１次元中性子拡散方程式の導出

千葉豪

平成 26 年 6 月 16 日

１次元平板系での中性子輸送方程式は以下のように書ける。なお、外部中性子源は等方であるとする。

$$\mu\frac{\partial}{\partial x}\psi(x,\mu)+\Sigma(x)\psi(x,\mu)=\sum_{l=0}^{\infty}\frac{2l+1}{4\pi}P_l(\mu)\Sigma_l(x)\phi_l(x)+\frac{1}{4\pi}s(x) \tag{1}$$

$\psi(x,\mu)$ は位置 x における角度中性子束を示し、その向きと X 軸のなす角の余弦が μ である。

角度中性子束 $\psi(x,\mu)$ について、その μ 依存性を以下のように Legendre 多項式 $P_l(\mu)$ で展開する。

$$\psi(x,\mu)=\sum_{l=0}^{\infty}\frac{2l+1}{4\pi}P_l(\mu)\phi_l(x) \tag{2}$$

なお、角度中性子束の l 次のルジャンドル展開係数 $\phi_l(x)$ は以下で定義される。

$$\phi_l(x)=2\pi\int_{-1}^{1}d\mu P_l(\mu)\psi(x,\mu) \tag{3}$$

この式は、式 (2) の両辺に $P_{l'}(\mu)$ を乗じて、$-1\leq\mu 1$ で積分することにより得ることが出来る。

式 (2) を式 (1) に代入し、両辺に $P_{l'}(\mu)$ を乗じて $-1\leq\mu\leq 1$ で積分すると、次の式を得ることが出来る。

$$\sum_{l=0}^{\infty}\frac{2l+1}{4\pi}\left\{\int_{-1}^{1}d\mu\mu P_{l'}(\mu)P_l(\mu)\frac{d\phi_l(x)}{dx}+\int_{-1}^{1}d\mu P_{l'}(\mu)P_l(\mu)\Sigma(x)\phi_l(x)\right\}$$
$$=\sum_{l=0}^{\infty}\frac{2l+1}{4\pi}\Sigma_l\int_{-1}^{1}d\mu P_{l'}(\mu)P_l(\mu)\phi_l(x)+\frac{1}{2\pi}s(x)\delta_{l',0},\qquad(l'=0,1,2,\cdots) \tag{4}$$

なお、上式の右辺最終項は

$$\frac{1}{4\pi}s(x)\int_{-1}^{1}d\mu P_{l'}(\mu)=\frac{1}{4\pi}s(x)\int_{-1}^{1}d\mu P_{l'}(\mu)P_0(\mu)=\frac{1}{4\pi}s(x)\cdot 2\delta_{l',0} \tag{5}$$

から得られたものである。

それでは、式 (4) の各項について整理しよう。

式 (4) の左辺第一項については $\mu P_l(\mu)$ が含まれているので以下の漸化式を用いて μ を消去する。

$$\mu P_l(\mu)=\frac{l}{2l+1}P_{l-1}(\mu)+\frac{l+1}{2l+1}P_{l+1}(\mu) \tag{6}$$

すると、式 (4) の左辺第一項は以下のように書ける。

$$\begin{aligned}\sum_{l=0}^{\infty}\frac{2l+1}{4\pi}\frac{d\phi_l(x)}{dx}\int_{-1}^{1}d\mu\mu P_{l'}(\mu)P_l(\mu)&\\ =\sum_{l=0}^{\infty}\frac{1}{4\pi}\frac{d\phi_l(x)}{dx}\int_{-1}^{1}d\mu\left\{lP_{l-1}(\mu)+(l+1)P_{l+1}(\mu)\right\}P_{l'}(\mu)&\end{aligned} \tag{7}$$

Legendre 多項式の直交性

$$\int_{-1}^{1}d\mu P_l(\mu)P_{l'}(\mu)=\frac{2}{2l+1}\delta_{l,l'} \tag{8}$$

を用いることにより、式 (7) は以下のように書ける。

$$\begin{aligned}\sum_{l=0}^{\infty}\frac{2l+1}{4\pi}\frac{d\phi_l(x)}{dx}\int_{-1}^{1}d\mu\mu P_{l'}(\mu)P_l(\mu)&\\ =\frac{1}{4\pi}\sum_{l=0}^{\infty}\frac{d\phi_l(x)}{dx}\left\{l\cdot\frac{2}{2l'+1}\delta_{l',l-1}+(l+1)\frac{2}{2l'+1}\delta_{l',l+1}\right\}&\end{aligned} \tag{9}$$

右辺第一項は $l=l'+1$ のときのみ、第二項は $l=l'-1$ のときのみ値をもつので、上式は次のように書ける。

$$\sum_{l=0}^{\infty}\frac{2l+1}{4\pi}\frac{d\phi_l(x)}{dx}\int_{-1}^{1}d\mu\mu P_{l'}(\mu)P_l(\mu)=\frac{2}{4\pi}\left(\frac{l'+1}{2l'+1}\frac{d\phi_{l'+1}}{dx}+\frac{l'}{2l'+1}\frac{d\phi_{l'-1}}{dx}\right) \tag{10}$$

また、式 (4) の左辺第二項は Legendre 多項式の直交性を用いることにより以下のように書ける。

$$\sum_{l=0}^{\infty}\frac{2l+1}{4\pi}\int_{-1}^{1}d\mu P_{l'}(\mu)P_l(\mu)\Sigma(x)\phi_l(x)=\frac{2}{4\pi}\Sigma(x)\phi_{l'}(x) \tag{11}$$

さらに、式 (4) の右辺第一項は $\frac{2}{4\pi}\Sigma_{l'}\phi_{l'}$ と書ける。

以上より、式 (4) は以下のように書ける。

$$\frac{l'}{2l'+1}\frac{d\phi_{l'-1}}{dx}+\frac{l'+1}{2l'+1}\frac{d\phi_{l'+1}}{dx}+\Sigma\phi_{l'}=\Sigma_{l'}\phi_{l'}+s(x)\delta_{l',0},\qquad(l'=0,1,2,\cdots) \tag{12}$$

この式も中性子「輸送」方程式の一種であり、式 (1) とは等価である。

式 (12) を閉じるためには、l' を有限で打ちきる必要がある。P_N 法と呼ばれる方法では、次の近似を導入する。

$$\frac{d\phi_{N+1}}{dx}=0 \tag{13}$$

これにより、以下の解くべき $N+1$ 本の方程式が得られる。

$$\frac{l'}{2l'+1}\frac{d\phi_{l'-1}}{dx}+\frac{l'+1}{2l'+1}\frac{d\phi_{l'+1}}{dx}+\Sigma\phi_{l'}=\Sigma_{l'}\phi_{l'}+s\delta_{l',0},\qquad(l'=0,1,2,\cdots,N-1) \tag{14}$$

$$\frac{N}{2N+1}\frac{d\phi_{N-1}}{dx}+(\Sigma-\Sigma_N)\phi_N=0 \tag{15}$$

これが P_N 方程式と呼ばれているものであり、P_N 法ではこの方程式を解いて角度中性子束を計算する。

中性子拡散方程式は１次元問題でかつエネルギーが１群の場合には P1 方程式と等価となる。
P1 方程式は以下のように書ける。

$$\begin{aligned} \frac{d\phi_1}{dx} + \Sigma\phi_0 &= \Sigma_0\phi_0 + s & (16) \\ \frac{1}{3}\frac{d\phi_0}{dx} + (\Sigma - \Sigma_1)\phi_1 &= 0 & (17) \end{aligned}$$

式 (17) より以下のように ϕ_1 と ϕ_0 の関係式が導かれる。

$$\phi_1 = -\frac{1}{3(\Sigma - \Sigma_1)}\frac{d\phi_0}{dx} = -D\frac{d\phi_0}{dx} \tag{18}$$

ここで、D は拡散係数と呼ばれているものである。
式 (18) を式 (16) に代入すると、以下のように中性子拡散方程式を得ることができる。

$$-D\frac{d^2\phi_0}{dx^2} + \Sigma\phi_0 = \Sigma_0\phi_0 + s \tag{19}$$

次に、エネルギーを多群とした場合を考えよう。この場合、P1 方程式は次のように書ける。

$$\begin{aligned} \frac{d\phi_{1,g}}{dx} + \Sigma_g\phi_{0,g} &= \sum_{g'}\Sigma_{0,g'\to g}\phi_{0,g'} + s_g, & (20) \\ \frac{1}{3}\frac{d\phi_{0,g}}{dx} + \Sigma_g\phi_{1,g} &= \sum_{g'}\Sigma_{1,g'\to g}\phi_{1,g'} & (21) \end{aligned}$$

これらの式から多群の中性子拡散方程式を得るためには、以下の近似が必要となる。

$$\sum_{g'}\Sigma_{1,g'\to g}\phi_{1,g'} = \sum_{g'}\Sigma_{1,g\to g'}\phi_{1,g} \tag{22}$$

式 (22) を式 (21) に代入すると以下の式を得る。

$$\frac{1}{3}\frac{d\phi_{0,g}}{dx} + \Sigma_g\phi_{1,g} = \phi_{1,g}\sum_{g'}\Sigma_{1,g\to g'} \tag{23}$$

これより、g 群の ϕ_1 と ϕ_0 を関係づけることが出来、ϕ_0 のみからなる拡散方程式が導出される。この場合の拡散係数は以下のように定義されることになる。

$$D = \frac{1}{3\left(\Sigma_g - \sum_{g'}\Sigma_{1,g\to g'}\right)} \tag{24}$$

なお、式 (22) の近似は、Simplified P_N 法でも導入される近似であり、1 次元体系では Simplified P1 方程式は拡散方程式と一致する。

最後に、P_N 方程式における境界条件について整理する。

反射境界条件の場合、境界に入射する中性子と境界から放出される中性子は対称関係をもつ。すなわち、一次元平板体系の場合、反射境界上の角度中性子束 $\psi(\mu)$ は $\mu=0$ を軸として対称になる。従って、$\psi(\mu)$ を Legendre 展開した場合には、$\mu=0$ で対称となる偶数次の成分のみで記述されることになり、奇数次の成分の係数はゼロになる。

一方、真空境界条件の場合は事情が異なる（文献 [2]、p.181 以降を参照)。真空境界では真空から入射してくる中性子がないが、これを式で表示すると以下のようになる。

$$\psi(\mu)=0, \qquad 0<\mu\leq 1 \tag{25}$$

ここで真空境界が媒質の左側にあると仮定している。この関係を満たす $\psi(\mu)$ が Legendre 展開できるとした場合、全ての展開係数をゼロとしなければならない。これはすなわち、真空に放出される中性子（$-1\leq\mu\geq 1$ を向く中性子）もゼロとなることを意味し、物理的に妥当ではない。

P_N 法における真空境界の取り扱い方法はいくつかあるが、Marshak が提案した方法が一般的によく用いられているようである。Marshak の条件では、以下のように、奇数次の Legendre の多項式と角度束の積の内向きの角度についての積分をゼロとする。

$$\int_0^1 d\mu P_l(\mu)\psi(\mu)=0, \qquad l=1,3,...,L \tag{26}$$

この式の利点は $l=1$ の場合は

$$\int_0^1 d\mu\mu f(\mu)=0 \tag{27}$$

となり、真空境界から入射する正味の中性子の流れはないという条件を表していることである[1] 。

Marshak の境界条件を角度中性子束の Legendre 成分 ϕ_l で記述することを考える。式 (26) 中の $\psi(\mu)$ を Legendre 展開すると、以下のように書ける。

$$\int_0^1 d\mu P_l(\mu)\sum_{l'} P_{l'}(\mu)\phi_{l'}=\sum_{l'}\phi_{l'}\int_0^1 d\mu P_l(\mu)P_{l'}(\mu)=0, \qquad l=1,3,...,L \tag{28}$$

すなわち、L 次で展開次数を打ち切った計算をする場合、真空境界条件を表す式として真空境界面あたり (L-1)/2 本が得られることになる。

参考文献

[1] E.E.Lewis, W.F.Miller, Jr., Computational methods of neutron transport, American Nuclear Society.

[1] 文献 [2] には、「低次の P_L 近似では、Marshak の条件は Mark の条件よりも高い精度の解を与える」とある。これは、高次の P_L 近似では精度が悪化する、ということを意味するのであろうか？

[2] 小林啓祐、原子炉物理、コロナ社

[3] A.Yamamoto, "Utilization of discontinuity factor in integro-differential type of Boltzmann transport equation," *Proc. of Int. Conf. on Physics of Reactor, Physor2010*, Pittsburgh, Pennsylvania (2010).

A 多群計算時の S_N 法と P_N 法との相違点

連続エネルギーの１次元中性子輸送方程式を以下のように書く。

$$\mu\frac{d\psi(x,\mu,E)}{dx}+\Sigma(x,E)\psi(x,\mu,E)=s(E) \tag{29}$$

これから多群の輸送方程式を得る場合、全断面積 $\Sigma(x,E)$ の角度依存性が発生するのを防ぐため、左辺第二項の $\psi(x,\mu,E)$ を Legendre 展開して表示する。

$$\mu\frac{d\psi(x,\mu,E)}{dx}+\sum_l\Sigma(x,E)P_l(\mu)\phi_l(x,E)=s(E) \tag{30}$$

この形の輸送方程式を多群化すると、以下のように書ける。

$$\mu\frac{d\psi_g(x,\mu)}{dx}+\sum_l\Sigma_{g,l}(x)P_l(\mu)\phi_{l,g}(x)=s_g \tag{31}$$

ここで、$\Sigma_{g,l}$ は、以下の式で定義される、角度中性子束の l 次成分で縮約した g 群の全断面積である。

$$\Sigma_{g,l}=\frac{\displaystyle\int dE\Sigma(E)\phi_l(E)}{\displaystyle\int dE\phi_l(E)} \tag{32}$$

さて、ここで、式 (31) を出発点として、P_N 法、S_N 法の式を考えてみる。

P_N 法では角度中性子束を Legendre 展開し、有限の次数 L で展開を打ち切る。式 (31) 左辺の第二項はすでに展開されて記述されているが、この項は L 次まで考慮されることになる。逆に言うと、$L+1$ 次以上の $\Sigma_{g,l}\phi_{l,g}$ が無視されることになる。

一方、S_N 法では左辺第二項における群全断面積が l に依存しており、このままでは簡単に解くことは出来ない。そこで、左辺第２項を右辺に移し、両辺に $\Sigma_{0,g}\psi_g$ なる項を加える（Consistent P 近似）。すると、

$$\mu\frac{d\psi_g(x,\mu)}{dx}+\Sigma_{g,0}(x)\psi_g(x,\mu)=\Sigma_{g,0}(x)\psi_g(x,\mu)-\sum_l\Sigma_{g,l}(x)P_l(\mu)\phi_{l,g}(x)+s_g \tag{33}$$

と書ける。さらに、右辺第一項の ψ を Legendre 展開して整理すると、

$$\mu\frac{d\psi_g(x,\mu)}{dx}+\Sigma_{g,0}(x)\psi_g(x,\mu)=\sum_l P_l(\mu)\left(\Sigma_{g,0}(x)-\Sigma_{g,l}(x)\right)\phi_{l,g}(x)+s_g \tag{34}$$

と書ける。この右辺第一項を L 次までで打ち切った場合、S_N 法では $L+1$ 次以上の $(\Sigma_{g,0}-\Sigma_{g,l})\phi_{l,g}$ が無視されることになる。一般に、S_N 法における右辺第一項の打ち切り次数は、散乱断面積の Legendre 多項式打ち切り次数と連動している。