Sn 法に用いる角度求積セットの数値積分精度 (2)*

千葉豪

平成 29 年 1 月 26 日

離散座標法に基づく中性子や光子の輸送計算では、散乱に非等方性がある場合、一般的には角度微分散乱断面積は散乱角余弦に対する Legendre 関数形式で与えられることから、散乱源の計算では、角度中性子束の Legendre モーメント（１次元の場合)、もしくは球面調和関数モーメント（多次元の場合）を角度求積公式により求めるという手続きがとられる。原子炉内やその周りに関してはこのような手続きで問題ないが、例えば海水中の光の輻射問題など散乱の前方性が極めて強い場合には、散乱源の計算は直接角度中性子束を用いて行われる [1]。

散乱源を角度中性子束から直接計算する場合には、ある角度離散メッシュからある角度離散メッシュへの散乱確率を陽に与える必要がある。角度 $\mathbf{\Omega}$ を極角 θ と方位角 ϕ で記述し、極角の余弦を $\mu = \cos\theta$ とする。このとき、全球面を有限のメッシュで分割し、角度離散メッシュ(p,q) を $[\mu_{p^-},\mu_{p^+}]$、$[\phi_{q^-},\phi_{q^+}]$ として定義するならば、角度離散メッシュ(p,q) から (p',q') への（平均）散乱確率 $\langle f\rangle_{p,q}^{p',q'}$ は以下のように計算される [1]。

$$\langle f\rangle_{p,q}^{p',q'} = \frac{\int_{\mu_{p^-}}^{\mu_{p^+}} d\mu \int_{\phi_{q^-}}^{\phi_{q^+}} d\phi \int_{\mu_{p'^-}}^{\mu_{p'^+}} d\mu' \int_{\phi_{q'^-}}^{\phi_{q'^+}} d\phi' f(\mathbf{\Omega}'\cdot\mathbf{\Omega})}{\int_{\mu_{p^-}}^{\mu_{p^+}} d\mu \int_{\phi_{q^-}}^{\phi_{q^+}} d\phi \int_{\mu_{p'^-}}^{\mu_{p'^+}} d\mu' \int_{\phi_{q'^-}}^{\phi_{q'^+}} d\phi'} \tag{1}$$

この計算は数値的に行われるが、相応の計算量となる模様である [1]。また、各々の角度離散メッシュの定義域を陽に考える必要があることになろう。

一方、これとは別に、角度離散メッシュ間の散乱確率を、離散メッシュの代表離散方向を用いて定義する方法がある。この場合、ある２つの角度離散メッシュがそれぞれ離散方向 $\mathbf{\Omega}'$、$\mathbf{\Omega}$ で代表されるとするならば、この２つの角度離散メッシュ間の平均散乱確率を以下のように与える。

$$\langle f\rangle = f(\mathbf{\Omega}'\cdot\mathbf{\Omega}) \tag{2}$$

この方法は、角度離散点と重みが与えられる角度求積公式と親和性が良いと考えられる。

本稿は、後者の方法について考察するものである。

ある角度 $\mathbf{\Omega}'$ をもつ中性子（ガンマ線も含むが以下このように記述する）の散乱を考える。角度 $\mathbf{\Omega}$ への散乱確率 $f(\mathbf{\Omega}',\mathbf{\Omega})$ は散乱角余弦 $\mu = \mathbf{\Omega}'\cdot\mathbf{\Omega}$ のみに依存するため、以下の式が成り立つ。

$$f(\mathbf{\Omega}',\mathbf{\Omega})d\mathbf{\Omega} = -f(\mu)d\mu d\phi \tag{3}$$

また、$f(\mu)$ は以下のように Legendre 多項式で記述されるものとする。

$$f(\mu) = \sum_l a_l P_l(\mu) \tag{4}$$

*/Document/Study/SnQuad_nonSPH/

さて、ある角度 $\mathbf{\Omega}_i$ からの散乱角余弦の Legendre モーメントは a_l として与えられるが、角度を離散化した場合にはそれが再現される保証はなく、数値計算誤差として顕れることになる。従って、離散座標法に基づく中性子輸送計算においては、角度求積セットの散乱角 Legendre モーメントの計算精度が重要となる。離散角度 $\mathbf{\Omega}_i$ からの散乱についての散乱角余弦の l 次の Legendre モーメントは角度求積セットを用いて以下のように近似的に計算される。

$$\begin{aligned}\int_{4\pi} P_l(\mathbf{\Omega}_i\cdot\mathbf{\Omega})f(\mathbf{\Omega}_i,\mathbf{\Omega})d\mathbf{\Omega} = \sum_{l'} a_{l'}\frac{4\pi}{2l+1}\delta_{ll'} &= \int_{4\pi} P_l(\mathbf{\Omega}_i\cdot\mathbf{\Omega})\left(\sum_{l'} a_{l'}P_{l'}(\mathbf{\Omega}_i\cdot\mathbf{\Omega})\right)d\mathbf{\Omega} \\ &\approx \sum_{l'} a_{l'}\sum_j w_j P_l(\mathbf{\Omega}_i\cdot\mathbf{\Omega}_j)P_{l'}(\mathbf{\Omega}_i\cdot\mathbf{\Omega}_j) \end{aligned} \qquad (5)$$

そこで、角度求積セットの積分精度を示す指標として $\epsilon_{l,l'}$ を以下のように定義する。

$$\epsilon_{l,l'} = \max_i \left| \sum_j w_j P_l(\mathbf{\Omega}_i\cdot\mathbf{\Omega}_j)P_{l'}(\mathbf{\Omega}_i\cdot\mathbf{\Omega}_j) - \frac{4\pi}{2l+1}\delta_{ll'} \right| \qquad (6)$$

なお、この積分精度は、$\mathbf{\Omega}_i$ を基準方向にとった球面調和関数 Y_{lm} に関する Y_{l0} と $Y_{l'0}$ の直交性に対する積分精度に対応する。従って、ここでの議論は既報 [2] のものをそのまま適用できることになる。

以降では $\epsilon_{l,l'}$ についてのいくつかの角度求積セットに関する計算結果を示す。なお、以降で示す結果は既報 [2] と整合する。

はじめに、Level symmetric セットの結果を **Fig. 1** に示す。なお、横軸の数値は $l+1$、縦軸の数値は $l'+1$ にそれぞれ対応する（以降の図も同様）。LS4 の結果では $\epsilon_{0,l'}$ については $l' < 6$ までは積分精度が良好である。これは、散乱確率の角度依存性が 6 次以上の Legendre 展開で記述される場合には、散乱確率の 0 次の Legendre モーメントが正確に計算されないこと、すなわち散乱による中性子の保存が担保されないことを意味する。このような場合には、角度メッシュ間の散乱確率の規格化等を行う必要がある。

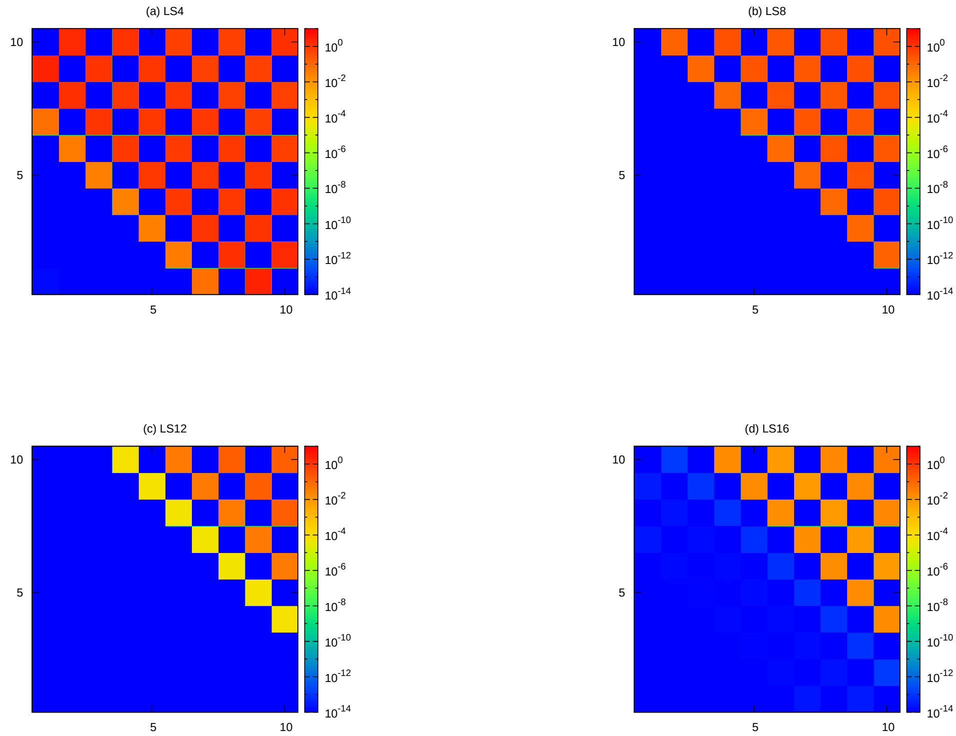

Fig. 1: Reproduction error of orthgonality of the Legendre polynomials by the Gauss-Legendre quadratures with different order

次に、Even-Odd セットの結果を **Fig. 2** に示す。Level symmetric セットと比べて積分精度が劣るが、この理由は既報 [2] で示しているので省略する。

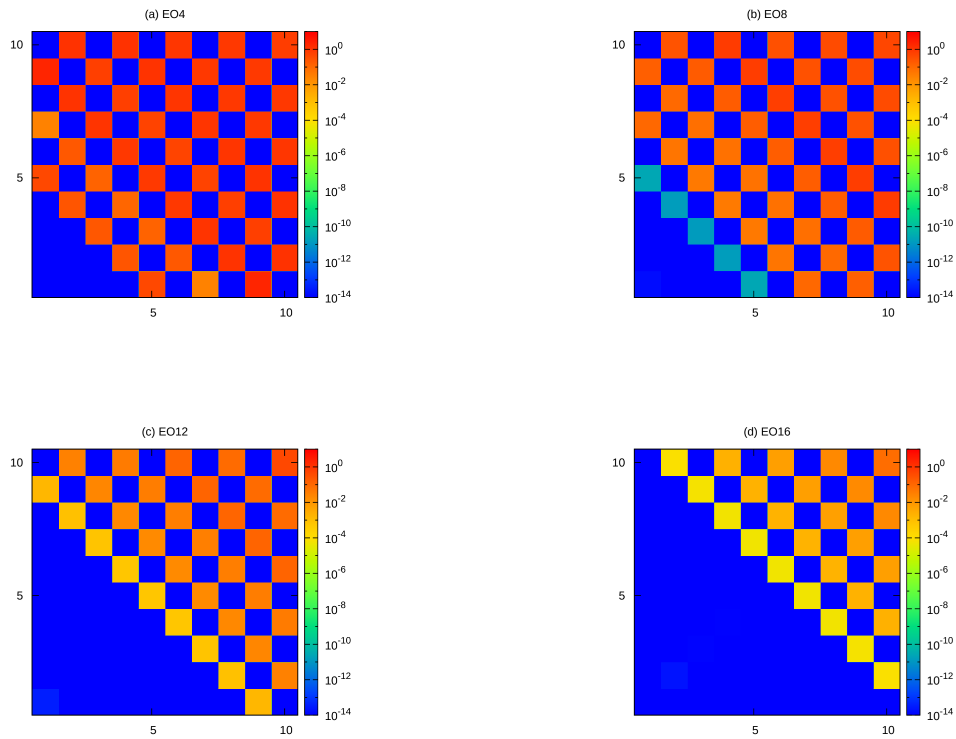

Fig. 2: Reproduction error of orthgonality of the Legendre polynomials by the Even-Odd moment quadratures with different order

最後に、Lebedev 型の結果を **Fig. 3** に示す。「Precision 7」「Precision 15」の離散点数はそれぞれ 26、86 となっており、それぞれ LS4/EO4（離散点数 24）、LS8/EO8（同 80）と同程度であるが、積分精度が良好であることが分かる。

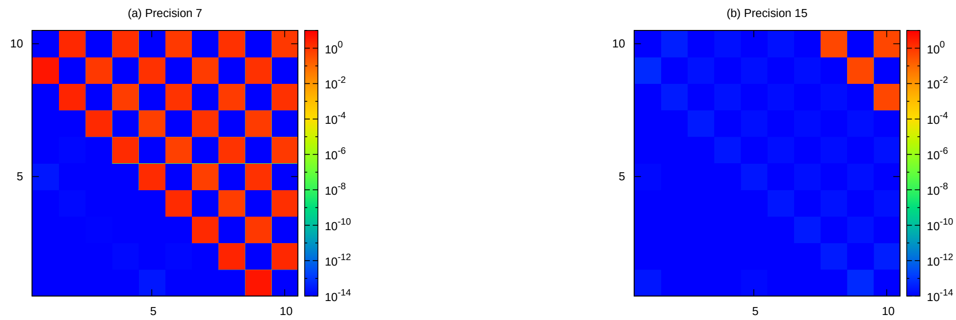

Fig. 3: Reproduction error of orthgonality of the Legendre polynomials by the Lebedev-type quadratures with different order

参考文献

[1] R. Sanchez, N.J. McCormick, "Discrete ordinates solutions for highly forward peaked scattering," *Nucl. Sci. Eng.*, **147**, p. 249-274 (2004).

[2] 千葉豪、「Sn 法に用いる角度求積セットの数値積分精度」.