chi^i\geqq 0$，$\chi^1>0$

であり，更に$D^i(\vec{r})$，$\sigma^i(\vec{r})$，$\sigma_r^{j\to i}(\vec{r})$，$\nu\Sigma_f^i(\vec{r})$はすべての$R_\ell$で連続である。

各境界上では次の条件を課す。

$\phi^i(\vec{r})$は$\bar{R}$で連続で，$D^i(\vec{r})\dfrac{\partial\phi^i(\vec{r})}{\partial n}$は内部境界$\gamma_{\ell,\ell'}$を横切って連続である。

外部境界Γでは，$\phi^i(\vec{r})=0$ あるいは $\dfrac{\partial\phi^i(\vec{r})}{\partial n}+\mu^i(\vec{r})\phi^i(\vec{r})=0$ *

ここで$\mu^i(\vec{r})>0$はΓ上で区分的に連続である。(*$\frac{\partial}{\partial n}$；外向き法線微分)

定常状態の中性子束を求める問題は，上の$\gamma_{\ell,\ell'}$，Γ上の境界条件のもとに式(1.1)の絶対値の意味で最大な固有値λとそれに対応する固有関数$\phi^i(\vec{r})$を求めることである。

1.2 拡散差分方程式

数値解を得るために、境界条件のもとに式(1.1)の差分近似を行い、拡散差分方程式を作りその解を求めることにする。ここでは領域Rについて次のように限定する。x-y座標またはr-z座標を考えるとき、すべての境界$\gamma_{e,i}$, Γはx,y軸またはr,z軸に平行な直線によって構成されたものとする。x,y軸[*1]に平行な直線群によって長方形格子点$P_{m,n}=(x_m, y_n)$を作り境界$\gamma_{e,i}$, Γ上には必ず格子点があるようにする。この場合$x_{m+1}=x_m+g_m$, $y_{n+1}=y_n+h_n$, $(1\leqq m\leqq N_r-1,\ 1\leqq n\leqq N_c-1)$で格子点間隔$g_m$, h_nは一定とは限らない。

各格子点のまわりで積分して差分近似を行いまとめると[(1),(2)]、次の5点近似の差分式を得る。[*2]

$$
\begin{aligned}
&-R^i_{m,n}\cdot\phi^i_{m+1,n}-E^i_{m,n}\cdot\phi^i_{m-1,n}-T^i_{m,n}\cdot\phi^i_{m,n+1}-B^i_{m,n}\cdot\phi^i_{m,n-1} \qquad (1.2)\\
&+(R^i_{m,n}+E^i_{m,n}+T^i_{m,n}+B^i_{m,n}+\varepsilon^i_{m,n})\cdot\phi^i_{m,n}=\frac{\chi^i}{\lambda}\sum_{j=1}^{K}u^j_{m,n}\cdot\phi^j_{m,n}+\sum_{j=1}^{i-1}w^{i,j}_{m,n}\cdot\phi^j_{m,n}\\
&\qquad\qquad (1\leqq m\leqq N_r,\quad 1\leqq n\leqq N_c)
\end{aligned}
$$

上式(1.2)は；

$$
\vec{\Phi}^i_n=\{\phi^i_{m,n}\ ;\ P_{m,n}\in\overline{R},\ m=1,\cdots,N_r\},\quad \vec{\Phi}^i=\begin{pmatrix}\vec{\Phi}^i_1,\\ \vdots\ ,\\ \vec{\Phi}^i_{N_c}\end{pmatrix}
$$

とするとき、次のように表わされる。

$$
\left\{
\begin{aligned}
&A^i\cdot\vec{\Phi}^i=\frac{\chi^i}{\lambda}\sum_{j=1}^{K}F^j\cdot\vec{\Phi}^j+\sum_{j=1}^{i-1}G^{i,j}\cdot\vec{\Phi}^j \qquad (1.3)\\
&A^i=H^i+V^i+S^i \qquad (1\leqq i\leqq K)
\end{aligned}
\right.
$$

※1 r-z座標も同様　，※2 $\phi^i(\vec{r})=0$の境界条件のときは，$m=0, N_r+1$あるいは$n=0, N_c+1$等の分点$P_{m,n}$で$\phi^i_{m,n}=0$とする。

ここで，$G^{i,j}$，F^{i}，S^{i}，H^{i}，V^{i}，A^{i} は $N\times N$ 行列（$N\leqq N_r\times N_z$）で次の性質をもつ。

(a) $G^{i,j}$；非負対角行列で $G^{i,i-1}_{m,m}>0$

(b) F^{i}；非負対角行列で $\sum_{i,m} F^{i}_{m,m}>0$

(c) S^{i}；非負対角行列で $S^{i}_{m,m}>0$

(d) H^{i}；対称な block-diagonal 行列で，$H^{i}_{m,m}>0$，$H^{i}_{\underset{(\neq)}{m,n}}\leqq 0$，$\sum_{n} H^{i}_{m,n}=0$

(e) V^{i}；対称な block-tridiagonal 行列で，$V^{i}_{m,m}>0$，$V^{i}_{\underset{(\neq)}{m,n}}\leqq 0$，$\sum_{n} V^{i}_{m,n}=0$

(f) A^{i}；diagonally dominant で既約な正定値対称行列である。更に $(A^{i})^{-1}$ が存在して $(A^{i})^{-1}>0$。[3]

式(1.3)は，$\vec{\Phi}=\begin{pmatrix}\vec{\Phi}_1\\ \vdots \\ \vec{\Phi}_K\end{pmatrix}$ としてまとめると次のように表わされる。

$$M\cdot\vec{\Phi}=\frac{1}{\lambda}F\vec{\Phi}\ ,\quad M=A-G\ ,\quad A=H+V+S \qquad (1.4)$$

かくして，拡散方程式の数値解を得るため，拡散差分方程式(1.4)の最大（絶対値の意味で）固有値λと対応する固有ベクトル$\vec{\Phi}$を求める固有値問題を解くことになる。この場合λと$\vec{\Phi}$は原子炉実効増倍率と炉内の中性子束に対応するから負でないことが望ましい。このことは次のように保証されている。$M^{-1}=(\overline{M}_{i,j})$ で $\overline{M}_{i,j}$ を $N\times N$ 行列とするとき，$\overline{M}_{i,j}>0 \quad i\geqq j$，$\overline{M}_{i,j}=0 \quad i<j$ となる。従って適当な置換行列 P を用いて

$$M^{-1}F=P^{-1}\begin{pmatrix}0 & S\\ 0 & R\end{pmatrix}\cdot P\ ,\quad S>0\ ,\ R>0$$

となり，正行列の Perron の定理[7,8]から次のことが成立する。[3]

"$M^{-1}F$ の最大（絶対値の意味で）固有値λは正で単純であり，対応する固有ベクトル$\vec{\Phi}$は定数因子を除いてただ一つ存在し，要素はすべて正にできる。"

1.3 outer iteration と inner iteration

上の性質から λ_1 と $\vec{\phi}_1$ を power 法で求めることができる[3]。すなわち、

"$(\vec{\phi}^{(0)}, \vec{v})=1$，$\vec{v}>0$ なる任意の $\vec{\phi}^{(0)}>0$ に対して，$M\vec{\phi}=F\cdot\vec{\phi}^{(\ell-1)}$，

$\lambda^{(\ell)}=(\vec{\phi},\vec{v})$，$\vec{\phi}^{(\ell)}=\vec{\phi}/\lambda^{(\ell)}$ $(\ell=1,2,\cdots)$ とすると $\vec{\phi}^{(\ell)}\longrightarrow c\cdot\vec{\phi}_1$，

$\lambda^{(\ell)}\longrightarrow\lambda_1$，$\ell\longrightarrow\infty$ である。更に，$\beta_\ell=\max_n\{(\vec{\phi})_n/(\vec{\phi}^{(\ell-1)})_n\}$，

$\alpha_\ell=\min_n\{(\vec{\phi})_n/(\vec{\phi}^{(\ell-1)})_n\}$ とするとき，$\alpha_\ell\leqq\lambda_1\leqq\beta_\ell$，$\alpha_{\ell-1}\leqq\alpha_\ell$

$\leqq\beta_\ell\leqq\beta_{\ell-1}$ $(\ell=1,2,\cdots\cdots)$ である。"

power 法の収斂は遅いので，outer iteration の収斂を早める加速法が考えられてきた，よく用いられる方法として Chebyshev 多項式加速法がある。$M^{-1}F$ の固有値がすべて実数で非負，すなわち $\lambda_1>\lambda_2\geqq\cdots\geqq\lambda_n\geqq0$ で，対応する固有ベクトル $\vec{\phi}_j$ が全空間を張る（この仮定は保証されていない）とすると，Chebyshev 多項式加速法は次のように与えられる。*

$$
\left\{
\begin{aligned}
& M\vec{\phi}=F\cdot\vec{\phi}^{(\ell-1)}, \quad \lambda^{(\ell)}=(\vec{\phi},\vec{v}), \quad (\vec{\phi}^{(0)},\vec{v})=1 \\
& \vec{\phi}^{(\ell)}=\vec{\phi}^{(\ell-1)}+\alpha_\ell\cdot\left(\vec{\phi}/\lambda^{(\ell)}-\vec{\phi}^{(\ell-1)}\right)+\beta_\ell\cdot\left(\vec{\phi}^{(\ell-1)}-\vec{\phi}^{(\ell-2)}\right) \\
& \qquad\qquad\qquad\qquad (\ell=1,2,\cdots\cdots) \qquad\qquad (1.5) \\
& \alpha_1=1.0 \quad \beta_1=0, \quad \alpha_2=2/(2-\sigma) \quad \beta_2=0 \\
& \alpha_\ell=4\cdot T_{\ell-2}\left(\tfrac{2}{\sigma}-1\right)/\left(\sigma\cdot T_{\ell-1}\left(\tfrac{2}{\sigma}-1\right)\right) \quad \beta_\ell=T_{\ell-3}\left(\tfrac{2}{\sigma}-1\right)/T_{\ell-1}\left(\tfrac{2}{\sigma}-1\right) \\
& \qquad\qquad\qquad\qquad (\ell=3,4,\cdots) \\
& \sigma=\frac{\lambda_2}{\lambda_1}, \quad T_\ell(x);\ \ell\text{次の Chebyshev 多項式}
\end{aligned}
\right.
$$

所で，上の各 outer iteration 毎に $M\cdot\vec{\phi}=F\cdot\vec{\phi}^{(\ell-1)}$ を解かなければならない。すなわち，

---

* この形で原子力コードとして始めて用いられたのは文献(2)である。

$$A^i \vec{\varphi}^{\,i} = \chi^i \sum_{j=1}^{k} F^j \vec{\varphi}^{\,j(\ell-1)} + \sum_{j=1}^{i-1} G^{ij} \vec{\varphi}^{\,j} \equiv \vec{d}^{\,i} \qquad (1.6)$$
$$(1 \leq i \leq k)$$

を解くことになる。この inner iteration の方法としては，SLOR法やADI法等が用いられている。

§2. Wielandt 法の適用

outer iteration に Wielandt 法を適用することを考える。ここでは Wielandt 法を次のように与える。*

$$\begin{cases} \left(M - \dfrac{1}{\bar{\lambda}^{(\ell-1)}} F\right) \vec{\varphi} = F \vec{\varphi}^{(\ell-1)}, \quad \tau^{(\ell)} = (\vec{\varphi}, \vec{v}), \quad \vec{\varphi}^{(\ell)} = \vec{\varphi}/\tau^{(\ell)}, \quad \vec{v} > 0 \\ \lambda^{(\ell)} = 1\Big/\left(\dfrac{1}{\tau^{(\ell)}} + \dfrac{1}{\bar{\lambda}^{(\ell-1)}}\right), \quad \bar{\tau}^{(\ell)} = \max\limits_{n} \left\{ (\vec{\varphi})_n / (\vec{\varphi}^{(\ell-1)})_n \right\}, \\ \bar{\lambda}^{(\ell)} = 1\Big/\left(\dfrac{1}{\bar{\tau}^{(\ell)}} + \dfrac{1}{\bar{\lambda}^{(\ell-1)}}\right), \quad \underline{\tau}^{(\ell)} = \min\limits_{n} \left\{ (\vec{\varphi})_n / (\vec{\varphi}^{(\ell-1)})_n \right\}, \\ \Delta^{(\ell)} = 1\Big/\left(\dfrac{1}{\underline{\tau}^{(\ell)}} + \dfrac{1}{\bar{\lambda}^{(\ell-1)}}\right) \qquad , (\ell = 1, 2, 3, \cdots\cdots) \end{cases} \qquad (2.1)$$

このとき，次の収斂の性質が与えられる。[9]

"任意の正ベクトル $\vec{\varphi}^{(0)} > 0$ と $\bar{\lambda}^{(0)} > \lambda_1$ に対して，$\lambda^{(\ell)} \longrightarrow \lambda_1$，$\vec{\varphi}^{(\ell)} \longrightarrow c\vec{\varphi}_1$，$(\bar{\lambda}^{(\ell)} - \Delta^{(\ell)})/\lambda^{(\ell)} \longrightarrow 0 \quad (\ell \longrightarrow \infty)$ となる。更に $\vec{\varphi}^{(0)} \neq c_1 \vec{\varphi}_1$ のとき $\bar{\lambda}^{(0)} > \bar{\lambda}^{(1)} > \cdots\cdots > \bar{\lambda}^{(\ell)} > \cdots \longrightarrow \lambda_1$"。

ここで，Wielandt 法と Chebyshev 多項式加速法との outer iteration の収斂の早さについて比較すると，各方法の ℓ 回目までの行列を $T_W^{(\ell)}$，$T_C^{(\ell)}$ とすると[9]，"スペクトル半径 $\lambda(T_W^{(\ell)})$，$\lambda(T_C^{(\ell)})$ に対して，$\lambda(T_W^{(\ell)})/\lambda(T_C^{(\ell)}) \longrightarrow 0$，$\ell \longrightarrow \infty$。" となり，この意味で Wielandt 法が Chebyshev 多項式加速

---

* Wachspress の場合には，$M - \frac{1}{\lambda_e} F$ で λ_e が固定されている。Wielandt 法の性質は(1)でも調べられているが，(4)，(6)，(9) と各々少しづつ異っている。

法より収斂が早いといえる。二つの方法の outer iteration の収斂回数の一例を図2(16頁)に示す。(但し，連立一次方程式については消去法で解いて)

所で，Wielandt 法(2.1)を行うとき次のような連立一次方程式を解かなければならない。

$$(M-\frac{1}{\lambda}F)\vec{\Psi}=\vec{S} \qquad , \qquad \lambda>\lambda_1 \qquad (2.2)$$

この場合，Chebyshev 多項式加速法のときと異り，式(1.6)の形で解くことはできない。式(2.2)は，

$$(H+V+S-G-\frac{1}{\lambda}F)\cdot\vec{\Psi}=\vec{S} \qquad (2.3)$$

であるが，適当な置換行列 P を用いて次のように表わされる。*

$$-B_n\cdot\vec{\xi}_{n-1}+(D_n-\frac{1}{\lambda}F_n)\cdot\vec{\xi}_n-T_n\vec{\xi}_{n+1}=\vec{\eta}_n \ , \quad \vec{\xi}_0=\vec{\xi}_{N_e+1}=0 \qquad (2.4)$$
$$(1\leqq n\leqq N_e)$$

従って，上式を消去法で解くことはできる。(4) しかし，行列 D_n 等の次数が大きいときには消去法よりくり返し法を用いることになる。

2.1 SOR法

式(2.3)に対して，

$$B_P=H_D+V_D+S-G-\frac{1}{\lambda}F \ , \quad C_P=-V+V_D-H+H_D$$

$$B_L=H+V_D+S-G-\frac{1}{\lambda}F \ , \quad C_L=-V+V_D$$

H_D；H の対角要素からなる対角行列 ，V_D も同様

とすると，

" $\lambda>\lambda_1$ に対して，$\overline{\lambda}(B_L^{-1}C_L)\leqq\overline{\lambda}(B_P^{-1}C_P)<1$ である。更に $\overline{\lambda}(B_L^{-1}C_L)\to 1$，$\lambda\to\lambda_1$ $(\lambda>\lambda_1)$ である。" (9),(10)

---

* $\vec{\xi}$ はエネルギー組，x 方向，y 方向の順にまとめたベクトルで $\vec{\Psi}=P\cdot\vec{\xi}$

$B_P^{-1}C_P$, $B_L^{-1}C_L$ にSOR法を適用すると*, $B_P^{-1}C_P$, $B_L^{-1}C_L$ のすべて固有値が実数のときSOR法の反復行列のスペクトル半径 $\bar{\nu}$ は,

$$\bar{\nu} = \omega_b - 1 \ , \quad \omega_b = 2/(1+\sqrt{1-\bar{\mu}^2}) \ , \quad \bar{\mu} \ ; \ \bar{\lambda}(B_P^{-1}C_P) \text{ または } \bar{\lambda}(B_L^{-1}C_L)$$

となる。$B_P^{-1}C_P$, $B_L^{-1}C_L$ の固有値が実数でないときには,"ある意味で,加速因子 $\omega=1$ の時が最適であり, ω の値によっては発散することがある。"(9) がいえる。(図3(16頁)) より詳しい性質が文献(10)にはのべてある。

2.2 ADI 法

式(2.3)に次のくり返し法を適用する。

$$\begin{cases} \{(a+\omega_k)B_P + H - H_D\}\vec{\Phi}^{(k+\frac{1}{2})} = \{(-b+\omega_k)B_P - V + V_D\}\vec{\Phi}^{(k)} + \vec{d} \\ \{(b'+\omega_k)B_P + V - V_D\}\vec{\Phi}^{(k+1)} = \{(-a'+\omega_k)B_P - H + H_D\}\vec{\Phi}^{(k+\frac{1}{2})} + \vec{d} \end{cases}$$

$$(k=0,1,2,\cdots) \qquad (2.5)$$

これをADI法と呼ぶことにする。"$\lambda > \lambda_1$ のとき, $a=b'=1$, $\omega_k=\bar{\omega}>0$ であれば解 $\vec{\Phi}$ に収斂し, $\lambda \to \lambda_1$ につれてこの収斂は遅くなる。"(9) が成立するが収斂は遅い。特別な場合として,"普通のADI法で可換の場合"と同様に成立し $\lambda \to \lambda_1$ につれて収斂は遅くなる。"がいえる。(図4, 表1(17頁))

以上のことからSOR, ADI法ともWielandt法のiterationが進むにつれてinner iterationの収斂が遅くなっていく。

outer iterationとしてChebyshev多項式加速法を用いたときには, inner iterationの判定(収斂)条件として 10^{-2} 以下の誤差減少で普通ADI法で4回位で行われる。Wielandt法を用いたときは, outer iterationを早くしよう

---

* $B_P^{-1}C_P$ はエネルギー組でまとめたときのpoint SOR法で, $B_L^{-1}C_L$ はline SOR法で式(2.4)にSOR法を適用したもの。

とすると）inner iteration が遅くなり，更にエネルギー組をまとめて行うため演算もふえ，特別な場合のADI法のとき以外は全体としてChebyshev多項式加速法にかなわない。

2.3　Wielandt法の変形

Wielandt法の場合には，inner iteration を式(2.2)の形で行ったが，次のような方法を考えることで式(1.6)の形でinner iteration を行えるようにする。

$$
\left\{
\begin{array}{ll}
Q^{(\ell-1)}\cdot\vec{\Phi}^{(\ell-1)} = F\cdot\vec{\Phi}^{(\ell-1)} & ,\ Q^{(\ell-1)}\text{；対角行列} \\
\left(M - \dfrac{1}{\lambda^{(\ell-1)}}Q^{(\ell-1)}\right)\cdot\vec{\Phi} = F\cdot\vec{\Phi}^{(\ell-1)}, & \tau^{(\ell)} = (\vec{\Phi}, \vec{v}),\ \vec{v} > 0 \\
\vec{\Phi}^{(\ell)} = \vec{\Phi}/\tau^{(\ell)}, & \lambda^{(\ell)} = 1\Big/\left(\dfrac{1}{\tau^{(\ell)}} + \dfrac{1}{\lambda^{(\ell-1)}}\right), \\
\bar{\tau}^{(\ell)} = \max\limits_{n}\left\{(\vec{\Phi})_n/(\vec{\Phi}^{(\ell-1)})_n\right\}, & \bar{\lambda}^{(\ell)} = 1\Big/\left(\dfrac{1}{\bar{\tau}^{(\ell)}} + \dfrac{1}{\lambda^{(\ell-1)}}\right)
\end{array}
\right.
\qquad (\ell = 1, 2, 3 \cdots) \tag{2.6}
$$

このとき，“$\bar{\lambda}^{(\ell)} > \bar{\lambda}(M^{-1}Q^{(\ell)})$ で $\vec{\Phi}^{(\ell)}$ が収斂すると，$\vec{\Phi}^{(\ell)} \to c\vec{\Phi}_1$，$\lambda^{(\ell)} \to \lambda_1$ $(\ell \to \infty)$である。”従って収斂したときの $Q^{(\infty)} = Q$ は，$Q\vec{\Phi}_1 = F\vec{\Phi}_1$ で与えられる。すなわち，収斂したときには，ℓ の大きい所で式(2.6)は $M^{-1}Q$ のWielandt法を近似的に行っていると考えられる。$M^{-1}Q$ については，“$M^{-1}Q$ の最大（絶対値の意味で）固有値は λ_1 で正で単純であり対応する固有ベクトルは $\vec{\Phi}_1$ で定数因子を除いてただ一つ存在する。”[9] がいえる。従って式(2.6)の $Q^{(\ell-1)}$ の代りに Q を用いると $\vec{\Phi}^{(\ell)} \to c\vec{\Phi}_1$，$\lambda^{(\ell)} \to \lambda_1$ $(\ell \to \infty)$ となるが，Q が未知であるから実際にはできない。

式(2.6)を行うとき，

$$\left(M - \frac{1}{\lambda}Q^{(\ell)}\right)\vec{\Phi} = \vec{S} \quad , \quad \lambda > \bar{\lambda}(M^{-1}Q^{(\ell)})$$

を解かなければならないが，$Q^{(\ell)}$ が対角行列であるから，

$$\left(A^{i}-\frac{1}{\lambda}Q^{(\ell)i}\right)\cdot\vec{\phi}^{\,i}=\vec{d}^{\,i}\quad,\qquad Q^{(\ell)}=\begin{pmatrix} Q^{(\ell)1} & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & Q^{(\ell)K} \end{pmatrix}\qquad(2.7)$$

を解けばよい。

inner iteration に SOR, ADI 法を適用することは Wielandt 法のときと同様に考えられるが，$A^{i}-\frac{1}{\lambda}Q^{(\ell)i}$ は対称行列であり Wielandt 法のときよりは比較的簡単である。

特別な場合として，$A^{i}=H^{i}+V^{i}+S^{i}$ に対して $S^{i}-\frac{1}{\lambda}Q^{(\ell)i}\geqq 0$ のときには普通の ADI 法が適用される。このときの式(2.6)の一例を図5(17頁)に示す。但し，初めから式(2.6)でやるのではなく，まず Chebyshev 多項式加速法で行い，$\varepsilon^{(\ell)}=(\overline{\lambda}^{(\ell)}-\underline{\lambda}^{(\ell)})/(2\lambda^{(\ell)})$ が $\varepsilon^{(\ell)}<\varepsilon_{ad}$ になった所で式(2.6)を用いている。

§3. 時間依存一次元拡散方程式

ここでは時間依存一次元拡散方程式に implicit 法, Crank−Nicolson 法を適用したときの安定性について考える。時間依存一次元拡散方程式は次のように与えられる。*

$$\left\{\begin{array}{l} \dfrac{1}{v^{i}}\cdot\dfrac{\partial}{\partial t}\phi^{i}(x,t)=\mathrm{div}\left(D^{i}(x,t)\,\mathrm{grad}\,\phi^{i}(x,t)\right)-\sigma^{i}(x,t)\phi^{i}(x,t) \\ \qquad\qquad +\displaystyle\sum_{j=1}^{K}p_{1}^{ij}(x,t)\phi^{j}(x,t)+\sum_{j=1}^{K}p_{2}^{ij}(x,t)c^{j}(x,t)+f_{p}^{i}(x,t) \\ \qquad\qquad\qquad\qquad\qquad (1\leqq i\leqq K) \\ \cdot \\ \cdot \end{array}\right.\qquad(3.1)$$

---

*空間座標が r のときも同様

$$\frac{\partial}{\partial t} C^{i'}(x,t) = -\lambda^{i'}(x,t)\cdot C^{i'}(x,t) + \sum_{j=1}^{K} p_3^{i',j}(x,t)\,\phi^{j}(x,t) + f_D^{i'}(x,t)$$

$$(1 \leqq i' \leqq K')$$

ここで,

$\phi^i, C^{i'}$;中性子束

$f_p^i, f_D^{i'}$;連続で，与えられるもの

係数 $p_1^{i,j}, p_2^{i,j'}, p_3^{i',j} \geqq 0$, $D^i, \alpha^i, v^i, \lambda^{i'} > 0$

空間については，$(0 \leqq) X_0 \leqq x \leqq X\ (<\infty)$ で，境界条件を含めて定常状態のときと同様とし，時間については $(0 \leqq) T_0 \leqq t \leqq T\ (<\infty)$ で，各係数は連続とする。

初期条件として，$\phi^i(x, T_0)$, $C^{i'}(x, T_0)$ が与えられる。

空間について式(3.1)を積分して差分方程式を作ると，次のようになる。

$$\left\{\begin{aligned} &\frac{1}{v^i}\frac{\partial}{\partial t} V_n\cdot\phi_n^i = E_n^i\cdot\phi_{n-1}^i - D_n^i\cdot\phi_n^i + R_n^i\cdot\phi_{n+1}^i + \sum_{j=1}^{K} p_{1,n}^{i,j}\cdot\phi_n^j \\ &\qquad\qquad + \sum_{j'=1}^{K'} p_{2,n}^{i,j'}\cdot C_n^{j'} + f_{p,n}^i \qquad (1 \leqq i \leqq K) \\ &\frac{\partial}{\partial t} V_n\cdot C_n^{i'} = -\lambda_n^{i'}\cdot C_n^{i'} + \sum_{j=1}^{K} p_{3,n}^{i',j}\cdot\phi_n^j + f_{D,n}^{i'} \\ &\qquad\qquad (1 \leqq i' \leqq K'),\ (1 \leqq n \leqq N) \end{aligned}\right. \tag{3.2}$$

上式をまとめると次のように表わされる。

$$\left\{\begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial t}\vec{\Psi}(t) = Q(t)\,\vec{\Psi}(t) + \vec{f}(t) \quad , \quad Q(t) = A(t) + P(t) \\ A(t) = \begin{pmatrix} V^1 A^1(t) V^1, & & & & 0 \\ & \ddots & & & \\ & & V^1 A^K(t) V^K, & & \\ & & & -V^1\Lambda^1(t), & \\ 0 & & & & \ddots \\ & & & & -V^1\Lambda^K(t) \end{pmatrix} \end{array}\right. \qquad (3.3)$$

ここで，

$$\vec{\Psi}(t) = \begin{pmatrix} \vec{\Phi}, \\ \vec{C} \end{pmatrix} \quad , \quad \vec{\Phi} = \begin{pmatrix} \vec{\Phi}^1, \\ \vdots \\ \vec{\Phi}^K \end{pmatrix} \quad , \quad \vec{\Phi}^i = \begin{pmatrix} \phi_1^i, \\ \vdots \\ \phi_N^i \end{pmatrix}$$

$\vec{C}$; $\vec{\Phi}$と同様

$\vec{f}(t)$; $f_{P,n}^i$, $f_{D,n}^i$ から作られたもの

$$A^i(t) = \begin{pmatrix} -D_1^i, R_1^i & & & 0 \\ \ddots & \ddots & \ddots & \\ & E_n^i, -D_n^i, R_n^i & & \\ 0 & & \ddots & \\ & & & E_N^i, -D_N^i \end{pmatrix} , \quad \Lambda^i(t) = \begin{pmatrix} \lambda_1^i, & & & 0 \\ & \ddots & & \\ & & \lambda_n^i, & \\ 0 & & & \ddots \ \lambda_N^i \end{pmatrix}$$

$P(t)$; $A(t)$ を除いたもので $P(t) \geqq 0$

$$V = \begin{pmatrix} V_1, & & & 0 \\ & \ddots & & \\ & & V_n, & \\ 0 & & & \ddots \ V_N \end{pmatrix} \quad , \quad V_n > 0$$

。

さて，上式(3.3)に implicit, Crank−Nicolson 法を適用する。

$$\left\{\begin{aligned} &\frac{\vec{\Psi}(t+\Delta t)-\vec{\Psi}(t)}{\Delta t} = Q(t+\Delta t)\,\vec{\Psi}(t+\Delta t) + \vec{F}(t+\Delta t) \qquad (\text{implicit 法}), \\ &\frac{\vec{\Psi}(t+\Delta t)-\vec{\Psi}(t)}{\Delta t} = \frac{1}{2}\,Q\left(t+\frac{\Delta t}{2}\right)\left(\vec{\Psi}(t+\Delta t)+\vec{\Psi}(t)\right) + \frac{1}{2}\left(\vec{F}(t+\Delta t)\right. \\ &\qquad\qquad \left. + \vec{F}(t)\right) \qquad (\text{Crank-Nicolson 法}) \end{aligned}\right.$$

所で，$\tilde{A}^i(t)$ は対称行列で *essentially positive*[7]，$(-\tilde{A}^i(t))^{-1} \geq 0$ であるから

$$\rho\left(\left(1-\Delta t\cdot\nu^i\cdot\tilde{A}^i(t)\right)^{-1}\right) < 1 \quad , \qquad \forall t,\ \Delta t > 0$$

$$\rho\left(\left(1-\Delta t\cdot\nu^i\cdot\tilde{A}^i(t)\right)^{-1}\left(1+\Delta t\cdot\nu^i\cdot\tilde{A}^i(t)\right)\right) < 1 \quad , \qquad \forall t,\ \Delta t > 0$$

$$\tilde{A}^i(t) = V^{-\frac{1}{2}}\cdot A^i(t)\cdot V^{\frac{1}{2}}$$

となる[7]。この性質を用いて，implicit，Crank-Nicolson 法の安定性が保証される。

〃 $X_0 = x_1 < x_2 < \cdots < x_N = X$，$\Delta x \geq (x_{n+1}-x_n) \geq \Delta x / C_x^2$

$(1 \leqq n \leqq N-1)$

$T_0 = t_1 < t_2 < \cdots < t_L = T$，$\Delta t \geq (t_{l+1}-t_l) \geq \Delta t / C_t^2$

$(1 \leqq l \leqq L-1)$

$C_x^2,\ C_t^2$ ；常数

とするとき，

$$\|\vec{\Psi}\| \leqq e^{cT} \cdot \|\vec{\Psi}(0)\| + e^{cT} \cdot T \, \|\vec{f}\| \quad , \forall \Delta x > 0 , \ \Delta x \geqq \forall \Delta t > 0$$

ここで，

c，T ；常数　，$\Delta x > 0$ ，

$$\|\vec{\Psi}\| = \max_{1 \leqq \ell \leqq L} \|\vec{\Psi}(t_\ell)\| , \qquad \|\vec{\Psi}(t_\ell)\|^2 = \left(\vec{\Psi}(t_\ell), \begin{bmatrix} V & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & V \end{bmatrix} \cdot \vec{\Psi}(t_\ell) \right)$$

である。”

参考文献

1) R. S. Varga ; Numerical solution of the two-group diffusion equation in x-y geometry , IRE Trans.

of the Professinal Group on Nuclear Science NS-4 (1957), p52~62

2) E.L.Wachspress ; CURE , KAPL-1724 (1957)

3) R.S.Varga ; Numerical methods for solving multi-dimensional multi-group diffusion equations, Proceedings of symposia in Applied Mathematics XI (1961), p164~189

4) E.L.Wachspress ; A numerical technique for solving group diffusion equations, Nucl. Sci. Eng. 8 (1960), p164~170.

5) E.L.Wachspress ; Strategy for multi-dimensional neutron group diffusion computation, IFIP (1962)

6) A.M.Ostrowski ; On the convergence of the Rayleigh quotient iteration for the computation of the characteristic roots and vectors, I-VI , Arch. Rational Mech. Anal. 1-4 (1958-1960)

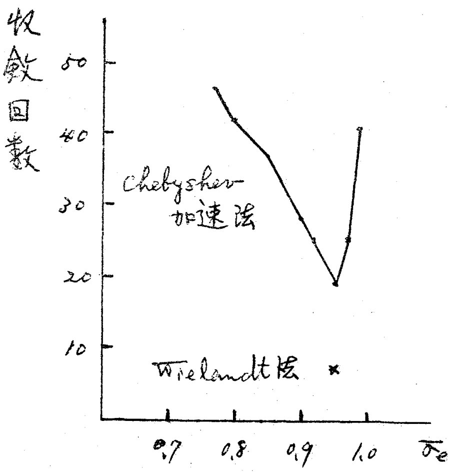
7) R.S.Varga ; Matrix Iterative Analysis (1962 , Prentice-hall, Inc)

8) F. R. Gantmacher ; The Theory of Matrices, 2 (1959, Chelsea Publishing Company)

9) 野田 隆 ；定常状態における中性子拡散差分方程式に適用されたWielandt法，情報処理7，No.2 (1966)，P84〜90.

10) E. L. Wachspress ; Iterative Solution of Elliptic Systems and Applications to the Neutron Diffusion Equations of Reactor Physics (1966, Prentice-hall, Inc)

11) Arai, K., Noda, T. and Terasawa, S ; On the convergence of diffusion codes, Trans. Am. Nucl. Soc. 6 (1963) P277〜279.



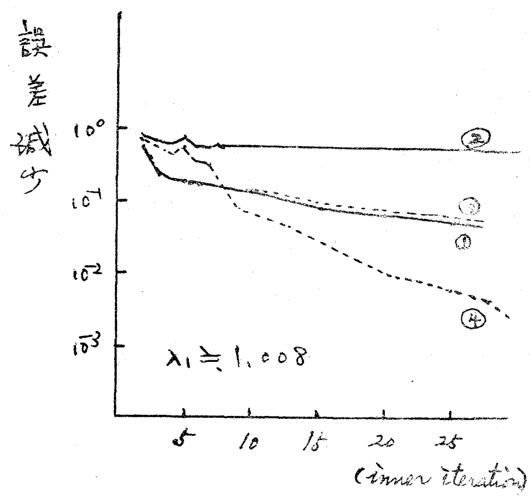


図2. Chebyshev加速法とWielandt法

図3. SLORにおける収斂状況

1. $\bar{\sigma} \fallingdotseq 0.95$ のとき，Chebyshev加速法の$\bar{\sigma}_e$を変えたときの収斂回数の変化

2. Wielandt法は，3回までpower法を用い4回からWielandt法を用いた。

	λ	ω	$\bar{\mu}$
①	1.01	1.85	
②	1.01	1.654	0.998
③	100	1.26	
④	100	1.564	0.960

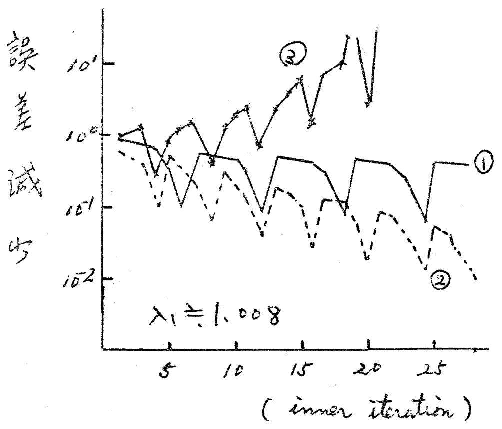


図4. ADIにおける収斂状況

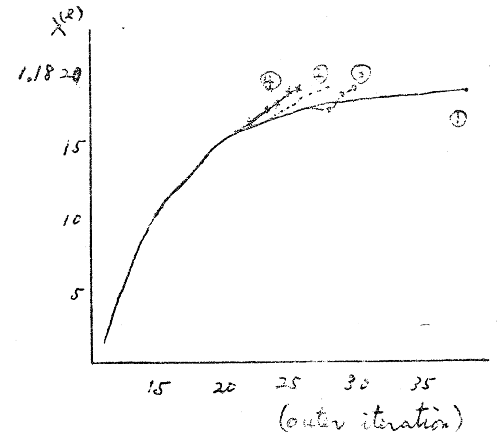


図5. 変形Wielandt法の収斂状況

	λ	a	ω_c	x	ω_{max}
①	1.01	1	10^{-4}	10	9
②	100	1	10^{-3}	10	9
③	100	0.5	10^{-3}	10	9

	ε_a	変形への[illegible]	収斂回数
①	0		38
②	$.98\times10^{-2}$	24	28
③	$.8\times10^{-3}$	28	30
④	$.98\times10^{-1}$	22	26

λ	$\bar{\lambda}$ ([illegible])	α	β	ADIのスペクトル半径 $\leqq 10^{-2}$	
10^{5}	0.98536	0.73172×10^{-2}	0.99268	6 回	
0.5	0.98742	0.62864×10^{-2}	0.99371	6 回	
0.033	0.99985	0.7490×10^{-4}	0.99993	10 回	
0.0325	0.99999	0.59207×10^{-5}	0.99999	12 回	12 回 (4)
0.032	1.00013	-0.64813×10^{-4}	1.00006	発散	
				$x=0.1$	ω_a 計算

$\lambda_1 = 0.32457\times10^{-1}$

表1. λの変化と inner iterationのスペクトル半径(特別な場合)

λ	$\left\lvert\dfrac{\text{第2モードの固有値}}{\text{第1モードの固有値}}\right\rvert$
10^{5}	2.23×10^{-1}
0.5	2.11×10^{-1}
0.033	4.71×10^{-3}
0.0325	3.9×10^{-4}
0.032	