寄　　書

あるデータにおける ADI 法*

松　尾　隆　雄**　　野　田　　隆***

1. はじめに

原子炉計算においては，定常状態の中性子拡散方程式が数値的に解かれることが多い．この計算の一部として，ADI 法が用いられる．現在のところ，ADI 法の理論的解明は，特殊な場合以外は不十分である．

今まで，いろいろな data を ADI 法を用いて計算してきた．それはいづれも収斂したのであるが，今回たまたま発散する data にぶっつかた．そこで，この data の場合について数値的に少し調べてみたので以下のべておく．

2. 拡散方程式

2 次元拡散方程式

$$-D\Delta\phi(\overrightarrow{r})+\Sigma\phi(\overrightarrow{r})=\frac{\chi}{\lambda}\nu\Sigma_f\phi(\overrightarrow{r}) \qquad (1)$$

に外側の境界において，全て対称なる条件を入れたとき，次のような差分方程式に展開することができる．

すなわち

$$-R_{m,n}\phi_{m+1,n}-E_{m,n}\phi_{m-1,n}-T_{m,n}\phi_{m,n+1}$$
$$-B_{m,n}\phi_{m,n-1}+(R_{m,n}+E_{m,n}+T_{m,n}+B_{m,n}$$
$$+\sigma_{m,n})\phi_{m,n}=S_{m,n} \qquad (2)$$

$$S_{m,n}=\frac{\chi}{\lambda}u_{m,n}\phi_{m,n}$$

$$R_{m,n}=\frac{1}{2g_m}(D^1_{m,n}h_n+D^4_{m,n}h_{n-1})$$

$$E_{m,n}=\frac{1}{2g_{m-1}}(D^2_{m,n}h_n+D^3_{m,n}h_{n-1})$$

$$T_{m,n}=\frac{1}{2h_n}(D^1_{m,n}g_m+D^2_{m,n}g_{m-1})$$

$$B_{m,n}=\frac{1}{2h_{n-1}}(D^3_{m,n}g_{m-1}+D^4_{m,n}g_m)$$

$$\sigma_{m,n}=\Sigma^1_{m,n}Ar_1+\Sigma^2_{m,n}A_{r2}+\Sigma^3_{m,n}A_{r3}$$
$$+\Sigma^4_{m,n}A_{r4}$$

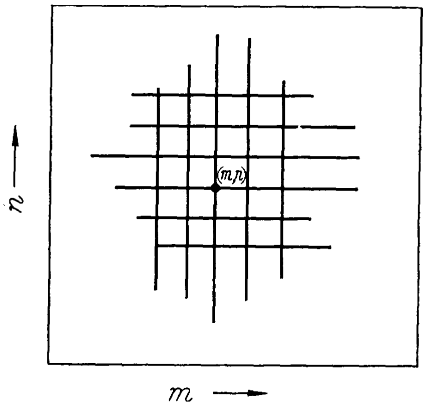
$$u_{m,n}=\nu\Sigma^1_{fm,n}Ar_1+\nu\Sigma^2_{fm,n}Ar_2+\nu\Sigma^3_{fm,n}Ar_3$$
$$+\nu\Sigma^4_{fm,n}Ar_4$$

$$Ar_1=\frac{1}{4}h_ng_m$$

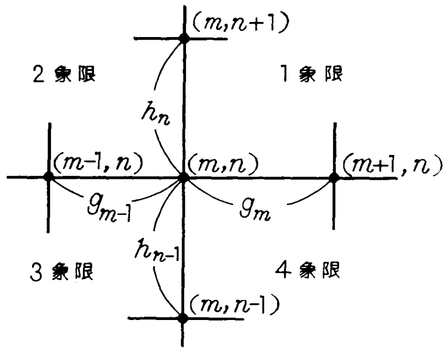
$$Ar_2=\frac{1}{4}h_ng_{m-1}$$

$$Ar_3=\frac{1}{4}h_{n-1}g_{m-1}$$

$$Ar_4=\frac{1}{4}h_{n-1}g_m$$



第 1 図



第 2 図

ただし，属さない部分の係数は 0 であり，suffix 1～4 は象限を表わす．

* ADI method in numerical example, by Takao Matsuo (IBM Japan, Ltd. Data Center) and Takashi Noda (Ozenzi Division, Central Research Laboratory of Hitachi Ltd.)

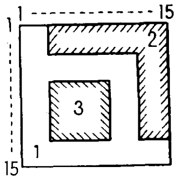
** 日本アイ・ビー・エム　データセンター
*** 日立中央研究所　王禅寺支所

また，ここでは**第1表**に示される data を用いた．

第1表 係 数

物質	D	Σ	$\nu\Sigma_f$
1	0.257	0.00983	0
2	0.272	0.225	0
3	0.5	0.5	0.26

$\chi=1.0$　$\lambda=0.17189366E-18$　initial $\phi=1.E-20$



mesh interval は low column とも 1～3；0.1985, 3～5；0.0795, 5～11；2.821, 11～13；0.0795, 13～15；0.1985

これは

$$[\boldsymbol{H\phi}]_{m,n}=-R_{m,n}\phi_{m+1,n}+(R_{m,n}+E_{m,n})\phi_{m,n}-E_{m,n}\phi_{m-1,n}$$

$$[\boldsymbol{V\phi}]_{m,n}=-T_{m,n}\phi_{m,n+1}+(T_{m,n}+B_{m,n})\phi_{m,n}-B_{m,n}\phi_{m,n-1}$$

$$[\boldsymbol{\Sigma\phi}]_{m,n}=\sigma_{m,n}\phi_{m,n}$$

$$[\boldsymbol{S}]_{m,n}=S_{m,n}$$

（ただし，$\boldsymbol{H}$, $\boldsymbol{V}$, $\boldsymbol{\Sigma}$ は matrix, $\boldsymbol{\Phi}$, $\boldsymbol{S}$ は vector を表わす）

とすると，（2）式は

$$(\boldsymbol{\Sigma}+\boldsymbol{H}+\boldsymbol{V})\boldsymbol{\phi}=\boldsymbol{S} \tag{3}$$

となり，$(\boldsymbol{\Sigma}+\boldsymbol{H}+\boldsymbol{V})$ matrix は irreducibly diagonal dominant であるから non-singular matrix* であり，解 $\boldsymbol{\phi}$ は一意的に存在する．

この（3）式を，ADI 法で表現すれば

$$\boldsymbol{H}_1=\boldsymbol{H}+\frac{1}{2}\boldsymbol{\Sigma}$$

$$\boldsymbol{V}_1=\boldsymbol{V}+\frac{1}{2}\boldsymbol{\Sigma}$$

$$[\boldsymbol{I\phi}]_{m,n}=(R_{m,n}+E_{m,n}+T_{m,n}+B_{m,n})\phi_{m,n}$$

とするとき

$$(\boldsymbol{H}_1+w_{i+\frac{1}{2}}\boldsymbol{I})\boldsymbol{\phi}^{(i+\frac{1}{2})}=(w_{i+\frac{1}{2}}\boldsymbol{I}-\boldsymbol{V}_1)\boldsymbol{\phi}^{(i)}+\boldsymbol{S} \tag{4}$$

$$(\boldsymbol{V}_1+w_{i+1}\boldsymbol{I})\boldsymbol{\phi}^{(i+1)}=(w_{i+1}\boldsymbol{I}-\boldsymbol{H}_1)\boldsymbol{\phi}^{(i+\frac{1}{2})}+\boldsymbol{S}$$

（ただし，i は iteration number, w_i は acceleration parameters）

となり，Peaceman-Rachford matrix は

$$(\boldsymbol{V}_1+w_{i+1}\boldsymbol{I})^{-1}(w_{i+1}\boldsymbol{I}-\boldsymbol{H}_1)(\boldsymbol{H}_1+w_{i+\frac{1}{2}}\boldsymbol{I})^{-1}\times(w_{i+\frac{1}{2}}\boldsymbol{I}-\boldsymbol{V}_1) \tag{5}$$

となる．

この ADI 法においては次の定理が証明されている*．

定理，$\boldsymbol{H}_1$, $\boldsymbol{V}_1$, $\boldsymbol{I}$ が positive definite matrix であり $\alpha\leqq\beta$ を任意の positive real number とするとき（5）が convergent となるような w_i

$$\beta=w_{\frac{1}{2}}\geqq w_1\geqq\cdots\cdots\geqq w_{n_0-\frac{1}{2}}\geqq w_{n_0}=\alpha$$

$$w_k=w_k(\mathrm{mod}\ n_0)$$

が存在する．

上の定理より，$\alpha=\beta$ とすることによって constant 加速の場合は常に収束することがわかる．

また，Laplace 方程式における実験結果として Garrett Birkhoff, Richard S. Varga, and Young "Alternating Divection Implicit Methods**" には次のことが述べられている．

（1） Peaceman-Rachford method は，commutative の場合と同様な収束をする（commutative の場合は収束することが証明されている）．

（2） Peaceman-Rachford method は，ちいさな mesh (interval h) に対しては SOR より有効な方法である．

（3） Wackspress parameter は，Peaceman-Rachford に関しては最もよい parameter である．

3. 実験結果

上記の sample を計算すると，以前に述べられた* ADI 法による実験的結果とは異り parameter のとり方によっては発散する場合がある．

ここで parameter の maximum α は

$$\alpha_H=2\max_{m,n}\left(\frac{R_{m,n}+E_{m,n}}{R_{m,n}+E_{m,n}+T_{m,n}+B_{m,n}}\right)$$

$$\alpha_V=2\max_{m,n}\left(\frac{T_{m,n}+B_{m,n}}{R_{m,n}+E_{m,n}+T_{m,n}+B_{m,n}}\right)$$

$$\alpha=\frac{1}{2}(\alpha_H+\alpha_V)$$

によって求め，minimum は 10^{-4} とした．

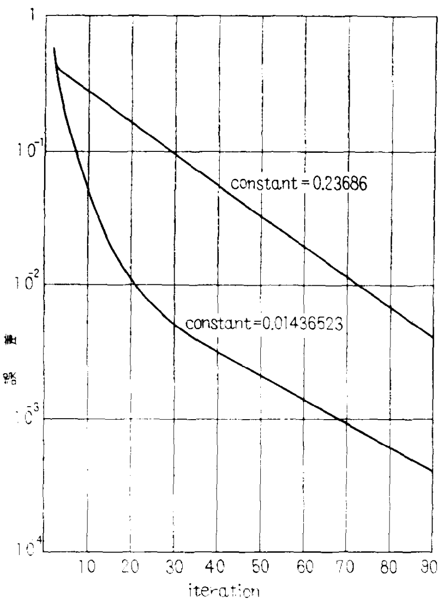
これを 4 parameters, 16 parameters にすると**第2表**のようになる．

1 parameter のときは，定理に述べられているように収束した．**第3図**がそれである．

* Richard S. Varga, "Matrix Iterative Analysis"

* Douglas, Jr., J., and C.M. Pearcy, "On Convergence of Alternating Direction Procedures" Numerishe Mathematik, Juni. 1963.

** Adrances in Computers Volume 3



第3図　1 parameter

第2表　加速 parameters

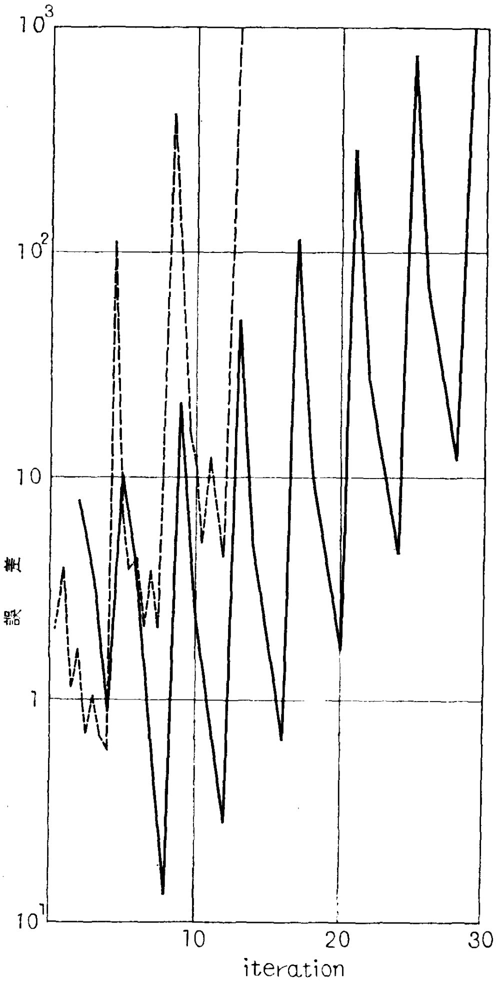
4 parameters	16 parameters
0.91998874 E 0	0.18801950 E 1
0.57955511 E-1	0.12379355 E 1
0.34481845 E-2	0.66541123 E 0
0.21722188 E-3	0.33584611 E 0
	0.16674783 E 0
	0.82454003 E-1
	0.40731517 E-1
	0.20116170 E-1
	0.99343602 E-2
	0.49063062 E-2
	0.24236703 E-2
	0.11984652 E-2
	0.59504082 E-3
	0.30032938 E-3
	0.16143193 E-3
	0.10629018 E-3

なお誤差評価は

$$E^{i+1}_{rror}=\frac{\sum_{m,n}|\phi^{i+1}_{m,n}-\phi_{m,n}^{i+\frac{1}{2}}|+\sum_{m,n}|\phi_{m,n}^{i+\frac{1}{2}}-\phi^{i}_{m,n}|}{\sum_{m,n}|\phi^{1}_{m,n}-\phi_{m,n}^{\frac{1}{2}}|+\sum_{m,n}|\phi_{m,n}^{\frac{1}{2}}-\phi^{0}_{m,n}|} \tag{6}$$

による（ただし，i は iteration 回数を表わす)．

第2表で与えられた 4 parameters の加速による iteration を行なった．その結果は大きな parameter から小さな parameter と，小から大へのふたとおり行なったが，**第4図，第5図**のようにともに発散した．なお誤差評価は（6）による．また，そこに…で表わされているものは真の解との相対誤差である．



第4図　4 parameters（小 → 大）

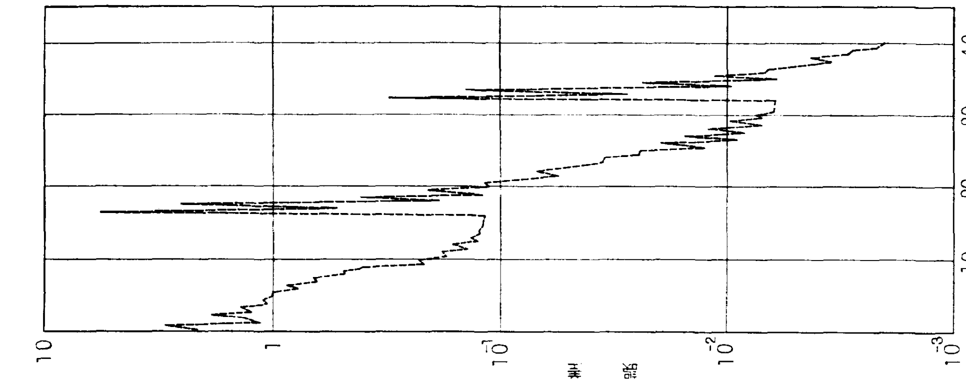
次に 16 parameters の加速による iteration を行なった．その結果は**第6図，第7図**に示されるものである．図からわかるように 16 cycle で振動はしながらも 1 parameter の場合よりも速く収束した．

結　　論

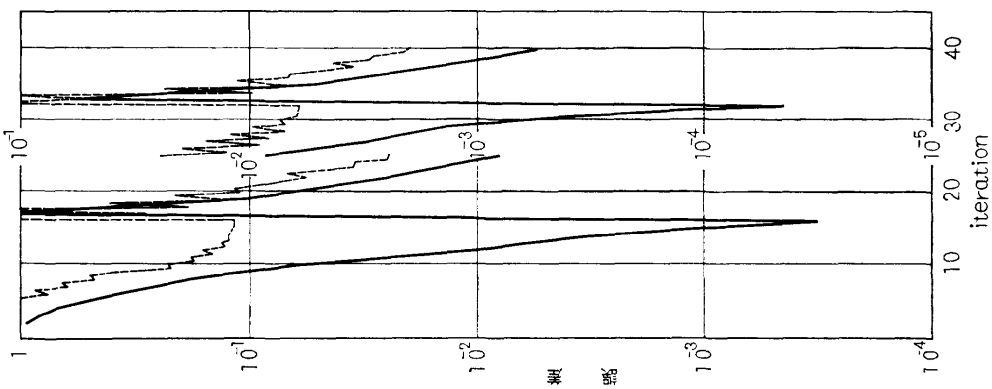
以上の数値例の結果，次のようなことに気づく．

（1） 4 parameters で発散する場合でも，16 parameters で収束している．もちろん，定理から parameters の数が適当に多ければ収束することは明らかである．

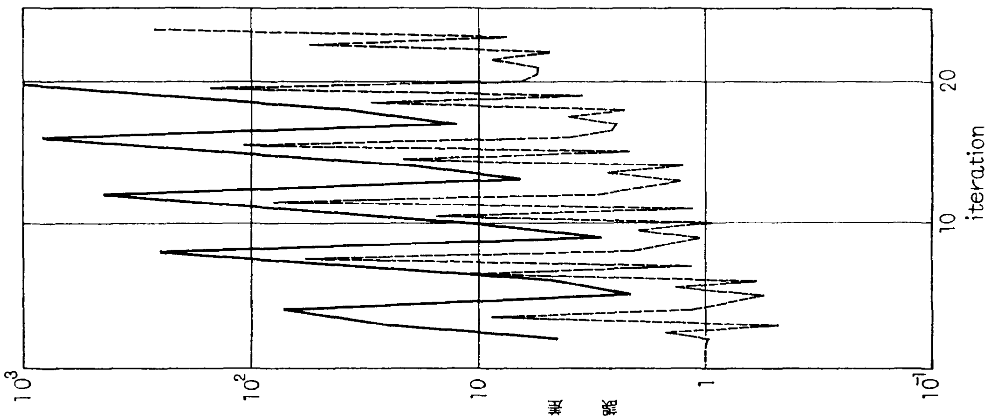
（2） 1 parameters（ここで用いた値）より，16



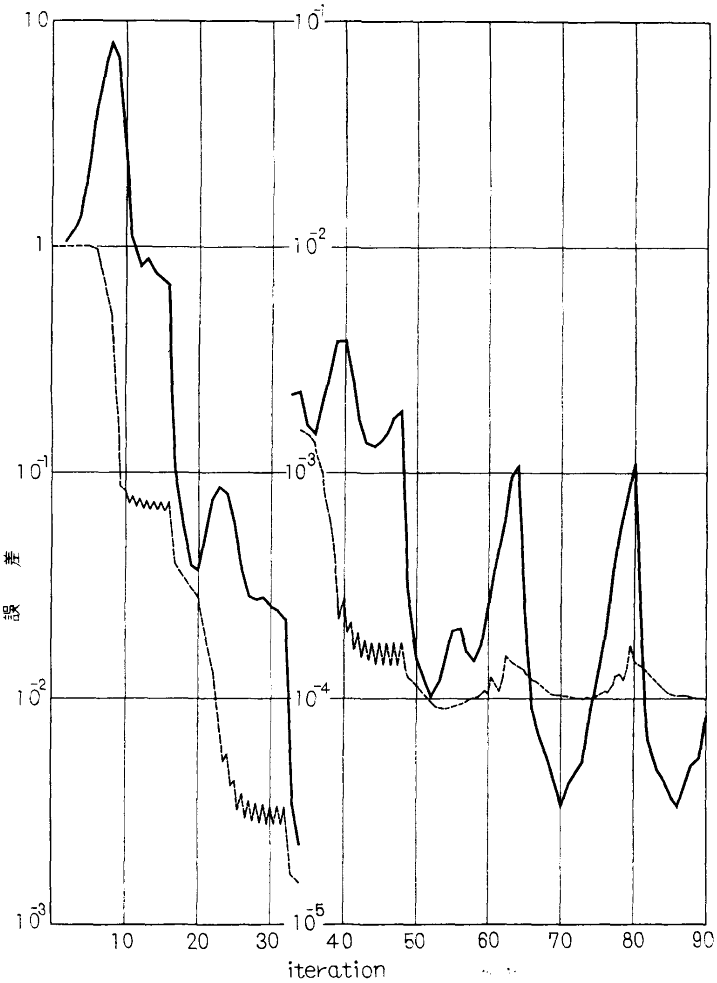
第6′図 第6図での真の解との誤差



第6図 16 parameters (小→大)



第5図 4 parameters (大→小)



第7図　16 parameters (大 → 小)

parameters の方が収束が速い.

(3) (6) で示された誤差は真の解との誤差 (真の誤差) と比べて1桁以上も違う場合がある.

(4) parameters は (大 → 小) が (小 → 大) より真の誤差と誤差との違いが少なく, また, 収束が速い.

これらは, あくまでも, ここにおける data についてであり, 一般性はないが, ADI 法の一つの資料にはなると思われる.