

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と問題は、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にいろいろな試みが行われてきた。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 SCR 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。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。⁽⁴⁾⁽⁹⁾ここでは、我々が試みる Wielandt 法とその変形ならびにそのときの inner iteration について述べる。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

原子炉が占める二次元領域 R を有界連結領域 R_i の有限個から構成される

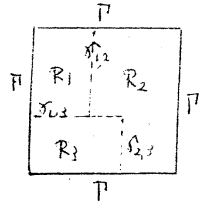
ものとし, R の境界を Γ , $R_i \equiv R_j$ を接する内部境界を $\gamma_{i,j}$ とする。(図1)

エネルギーを K 組に分けると, 定常状態での拡散方程式は次式で与えられる。

$$-\operatorname{div}(D^i(\vec{r}) \cdot \operatorname{grad} \phi^i(\vec{r})) + \sigma^i(\vec{r}) \cdot \phi^i(\vec{r}) \quad (1.1)$$

$$= \frac{\kappa^i}{\lambda} \sum_{j=1}^K \nu_{ij}^j(\vec{r}) \cdot \phi^j(\vec{r}) + \sum_{j=1}^{i-1} \sigma_{ij}^j(\vec{r}) \phi^j(\vec{r})$$

$$(\vec{r} \in R_e, \quad 1 \leq i \leq K)$$



(図1)

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, $D^i(\vec{r}) > 0$ $\vec{r} \in \overline{R} = R + \Gamma$

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

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

$\nu_{ij}^j(\vec{r})$; 分裂断面積に関する量, $\nu_{ij}^j(\vec{r}) \geq 0$ $\vec{r} \in \overline{R}$

κ^i ; 分裂スペクトル, $\kappa^i \geq 0$, $\kappa^i > 0$

であり, 更に $D^i(\vec{r})$, $\sigma^i(\vec{r})$, $\sigma_r^{ij}(\vec{r})$, $\nu_{ij}^j(\vec{r})$ はすべての R_e で連続である。

各境界上では次の条件を課す,

$\phi^i(\vec{r})$ は $\overline{R}$ で連続で, $D^i(\vec{r}) \frac{\partial \phi^i(\vec{r})}{\partial n}$ は内部境界 $\gamma_{i,j}$ 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 $\frac{\partial \phi^i(\vec{r})}{\partial n} + \mu^i(\vec{r}) \phi^i(\vec{r}) = 0$ *

ここで $\mu^i(\vec{r}) > 0$ は Γ 上で正分的に連続である。($\frac{\partial}{\partial n}$; 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 $\gamma_{i,j}$, 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、すべての境界 ∂R 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 軸に^{*}1 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 ∂R 上には必ず格子点があるようにする。この場合 $x_{m+1} = x_m + g_m$, $y_{n+1} = y_n + h_n$, ($1 \leq m \leq N_r - 1$, $1 \leq n \leq N_c - 1$) 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^{(1),(2)}とめると、次の点近似的差分式を得る。^{*}2

$$\begin{aligned}
 & -R_{m,n}^i \cdot \phi_{m+1,n}^i - E_{m,n}^i \cdot \phi_{m,n+1}^i - T_{m,n}^i \cdot \phi_{m,n+1}^i - B_{m,n}^i \cdot \phi_{m,n-1}^i \\
 & + (R_{m,n}^i + E_{m,n}^i + T_{m,n}^i + B_{m,n}^i + \varepsilon_{m,n}^i) \cdot \phi_{m,n}^i = \frac{\chi^i}{\lambda} \sum_{j=1}^K u_{m,n}^j \cdot \phi_{m,n}^j + \sum_{j=1}^K w_{m,n}^{(i,j)} \cdot \phi_{m,n}^j \\
 & \quad (1 \leq m \leq N_r, 1 \leq n \leq N_c)
 \end{aligned} \tag{1.2}$$

上式(1.2)は、

$$\vec{\Phi}_n^i = \{ \phi_{m,n}^i ; P_{m,n} \in \overline{R}, m=1, \dots, N_r \}, \quad \vec{\Phi}^i = \begin{pmatrix} \vec{\Phi}_1^i \\ \vdots \\ \vec{\Phi}_{N_c}^i \end{pmatrix}$$

とすると、次のように表わされる。

$$\begin{cases} A^i \cdot \vec{\Phi}^i = \frac{\chi^i}{\lambda} \sum_{j=1}^K F^j \cdot \vec{\Phi}^j + \sum_{j=1}^K G^j \cdot \vec{\Phi}^j \\ A^i = H^i + V^i + S^i \end{cases} \quad (1 \leq i \leq K) \tag{1.3}$$

*1 r - z 座標も同様, *2 $\phi^i(\overline{r}) = 0$ の境界条件をとせば, $m=0, N_r+1$ あるいは $n=0, N_c+1$ 等の分点 $P_{m,n}$ で $\phi_{m,n}^i = 0$ とする。

$z = z^i$, G^i , F^i , S^i , H^i , V^i , A^i は $N \times N$ 行列 ($N \leq N_1 \times N_2$) z^i 次の性質をもつ。

- (a) G^i ; 非負対角行列 $z^i G_{m,m}^{i,i-1} > 0$
- (b) F^i ; 非負対角行列 $z^i \sum_{m,n} F_{m,m}^i > 0$
- (c) S^i ; 非負対角行列 $z^i S_{m,m}^i > 0$
- (d) H^i ; 対称な block-diagonal 行列 z^i , $H_{m,m}^i > 0$, $H_{m,n}^i \leq 0$, $\sum_n H_{m,n}^i = 0$
- (e) V^i ; 対称な block-tridiagonal 行列 z^i , $V_{m,m}^i > 0$, $V_{m,n}^i \leq 0$, $\sum_n V_{m,n}^i = 0$
- (f) A^i ; diagonally dominant で既約な正定値対称行列 z^i である。更に $(A^i)^{-1}$ が存在して $(A^i)^{-1} > 0$ 。⁽³⁾

式(1.3)は, $\vec{\Phi} = \begin{pmatrix} \Phi_1 \\ \vdots \\ \Phi_K \end{pmatrix}$ としてまとめると次のように表わされる。

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

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)固有値入と対応する固有ベクトル $\vec{\Phi}$ を求め、固有値問題を解くことになる。この場合入と $\vec{\Phi}$ 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。 $M^{-1} = (M_{ij})$ と M_{ij} を $N \times N$ 行列とすると、 $M_{ij} > 0 \quad i \geq j$, $M_{ij} = 0 \quad i < j$ となる。従って適当な置換行列 P を用いて

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

なり, 正行列の Perron の定理⁽⁴⁾⁽⁵⁾ 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)固有値入は正で単純であり, 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, 要素はすべて正になる。”

1.3 outer iteration と inner iteration

上の性質から λ_1 と $\vec{p}_1$ を power 法で求めよと加わった⁽³⁾。すなわち,

$$\begin{aligned} & "(\vec{p}^{(0)}, \vec{c}) = 1, \vec{c} > 0 \text{ なる任意の } \vec{p}^{(0)} > 0 \text{ に対して, } M\vec{p} = F\vec{p}^{(l-1)}, \\ & \lambda^{(l)} = (\vec{p}^{(l)}, \vec{c}), \vec{p}^{(l)} = \vec{p} / \lambda^{(l)} \quad \text{とありと} \quad \vec{p}^{(l)} \rightarrow c\vec{p}_1, \\ & \quad \quad \quad (l=1, 2, \dots) \\ & \lambda^{(l)} \rightarrow \lambda_1, \quad l \rightarrow \infty \text{ である。更に, } \beta_l = \max_n \{(\vec{p}^{(l)})_n / (\vec{p}^{(l-1)})_n\}, \\ & \alpha_l = \min_n \{(\vec{p}^{(l)})_n / (\vec{p}^{(l-1)})_n\} \text{ とありとせ, } \alpha_l \leq \lambda_1 \leq \beta_l, \quad \alpha_{l-1} \leq \alpha_l \\ & \leq \beta_l \leq \beta_{l-1} \quad (l=1, 2, \dots) \text{ である。"} \end{aligned}$$

power 法の収束は遅いので、outer iteration の収束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 の固有値がすべて実数で非負、すなわち $\lambda_1 > \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n \geq 0$ で、
対応する固有ベクトル $\vec{p}_j$ 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。^{*}

$$\left\{ \begin{aligned} & M\vec{p} = F\vec{p}^{(l-1)}, \quad \lambda^{(l)} = (\vec{p}^{(l)}, \vec{c}), \quad (\vec{p}^{(0)}, \vec{c}) = 1 \\ & \vec{p}^{(l)} = \vec{p}^{(l-1)} + \alpha_l (\vec{p} / \lambda^{(l)} - \vec{p}^{(l-1)}) + \beta_l (\vec{p}^{(l-1)} - \vec{p}^{(l-2)}) \\ & \quad \quad \quad (l=1, 2, \dots) \quad (1.5) \\ & \alpha_1 = 1, \quad \beta_1 = 0, \quad \alpha_2 = 2/(2-\sigma), \quad \beta_2 = 0 \\ & \alpha_l = 4 \cdot T_{l-2}(\frac{2}{\sigma} - 1) / (\sigma \cdot T_{l-1}(\frac{2}{\sigma} - 1)) \quad \beta_l = T_{l-2}(\frac{2}{\sigma} - 1) / T_{l-1}(\frac{2}{\sigma} - 1) \\ & \sigma = \frac{\lambda_2}{\lambda_1}, \quad T_l(x); l \text{ 次 Chebyshev 多項式} \quad (l=2, 4, \dots) \end{aligned} \right.$$

所で、上の outer iteration 毎に $M\vec{p} = F\vec{p}^{(l-1)}$ を解かなければならな
い。すなわち、

^{*} この形は原力の教科書として始めて用いられたのは文献(2)である。

$$A^i \vec{p}^i = \lambda_i \sum_{j=1}^k F_i \vec{p}^j (i-1) + \sum_{j=1}^{i-1} G_{ij} \vec{p}^j \equiv \vec{a}^i \quad (1.6)$$

($1 \leq i \leq k$)

を解くことになる。こゝ 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 法を適用すること考えよう。こゝで Wielandt 法を次のように与えよう。^{*}

$$\begin{cases} (M - \frac{1}{\lambda^{(l)}} F) \vec{p} = F \vec{p}^{(l-1)}, & \tau^{(l)} = (\vec{p}, \vec{v}), & \vec{p}^{(l)} = \vec{p} / \tau^{(l)}, & \vec{v} > 0 \\ \lambda^{(l)} = 1 / (\frac{1}{\tau^{(l)}} + \frac{1}{\lambda^{(l-1)}}), & \bar{\lambda}^{(l)} = \max_n \{ (\vec{p})_n / (\vec{p}^{(l-1)})_n \}, \\ \lambda^{(l)} = 1 / (\frac{1}{\tau^{(l)}} + \frac{1}{\lambda^{(l-1)}}), & \underline{\lambda}^{(l)} = \min_n \{ (\vec{p})_n / (\vec{p}^{(l-1)})_n \}, \\ \Delta^{(l)} = 1 / (\frac{1}{\tau^{(l)}} + \frac{1}{\lambda^{(l-1)}}) \end{cases} \quad (2.1)$$

($l = 1, 2, 3, \dots$)

このとき、次の収斂の性質が与えられる。⁽⁹⁾

“任意の正の ϵ に対し $\vec{p}^{(0)} > 0$ と $\lambda^{(0)} > \lambda_1$ に対して、 $\lambda^{(l)} \rightarrow \lambda_1$, $\vec{p}^{(l)} \rightarrow \vec{p}_1$,
 $(\bar{\lambda}^{(l)} - \Delta^{(l)}) / \lambda^{(l)} \rightarrow 0$ ($l \rightarrow \infty$) となる。更に $\vec{p}^{(0)} \neq \vec{p}_1$ のとき
 $\bar{\lambda}^{(0)} > \bar{\lambda}^{(1)} > \dots > \bar{\lambda}^{(l)} > \dots \rightarrow \lambda_1$ 。”

こゝで、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 $T_W^{(l)}$, $T_C^{(l)}$ とすると⁽⁹⁾ “スベクトル半径 $\lambda(T_W^{(l)})$, $\lambda(T_C^{(l)})$ に対して、 $\lambda(T_W^{(l)}) / \lambda(T_C^{(l)}) \rightarrow 0$, $l \rightarrow \infty$ ” となり、この意味で Wielandt 法が Chebyshev 多項式加速

* Wachspress の場合には、 $M - \frac{1}{\lambda} F$ で λ が固定されている。Wielandt 法の性質は (b) で説明されているが、(4), (6), (9) と各々少し異なる。

法より収束が早いといえる。二つの方法の outer iteration の収束回数の一例を図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、Weilandt 法(2.1)を行(と主次のよ)な連立一次方程式を解かなければならない。

$$(M - \frac{1}{\lambda} F) \cdot \vec{x} = \vec{a} \quad , \quad \lambda > \lambda_1 \quad (2.2)$$

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

$$(H + V_0 + S - G - \frac{1}{\lambda} F) \cdot \vec{x} = \vec{a} \quad (2.3)$$

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^{*}。

$$-B_n \cdot \vec{z}_{n-1} + (D_n - \frac{1}{\lambda} F_n) \cdot \vec{z}_n - T_n \cdot \vec{z}_{n+1} = \vec{r}_n \quad , \quad \vec{z}_0 = \vec{z}_{N_d+1} = 0 \quad (2.4)$$

$$(1 \leq n \leq N_c)$$

従って、上式を消去法で解くことはでき⁽⁴⁾。しかし、行列 D_n 等の次数が大ま(とま)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、

$$B_p = H_0 + V_0 + S - G - \frac{1}{\lambda} F \quad , \quad C_p = -V + V_0 - H + H_0$$

$$B_L = H + V_0 + S - G - \frac{1}{\lambda} F \quad , \quad C_L = -V + V_0$$

H_0 : H の対角要素からなる対角行列 , V_0 も同様

とすると、

" $\lambda > \lambda_1$ に対して、 $\lambda(B_L^{-1} C_L) \leq \lambda(B_p^{-1} C_p) < 1$ である。更に $\lambda(B_L^{-1} C_L) \rightarrow 1$, $\lambda \rightarrow \lambda_1$ ($\lambda > \lambda_1$) である。" (9), (10)

^{*} $\vec{z}$ はエネルギー一組、 x 方向、 y 方向の順に z とあるように $\vec{x} = P \cdot \vec{z}$

$B_p^T C_p$, $B_L^T C_L$ にSOR法を適用すると*, $B_p^T C_p$, $B_L^T C_L$ 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 $\bar{\omega}$ は,

$$\bar{\omega} = \omega_b - 1, \quad \omega_b = 2 / (1 + \sqrt{1 - \mu^2}), \quad \mu; \lambda(B_p^T C_p) \text{ または } \lambda(B_L^T C_L)$$

となる。 $B_p^T C_p$, $B_L^T C_L$ の固有値が実数でないときには, “ある意味で, 加速因子 $\omega=1$ の方が最適であり, ω の値によつては発散することもある”⁽⁹⁾ かいえる。(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)に次ぐくり返し法を適用する。

$$\begin{cases} \{ (a + \omega_k) B_p + H - H_0 \} \cdot \vec{x}^{(k+1/2)} = \{ (-b + \omega_k) B_p - V + V_0 \} \cdot \vec{x}^{(k)} + \vec{d} \\ \{ (b' + \omega_k) B_p + V - V_0 \} \cdot \vec{x}^{(k+1)} = \{ (-a' + \omega_k) B_p - H + H_0 \} \cdot \vec{x}^{(k+1/2)} + \vec{d} \end{cases}$$

($k=0, 1, 2, \dots$) (2.5)

これをADI法と呼ぶことにする。“ $\lambda > \lambda_1$ のとき, $a=b'=1$, $\omega_k=\omega > 0$ であれば解 $\vec{x}$ に収斂し, $\lambda \rightarrow \lambda_1$ につれてこの収斂は遅くなる”⁽⁹⁾ が成立するか収斂は遅い。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 $\lambda \rightarrow \lambda_1$ につれて収斂は遅くなる” かいえる。(図4 表1(7頁))

以上のことからSOR, ADI法ともWielandt法のiterationが速くなるにつれて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を早くした。

* $B_p^T C_p$ はエネルギー組で与えられるときのpoint SOR法で, $B_L^T C_L$ はline SOR法で式(2.4)にSOR法を適用したものである。

とすると inner iteration が速くなり、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 法のみ以外は全体として Chebyshev 多項式加速法にかなわない。

2.3 Wrelandt 法の変形

Wrelandt 法の場合には、inner iteration を式 (2.2) の形で行うが、次のような方針を考へることから式 (1.6) の形で inner iteration を行えようとする。

$$\left\{ \begin{array}{l} Q^{(l-1)} \cdot \vec{p}^{(l-1)} = H \cdot \vec{p}^{(l-1)}, \quad Q^{(l-1)} \text{ ; 対角行列} \\ (M - \frac{1}{\lambda^{(l-1)}} Q^{(l-1)}) \cdot \vec{p} = H \cdot \vec{p}^{(l-1)}, \quad \tau^{(l)} = (\vec{p}, \vec{v}), \quad \vec{v} > 0 \quad (2.6) \\ \vec{p}^{(l)} = \vec{p} / \tau^{(l)}, \quad \lambda^{(l)} = 1 / (\frac{1}{\tau^{(l)}} + \frac{1}{\lambda^{(l-1)}}), \\ \tau^{(l)} = \max_n \{ (\vec{p})_n / (\vec{p}^{(l-1)})_n \}, \quad \lambda^{(l)} = 1 / (\frac{1}{\tau^{(l)}} + \frac{1}{\lambda^{(l-1)}}) \quad (l=1, 2, 3, \dots) \end{array} \right.$$

このとき、" $\lambda^{(l)} > \lambda(M^{-1}Q^{(l)})$ で $\vec{p}^{(l)}$ が収斂すると、 $\vec{p}^{(l)} \rightarrow \vec{p}$, $\lambda^{(l)} \rightarrow \lambda$ ($l \rightarrow \infty$) である" 従って収斂したときの $Q^{(\infty)} = Q$ は、 $Q\vec{p} = H\vec{p}$ で与えられる。すなわち、収斂したときには、その大まかい所で式 (2.6) は MQ の Wrelandt 法を近似的にやっていると考えられる。 MQ については、" MQ の最大 (絶対値の意味で) 固有値は λ である単純であり対応する固有ベクトルは $\vec{p}$ が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 $Q^{(l-1)}$ の代りに Q を用いると $\vec{p}^{(l)} \rightarrow \vec{p}$, $\lambda^{(l)} \rightarrow \lambda$ ($l \rightarrow \infty$) となるが、 Q が未知であるから実際にはできない。

式 (2.6) を行い、

$$(M - \frac{1}{\lambda} Q^{(l)}) \cdot \vec{p} = \vec{p}, \quad \lambda > \lambda(M^{-1}Q^{(l)})$$

を解かなければならないが、 $Q^{(k)}$ が対角行列であるから、

$$(A^i - \frac{1}{\lambda} Q^{(k)i}) \cdot \vec{\phi}^i = \vec{d}^i, \quad Q^{(k)} = \begin{pmatrix} Q^{(k)11} & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & Q^{(k)KK} \end{pmatrix} \quad (2.17)$$

を解けばよい。

inner iteration に SOR, ADI 法を適用することは Wirlandt 法のとまと同様に考えられるが、 $A^i - \frac{1}{\lambda} Q^{(k)i}$ は対称行列であり Wirlandt 法のとま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 $S^i - \frac{1}{\lambda} Q^{(k)i} \geq 0$ のときには普通の ADI 法が適用される。このとき式(2.6)の一例を図 5 (17 頁)に示す。但し、初めから式(2.6)をやりのではなく、まづ Chebyshev 多項式加速法を行い、 $\varepsilon^{(k)} = (\lambda^{(k)} - \Delta^{(k)}) / (2\lambda^{(k)})$ が $\varepsilon^{(k)} < \varepsilon_k$ になったところで式(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。^{*}

$$\begin{cases} \frac{1}{\rho^i} \frac{\partial}{\partial t} \phi^i(x, t) = \text{div}(\rho^i(x, t) \text{grad} \phi^i(x, t)) - \sigma^i(x, t) \phi^i(x, t) \\ \quad + \sum_{j=1}^k p_1^i(x, t) \phi^j(x, t) + \sum_{j=1}^k p_2^i(x, t) c^j(x, t) + f_p^i(x, t) \\ \quad (1 \leq i \leq k) \end{cases} \quad (3.1)$$

*空間座標 x のときも同様

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} c^{i'}(x, t) &= -\lambda^{i'}(x, t) \cdot c^{i'}(x, t) + \sum_{j=1}^K p_{3,j}^{i',j}(x, t) \phi^j(x, t) + f_p^{i'}(x, t) \\ (1 \leq i' \leq K') \end{aligned} \right.$$

ここで、

$\phi^i, c^{i'}$; 中性子束

$f_p^i, f_p^{i'}$; 連続で、与えられるもの

係数 $p_{1,j}^{i,j}, p_{2,j}^{i,j}, p_{3,j}^{i',j} \geq 0$, $D^i, \alpha^i, \nu^i, \lambda^i > 0$

空間については、 $(0 \leq) x_0 \leq x \leq X (< \infty)$ 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 $(0 \leq) T_0 \leq t \leq T (< \infty)$ 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(2.1)を積分して差分方程式を作ると、次のようになる。

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

上式をまとめると次のように表わされる。

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} \vec{\Psi}(t) = Q(t) \vec{\Psi}(t) + \vec{f}(t), & Q(t) = A(t) + P(t) \\ A(t) = \begin{pmatrix} \sqrt{A^1(t)} v^1 & & 0 \\ & \sqrt{A^k(t)} v^k & \\ 0 & & -\sqrt{\Lambda^1(t)} & \\ & & & -\sqrt{\Lambda^k(t)} \end{pmatrix} \end{cases} \quad (3.3)$$

2 2 2,

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

$\vec{c}$; $\vec{\Phi}$ と同様

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

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

$P(t)$; $A(t)$ を除いたもので $P(t) \geq 0$

$$V = \begin{pmatrix} v_1 & & 0 \\ & v_n & \\ 0 & & v_N \end{pmatrix}, \quad v_n > 0$$

2 2, 上式 (3.3) に implicit, Crank-Nicolson 法を適用する。

$$\frac{\vec{F}(t+\Delta t) - \vec{F}(t)}{\Delta t} = \alpha(t+\Delta t) \vec{F}(t+\Delta t) - \vec{F}(t-\Delta t) \quad (\text{implicit 法}),$$

$$\frac{\vec{F}(t+\Delta t) - \vec{F}(t)}{\Delta t} = \frac{1}{2} \alpha(t + \frac{\Delta t}{2}) (\vec{F}(t+\Delta t) - \vec{F}(t)) + \frac{1}{2} (\vec{F}(t+\Delta t) + \vec{F}(t)) \quad (\text{Crank-Nicolson 法})$$

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

$$\kappa((1 - \Delta t \cdot v_i \cdot \tilde{A}^i(t))^{-1}) < 1, \quad \forall t, \Delta t > 0$$

$$\kappa((1 - \Delta t \cdot v_i \cdot \tilde{A}^i(t))^{-1} (1 + \Delta t \cdot v_i \cdot \tilde{A}^i(t))) < 1, \quad \forall t, \Delta t > 0$$

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

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

$$x_0 = x_1 < x_2 < \dots < x_N = X, \quad \Delta x \geq (x_{n+1} - x_n) \geq \Delta x / c_x^2 \quad (1 \leq n \leq N-1)$$

$$T_0 = t_1 < t_2 < \dots < t_L = T, \quad \Delta t \geq (t_{l+1} - t_l) \geq \Delta t / c_t^2 \quad (1 \leq l \leq L-1)$$

c_x^2, c_t^2 ; 常数

とあり、

$$\|\vec{\Psi}\| \leq e^{cT} \|\vec{\Psi}(0)\| + e^{cT} \cdot T \|\vec{F}\|, \quad \forall \Delta_1 > 0, \Delta_2 \geq \frac{1}{\Delta_1} \Delta t > 0$$

ここで、

c, T : 常数, $\Delta_2 > 0$,

$$\|\vec{\Psi}\| = \max_{1 \leq i \leq L} \|\vec{\Psi}(t_i)\|, \quad \|\vec{\Psi}(t_i)\|^2 = (\vec{\Psi}(t_i), \begin{bmatrix} \sqrt{V} & 0 \\ 0 & \sqrt{V} \end{bmatrix} \vec{\Psi}(t_i))$$

とあり。

参考文献

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

- of the Professional Group on Nuclear Science NS-4
(1957), p52~62
- 2) E.L. Wachspress ; CURE , KAPL-1724 (1957)
- 3) R.S. Targa ; 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. Targa ; Matrix Iterative Analysis (1962,
Prentice-hall, Inc)

- 9) F.R. Gantmacher; *The Theory of Matrices*, 2 (1959, Chelsea Publishing Company)
- 7) 野田 隆 ; 定常状態における中性子拡散混合方程式に適用される 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 Terazawa, S; On the convergence of diffusion codes, Trans. Am. Nucl. Soc. 6 (1963) p277~279.

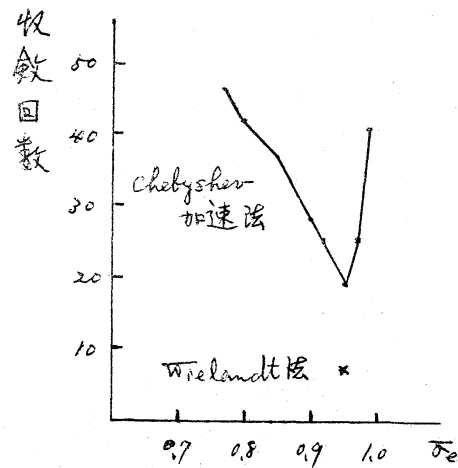


図2. Chebyshev 加速法とWielandt法

1. $\sigma \approx 0.95$ のとき, Chebyshev 加速法の σ_2 を変えたときの収束回数の変化
2. Wielandt 法は, 3 回まで power 法を用い 4 回から Wielandt 法を用いた。

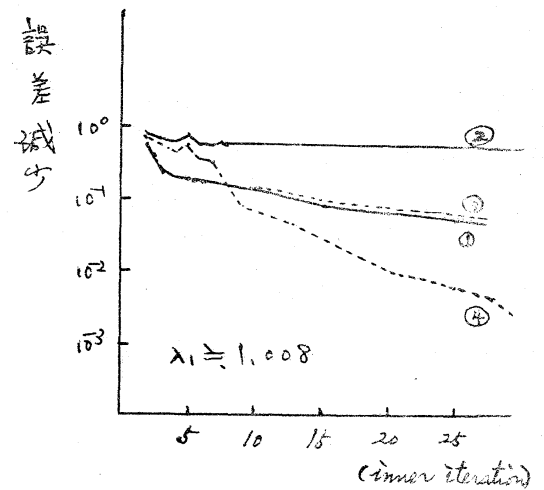


図3. SLOREにおける収束状況

	λ	ω	μ
①	1.01	1.25	
②	1.01	1.654	0.978
③	1.00	1.26	
④	1.00	1.564	0.960

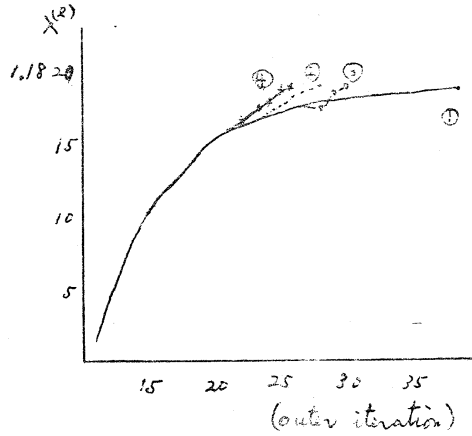
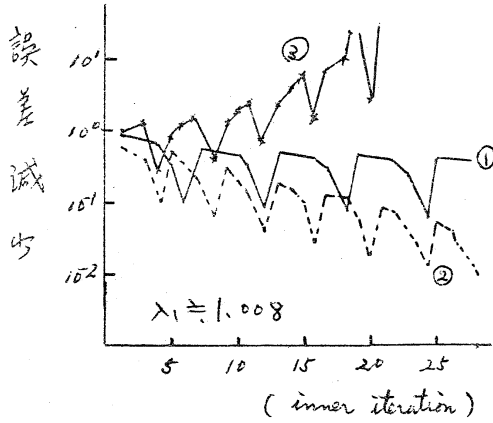


図4. ADIにおける収束状況

図5. 変形ワイド法の収束状況

	λ	α	ω_0	x	ω_{max}
①	1.01	1	10^4	10	9
②	1.00	1	10^3	10	9
③	1.00	0.5	10^3	10	9

	Σ_n	変形ワイド法の回数	収束回数
①	0		38
②	$.98 \times 10^2$	24	28
③	$.8 \times 10^3$	28	30
④	$.98 \times 10^1$	22	26

λ	$\overline{\lambda}(\overline{\omega}_0, \overline{\alpha})$	α	β	ADIのスホトル半径 $\leq 10^{-2}$	
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	
$\lambda_1 = 0.32457 \times 10^1$				$x=0.1$	ω_n 計算

表1. λ の変化と inner iterationのスホトル半径(特別な場合)

λ	$\frac{ \overline{\lambda}(\overline{\omega}_0, \overline{\alpha}) - \lambda }{ \lambda }$
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	

