

# ボルツマン輸送方程式の数値積分による 中性子平板問題の解析

竹内 清\*・片岡 巖\*

## A Numerical Integration Method of the Neutron Transport Equation in Slab Geometry

By

Kiyoshi Takeuchi and Iwao Kataoka

The EOS method for the direct numerical integration of the time independent Boltzmann transport equation in slab geometry has been developed. The EOS-2 code is prepared for the NEAC 2206 computer for calculation of neutron penetration problems.

This paper presents the treatment of mathematical procedures of neutron problems and some results of practical neutron penetration problems intending the description to be self contained. From a comparison of neutron spectra obtained by the EOS-2 code with one from the moments, this method seems to provide a correct treatment of neutron attenuation in a slab. The calculation of angular spectra of neutrons with  $0^\circ$  angle in water agrees well with the measurement of the Bulk Shielding Reactor 1. The calculated neutron spectrum in polyethylene layers disagrees with the measurement in USSR at deep penetrations. This may be attributed in part to the difference in calculational and experimental angular distribution of source. As an example of double layer problem energy spectra in a beryllium oxide—water layer with plane isotropic fission source is illustrated.

### 目 次

1. まえがき	4.5. 単一エネルギー単一方向問題の計算
2. 基礎方程式	4.6. EOS-2 コードの容量
2.1. ボルツマン輸送方程式	4.7. 比較すべき実験結果の不足
2.2. 散乱項の計算	4.8. 計算に使用する物質データの不足
2.3. 輸送方程式の積分	附録A 基礎式の導出
2.4. 計算方法	附録B マトリックス $B_{qk}^{ji}(x, \omega)$ の計算
3. 計算結果及び他の結果との比較	附録C 定理の証明
4. 考察及び結論	附録D 条件1のマトリックス $\phi_{pk}^{ii}$ の計算
4.1. 中性子束の減衰計算	附録E 条件3のマトリックス $\phi_{pk}^{ii}$ の計算
4.2. 中性子の角度スペクトルの計算	附録F 条件4のマトリックス $\phi_{pk}^{ii}$ の計算
4.3. 多重層遮蔽体に対する中性子透過計算	附録G マトリックス $T_{ok}^{ji}$ の計算
4.4. 非弾性散乱過程を含む計算	附録H 輸送方程式の積分

\* 原子力船部

## 1. まえがき

多重層遮蔽体に対する中性子の透過問題の厳密な計算理論を開発することは、遮蔽設計計算上極めて重要なことである。現在、中性子の厳密な計算理論として2通りの方法がある。その1つはボルツマン輸送方程式を数値解法で解く方法であり、もう1つはモンテカルロ法である。前者の解法として、これまでに開発されている方法に NIOBE<sup>1)2)</sup>とカールソンの Sn 法<sup>3)</sup>の遮蔽計算への適用がある。NIOBE は球対称形状遮蔽体に対する解法であり、計算に使用され成果を上げている。Sn 法適用の遮蔽計算コードも幾つか作られ計算に使用されているが、弾性散乱の取り扱いが簡単になされ、水素以外の元素の弾性散乱は等方散乱を仮定している。しかし最近になって、水素以外の元素の弾性散乱を非等方として扱った(3度ないし6度のルジャンドル展開近似)コードも作られている<sup>4)</sup>。今までのところモンテカルロ法も含めて、これらの理論はいずれも中性子透過問題に対し、決定的な理論ではない。むしろ現在は研究発展の段階であろう。

我々は先に定常状態の多重層板形状遮蔽体に対する、ボルツマン輸送方程式を数値積分で解き、中性子またはガンマ線束を求める方法として EOS 法を開発した。すでにガンマ線計算コード EOS-1 は NEAC 2206 計算機用に作られている。これについては計算結果と共に報告した<sup>5)6)</sup>。今回中性子計算コード EOS-2<sup>7)</sup> が NEAC 2206 計算機に対して作られ、中性子の透過計算を行った結果良好な結果を得たので報告する。この報告では中性子に対する理論の取り扱い、計算方法ならびに計算結果について述べる。特に理論は附録で詳細に計算することによって、他の参考文献を調べるわずらわしさを取り除いた。

中性子束ならびに弾性散乱による角度分布関数は共にルジャンドル展開近似し、散乱過程は弾性散乱と非弾性散乱の両過程を考慮する。この両散乱過程の理論の扱いは、モーメント法及び NIOBE に適用されている Certaine 等の開発した理論を適用する。非弾性散乱は等方散乱を仮定する。ボルツマン輸送方程式の積分は EOS-1 のガンマ線の場合と同様に直接積分で求める。

計算結果の他の結果との比較は計算、実験両面について行った。他の計算結果として、モーメント法による核分裂中性子のカーボン媒質透過計算との比較、実験結果として、BSR-1 における炉心からの中性子の

(368)

水中角度スペクトル、およびソ連における炉心からの速中性子のポリエチレン層透過実験との比較を行った。これらの結果 EOS 法は厳密な中性子透過計算に有効な理論であることがわかった。なお多重層透過計算例として、酸化ベリリウム-水2重層に対する核分裂中性子の透過計算を行った。

## 2. 基礎方程式

板形状の遮蔽体内における定常状態のボルツマン輸送方程式をたて、この式を計算機で解くのに適した形に変形する。そのために積分項を数値積分で処理できるように、中性子束や弾性散乱による角度分布関数をルジャンドル展開し、また非弾性散乱による減速核を簡単な関数で近似する。最後に輸送方程式を差分の形で表わし繰り返し計算(iteration)法で解を求める。

### 2.1 ボルツマン輸送方程式

定常の中性子輸送方程式は次の様である。

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \Omega N + \mu_T(x, E)N = \sum_i \int \int N(x, E', \Omega') \mu_i(x) \\ \times \sigma_i(\Omega' \rightarrow \Omega, E' \rightarrow E) dE' d\Omega' \\ + S(x, E, \Omega) \end{aligned} \quad (1)$$

ここで  $i$  についての和は物質中に含まれる各元素についてとる。以後の議論では中性子と物質との相互作用は、弾性散乱と非弾性散乱の両散乱過程と吸収過程とする。核分裂反応は考慮しない。実際の遮蔽計算ではこれで十分である。(1)式はエネルギー  $E$  よりも中性子レサジ  $u$  について書き表わした方が便利である。本報告では中性子レサジ  $u$  を逆符号にとって次の様に定義する。

$$u = \ln \frac{E}{E_0}$$

ここで  $E_0$  は求める中性子の最小エネルギーを示す。形状を平板とし附録Aにより(1)式を次の様に書き直す。

$$\omega \frac{\partial N}{\partial x} + \mu_T(x, u)N = F[N; x, \omega, u] \quad (2)$$

ここで

$$\begin{aligned} F[N; x, \omega, u] = F_{el}[N; x, \omega, u] \\ + F_{in}[N; x, \omega, u] + S(x, \omega, u) \end{aligned} \quad (3)$$

$$\begin{aligned} F_{el}[N; x, \omega, u] \\ = \sum_i \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 \mu_i(x) \sigma_{el, i}(u') f_i(u', \mu) e^{u'-u} \\ \times N(x, \omega', u') d\mu d\phi \end{aligned} \quad (4)$$

ただし、

$$u' = u + \ln \frac{1+2\rho+\rho^2}{1+2\rho\mu+\rho^2} \quad (5)$$

$$\begin{aligned} F_{in}[N; x, \omega, u] \\ = 2\pi \sum_i \int_u^{\infty} \int_{-1}^1 n_i(x) \sigma_{in, i}(u') \frac{g_i(u', u)}{4\pi} \\ \times N(x, \omega', u') E_0 e^{u'} d\omega' du' \end{aligned} \quad (6)$$

散乱による角度変化の間には次式で示す関係がある。

$$\omega' = \omega\alpha + \sqrt{1-\omega^2} \sqrt{1-\alpha^2} \cos \phi$$

また実験室系の散乱角  $\alpha$  と重心系の散乱角  $\mu$  との間には次の関係がある。

$$\alpha = \frac{\mu + \rho}{\sqrt{1+2\rho\mu+\rho^2}} \quad (8)$$

上式では非弾性散乱過程の散乱は等方であると仮定したが、現在の知識ではこれで十分である。将来非弾性散乱過程の散乱の非等方に関する十分なデータが得られるならば、この部分は改訂する。

## 2.2 散乱項の計算

(4)式、(6)式の積分を和の形で近似するために中性子束  $N(x, \omega, u)$  と散乱角度分布関数  $f(u, \mu)$  をルジャンドル展開する。

$$N(x, \omega, u) = \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{4\pi} N_l(x, u) P_l(\omega) \quad (9)$$

$$f(u, \mu) = \sum_{p=0}^P \frac{2p+1}{4\pi} f_p(u) P_p(\mu) \quad (10)$$

ここで  $L, P$  は与えられる常数である。

(9)式における展開係数  $N_l(x, u)$  は文献(6)と同じ方法で次の様に表わすことができる。

$$\begin{aligned} N_l(x, u) &= 2\pi \int_{-1}^1 N(x, \omega, u) P_l(\omega) d\omega \\ &= \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{q=1}^{2Q} a_{lq} N(x, \omega_q, u) \end{aligned} \quad (11)$$

ここで

$$a_{lq} = (2l+1) a_q P_l(\omega_q)$$

ここで、 $\omega_q$  は  $P_{2Q}(\omega) = 0$  の根であり、 $a_q$  は(11)式の積分をガウス近似した時の係数で、文献(9)に  $2Q \leq 16$  まで表の形で与えられている。

(11)式と(9)式から  $N(x, \omega, u)$  は次の様になる。

$$N(x, \omega, u) = \sum_{l=0}^L \sum_{q=1}^{2Q} a_{lq} N(x, \omega_q, u) P_l(\omega) \quad (12)$$

問題のエネルギー依存については、レサジについて等間隔  $h$  で  $(J-1)$  個のグループに分けることによって処理する。したがって(5)式は次の(5')式に書くことができる。

$$u' = u + kh \quad (5')$$

### 2.2.1 弾性散乱項の計算

弾性散乱項(4)式は文献(1), (11), (12)または附録B, C等を参照して、レサジ  $u_j$  について次の和の形で求められる。

$$\begin{aligned} F_{ei}[N; x, \omega, u_j] \\ = \sum_i \sum_{k=0}^{N_i+1} \sum_{q=1}^{2Q} B_{qk}^{ji}(x, \omega) N(x, \omega_q, u_j + kh) \end{aligned} \quad (13)$$

ここで、

$$N_i \equiv \text{最小} \left\{ \left[ \frac{2}{h} \ln \left( \frac{1+\rho_i}{1-\rho_i} \right) \right], J-j \right\}$$

であり、[ ] はガウス記号である。

$B_{qk}^{ji}(x, \omega)$  は附録Bより次の和の形で求まる。

$$B_{qk}^{ji}(x, \omega) = \sum_{l=0}^L a_{lq} P_l(\omega) \Psi_{lk}^{ji}(x). \quad (14)$$

ここで

$$\Psi_{lk}^{ji}(x) = n_i(x) \sigma_{el, i}^{j+k} \sum_{p=0}^P f_{p, i}^{j+k} \phi_{pk}^{li}, \quad (15)$$

$$\sigma_{el, i}^{j+k} \equiv \sigma_{el, i}(u_j + kh),$$

$$f_{p, i}^{j+k} \equiv f_{p, i}(u_j + kh).$$

また  $\phi_{pk}^{li}$  は附録Cの定理によって定まる。 $\phi_{pk}^{li}$  は散乱物質の性質により次の様に分けて計算する。

条件1 散乱物質が水素

条件2 散乱物質が非常に大きい原子量をもつ元素

条件3 散乱物質が中間の大きさの原子量をもつ元素

条件4 散乱物質が小さい原子量をもつ元素の場合  
1回の散乱での最大エネルギー損失  $2\ln\left(\frac{1+\rho}{1-\rho}\right)$   
が数レサジメッシュを越える

条件1では水素の原子量は1であるから、散乱は重心系で等方散乱である。したがって、散乱角度分布関数  $f(u', \mu) = \frac{1}{4\pi}$  である。よって  $f_p(u) = \delta_{p0}$  となる。 $\Psi_{lk}^{ji}(x)$  は次の様になる。

$$\Psi_{lk}^{ji}(x) = n_i(x) \sigma_{el, i}^{j+k} \phi_{pk}^{li} \delta_{p0}$$

水素についての  $\phi_{pk}^{li}$  の計算は文献(11)及び附録Dでなされている。

条件2では  $\rho=0$  と仮定できるから、(5)式で  $\rho=0$  とおいて  $u'=u$  を得る。これは中性子が散乱によってレサジ(したがってエネルギー)を変えないことを意味する。また(5')式から  $k=0$  を得る。また(8)式に  $\rho=0$  とおくことにより  $\alpha=\mu$  を得る。附録Cの定理で  $P_l(\alpha)$  を  $P_l(\mu)$  とおくことにより、次のルジャンドル多項式の関係から  $p=l$  となり  $f_p = f_l$  となる。

$$\frac{2l+1}{2} \int_{-1}^1 P_p(\mu) P_l(\mu) d\mu = \begin{cases} 1 & p=l \\ 0 & p \neq l \end{cases}$$

したがって  $\Psi_{ik}^{ji}(x)$  は次の様になる。

$$\Psi_{ik}^{ji}(x) = n_i(x) \sigma_{el,i}^{j+k} \sum_{l=0}^L f_{l,i}^{j+k} \delta_{lk}, 0$$

条件3における  $\Psi_{ik}^{ji}(x)$  は(15)式そのままである。 $\phi_{pk}^{li}$  の詳細な計算は文献(11)及び附録Eでなされている。

条件4における  $\Psi_{ik}^{ji}(x)$  は条件3と同様に(15)式で表わされる。 $\phi_{pk}^{li}$  の計算は  $l=0$  の場合、すなわち  $\phi_{pk}^{oi}$  を計算する方法は条件3と全く同じであるが、 $l>0$  の場合  $\phi_{pk}^{oi}$  から  $\phi_{pk}^{li}$  を計算する方法は条件3の場合と異なる。 $\phi_{pk}^{oi}$  から  $\phi_{pk}^{li}$  を計算する方法は附録Fに与えておく。

以上の結果から弾性散乱項は次の手順で計算できる。まず散乱物質の性質で定まる条件から  $\phi_{pk}^{li}$  を計算する。次に  $\phi_{pk}^{li}$  を知って(15)式より  $\Psi_{ik}^{ji}(x)$  が求まる。 $\Psi_{ik}^{ji}(x)$  が求まると(14)式により  $B_{qk}^{ji}(x, \omega)$  が計算され、最後に(13)式から弾性散乱項  $F_{el}[N; x, \omega, u]$  は求まる。

### 2.2.2 非弾性散乱項の計算

非弾性散乱項(6)式を計算するには、減速核  $g(u', u)$  を数値計算可能な簡単な関数で近似できればよい。 $g(u', u)$  は散乱物質の核の励起エネルギー準位に関係している。このエネルギー準位は非常に高いエネルギーでは、連続分布であるとみなしてもよい。今  $u_B$  をエネルギー準位が連続分布であるとみなせる最下位のエネルギー準位に相当する中性子のレサジとする。 $u_B$  より下のエネルギー準位は本来の不連続分布として取り扱う。したがって減速核  $g(u', u)$  は次の様に表わせる。

$$g(u', u) = \begin{cases} g_0(u', u) & u' \geq u_B \\ \sum a_i(u') \delta[u' - (u + u^w)] & u' < u' < u_B \end{cases} \quad (16)$$

ここで、 $g_0(u', u)$  は連続分布の関数を意味し、 $a_i(u')$  は減速核が不連続分布として取り扱われる場合、中性子がレサジ  $u' = u + u^w$  から  $u$  に減速される割合を意味する。 $u^w$  は散乱物質の核の基底状態と  $\nu$  番目のエネルギー準位に相当するレサジとのレサジ差である。また、 $g(u', u)$  の物理的な意味は次の関係から明らかである。

$$\int_0^{u'} g(u', u) du = \begin{cases} 1 & u' \geq u^1 \\ 0 & u' < u^1 \end{cases}$$

$g(u', u)$  を(16)式で表わし、文献(15)の方法を適用すると(6)式は中性子のレサジ  $u_j$  について次の(17)

(370)

式になる。

$$F_{in}[N; x, \omega, u_j] = \sum_i \sum_{k=0}^{J-j} \sum_{q=1}^{2Q} C_{qk}^{ji}(x, \omega) N(x, \omega_q, u_j + kh) \quad (17)$$

ここで  $C_{qk}^{ji}(x, \omega)$  は附録Gにより次の積の形で求まる。

$$C_{qk}^{ji}(x, \omega) = n_i(x) a_{oq} T_{ok}^{ji}$$

したがって非弾性散乱項は  $N(x, \omega_q, u_j + kh)$  を既知であるとすれば、 $T_{ok}^{ji}$  を計算することにより  $C_{qk}^{ji}$  が求まり、最後に(17)式から計算できる。

ここで  $i$  について次の和をとれば

$$A_{qk}^j = \sum_i (B_{qk}^{ji} + C_{qk}^{ji})$$

散乱項の積分は次の様に書くことができる。

$$F_{el} + F_{in} = \sum_k \sum_{q=1}^{2Q} A_{qk}^j N(x, \omega_q, u_j + kh) \quad (18)$$

ここで  $K$  は、媒質が水素元素または非弾性散乱断面積を持つ元素を含む場合は  $J-j$  であり、その他の場合は各元素の  $(N_i+1)$  のうち最大値  $(N_i+1)$  となる。

### 2.3 輸送方程式の積分

前節で散乱項が求まると輸送方程式(2)の右辺はただちに計算できる。(2)式を中性子レサジ  $u_j$  について書くと(19)式になる。

$$\omega \frac{\partial}{\partial x} N(x, \omega, u_j) + \mu_T(x, u_j) N(x, \omega, u_j) = F[N; x, \omega, u_j] \quad (19)$$

(19)式は文献(6)の(10)式と全く同じ形であるから同じ様に解くことができる。すなわち、 $F[N; x, \omega, u_j]$  は  $x$  について  $x_{s-1}, x_s$  間で1次関数で表わされると仮定する。(19)式は簡単に積分できて、その最終式は次の(20)式になる。詳細な計算は附録Hに与えておく。

$$N^{(n+1)}(x_s, \omega_q, u_j) = \exp(-\gamma_{sq}^j) N^{(n)}(x_{s-1}, \omega_q, u_j) + \alpha_{sq}^j F[N^{(n)}; x_s, \omega_q, u_j] + \beta_{sq}^j F[N^{(n)}; x_{s-1}, \omega_q, u_j], \quad (20)$$

ここで

$$\alpha_{sq}^j = \frac{ds}{\omega_q} \cdot \frac{\{\gamma_{sq}^j + \exp(-\gamma_{sq}^j) - 1\}}{(\gamma_{sq}^j)^2},$$

$$\beta_{sq}^j = \frac{ds}{\omega_q} \cdot \frac{\{1 - (1 + \gamma_{sq}^j) \exp(-\gamma_{sq}^j)\}}{(\gamma_{sq}^j)^2},$$

$$\gamma_{sq}^j = \frac{\mu_T(x_s, u_j) ds}{\omega_q},$$

$$ds = xs - xs_{-1}.$$

上式における  $N^{(n)}$  は  $n$  回目の繰り返し計算での  $N(xs, \omega_q, u_j)$  の値を示す。

## 2.4 計算方法

(20)式を計算機で計算する方法は文献(6)に述べられている方法と全く同様に行なえばよい。すなわち初めに、求める中性子の最大レサジにおける中性子束を計算する。これには  $F[N^{(0)}; xs, \omega_q, u_j]$  を適当に仮定し、既知である境界条件

$$N(0, \omega, u_j) \quad 0 < \omega \leq 1$$

$$N(A, \omega, u_j) \quad -1 \leq \omega < 0$$

のうちどちらか、例えば  $x=0$  におけるある  $\omega_q$  ( $0 < \omega_q \leq 1$ ) の値  $N(0, \omega_q, u_j)$  を初期値として(20)式から  $x$  について  $x=A$  まで順に求める。もし  $0 < \omega_q \leq 1$  の範囲の全ての  $\omega_q$  に対して上の手順がとられたら、次いで  $-1 \leq \omega_q < 0$  の全ての  $\omega_q$  について  $x=A$  における値  $N(A, \omega_q, u_j)$  を初期値として  $x=0$  まで(20)式から順に求めていく。これで1繰り返し計算終了となるが、もし次の収斂判定条件を満足しなければ満足するまで繰り返し計算を行う。

$$\max_{xs, \omega_q} \left| 1 - \frac{N^{(n+1)}(xs, \omega_q, u_j)}{N^{(n)}(xs, \omega_q, u_j)} \right| < \varepsilon$$

ここで  $\varepsilon$  は収斂判定条件である。

上の収斂判定条件を満足すれば、この時の  $N^{(n+1)}(xs, \omega_q, u_j)$  を中性子レサジにおける計算結果として、次のレサジにおける中性子束計算に移っていく。

実際の計算コードでは、(20)式は収斂加速係数  $\chi$  を用いて次式の様になる。

$$\begin{aligned} N^{(n+1)}(xs, \omega_q, u_j) = & \chi \{ \exp(-\gamma_{sq}^j) N^{(n+1)}(xs_{-1}, \omega_q, u_j) \\ & + \alpha_{sq}^j F[N^{(n)}; xs, \omega_q, u_j] \\ & + \beta_{sq}^j F[N^{(n)}; xs_{-1}, \omega_q, u_j] \} \\ & + (1-\chi) N^{(n)}(xs, \omega_q, u_j) \quad (21) \end{aligned}$$

(21)式は EOS-2 コード<sup>7)</sup>として NEAC 2206 計算機用にコード化されている。

## 3. 計算結果及び他の結果との比較

他の理論による計算結果との比較、及び実験結果との比較は次の順序で行う。

第1にモーメント法の計算結果<sup>16)</sup>と比較するために、カーボン媒質中の核分裂線源による中性子透過問題を計算した。線源は板形状核分裂線源とし、線源の角度分布は等方分布と仮定する。線源の強さは1中性子/秒-MeV-cm<sup>2</sup>にとる。カーボン媒質の厚さはEOS計算では80 g/cm<sup>2</sup>であり、モーメント法は無限媒質

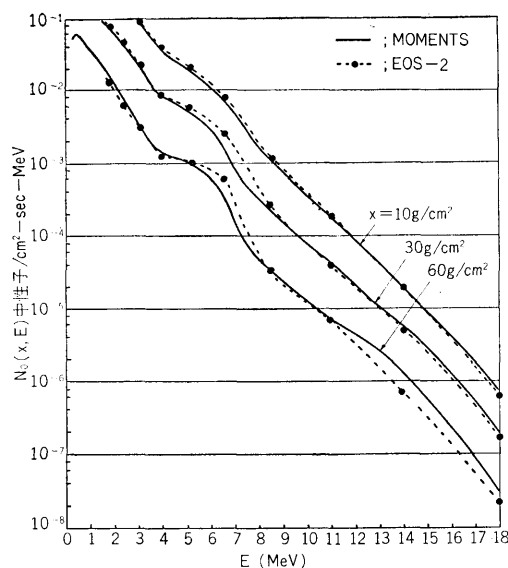


図-1 中性子スペクトル  
媒質; カーボン 線源; 板形状核分裂等方線源

である。図-1に両方法の計算結果として、横軸のエネルギーについて  $10 \text{ g/cm}^2$ ,  $30 \text{ g/cm}^2$ ,  $60 \text{ g/cm}^2$  の距離における速中性子スペクトルを示す。実線はモーメント法による結果であり、点線はEOS法による計算結果である。両スペクトルは極めて良く一致している。中性子エネルギーが6,7 MeV附近でEOS法によるスペクトルは大きな変化を示しているが、ソ連で行なわれた実験結果(原子炉からの中性子のカーボン媒質透過スペクトル)でも中性子スペクトルはこのエネルギー近傍で大きな変化を示している。

第2にBSR-1における水中の中性子角度スペクトルの実験結果<sup>17)</sup>と比較するために、炉心からの中性子の水媒質透過問題を計算した。実験はM. S. BokhariとV. V. Verbinskiによって行なわれ、BSR-1の炉心からの中性子束は水プール中でコリメートされた $\text{Li}^6\text{F}$ ダイオードスペクトロメータにより測定された。計算結果は実験結果と共に図-2に示してある。EOS計算における線源の中性子スペクトルは図-2で0 cmと記してある実験による中性子スペクトルと一致させた。この点での中性子スペクトル測定値は、BSR-1の炉心面の中心で、炉心面に垂直方向の成分である。計算では線源の角度分布は等方分布であると仮定した。EOS計算での水層の厚さは50 cmにとった。図-2に示してある中性子角度スペクトルは測定角度を炉心面に垂直方向にとった場合である。他の角度について

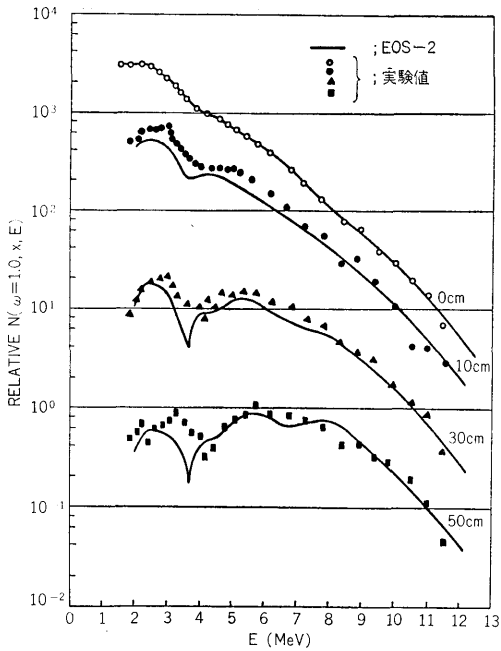


図-2 中性子角度スペクトル  
媒質; 水 線源; BSR-1 の炉心

も中性子スペクトルは計算されているが、EOS 法では線源が無限平板であるのに対し炉心面は有限平板である。両者の線源は幾可形状が異なっているため、求めた中性子角度スペクトルは実験結果と比較できない。図-2 からわかるように、両スペクトルは中性子の高エネルギー領域で極めて良い一致を示している。計算によるスペクトルは 3.5 MeV 附近で急激な減衰を示しているが、これは水中の酸素原子が 3.5 MeV 附近で大きな吸収断面積を持つためである。実験によるスペクトルはこの減衰の位置が、高エネルギー側にずれて 4 MeV 近傍にある。また実験では使用した測定器が有限の分解能を持つため、急激なピークあるいは減衰はなめらかに測定されている。

第3に3連において、ポリエチレン媒質中の速中性子スペクトル<sup>18)</sup>が原子炉からの核分裂中性子を用いて測定されている。この実験によるスペクトルと比較するために、厚さ 70 g/cm<sup>2</sup> のポリエチレン層における中性子透過問題を計算した。実験は原子炉からの中性子を広角のコリメータをもつシンチレーションスペクトロメータで測定している。実験結果と EOS 計算結果は図-3 に示してある。実線が EOS 計算の結果である。EOS 計算における線源は図-3 で 0 g/cm<sup>2</sup> と

(372)

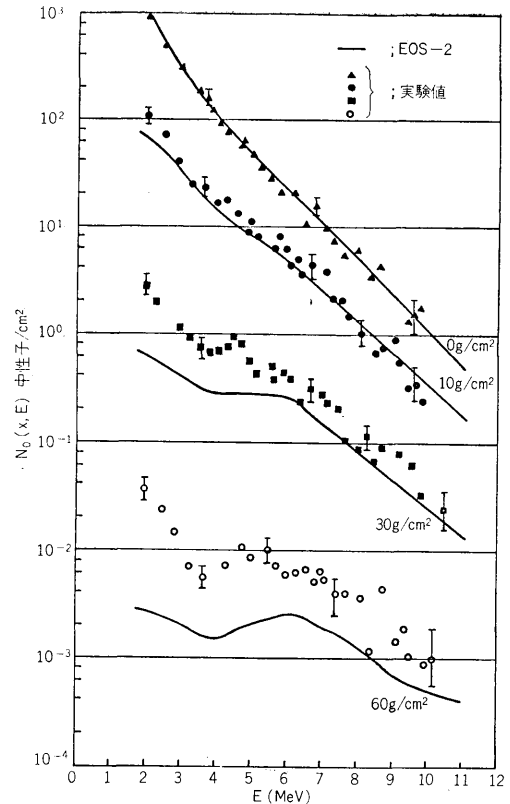
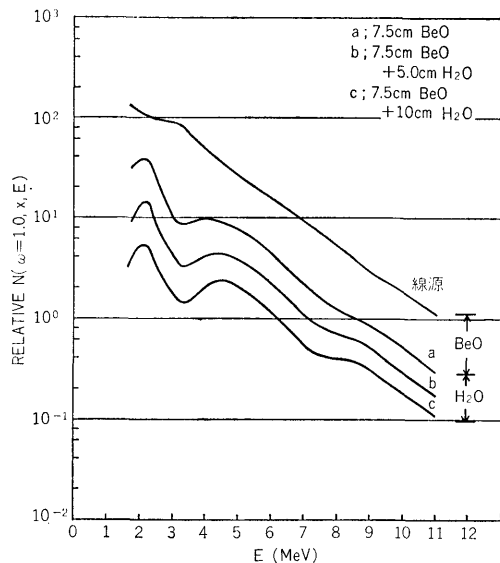


図-3 中性子スペクトル  
媒質; ポリエチレン 線源; 原子炉からの核分裂線源

記してある測定値と一致させた。また計算における線源の角度分布は線源平面に垂直 ( $\omega_0=1.0$ ) 方向の単一方向分布と仮定した。計算結果は 10 g/cm<sup>2</sup> の距離では測定値と極めて良く一致した。しかし距離が大きくなるに従って、計算スペクトルは測定スペクトルよりもかなり低く出ている。60 g/cm<sup>2</sup> の距離で 2 MeV のエネルギーの点では、計算結果は実験結果よりも、およそ 1 桁余り小さい。それにもかかわらず、両スペクトルの形は同じ傾向を示している。すなわち、距離が大きくなるに従ってスペクトルはハードニングを示している。計算結果が実験値と一致しない原因は計算における線源の角度分布の仮定に問題があるように思う。

最後に多重層問題の計算例として、酸化ベリリウム (7.5 cm 厚) — 水 (10 cm 厚) 2 重層媒質に対する核分裂中性子の透過問題計算結果を図-4 に示す。線源のスペクトルは図-4 で線源と記してあるスペクトルで、線源の角度分布は  $\cos^2\theta$  分布を仮定した。酸化ベ



図—4 中性子の角度スペクトル  
 媒質; 酸化ベリリウム (7.5 cm)+水 (10 cm)  
 線源; 核分裂線源

リリウムの比重は  $2.82 \text{ g/cm}^3$  とした。図—4 に示してあるスペクトルは角度方向を前方方向 ( $\omega=1.0$ ) にとった中性子の角度スペクトルである。スペクトル a は酸化ベリリウム 7.5 cm の層を透過した時の中性子角度スペクトルであり、同じく b は酸化ベリリウム層透過後水層 5 cm を透過した時のスペクトルである。c は同じく酸化ベリリウム層の後水層 10 cm を透過した時のスペクトルである。スペクトルは 7~8 MeV 近傍で幾分減衰を示し、3 MeV 近傍及び 2 MeV 以下のエネルギーで大きな減衰を示す。このうち 7~8 MeV 近傍と 2 MeV 以下のエネルギーにおける減衰は、酸化ベリリウムと水に含まれる酸素の原子が 7.3 MeV 及び 1.6 MeV のエネルギーで大きな吸収断面積を持つことによる。3 MeV 近傍における減衰は酸素とベリリウムの両原子が、各々 3.5 MeV と 2.7 MeV 近傍のエネルギーで大きな吸収断面積を持つことによる。これとは逆に 2 MeV 近傍に大きなピークがあるが、これは酸化ベリリウムに含まれるベリリウム原子の非弾性散乱によって、高エネルギー中性子が減速されて、2 MeV 近傍以下の低エネルギー領域に中性子の蓄積が起きるためであろう。

#### 4. 考察及び結論

##### 4.1 中性子束の減衰計算

EOS-2 コードは中性子束の減衰計算を正確に行うことが、図—1 に示すモーメント法の計算結果と良い一致を示すことから明らかである。

##### 4.2 中性子の角度スペクトルの計算

EOS-2 コードは中性子の角度スペクトルの計算を予想されるように厳密に行うことが、図—2 に示す BSR-1 における実験結果と良い一致を示すことから推定される。しかし図—2 に示す中性子の角度スペクトルは角度が前方方向 ( $\omega=1.0$ ) のみであり、他の角度についての角度スペクトルに関しては結論を出すことができない。これは無限平板状の幾何形状に相当する線源による実験結果及び他の計算結果が、得られていないためである。

##### 4.3 多重層遮蔽体に対する中性子透過計算

EOS-2 コードは 図—4 に示す様に、多重層遮蔽体に対する中性子の透過計算を行うことができる。現在のところ、多重層遮蔽体についての信頼すべき実験結果及び他の計算結果が得られていないので、比較検討することはできない。

##### 4.4 非弾性散乱過程を含む計算

EOS-2 コードはベリリウム原子の様に明らかな非弾性散乱断面積を持つ物質に対しても、図—4 に示す様な計算結果を与えた。このことから非弾性散乱断面積を持つ物質に対して、EOS 法は有効に計算することが予想される。ただし引用可能な実測データが不足のため、比較検討は将来の課題である。非弾性散乱過程は中性子の高エネルギー領域で重要な要因となるから、計算は 18 MeV 程度の高エネルギー中性子から始めるべきである。しかし、EOS-2 コードはエネルギーメッシュの制限 (最大 10 エネルギーメッシュ) から計算は 11 MeV 近傍から始めた。幸いにもベリリウム原子の非弾性散乱断面積は、高エネルギー領域でも弾性散乱断面積に比べて  $1/2$  以下であるから、誤差は小さくてすむ。これに対し鉄の様に高エネルギー領域で両散乱断面積が同程度である場合は、18 MeV 程度の高エネルギー中性子から計算を始める必要がある。

##### 4.5 単一エネルギー単一方向問題の計算

EOS 法は単一エネルギー単一方向問題の計算に困難がある。これは EOS 法が線素をルジャンドル展開近似していることによる。この困難を取り除くため、新たに SELENE 法<sup>19)</sup>が開発されている。SELENE 法はガンマ線計算に適用され有効であることがわかった。中性子束計算に適用する計算コード MENE もすでに完成しよい結果を得ることが確かめられた。

#### 4.6 EOS-2 コードの容量

EOS-2 コードは記憶容量としてコア 4,000 語、磁気ドラム 10,000 語を有する NEAC 2206 計算機用に作ったので、計算条件の制限が特に狭くなった。特にエネルギーメッシュが最大 10 という制限は、速中性子を全領域にわたって計算することを不可能にする。物質が非弾性散乱断面積を持つ場合はなおさらである。したがって現 EOS-2 コードを非弾性散乱断面積を持つ問題の解法に適用するには無理がある。距離方向メッシュ数は計算時間の制限があるが、多ければ多いほどメッシュ間隔を小さくすることが出来るから、計算結果は厳密になる。この様な制限を大幅に緩和するため、現 EOS-2 コードは磁気コア 1 万語および磁気テープ 5 台を使用できるように作り直す予定である。

#### 4.7 比較すべき実験結果の不足

EOS-2 コードはまだ種々の面で実験結果と比較検討すべきである。しかし幾可形状の相違などにより、EOS 法の計算結果と比較するのに適したデータが少ない。

#### 4.8 計算に使用する物質データの不足

本計算に使用した物質の核データは文献(20)によるが、この文献に集められている核データはわずかに水素、リチウム、ベリリウム、炭素、酸素、シリコン、鉄、それにウラニウム 238 のみである。今後他の原子に関する核データを集める必要があるが、中性子に関する各原子の詳細な核データは将来の研究に期待する他ないであろう。特に非弾性散乱過程における散乱の取り扱い、EOS 法では等方散乱を仮定しているが、これは非弾性散乱における散乱角度分布に関するデータがほとんど得られていないためである。

##### [記号の説明]

$N(x, E, \Omega)$ : 位置  $x$  で単位エネルギー、単位立体角あたりエネルギー  $E$  をもつ中性子が  $\Omega$  方向へ進行し、 $\Omega$  方向に垂直な単位面積を単位時間に通過する数

$\mu_T(x, E)$ : 位置  $x$  でのエネルギー  $E$  の中性子に対する物質の巨視的全断面積  $\text{cm}^{-1}$

$n_i(x)$ : 物質に含まれる  $i$  番目の元素の原子密度、 $n_i(x) \times 10^{24}$  として取り扱う。

$\sigma_i(\Omega' \rightarrow \Omega, E' \rightarrow E)$ :  $i$  番目の元素による微分散乱断面積。エネルギー  $E'$  で進行方向  $\Omega'$  の中性子がエネルギー  $E$  で方向  $\Omega$  の単位エネルギー、単位立体角あたりに変化する確率

$S(x, E, \Omega)$ : 位置  $x$  で単位エネルギー、単位立体角あたり、エネルギー  $E$  をもち  $\Omega$  を進行方向とする中性子が単位体積あたり単位時間に生まれる数

$\omega$ :  $x$  方向と  $\Omega$  方向とのなす角の余弦

$F_{el}[N; x, \omega, u]$ : 位置  $x$  で弾性散乱により単位レサジ、単位立体角あたり、レサジ  $u$  をもち角度方向  $\omega$  の中性子が単位体積あたり単位時間に生ずる数。簡単のため弾性散乱項と呼ぶ。

$F_{in}[N; x, \omega, u]$ : 位置  $x$  で非弾性散乱により単位レサジ、単位立体角あたり、レサジ  $u$  をもち角度方向  $\omega$  の中性子が単位体積あたり単位時間に生ずる数。簡単のため非弾性散乱項と呼ぶ。

$\sigma_{el, i}(u)$ : レサジ  $u$  をもつ中性子に対する  $i$  番目の元素の微分弾性散乱断面積、パーセント

$\sigma_{in, i}(u)$ : レサジ  $u$  をもつ中性子に対する  $i$  番目の元素の微分非弾性散乱断面積、パーセント

$f_i(u, \mu)$ :  $i$  番目の元素の重心系における散乱角度分布関数

$$2\pi \int_{-1}^1 f_i(u, \mu) d\mu = 1$$

$\mu$ : 重心系における散乱角の余弦

$\phi$ : 散乱の方位角

$\rho$ : 元素の原子量の逆数、 $\rho = \frac{1}{M}$

$g_i(u', u)$ :  $i$  番目の元素による非弾性散乱の結果、レサジ  $u'$  の中性子がレサジ  $u$  における単位レサジ当りに変化する確率、簡単のため減速核と呼ぶ。

$$\int_0^{u'} g_i(u', u) du = 1$$

$\alpha$ : 実験室系における散乱角の余弦

$P_l(\omega)$ :  $\omega$  についての  $l$  度のルジャンドル多項式

$P_p(\mu)$ :  $\mu$  についての  $p$  度のルジャンドル多項式

$h$ : 組み分けのレサジ幅

$$h = \frac{1}{(J-1)} \ln \frac{E_J}{E_0}$$

$u_j$ :  $u_j$  を最大レサジとすると、 $(J-j+1)$  番目のレサジ

$P_l(\alpha)$ :  $\alpha$  についての  $l$  度のルジャンドル多項式



- $A$  :  $x=0$  から外側境界までの距離  
 $\omega_0$  : 中性子の入射方向と  $x$  方向とのなす角の余弦

【参考文献】

- 1) Preiser, S., Rabinowitz, G., de Dufour, E.; ARL-Tr-60-314 (1960)
- 2) Yetman, D., Eisenman, B., Rabionowitz, G.; NDA 2143-18 (1961)
- 3) Carlson, B., Lee, C., Worlton, J.; LAMS-2346 (1960)
- 4) ANS-SD-1, Neutron Attenuation in Optically Thick Shields (1963)
- 5) 片岡 巖, 竹内 清; J. Nucl. Sci. Tech. Vol. 2 No. 1 (1965)
- 6) 片岡 巖, 竹内 清; Papers of Ship Research Institute No. 6 (1965)
- 7) 竹内 清; EOS-2 コード使用法, 船研報告第 3 巻 2 号
- 8) Goldstein, H.; Fundamental Aspect of Reactor Shielding
- 9) Lowan, A. N., Davids, N., Levenson, A.; National Bureau of Standards, Applied Mathematics Series 37, 185 (1954)
- 10) Certaine, J.; NDA-15C-12 (1953)
- 11) Certaine, J.; NYO-6268 (1955)
- 12) Certaine, J., Mittelman, P. S.; NDA-10-161 (1955)
- 13) Whittaker, E. T., Watson, G. M.; Modern Analysis, Cambridge (1946)
- 14) Certaine, J.; Two Summation Theorems
- 15) Certaine, J., Brooks, J.; NDA-2015-92 (1956)
- 16) Krumbein, A. D.; NDA-92-2 (Rev) (1957)
- 17) Bokhari, M. S., Verbinski, V. V.; 28/p/670, Proc. Int. Conf. (1964)
- 18) IAEA Shielding Panel, Some Problems of Biological Shielding in Reactors (1964)
- 19) 片岡 巖; 船研報告, 3 巻 4 号。計算結果は片岡, 竹内により別に発表予定。
- 20) Goldstein, H.; Neutron Cross Sections for Neutron Attenuation Problem Proposed By The ANS Shielding Division (1963)

## 附録 A 基礎式の導出

形状を平板とし, レサジ  $u$  で (1) 式を書き直すと次式の様になる。

$$\begin{aligned} \omega \frac{\partial N}{\partial x} + \mu_T(x, u) N \\ = \sum_i \iint N(x, u', \Omega') n_i(x) \sigma_i(\Omega' \rightarrow \Omega, E' \rightarrow E) \\ \times E' du' d\Omega' + S(x, u, \Omega) \end{aligned} \quad (A-1)$$

(i) 弾性散乱過程

文献 (8) を参照して  $\sigma_i(\Omega' \rightarrow \Omega, E' \rightarrow E)$  は次の様に表わすことができる。

$$\begin{aligned} \sigma_i(\Omega' \rightarrow \Omega, E' \rightarrow E) \\ = \sigma_{ei, i}(u') f_i(u', \mu) \frac{(M_i+1)^2}{2M_i E} \end{aligned} \quad (A-2)$$

また重心系での中性子の散乱角の余弦とエネルギー変化との間には次式で示す関係がある。

$$\mu = 1 - \frac{(M_i+1)^2}{2M_i} \left(1 - \frac{E}{E'}\right)$$

エネルギー  $E$  及び原子量  $M_i$  をレサジ  $u$  及び  $M_i$  の逆数  $\rho$  で表わすと, 上式は次の様になる。

$$\mu = 1 - \frac{(1+\rho)^2}{2\rho} (1 - e^{u-u'}) \quad (A-3)$$

また (A-3) 式を微分すると

$$d\mu = -\frac{(1+\rho)^2}{2\rho} e^{u-u'} du'$$

を得るから, (A-2) 式に  $E' du'$  を掛けたものは (A-4) 式になる。

$$\begin{aligned} \sigma_i(\Omega' \rightarrow \Omega, E' \rightarrow E) E' du' \\ = \sigma_{ei, i}(u') f_i(u', \mu) e^{u-u'} d\mu \end{aligned} \quad (A-4)$$

$\Omega'$  についての積分は次の様に表わせるから<sup>10)</sup>

$$\int d\Omega' = \int_{-1}^1 d\mu \int_0^{2\pi} d\phi$$

弾性散乱項は次式の様になる。

$$\begin{aligned} \sum_i n_i(x) \int_{-1}^1 \sigma_{ei, i}(u') f_i(u', \mu) e^{u-u'} d\mu \\ \times \int_0^{2\pi} N(x, \omega', u') d\phi \end{aligned} \quad (A-5)$$

また (A-3) 式から

$$e^{u-u'} = 1 - \frac{2\rho(1-\mu)}{(1+\rho)^2} \quad (A-6)$$

対数をとると

$$u' = u + \ln \frac{1+2\rho+\rho^2}{1+2\rho\mu+\rho^2}$$

となり (5) 式を得る。

実験室系で中性子の散乱角の余弦とエネルギー変化の間には次の関係がある。

$$\alpha = \frac{M_i+1}{2} \sqrt{\frac{E}{E'}} - \frac{M_i-1}{2} \sqrt{\frac{E'}{E}}$$

上式で変数  $E, M_i$  をそれぞれ  $u, \rho$  で書き直すと

$$\alpha = \frac{1+\rho}{2\rho} e^{(u-u')/2} - \frac{1-\rho}{2\rho} e^{-(u-u')/2} \quad (A-7)$$

この式に (A-6) 式を代入して

$$\alpha = \frac{1+\rho}{2\rho} \cdot \frac{\sqrt{1+2\rho\mu+\rho^2}}{1+\rho} - \frac{1-\rho}{2\rho} \cdot \frac{1+\rho}{\sqrt{1+2\rho\mu+\rho^2}}$$

$$= \frac{\mu + \rho}{\sqrt{1 + 2\rho\mu + \rho^2}}$$

これは (8) 式の関係を表わす。

非弾性散乱過程

散乱は等方と仮定するから  $\sigma_i(\Omega' \rightarrow \Omega, E' \rightarrow E)$  は簡単に

$$\sigma_i(\Omega' \rightarrow \Omega, E' \rightarrow E) = \frac{1}{4\pi} \sigma_{in,i}(u') g_i(u', u)$$

となるから、非弾性散乱項は次式の様になる。

$$\begin{aligned} \sum_i n_i(x) \int_u^\infty \sigma_{in,i}(u') \frac{g_i(u', u) E_0 e^{u'}}{4\pi} du' \cdot 2\pi \\ \times \int_{-1}^1 N(x, \omega', u') d\omega' \end{aligned}$$

## 附録 B マトリックス $B_{qk}^{ji}(x, \omega)$ の計算

(4) 式は次の積分を求めれば計算できる。

$$\int_{-1}^1 \sigma(u') f(u', \mu) e^{u'-u} d\mu \int_0^{2\pi} N(x, \omega', u') d\phi \quad (\text{B-1})$$

(B-1) 式のうち  $\int_0^{2\pi} N(x, \omega', u') d\phi$  に文献 (13) の

定理

$$\frac{1}{\pi} \int_0^\pi P_l(\omega') d\phi = P_l(\alpha) P_l(\omega)$$

を適用する。ただし各角度間には (7) 式の関係式が成立しているものとする。

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} N(x, \omega', u') d\phi &= \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{4\pi} N_l(x, u') \cdot 2 \int_0^\pi P_l(\omega') d\phi \\ &= \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} N_l(x, u') P_l(\alpha) P_l(\omega) \quad (\text{B-2}) \end{aligned}$$

したがって (B-1) 式は次の様になる。

$$\begin{aligned} (\text{B-1}) &= \int_{-1}^1 \sigma(u') \cdot \frac{2p+1}{4\pi} \sum_{p=0}^P f_p(u') P_p(\mu) e^{u'-u} \\ &\quad \times \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} N_l(x, u') P_l(\alpha) P_l(\omega) d\mu \\ &= \sum_{p=0}^P \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{4\pi} \cdot \frac{2p+1}{2} e^{u'-u} P_l(\omega) \\ &\quad \times \int_{-1}^1 \sigma(u') f_p(u') N_l(x, u') P_l(\alpha) P_p(\mu) d\mu \quad (\text{B-3}) \end{aligned}$$

いま  $u$  を  $u_j$ ,  $u' = u_j + kh$  として議論を進める。(B-3) 式での  $\mu$  についての積分は次の和の形で近似できる。(附録 c 参照)

$$\begin{aligned} \frac{2p+1}{2} \int_{-1}^1 \sigma(u') f_p(u') N_l(x, u') P_p(\mu) P_l(\alpha) d\mu \\ = \sum_{k=0}^{N+1} \sigma_k N_{lk} f_{pk} e^{-kh} \phi_{pk}^l \quad (\text{B-4}) \end{aligned}$$

(376)

このときは (B-3) 式は (B-4) 式の関係から次の様になる。

$$\begin{aligned} (\text{B-3}) &= \sum_{p=0}^P \sum_{l=0}^L \sum_{k=0}^{N+1} \sigma(u_j + kh) f_p(u_j + kh) P_l(\omega) \\ &\quad \times \phi_{pk}^l \cdot \frac{2l+1}{4\pi} N_l(x, u_j + kh) \\ &= \sum_{p=0}^P \sum_{l=0}^L \sum_{k=0}^{N+1} \sigma(u_j + kh) f_p(u_j + kh) P_l(\omega) \phi_{pk}^l \\ &\quad \times \sum_{q=1}^{2Q} a_{lq} N(x, \omega_q, u_j + kh) \quad (\text{B-5}) \end{aligned}$$

以上、元素についての添字  $i$  は省略してある。

したがって散乱項 (4) 式は、(B-5) 式に  $n_i(x)$  を掛けて  $i$  について和をとればよい。

そこで

$$\Psi_{lk}^{ji} = n_i(x) \sigma_{el,i}(u_j + kh) \sum_{p=0}^P f_{p,i}(u_j + kh) \phi_{pk}^{li} \quad (\text{B-6})$$

とおけば (4) 式は

$$(4) = \sum_i \sum_{k=0}^{N+1} \sum_{q=1}^{2Q} \sum_{l=0}^L a_{lq} P_l(\omega) \Psi_{lk}^{ji} N(x, \omega_q, u_j + kh) \quad (\text{B-7})$$

となる。(A-7) 式で

$$B_{qk}^{ji}(x, \omega) = \sum_{l=0}^L a_{lq} P_l(\omega) \Psi_{lk}^{ji}(x) \quad (\text{B-8})$$

とおくことにより (13) 式を得る。(A-8) 式、(A-6) 式はそれぞれ (14) 式、(15) 式の関係を表わす。

## 附録 C 定理の証明

本定理及び証明は文献 (11) による。

定理  $H(u')$  を連続関数とし、 $u_k' \leq u' \leq u_{k+1}'$  の範囲で 1 次関数であるとする。今  $H_k$  を  $u_k' = u + kh$  における  $H(u')$  の値とすれば、積分は次の様に和の形で表わせる。

$$\frac{2p+1}{2} \int_{-1}^1 H(u') P_p(\mu) P_l(\alpha) d\mu = \sum_{k=0}^{N+1} H_k e^{-kh} \phi_{pk}^l \quad (\text{C-1})$$

ここで

$$u' = u + \ln \left( \frac{1 + 2\rho + \rho^2}{1 + 2\rho\mu + \rho^2} \right),$$

$$\phi_{p0}^l = \frac{2p+1}{2h} \int_{\mu_1}^1 L_1(\mu) P_p(\mu) P_l(\alpha) d\mu,$$

$$\phi_{pk}^l = \frac{2p+1}{2h} e^{kh} \left[ \int_{\mu_{k+1}}^{\mu_k} L_{k+1}(\mu) P_p(\mu) P_l(\alpha) d\mu \right.$$

$$\left. + \int_{\mu_{k-1}}^{\mu_k} L_{k-1}(\mu) P_p(\mu) P_l(\alpha) d\mu \right],$$

( $0 < k < N$ )

$$\begin{aligned}\phi_{pN}^l &= \frac{2p+1}{2h} e^{N\hbar} \left[ \int_{\mu_{N-1}}^{\mu_N} L_{N-1}(\mu) P_p(\mu) P_l(\alpha) d\mu \right. \\ &\quad \left. + \int_{-1}^{\mu_N} L_{N+1}(\mu) P_p(\mu) P_l(\alpha) d\mu \right], \\ \phi_{pN+1}^l &= \frac{2p+1}{2h} e^{(N+1)\hbar} \int_{\mu_N}^{-1} L_N(\mu) P_p(\mu) P_l(\alpha) d\mu, \\ L_k(\mu) &= \ln \left( \frac{1+2\rho\mu+\rho^2}{1+2\rho\mu_k+\rho^2} \right), \\ \mu_k &= \frac{(1+\rho)^2 e^{-k\hbar} - (1+\rho^2)}{2\rho} \quad (0 \leq k \leq N+1).\end{aligned}$$

[定理の証明]

$H(u')$  の定義から  $u_k' \leq u' \leq u_{k+1}'$  の範囲で

$$H(u') = \frac{(u' - u_k') H_{k+1} - (u' - u_{k+1}') H_k}{h} \equiv H_k(\mu)$$

と表わす。

(5) 式の関係から  $L_k(\mu)$  は求まる。

$$u' - u_k' = \ln \left( \frac{1+2\rho\mu_k+\rho^2}{1+2\rho\mu+\rho^2} \right) \equiv -L_k(\mu)$$

$\mu_k$  は (A-6) 式から求まる。

したがって  $H_k(\mu)$  は次の様に表わせる。

$$H_k(\mu) = \frac{H_k L_{k+1}(\mu) - H_{k+1} L_k(\mu)}{h} \quad (\text{C-2})$$

定理の (C-1) 式は (C-2) 式の関係から次の様に証明される。

$$\begin{aligned}\frac{2p+1}{2} \int_{-1}^1 H(u') P_p(\mu) P_l(\alpha) d\mu &= \frac{2p+1}{2} \sum_{k=0}^{N-1} \int_{\mu_{k+1}}^{\mu_k} H_k(\mu) P_p(\mu) P_l(\alpha) d\mu \\ &\quad + \frac{2p+1}{2} \int_{-1}^{\mu_N} H_N(\mu) P_p(\mu) P_l(\alpha) d\mu \\ &= \frac{2p+1}{2h} \sum_{k=0}^{N-1} \left( H_k \int_{\mu_{k+1}}^{\mu_k} L_{k+1}(\mu) P_p(\mu) P_l(\alpha) d\mu \right. \\ &\quad \left. - H_{k+1} \int_{\mu_{k+1}}^{\mu_k} L_k(\mu) P_p(\mu) P_l(\alpha) d\mu \right) \\ &\quad + \frac{2p+1}{2h} \left( H_N \int_{-1}^{\mu_N} L_{N+1}(\mu) P_p(\mu) P_l(\alpha) d\mu \right. \\ &\quad \left. - H_{N+1} \int_{-1}^{\mu_N} L_N(\mu) P_p(\mu) P_l(\alpha) d\mu \right) \\ &= \sum_{k=0}^{N-1} H_k e^{-k\hbar} \cdot \frac{2p+1}{2h} e^{k\hbar} \left[ \int_{\mu_{k+1}}^{\mu_k} L_{k+1}(\mu) P_p(\mu) P_l(\alpha) d\mu \right. \\ &\quad \left. + \int_{\mu_{k-1}}^{\mu_k} L_{k-1}(\mu) P_p(\mu) P_l(\alpha) d\mu \right] \\ &\quad + H_N e^{-N\hbar} \cdot \frac{2p+1}{2h} e^{N\hbar} \left[ \int_{\mu_{N-1}}^{\mu_N} L_{N+1}(\mu) P_p(\mu) P_l(\alpha) d\mu \right. \\ &\quad \left. + \int_{-1}^{\mu_N} L_{N+1}(\mu) P_p(\mu) P_l(\alpha) d\mu \right]\end{aligned}$$

これで定理が証明された。

## 附録 D 条件1のマトリックス

### $\phi_{pk}^{li}$ の計算

水素については、 $\rho=1$ ,  $f_p(u) = \delta_{p0}$  であるから、実験室系での散乱角の余弦  $\alpha$  及び  $L_k(\mu)$  は次の様になる。

$$\alpha = \frac{\rho + \mu}{\sqrt{1+2\rho\mu+\rho^2}} = \frac{1+\mu}{\sqrt{2(1+\mu)}} = \sqrt{\frac{1+\mu}{2}},$$

$$\begin{aligned}L_k(\mu) &= \ln \frac{1+2\rho\mu+\rho^2}{1+2\rho\mu_k+\rho^2} = \ln \frac{1+\mu}{1+\mu_k} = 2 \ln \sqrt{\frac{1+\mu}{1+\mu_k}} \\ &= 2 \ln \frac{\alpha}{\alpha_k}\end{aligned}$$

ここで  $\alpha_k = \sqrt{\frac{1+\mu_k}{2}}$  であり、 $\mu_k$  は附録 C より

$$\mu_k = \frac{(1+\rho)^2 e^{-k\hbar} - (1+\rho^2)}{2\rho}$$

$\rho=1$  を代入して

$$\mu_k = 2e^{-k\hbar} - 1$$

$$\therefore \alpha_k = e^{-k\hbar/2}$$

したがって  $\phi_{0k}^l$  は次の様に求まる。

$$\begin{aligned}\phi_{00}^l &= \frac{1}{2h} \int_{\mu_1}^1 L_1(\mu) P_l(\alpha) d\mu = \frac{1}{2h} \int_{\alpha_1}^{\alpha_0} 2 \ln \frac{\alpha}{\alpha_1} P_l(\alpha) 4\alpha d\alpha \\ &= \frac{4}{h} \int_{\alpha_1}^{\alpha_0} \alpha \ln \left( \frac{\alpha}{\alpha_1} \right) P_l(\alpha) d\alpha,\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\phi_{0k}^l &= \frac{1}{2h} e^{k\hbar} \left[ \int_{\mu_{k+1}}^{\mu_k} L_{k+1}(\mu) P_l(\alpha) d\mu \right. \\ &\quad \left. + \int_{\mu_{k-1}}^{\mu_k} L_{k-1}(\mu) P_l(\alpha) d\mu \right] \quad (0 < k < N) \\ &= \frac{4}{h} e^{k\hbar} \int_{\alpha_{k+1}}^{\alpha_k} \alpha \ln \left( \frac{\alpha}{\alpha_{k+1}} \right) P_l(\alpha) d\alpha \\ &\quad + \int_{\alpha_{k-1}}^{\alpha_k} \alpha \ln \left( \frac{\alpha}{\alpha_{k-1}} \right) P_l(\alpha) d\alpha.\end{aligned}$$

$P_l(\alpha)$  を  $\alpha$  のべきで展開して次次の様に表わす。

$$P_l(\alpha) = \sum_{\lambda=0}^l A_{\lambda}^l \alpha^{\lambda}.$$

積分  $\int_{\alpha_{k*1}}^{\alpha_k} \ln \left( \frac{\alpha}{\alpha_{k*1}} \right) \alpha^{\lambda+1} d\alpha$  を計算すれば、 $\phi_{0k}^l$  は求まる。ここで \* は ± の符号を表わす。

$$\begin{aligned}\int_{\alpha_{k*1}}^{\alpha_k} \ln \left( \frac{\alpha}{\alpha_{k*1}} \right) \alpha^{\lambda+1} d\alpha &= \frac{h^2}{4} \exp \left( -\frac{k\hbar}{2}(\lambda+2) \right) \\ &\quad \times \left[ \frac{*\hbar}{2}(\lambda+2) + \exp \left( -\frac{k\hbar}{2}(\lambda+2) \right) - 1 \right] \\ &\quad \times \left[ \frac{\hbar}{2}(\lambda+2) \right]^2\end{aligned}$$

したがって

$$\begin{aligned}
\phi_{00}^l &= h \sum_{\lambda=0}^l A_{\lambda}^l \left[ \frac{\frac{h}{2}(\lambda+2) + \exp\left(-\frac{kh}{2}(\lambda+2)\right) - 1}{\left\{\frac{h}{2}(\lambda+2)\right\}^2} \right] \\
&= h \sum_{\lambda=0}^l A_{\lambda}^l g_0\left(\left(\frac{\lambda}{2}+1\right)h\right), \\
\phi_{0k}^l &= h \sum_{\lambda=0}^l A_{\lambda}^l \exp\left(-\frac{kh\lambda}{2}\right) \\
&\quad \times \left[ \frac{\exp\left(\frac{h}{2}(\lambda+2)\right) + \exp\left(-\frac{h}{2}(\lambda+2)\right) - 2}{\left\{\frac{h}{2}(\lambda+2)\right\}^2} \right] \\
&= 2h \sum_{\lambda=0}^l A_{\lambda}^l \exp\left(-\frac{kh\lambda}{2}\right) g_k\left(\left(\frac{\lambda}{2}+1\right)h\right),
\end{aligned}$$

ここで

$$\begin{aligned}
g_0(x) &= \frac{e^{-x} + x - 1}{x^2}, \\
g_k(x) &= \frac{\cosh x - 1}{x^2}, \quad k > 0.
\end{aligned}$$

## 附録 E 条件 3 のマトリックス

### $\phi_{pk}^{li}$ の計算

三次元マトリックスである係数  $\phi_{pk}^l$  の計算方法を以下に述べる。 $\phi_{pk}^l$  は附録 C で与えられているが、いま簡単のため  $\phi_{pk}^l$  を次の様におく。

$$\phi_{pk}^l = \frac{2p+1}{2} \int L_k(\mu) P_p(\mu) P_l(\alpha) d\mu \quad (\text{E-1})$$

上式の右辺に含まれる  $P_l(\alpha)$  にルジャンドルの漸化式を適用する。

$$\begin{aligned}
\phi_{pk}^l &= \frac{2p+1}{2} \int L_k(\mu) P_p(\mu) \left\{ \frac{2l-1}{l} \alpha P_{l-1}(\alpha) \right. \\
&\quad \left. - \frac{l-1}{l} P_{l-2}(\alpha) \right\} d\mu \\
&= \frac{2l-1}{l} \cdot \frac{2p+1}{2} \int L_k(\mu) \cdot \alpha P_p(\mu) \cdot P_{l-1}(\alpha) d\mu \\
&\quad - \frac{l-1}{l} \cdot \frac{2p+1}{2} \int L_k(\mu) P_p(\mu) P_{l-2}(\alpha) d\mu
\end{aligned}$$

上式で  $\alpha P_p(\mu)$  を  $P_t(\mu)$  で展開する。

$$\frac{2p+1}{2} \alpha P_p(\mu) = \sum_t \frac{2t+1}{2} \alpha_{pt} P_t(\mu)$$

$$\text{ここで } \alpha_{pt} = \frac{2p+1}{2} \int_{-1}^1 \alpha P_p(\mu) P_t(\mu) d\mu \quad (\text{E-2})$$

$t$  の範囲を  $0 \leq t \leq p$  にしておく。

したがって

$$\phi_{pk}^l = \frac{2l-1}{l} \sum_t \frac{2t+1}{2} \alpha_{pt} \int L_k(\mu) P_t(\mu) P_{l-1}(\alpha) d\mu$$

(378)

$$- \frac{l-1}{l} \frac{2p+1}{2} \int L_k(\mu) P_p(\mu) P_{l-2}(\alpha) d\mu.$$

したがって、上式から  $\phi_{pk}^l$  の  $l$  について次の漸化式を得る。

$$\phi_{pk}^l = \frac{2l-1}{l} \sum_t \alpha_{pt} \phi_{pk}^{l-1} - \frac{l-1}{l} \phi_{pk}^{l-2}. \quad (\text{E-3})$$

(E-3) 式は  $l=0$  の時のマトリックス  $\phi_{pk}^0$  が求まれば、マトリックス  $\alpha_{pt}$  を知ることで  $\phi_{pk}^l$  は計算できることを示す。したがって以下には、 $\alpha_{pt}$  の求め方及び  $\phi_{pk}^0$  の計算方法について述べる。

$\alpha_{pt}$  は (E-2) 式の積分を求めることによって計算できる。(E-2) 式の  $P_t(\mu)$  にルジャンドルの漸化式を適用すると、

$$\begin{aligned}
\alpha_{pt} &= \frac{2p+1}{2} \int_{-1}^1 \alpha P_p(\mu) \left\{ \frac{2t-1}{t} \mu P_{t-1}(\mu) \right. \\
&\quad \left. - \frac{t-1}{t} P_{t-2}(\mu) \right\} d\mu \\
&= \frac{2p+1}{2} \int_{-1}^1 \frac{2t-1}{t} \alpha P_{t-1}(\mu) \cdot \mu P_p(\mu) d\mu \\
&\quad - \frac{2p+1}{2} \int_{-1}^1 \frac{t-1}{t} \alpha P_p(\mu) P_{t-2}(\mu) d\mu \\
&= \frac{2t+1}{t} \left\{ \frac{p+1}{2p+3} \alpha_{p+1, t-1} + \frac{p}{2p-1} \alpha_{p-1, t} \right\} \\
&\quad - \frac{t-1}{t} \alpha_{p, t-2}. \quad (\text{E-4})
\end{aligned}$$

(E-4) 式は  $\alpha_{p0}$  を知ることで計算することができる。 $\alpha_{p0}$  は次の関係式から求まる。

$$\alpha_{p0} = \frac{2p+1}{2} \int_{-1}^1 \alpha P_p(\mu) d\mu,$$

ここで

$$\alpha = \sum_{p=0}^{\infty} \alpha_{p0} P_p(\mu). \quad (\text{E-5})$$

一方  $\alpha$  は (8) 式に示す関係をもつ。(8) 式の右辺の分母  $(1+2\rho\mu+\rho^2)^{-1/2}$  はルジャンドル多項式の母関数である。これは次式で示すように展開される。

$$(1+2\rho\mu+\rho^2)^{-1/2} = \sum_{p=0}^{\infty} (-\rho)^p P_p(\mu). \quad (\text{E-6})$$

したがって

$$\begin{aligned}
\alpha &= (\rho + \mu) \sum_{p=0}^{\infty} (-\rho)^p P_p(\mu) \\
&= - \sum_{p=0}^{\infty} (-\rho)^{p+1} P_p(\mu) + \sum_{p=0}^{\infty} (-\rho)^p \\
&\quad \times \left\{ \frac{(p+1) P_{p+1} + p P_{p-1}}{2p+1} \right\} \\
&= \sum_{p=0}^{\infty} P_p(\mu) \left\{ -(-\rho)^{p+1} + \frac{p}{2p-1} (-\rho)^p \right\}
\end{aligned}$$

$$+ \frac{p+1}{2p+3} (-\rho)^{p+1} \Big\}. \quad (\text{E-7})$$

(E-5) 式は (E-7) 式に等しいから,  $\alpha_{p0}$  は次式の様  
に求まる。

$$\begin{aligned} \alpha_{p0} &= -(-\rho)^{p+1} + \frac{p}{2p-1} (-\rho)^{p-1} + \frac{p+1}{2p+3} (-\rho)^{p+1} \\ &= (-\rho)^{p-1} \left\{ \frac{p}{2p-1} - \frac{p+2}{2p+3} \cdot \rho^2 \right\} \end{aligned} \quad (\text{E-8})$$

(E-8) 式で  $\alpha_{p0}$  が求まると, (E-4) 式から  $\alpha_{pt}$  が  
計算できる。  $\alpha_{pt}$  を求めることができたから次に  $\phi_{pk}^0$   
を計算すればよい。  $\phi_{pk}^0$  の計算は次の様に行う。まず  
 $\phi_{pk}^0$  は附録 C から次式の形に書ける。

$$\phi_{p0}^0 = \frac{2p+1}{2h} \int_{\mu_1}^1 L_1(\mu) P_p(\mu) d\mu \quad (\text{E-9})$$

$$\begin{aligned} \phi_{pk}^0 &= \frac{2p+1}{2h} e^{kh} \left\{ \int_{\mu_{k+1}}^{\mu_k} L_{k+1}(\mu) P_p(\mu) d\mu \right. \\ &\quad \left. + \int_{\mu_{k-1}}^{\mu_k} L_{k-1}(\mu) P_p(\mu) d\mu \right\} \quad (\text{E-10}) \\ (0 < k < N) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \phi_{pN}^0 &= \frac{2p+1}{2h} e^{N\hbar} \left\{ \int_{\mu_{N-1}}^{\mu_N} L_{N-1}(\mu) P_p(\mu) d\mu \right. \\ &\quad \left. + \int_{-1}^{\mu_N} L_{N+1}(\mu) P_p(\mu) d\mu \right\} \quad (\text{E-11}) \end{aligned}$$

$$\phi_{p, N+1}^0 = \frac{2p+1}{2h} e^{(N+1)\hbar} \int_{\mu_N}^{-1} L_N(\mu) P_p(\mu) d\mu \quad (\text{E-12})$$

(E-9)~(E-12) 式の積分は次の積分で代表できる。

$$\int_{\alpha}^{\beta} L_k(\mu) P_p(\mu) d\mu \quad (\text{E-13})$$

(E-13) 式の  $P_p(\mu)$  を展開して

$$P_p(\mu) = \sum_{\lambda=0}^p A_{\lambda}^p \mu^{\lambda}$$

であるから, (E-13) 式の積分は

$$\int_{\alpha}^{\beta} L_k(\mu) \cdot \mu^{\lambda} d\mu \quad (\text{E-14})$$

を求めることに帰着する。部分積分すると

$$(\text{E-14}) = \left[ \frac{\mu^{\lambda+1}}{\lambda+1} L_k(\mu) \right]_{\alpha}^{\beta} - \frac{1}{\lambda+1} \int_{\alpha}^{\beta} \frac{\mu^{\lambda+1}}{1+2\rho\mu+\rho^2} d\mu \quad (\text{E-15})$$

(E-15) 式で  $b = -\frac{1+\rho^2}{2\rho}$  とおけば  $\mu = \frac{1+2\rho\mu+\rho^2}{2\rho}$   
+  $b$  と書き表わせる。また  $\tau = \frac{1+2\rho\mu+\rho^2}{2\rho}$  とおくと  
 $\mu = \tau + b$  と書ける。したがって,

$$\mu^{\lambda+1} = (\tau+b)^{\lambda+1} = \sum_{s=0}^{\lambda+1} \binom{\lambda+1}{s} \tau^s b^{\lambda+1-s}. \quad (\text{E-16})$$

(E-16) 式を (E-15) 式に代入して

$$\begin{aligned} \int_{\alpha}^{\beta} L_k(\mu) \mu^{\lambda+1} d\mu &= \left[ \frac{\mu^{\lambda+1}}{\lambda+1} L_k(\mu) \right]_{\alpha}^{\beta} \\ &\quad - \frac{1}{\lambda+1} \sum_{s=0}^{\lambda+1} \binom{\lambda+1}{s} b^{\lambda+1-s} \int_{\alpha}^{\beta} \tau^{s-1} d\mu \\ &= \left[ \frac{\mu^{\lambda+1}}{\lambda+1} L_k(\mu) \right]_{\alpha}^{\beta} - \frac{1}{\lambda+1} \sum_{s=1}^{\lambda+1} \binom{\lambda+1}{s} b^{\lambda+1-s} \left[ \frac{\tau^s}{s} \right]_{\alpha}^{\beta} \\ &\quad - \frac{b^{\lambda+1}}{\lambda+1} [\ln \tau]_{\alpha}^{\beta} \end{aligned} \quad (\text{E-17})$$

また

$$\ln \tau = \ln \frac{1+2\rho\mu+\rho^2}{2\rho}, \quad L_k(\mu) = \ln \frac{1+2\rho\mu+\rho^2}{1+2\rho\mu_k+\rho^2}$$

であるから,

$$[\ln \tau]_{\alpha}^{\beta} = [L_k(\mu)]_{\alpha}^{\beta} \quad (\text{E-18})$$

である。(E-18) 式を (E-17) 式に入れて

$$\begin{aligned} \int_{\alpha}^{\beta} L_k(\mu) \mu^{\lambda} d\mu &= \left[ \frac{\mu^{\lambda+1} - b^{\lambda+1}}{\lambda+1} L_k(\mu) \right]_{\alpha}^{\beta} \\ &\quad - \sum_{s=0}^{\lambda} \binom{\lambda}{s} \frac{b^{\lambda-s}}{(s+1)^2} [\tau^{s+1}]_{\alpha}^{\beta} \end{aligned} \quad (\text{E-19})$$

(E-19) 式を計算するために, まず  $L_k(\mu)$  を求める。

$1+2\rho\mu_k+\rho^2 = (1+\rho)^2 e^{-k\hbar}$  であるから,

$$\begin{cases} L_{k\pm 1}(\mu_k) = \pm \hbar \\ L_k(\mu_k) = 0 \end{cases} \quad (\text{E-20})$$

さらに  $N' = \frac{2}{\hbar} \ln \left( \frac{1+\rho}{1-\rho} \right) - N$  から,

$$\begin{aligned} L_{N+1}(-1) &= \ln \frac{(1-\rho)^2}{(1+\rho)^2 e^{-(N+1)\hbar}} = \ln \left( \frac{1-\rho}{1+\rho} \right)^2 e^{(N+1)\hbar} \\ &= (N+1)\hbar - \ln \left( \frac{1+\rho}{1-\rho} \right)^2 \\ &= \hbar(1-N') \end{aligned} \quad (\text{E-21})$$

同様に,

$$L_N(-1) = -N'\hbar \quad (\text{E-22})$$

次に  $\tau^{s+1}$  の計算する。

$$\begin{aligned} [\tau^{s+1}]_{\mu=\mu_k} &= \left\{ \frac{1+2\rho\mu_k+\rho^2}{2\rho} \right\}^{s+1} \\ &= \left\{ \frac{(1+\rho)^2}{2\rho} \right\}^{s+1} e^{-k\hbar(s+1)} \end{aligned} \quad (\text{E-23})$$

$$[\tau^{s+1}]_{\mu=\pm 1} = \left\{ \frac{(1\pm\rho)^2}{2\rho} \right\}^{s+1} \quad (\text{E-24})$$

(E-19) 式の右辺の第 1 項の  $\frac{\mu^{\lambda+1} - b^{\lambda+1}}{\lambda+1}$  を計算す  
る。まず  $\mu = \pm 1$  において,

$$\begin{aligned} \frac{(\pm 1)^{\lambda+1} - b^{\lambda+1}}{\lambda+1} &= \frac{1}{\lambda+1} \left[ \left\{ \frac{(1\pm\rho)^2}{2\rho} + b \right\}^{\lambda+1} - b^{\lambda+1} \right] \\ &= \sum_{s=1}^{\lambda+1} \frac{1}{\lambda+1} \binom{\lambda+1}{s} \left\{ \frac{(1\pm\rho)^2}{2\rho} \right\}^s b^{\lambda+1-s} \end{aligned}$$

この式は  $\frac{1}{\lambda+1} \binom{\lambda+1}{s+1} = \frac{1}{s+1} \binom{\lambda}{s}$  の関係から,

$$= \sum_{s=0}^{\lambda} \frac{1}{s+1} \binom{\lambda}{s} b^{\lambda-s} \left\{ \frac{(1 \pm \rho)^2}{2\rho} \right\}^{s+1} \quad (\text{E-25})$$

次に  $\mu = \mu_k$  において計算するが<sup>2</sup>,  $\mu_k$  を次の様に表わす。

$$\mu_k = \frac{1+2\rho\mu_k+\rho^2}{2} + b = \left\{ \frac{(1+\rho)^2}{2\rho} e^{-kh} \right\} + b$$

この関係を使用して,

$$\begin{aligned} \frac{\mu_k^{\lambda+1} - b^{\lambda+1}}{\lambda+1} &= \sum_{s=1}^{\lambda+1} \frac{1}{\lambda+1} \binom{\lambda+1}{s} \left\{ \frac{(1+\rho)^2}{2\rho} e^{-kh} \right\}^s \cdot b^{\lambda+1-s} \\ &= \sum_{s=0}^{\lambda} \frac{1}{s+1} \binom{\lambda}{s} b^{\lambda-s} \left\{ \frac{(1+\rho)^2}{2\rho} e^{-kh} \right\}^{s+1} \end{aligned} \quad (\text{E-26})$$

以上の計算から (E-19) 式を求めることができる。

さて (E-19) 式の  $\alpha, \beta$  を実際の定数に戻して計算をすすめる。まず  $\alpha = \mu_1, \beta = 1$  とおくと

$$\begin{aligned} \int_{\mu_1}^1 L_1(\mu) \mu^{\lambda} d\mu &= \frac{1^{\lambda+1} - b^{\lambda+1}}{\lambda+1} \times h \\ &- \sum_{s=0}^{\lambda} \binom{\lambda}{s} b^{\lambda-s} \frac{1}{(s+1)^2} [\tau^{s+1}]_{\mu_1}^1 \\ &= \sum_{s=0}^{\lambda} \frac{h}{s+1} \binom{\lambda}{s} b^{\lambda-s} \left\{ \frac{(1+\rho)^2}{2\rho} \right\}^{s+1} \\ &- \sum_{s=0}^{\lambda} \binom{\lambda}{s} b^{\lambda-s} \frac{1}{(s+1)^2} \left\{ \frac{(1+\rho)^2}{2\rho} \right\}^{s+1} \\ &\times [1 - e^{-h(s+1)}] \\ &= \sum_{s=0}^{\lambda} \binom{\lambda}{s} b^{\lambda-s} \left\{ \frac{(1+\rho)^2}{2\rho} \right\}^{s+1} \\ &\times \left\{ \frac{e^{-h(s+1)} + h(s+1) - 1}{(s+1)^2} \right\} \end{aligned} \quad (\text{E-27})$$

次に  $\alpha = \mu_{k \pm 1}, \beta = \mu_k$  において,

$$\begin{aligned} \int_{\mu_{k \pm 1}}^{\mu_k} L_{k \pm 1}(\mu) \mu^{\lambda} d\mu &= \frac{\mu_k^{\lambda+1} - b^{\lambda+1}}{\lambda+1} (\pm h) \\ &- \sum_{s=0}^{\lambda} \binom{\lambda}{s} b^{\lambda-s} \left\{ \frac{(1+\rho)^2}{2\rho} e^{-kh} \right\}^{s+1} \cdot \left\{ \frac{1 - e^{\mp h(s+1)}}{(s+1)^2} \right\} \\ &= \sum_{s=0}^{\lambda} \binom{\lambda}{s} b^{\lambda-s} \left\{ \frac{(1+\rho)^2}{2\rho} e^{-kh} \right\}^{s+1} \\ &\times \left\{ \frac{\pm h(s+1) + e^{\mp h(s+1)} - 1}{(s+1)^2} \right\} \end{aligned}$$

を得る。したがって

$$\begin{aligned} \int_{\mu_{k+1}}^{\mu_k} L_{k+1}(\mu) \mu^{\lambda} d\mu + \int_{\mu_{k-1}}^{\mu_k} L_{k-1}(\mu) \mu^{\lambda} d\mu \\ &= 2 \sum_{s=0}^{\lambda} \binom{\lambda}{s} b^{\lambda-s} \left\{ \frac{(1+\rho)^2}{2\rho} e^{kh} \right\}^{s+1} \\ &\times \left[ \frac{\cosh \{h(s+1)\} - 1}{(s+1)^2} \right] \end{aligned} \quad (\text{E-28})$$

また  $\alpha = \mu_{N-1}, \beta = \mu_N$  とおくと

$$\int_{\mu_{N-1}}^{\mu_N} L_{N-1}(\mu) \mu^{\lambda} d\mu = \frac{\mu_N^{\lambda+1} - b^{\lambda+1}}{\lambda+1} (-h)$$

(380)

$$- \sum_{s=0}^{\lambda} \binom{\lambda}{s} b^{\lambda-s} \left\{ \frac{(1+\rho)^2}{2\rho} e^{-N\hbar} \right\}^{s+1} \left\{ \frac{1 - e^{h(s+1)}}{(s+1)^2} \right\}$$

さらに  $\alpha = -1, \beta = \mu_N$  において

$$\begin{aligned} \int_{-1}^{\mu_N} L_{N+1}(\mu) \mu^{\lambda} d\mu &= \frac{\mu_N^{\lambda+1} - b^{\lambda+1}}{\lambda+1} \times h \\ &- \frac{(-1)^{\lambda+1} - b^{\lambda+1}}{\lambda+1} h(1-N') \\ &- \sum_{s=0}^{\lambda} \binom{\lambda}{s} b^{\lambda-s} \frac{1}{(s+1)^2} \left[ \left\{ \frac{(1+\rho)^2}{2\rho} e^{-N\hbar} \right\}^{s+1} \right. \\ &\left. - \left\{ \frac{(1-\rho)^2}{2\rho} \right\}^{s+1} \right] \end{aligned}$$

したがって

$$\begin{aligned} \int_{\mu_{N-1}}^{\mu_N} L_{N-1}(\mu) \mu^{\lambda} d\mu + \int_{-1}^{\mu_N} L_{N+1}(\mu) \mu^{\lambda} d\mu \\ &= - \sum_{s=0}^{\lambda} \binom{\lambda}{s} b^{\lambda-s} \left\{ \frac{(1+\rho)^2}{2\rho} e^{-N\hbar} \right\}^{s+1} \\ &\times \left\{ \frac{1 - e^{h(s+1)}}{(s+1)^2} \right\} - \frac{(-1)^{\lambda+1} - b^{\lambda+1}}{\lambda+1} h(1-N') \\ &- \sum_{s=0}^{\lambda} \binom{\lambda}{s} b^{\lambda-s} \frac{1}{(s+1)^2} \left[ \left\{ \frac{(1+\rho)^2}{2\rho} e^{-N\hbar} \right\}^{s+1} \right. \\ &\left. - \left\{ \frac{(1-\rho)^2}{2\rho} \right\}^{s+1} \right] \\ &= \sum_{s=0}^{\lambda} \binom{\lambda}{s} b^{\lambda-s} \left\{ \frac{(1-\rho)^2}{2\rho} \right\}^{s+1} \left[ \left\{ \frac{(1+\rho)^2}{(1-\rho)} e^{-N\hbar} \right\}^{s+1} \right. \\ &\times \frac{e^{h(s+1)}}{(s+1)^2} - \frac{h(1-N')}{s+1} \\ &\left. - \frac{1}{(s+1)^2} \left\{ \frac{(1+\rho)^2}{(1-\rho)} e^{-N\hbar} \right\}^{s+1} + \frac{1}{(s+1)^2} \right] \end{aligned}$$

ここで

$$N' = \frac{2}{h} \ln \left( \frac{1+\rho}{1-\rho} \right) - N$$

から

$$\left( \frac{1+\rho}{1-\rho} \right)^2 e^{-N\hbar} = e^{N'\hbar}$$

となる。この関係を上式に代入すると上記の積分は次のようになる。

$$\begin{aligned} &= \sum_{s=0}^{\lambda} \binom{\lambda}{s} b^{\lambda-s} \left\{ \frac{(1-\rho)^2}{2\rho} \right\}^{s+1} \\ &\times \frac{1}{(s+1)^2} \{1 + e^{N'(s+1)\hbar} - 2e^{N'(s+1)\hbar}\} \\ &+ (N'-1)h(s+1) \end{aligned} \quad (\text{E-50})$$

残る最後の積分は

$$\begin{aligned} \int_{\mu_N}^{-1} L_N(\mu) \mu^{\lambda} d\mu &= \frac{(-1)^{\lambda+1} - b^{\lambda+1}}{\lambda+1} (-N'h) \\ &- \sum_{s=0}^{\lambda} \binom{\lambda}{s} b^{\lambda-s} \frac{1}{(s+1)^2} \left[ \left\{ \frac{(1-\rho)^2}{2\rho} \right\}^{s+1} \right. \\ &\left. - \left\{ \frac{(1+\rho)^2}{2\rho} e^{-N\hbar} \right\}^{s+1} \right] = \sum_{s=0}^{\lambda} \binom{\lambda}{s} b^{\lambda-s} \left\{ \frac{(1-\rho)^2}{2\rho} \right\}^{s+1} \end{aligned}$$

$$\times \left\{ \frac{e^{N'(s+1)h} - N'h(s+1) - 1}{(s+1)^2} \right\} \quad (\text{E-51})$$

となる。以上の計算で、我々の目的とした (E-13) 式の積分が、積分の下限  $\alpha$  及び上限  $\beta$  の全てについて求められた。なお以後の計算に便利な様にまとめて書いておく。

$$\left. \begin{aligned} g_0[h(s+1)] &= \frac{e^{-h(s+1)} + h(s+1) - 1}{(s+1)^2 h^2} \\ g_k[h(s+1)] &= \frac{\cosh\{h(s+1)\} - 1}{(s+1)^2 h^2} \\ 0 < k < N \\ g_N[h(s+1)] &= \frac{1}{(s+1)^2 h^2} \\ &\times \{1 + e^{(N'+1)h(s+1)} - 2e^{N'h(s+1)h} \\ &+ (N' - 1)h(s+1)\} \\ g_{N+1}[h(s+1)] &= \frac{e^{N'(s+1)h} - N'h(s+1) - 1}{(s+1)^2 h^2} \end{aligned} \right\} (\text{E-52})$$

とおけば、(E-13) 式は次の様になる。

$$\begin{aligned} & \int_{\mu_1}^1 L_1(\mu) \mu^2 d\mu \\ &= h^2 \sum_{s=0}^{\lambda} \binom{\lambda}{s} b^{\lambda-s} \left\{ \frac{(1+\rho)^2}{2\rho} \right\}^{s+1} \cdot g_0[h(s+1)], \\ & \int_{\mu_{k+1}}^{\mu_k} L_{k+1}(\mu) \mu^2 d\mu + \int_{\mu_{k-1}}^{\mu_k} L_{k-1}(\mu) \mu^2 d\mu \\ &= 2h^2 \sum_{s=0}^{\lambda} \binom{\lambda}{s} b^{\lambda-s} \left\{ \frac{(1+\rho)^2 e^{-kh}}{2\rho} \right\}^{s+1} \cdot g_k[h(s+1)], \\ & \int_{\mu_{N-1}}^{\mu_N} L_{N-1}(\mu) \mu^2 d\mu + \int_{-1}^{\mu_N} L_{N+1}(\mu) \mu^2 d\mu \\ &= h^2 \sum_{s=0}^{\lambda} \binom{\lambda}{s} \left\{ \frac{(1-\rho)^2}{2\rho} \right\}^{s+1} \cdot g_N[h(s+1)], \\ & \int_{\mu_N}^{-1} L_N(\mu) \mu^2 d\mu \\ &= h^2 \sum_{s=0}^{\lambda} \binom{\lambda}{s} b^{\lambda-s} \left\{ \frac{(1-\rho)^2}{2\rho} \right\}^{s+1} \cdot g_{N+1}[h(s+1)] \end{aligned}$$

(E-13) 式の積分が以上の様に求まると、 $\phi_{pk}^0$  は簡単に求まり次の様に書くことができる。

$$\begin{aligned} \phi_{pk}^0 &= (2 - \delta_{k0}) \frac{2p+1}{2} h e^{kh} \sum_{i=0}^p A_i^p \sum_{s=0}^{\lambda} \binom{\lambda}{s} b^{\lambda-s} \\ &\times \left\{ \frac{(1+\rho)^2}{2\rho} e^{-kh} \right\}^{s+1} g_k[h(s+1)] \quad (\text{E-53}) \end{aligned}$$

$$(0 \leq k < N)$$

$$\begin{aligned} \phi_{pk}^0 &= \frac{2p+1}{2} h e^{kh} \sum_{i=0}^p A_i^p \sum_{s=0}^{\lambda} \binom{\lambda}{s} b^{\lambda-s} \left\{ \frac{(1-\rho)^2}{2\rho} \right\}^{s+1} \\ &\times g_k[h(s+1)] \quad (\text{E-54}) \end{aligned}$$

$$(k = N, N+1)$$

(E-53), (E-54) 式により  $\phi_{pk}^0$  は計算できるわけであるが、この両式を計算機で実際に計算することは容

易でない。そこでこの両式を計算機で計算するのに適した形に変形する必要がある。これを次の定理によって変形しよう。

定理

$$f(x) = \sum_{\lambda} A_{\lambda} x^{\lambda}, \quad \bar{g}(y) = \sum_n \bar{g}_n y^n$$

ならば

$$\sum_{\lambda} A_{\lambda} \sum_{s=0}^{\lambda} \binom{\lambda}{s} \bar{g}(s+1) a^s b^{\lambda-s} = \sum_j a^j f^{(j)}(a+b) \bar{G}_j$$

である。

ここで

$$\bar{G}_j = \sum_{n=j}^{\infty} \bar{d}_{jn} \bar{g}_n,$$

$$\bar{d}_{jm} = \delta_{j0} + \sum_{i=0}^{n-j} \binom{n}{i} \bar{d}_{j-1, n-1-i},$$

$$\bar{d}_{jm} = 0 \quad \begin{cases} j > n \\ j < 0. \end{cases}$$

定理の証明は省略する。文献 (14) を参照されたい。先に求めた  $\phi_{pk}^0$  に上の定理を適用すると次式の様になる。

$$\begin{aligned} \phi_{pk}^0 &= \frac{2 - \delta_{k0}}{4\rho} (2p+1) h (1+\rho)^2 \sum_{j=0}^p \left\{ \frac{(1+\rho)^2}{2\rho} e^{-kh} \right\}^j \\ &\times P_p^{(j)}(\mu_k) \bar{G}_{jk} \quad (0 \leq k < N) \quad (\text{E-55}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \phi_{pk}^0 &= \frac{e^{kh}}{4\rho} (2p+1) h (1-\rho)^2 \sum_{j=0}^p \left\{ \frac{(1-\rho)^2}{2\rho} \right\}^j \\ &\times P_p^{(j)}(-1) \bar{G}_{jk} \quad (k = N, N+1) \quad (\text{E-56}) \end{aligned}$$

ここで

$$\bar{G}_{jk} = \sum_{n=j}^{\infty} \bar{d}_{jn} \bar{g}_{nk}, \quad (\text{E-57})$$

$$\bar{g}_k(y) = g_k(hy) = \sum_{n=0}^{\infty} \bar{g}_{nk} y^n. \quad (\text{E-58})$$

$g_k(y)$  を  $y$  のべきで展開する。

$$g_k(y) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{g_{nk} y^n h^{-n}}{(n+2)!}, \quad (\text{E-59})$$

また

$$\bar{d}_{jm} = \frac{(n+2)!}{(j+2)!} d_{jm} \quad (\text{E-60})$$

とおく。

$g_k(hy)$  は (E-59) 式から

$$g_k(hy) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{g_{nk} h^n y^n h^{-n}}{(n+2)!} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{g_{nk}}{(n+2)!} y^n. \quad (\text{E-61})$$

(E-61) 式と (E-58) 式から

$$\bar{g}_{nk} = \frac{g_{nk}}{(n+2)!}. \quad (\text{E-62})$$

したがって  $\bar{G}_{jk}$  は (E-60) 式と (E-62) 式を (E-57) 式に代入して

$$\bar{G}_{jk} = \sum_{n=j}^{\infty} \frac{(n+2)!}{(j+2)!} d_{jn} \frac{g_{nk}}{(n+2)!} = \frac{1}{(j+2)!} \sum_{n=j}^{\infty} d_{jn} g_{nk} \quad (\text{E-63})$$

(E-52) 式で  $s+1$  を  $y$  とおけば  $g_k(hy)$  となり, また同式の右辺の指数および  $\cosh(hy)$  を  $y$  のべきで展開し, (E-61) 式と比較すると (E-61) 式の右辺の  $g_{nk}$  が次の様に求まる。

$$\left. \begin{aligned} g_{n0} &= (-h)^n \\ g_{nk} &= \begin{cases} h^n & n=\text{偶数} \\ 0 & n=\text{奇数} \end{cases} \\ g_{nN} &= h^n (1+N')^{n+2} - 2h^n N'^{n+2} \\ g_{n, N+1} &= h^n N'^{n+2} \end{aligned} \right\} \quad (\text{E-64})$$

以上で (E-63) 式から  $\bar{G}_{jk}$  が計算でき,  $\bar{G}_{jk}$  を知るにより (E-55), (E-56) 両式から  $\phi_{pk}^0$  が計算できることになる。

実際の計算は次の様に行うと便利である。

$$\left. \begin{aligned} 0 \leq k < N \\ G_{jk} &= h^{-j} (j+2)! \bar{G}_{jk}, \\ d_{jn} &= \frac{(j+2)!}{(n+2)!} \bar{d}_{jn}, \\ A_k &= \frac{h(1+\rho)^2}{2\rho} e^{-kh}, \\ P_{pj}^k &= \frac{2-\delta_{k0}}{4\rho} (2p+1) \frac{h(1+\rho)^2}{(j+2)!} \\ &\quad \times P_p^{(j)}(\mu_k) [A_k]^j, \end{aligned} \right\} \quad (\text{E-65})$$

とおくと (E-55) 式は次式で表わせる。

$$\phi_{pk}^0 = \sum_{j=0}^p P_{pj}^k G_{jk}$$

ここで

$$\begin{aligned} G_{jk} &= h^{-j} (j+2)! \bar{G}_{jk} \\ &= h^{-j} (j+2)! \frac{1}{(j+2)!} \sum_{n=j}^{\infty} d_{jn} g_{nk} \\ &= h^{-j} \sum_{n=j}^{\infty} d_{jn} g_{nk} \end{aligned}$$

したがって  $G_{jk}$  は  $k$  の値により次の様に求まる。

$$\left. \begin{aligned} G_{j0} &= (-1)^j \sum_{n=0}^{\infty} d_{j, j+n} (-h)^n \\ G_{jk} &= \begin{cases} \sum_{n=0}^{\infty} d_{j, j+2n} \cdot h^{2n} & (j=\text{偶数}) \\ \sum_{n=0}^{\infty} d_{j, j+2n+1} \cdot h^{2n+1} & (j=\text{奇数}) \end{cases} \end{aligned} \right\} \quad (\text{E-67})$$

$k=N$  の場合,  $N'$ ,  $N'+1$  の関数となるので, これを  $x$  と表わすと,

$$G_{jN}(x) = x^{-2} (xh)^{-j} (j+2)! \bar{G}_{j, N+1}(x)$$

(382)

$$\left. \begin{aligned} A_N(x) &= \frac{(1-\rho)^2}{2\rho} hx \\ P_{pj}^N(x) &= (2p+1) \frac{(1-\rho)^2}{4\rho} \\ &\quad \times x^2 h e^{(N+1)h} P_p^{(j)}(-1) \frac{[A_N(x)]^j}{(j+2)!} \end{aligned} \right\} \quad (\text{E-68})$$

とおく。いま

$$\phi_{pN}(x) = \sum_{j=0}^p P_{pj}^N(x) G_{jN}(x) \quad (\text{E-69})$$

とおき, この式で  $x=N'$  とすると, これは  $\phi_{p, N+1}^0$  になる。

$$\begin{aligned} \phi_{pN}(N') &= \sum_{j=0}^p P_{pj}^N(N') G_{jN}(N') \\ &= \phi_{p, N+1}^0 \end{aligned} \quad (\text{E-70})$$

ここで  $G_{jN}(N')$  は

$$\begin{aligned} G_{jN}(N') &= (N')^{-2} (N'h)^{-j} (j+2)! \\ &\quad \times \frac{1}{(j+2)!} \sum_{n=j}^{\infty} d_{jn} g_{n, N+1} \\ &= (N')^{-2} (N')^{-j} (h)^{-j} \sum_{n=j}^{\infty} d_{jn} h^n (N')^{n+2} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} d_{j, n+j} (N'h)^n \end{aligned} \quad (\text{E-71})$$

次いで (E-69) 式で  $x=N'+1$  とおくと

$$\phi_{pN}(N'+1) = \sum_{j=0}^p P_{pj}^N(N'+1) G_{jN}(N'+1) \quad (\text{E-72})$$

ここで  $G_{jN}(N'+1)$  は

$$\begin{aligned} G_{jN}(N'+1) &= (N'+1)^{-2} (N'+1)^{-j} (h)^{-j} \sum_{n=j}^{\infty} d_{jn} h^n (N'+1)^{n+2} \\ (\text{E-64) 式の関係から} \\ &= h^n (N'+1)^{n+2} = g_{n, N+2} + 2g_{n, N+1} \end{aligned}$$

したがって

$$\begin{aligned} G_{jN}(N'+1) &= (N'+1)^{-2} (N'+1)^{-j} (h)^{-j} \\ &\quad \times \left\{ \sum_{n=j}^{\infty} d_{jn} g_{n, N+2} + \sum_{n=j}^{\infty} d_{jn} g_{n, N+1} \right\} \end{aligned}$$

したがって (E-70), (E-71), (E-72) 式及び (E-56) 式から次式を得る。

$$\phi_{pN}^0 = e^{-h} \{ \phi_{pN}(1+N') - 2\phi_{pN}(N') \} \quad (\text{E-73})$$

以上で  $\phi_{pk}^0$  の実際の計算は終わったわけであるが, なお  $d_{jn}$  及び  $P_{pj}^k$  の求め方について, 一層詳細に書くことと次の様である。

$$\begin{aligned} d_{jn} &= \frac{(j+2)!}{(n+2)!} \bar{d}_{jn}, \\ \bar{d}_{jn} &= \delta_{j0} + \sum_{\lambda=0}^{n-j} \binom{n}{\lambda} \bar{d}_{j-1, n-1-\lambda} \quad (0 \leq j \leq n) \\ &= 0 \quad (0 \leq n < j) \end{aligned}$$



したがって

$$\left. \begin{aligned} d_{00} &= 1 \\ d_{0n} &= \frac{d_0, n-1}{n+2} \quad (n > 0) \\ d_{jm} &= \frac{(j+2)}{(n+1)(n+2)} \sum_{\lambda=0}^{n-j} \frac{n+1-\lambda}{\lambda!} \\ &\quad \times d_{j-1, n-1-\lambda} \quad (0 < j \leq n) \\ &= 0 \quad (0 \leq n < j) \end{aligned} \right\} \quad (\text{E-74})$$

を得る。 $P_{pj}^k$  及び  $P_{pj}^N(x)$  の計算も次の様に漸化式から求めた方が便利である。(E-65) 式及び (E-68) 式の  $P_{pj}^k$  の式から、

$$\left. \begin{aligned} P_{00}^k &= \frac{2-\delta_{k0}}{4\rho} \cdot \frac{h(1+\rho)^2}{2!} P_0^{(0)}(\mu_k) [A_k]^0 \\ &= \frac{(2-\delta_{k0})}{8\rho} h(1+\rho^2) \\ P_{00}^N(x) &= \frac{(1-\rho)^2}{4\rho} x^2 h e^{(N+1)\lambda} \\ &\quad \times P_0^{(0)}(-1) \frac{[A_N(x)]^0}{2!} \\ &= \frac{(1-\rho)^2 h}{4\rho} x^2 e^{(N+1)\lambda} \\ P_{p0}^k &= \frac{2p+1}{p} \left\{ \mu_k P_{p-1, 0}^k - \frac{p-1}{2p-3} P_{p-2, 0}^k \right\} \\ &\quad (p > 0) \\ P_{p+1, j+1}^k &= (2p+3) \\ &\quad \times \left\{ \frac{P_{p-1, j+1}^k}{2p-1} + A_k \frac{P_{pj}^k}{j+3} \right\} \\ &\quad (p \geq j \geq 0) \end{aligned} \right\} \quad (\text{E-75})$$

上式の証明はルジャンドルの漸化式を適用すれば簡単にできる。すなわちルジャンドルの漸化式は

$$\left. \begin{aligned} P_l(\mu_k) &= \frac{2l-1}{l} \mu_k P_{l-1}(\mu_k) \\ &\quad - \frac{l-1}{l} P_{l-2}(\mu_k) \\ P_{p+1}^{(j+1)}(\mu_k) &= P_{p-1}^{(j+1)}(\mu_k) \\ &\quad + (2p+1) P_p^{(j)}(\mu_k) \end{aligned} \right\} \quad (\text{E-76})$$

である。したがって

$$\begin{aligned} P_{p0}^k &= \frac{2-\delta_{k0}}{4\rho} (2p+1) \frac{h(1+\rho)^2}{2!} P_p^{(0)}(\mu_k) [A_k]^0 \\ &= \frac{(2-\delta_{k0})}{8\rho} h(1+\rho)^2 (2p+1) P_p(\mu_k) \\ &= P_{00}^k \cdot P_p(\mu_k) (2p+1) \quad (\text{E-77}) \\ P_{pj}^k &= \frac{2-\delta_{k0}}{4\rho} (2p+1) \frac{h(1+\rho)^2}{(j+2)!} P_p^{(j)}(\mu_k) [A_k]^j \\ &= \frac{2}{(j+2)!} P_p^{(j)}(\mu_k) P_{00}^k [A_k]^j (2p+1) \end{aligned}$$

(E-78)

(E-77) 式, (E-78) 式の  $P_p(\mu_k)$ ,  $P_p^{(j)}(\mu_k)$  に (E-76) 式を代入すれば  $P_{p0}^k$ ,  $P_{p+1, j+1}^k$  について漸化式を得る。

$$\begin{aligned} P_{p0}^k &= (2p+1) \left\{ \frac{2p-1}{p} \mu_k P_{p-1}(\mu_k) \right. \\ &\quad \left. - \frac{p-1}{p} P_{p-2}(\mu_k) \right\} P_{00}^k \\ &= \frac{2p+1}{p} \left\{ \mu_k P_{p-1, 0}^k - \frac{p-1}{2p-3} P_{p-2, 0}^k \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} P_{p+1, j+1}^k &= \frac{2}{(j+3)!} [A_k]^{j+1} P_{00}^k(\mu_k) \\ &\quad \times (2p+3) P_{p+1}^{(j+1)}(\mu_k) \\ &= \frac{2}{(j+3)!} [A_k]^{j+1} P_{00}^k(\mu_k) (2p+3) \\ &\quad \times \{ P_{p-1}^{(j)} + (2p+1) P_p^{(j)} \} \\ &= (2p+3) \left\{ \frac{P_{p-1}^{(j+1)}}{(j+3)!} [A_k]^{j+1} + \frac{A_k}{(j+3)} \right. \\ &\quad \left. \times \frac{(2p+1)}{(j+2)!} P_p^{(j)} [A_k]^j \right\} 2P_{00}^k \\ &= (2p+3) \left\{ \frac{P_{p-1, j+1}^k}{2p-1} + A_k \frac{P_{pj}^k}{j+3} \right\} \end{aligned}$$

以上の計算で実際に  $\phi_{pk}^0$  を求める計算方法が確立したわけである。ここで簡単にまとめておく。

$$\phi_{pk}^0 = \sum_{j=0}^p P_{pj}^k G_{jk} \quad (0 \leq k < N),$$

$$\phi_{pN}^0 = e^{-h} \{ \phi_{pN}(1+N') - 2\phi_{pN}(N') \},$$

$$\phi_{p, N+1}^0 = \phi_{pN}(N').$$

ここで

$$\phi_{pN}(N') = \sum_{j=0}^p P_{pj}^N(N') G_{jN}(N'),$$

$$N' = \frac{2}{h} \ln \left( \frac{1+\rho}{1-\rho} \right) - N,$$

$$N = \left[ \frac{2}{h} \ln \left( \frac{1+\rho}{1-\rho} \right) \right],$$

[ ] はガウス記号である。

また  $P_{pj}^k$  は (E-75) 式で与えられ,  $G_{jk}$  は (E-67), (E-71) で与えられる。

## 附録 F 条件 4 のマトリックス

### $\phi_{pk}^{ii}$ の計算

条件 4 の場合の  $\phi_{pk}^i$  の計算方法を述べる。(5') 式から  $u' - u = kh$  を得るから (A-7) 式は

$$\alpha_k = \frac{1+\rho}{2\rho} e^{-kh/2} - \frac{1-\rho}{2\rho} e^{kh/2} \quad (\text{F-1})$$

で表わせる。(4) 式の積分は附録 B と同様にすすめる。(B-4) 式は次式で表わす。

$$\begin{aligned} (\text{B-4}) &= \frac{2p+1}{2} \int_{-1}^1 \sigma(u') f_p(u') N_l(x, u') \\ &\quad \times P_p(\mu) P_l(\alpha_k) d\mu \\ &= \sum_{k=0}^{N+1} \sigma_k N_{lk} f_{pk} e^{-kh} \phi_{pk}^l \end{aligned}$$

ここで

$$\phi_{pk}^l = \phi_{pk}^0 P_l(\alpha_k), \quad (\text{F-2})$$

$$\phi_{pk}^0 = \frac{2p+1}{2} \int_{-1}^1 H(u') P_p(\mu) d\mu, \quad (\text{F-3})$$

$$H(u') = \sigma(u') f_p(u') N_l(x, u').$$

(F-3) 式は附録 C の定理 1 で  $l=0$  とした場合であり、条件 4 の場合も条件 3 と同様に附録 E で計算される。したがって (F-2) 式から  $\phi_{pk}^l$  を求めれば条件 4 の場合の  $\Psi_{ik}^{ji}(x)$  は計算できる。

## 附録 G マトリックス $T_{0k}^{ji}$ の計算

(6) 式の  $\omega'$  についての積分を実行すると次式になる。

$$\begin{aligned} \sum_i \int_u^\infty n_i(x) \sigma_{in, i}(u') g_i(u', u) \\ \times \sum_{q=1}^{2Q} a_{0q} N(x, \omega_q, u') E_0 e^{u'} du' \end{aligned} \quad (\text{G-1})$$

ここで  $g_i(u', u)$  は (16) 式で近似することにし、(G-1) 式の  $u'$  についての積分は以下に述べるように、 $u$  について  $u \geq u_B$ ,  $u < u_B$  の 2 通りに分けて計算する。

i)  $u \geq u_B$

$H(u') \equiv \sigma_{in}(u') g_c(u', u) N(u') E_0 e^{u'}$  とおく。添字  $i$  を除いてある。また  $N(u') \equiv N(x, \omega_q, u')$ 。

(G-1) 式の積分は次式の積分を求めればよい。

$$\int_{u_j}^\infty H(u') du' \quad (\text{G-2})$$

(G-2) 式の積分を台形公式で求めると

$$\int_{u_j}^\infty H(u') du' = \frac{1}{2} h H(u_j) + h \sum_{k=1}^\infty H(u_{j+k})$$

ここで

$$\frac{1}{2} h H(u_j) = \frac{h}{2} \sigma_{in}(u_j) g_c(u_j, u_j) N(u_j) E_0 e^{u_j}$$

$$h H(u_{j+k}) = h \sigma_{in}(u_{j+k}) g_c(u_{j+k}, u_j) N(u_{j+k}) E_0 e^{u_{j+k}}$$

したがって

(384)

$$\left. \begin{aligned} T_{00}^j &= \frac{h}{2} \sigma_{in}(u_j) g_c(u_j, u_j) E_0 e^{u_j}, \\ T_{0k}^j &= h \sigma_{in}(u_{j+k}) g_c(u_{j+k}, u_j) E_0 e^{u_{j+k}}, \end{aligned} \right\} \quad (\text{G-3})$$

$k > 0$

とおけば、(G-1) 式は次の様になる。

$$\sum_i \sum_{k=0}^{J-j} \sum_{q=1}^{2Q} n_i(x) a_{0q} T_{0k}^{ji} N(x, \omega_q, u_j + kh) \quad (\text{G-4})$$

ここで  $C_{0k}^{ji} = n_i(x) a_{0q} T_{0k}^{ji}$  とおけば (G-3) 式は (17) 式になる。

ii)  $u < u_B$

$H(u')$  を i) と同様に定義すると (G-1) 式の積分は次式の積分を求めればよい。

$$\begin{aligned} \int_{u_B}^\infty H(u') du' + \int_{u_j}^{u_B} \sigma_{in}(u') \\ \times \sum_{\nu} a_{\nu}(u') \delta[u' - (u + u^\nu)] E_0 e^{u'} N(u') du' \end{aligned} \quad (\text{G-5})$$

(G-5) 式の第 1 項の積分は i) の場合と同様に求まり、 $T_{0k}^j$  は次の様である。

$$\left. \begin{aligned} T_{0, B-j}^j &= \frac{h}{2} \sigma_{jn}(u_B) g_c(u_B, u_j) E_0 e^{u_B}, \\ T_{0k}^j &= h \sigma_{in}(u_{j+k}) g_c(u_{j+k}, u_j) E_0 e^{u_{j+k}}. \end{aligned} \right\} \quad (\text{G-6})$$

$(k > B-j)$

(G-5) 式の第 2 項の積分は次の和の形で書ける。ここではラサジ  $u$  をエネルギー  $E$  に戻して書く。理由は核の励起エネルギーが  $\omega'$  より  $E^\nu$  として与えられるためである。

$$\sum_{\nu} \sigma_{in}(E_j + E^\nu) a_{\nu}(E_j + E^\nu) N(E_j + E^\nu) \quad (\text{G-7})$$

ここで  $\nu$  についての和は  $E_j + E^\nu < E_B$  を満足する全ての  $\nu$  についてとる。また  $\nu$  は  $k$  に対して次の関係を満足するものとする。

$$E_j e^{kh} \leq E_j + E^\nu < E_j e^{(k+1)h}$$

$k$  は上式の関係から次の様に定まる。

$$\left. \begin{aligned} k \equiv k(\nu, j) &= \left[ \frac{1}{h} \ln \left( 1 + \frac{E^\nu}{E_j} \right) \right] \\ \text{また} \\ \theta_{k\nu}^j &= \frac{1}{h} \ln \left( 1 + \frac{E^\nu}{E_j} \right) - k(\nu, j) \end{aligned} \right\} \quad (\text{G-8})$$

とする。ここで [ ] はガウス記号である。

(G-8) 式で  $k(\nu, j)$  が同じ値をとる全ての  $\nu$  の集まりを  $S_k$  とする。

(G-7) 式は次式を  $k$  について和をとれば求まる。

$$\begin{aligned} \sum_{\nu \in S_k} \sigma_{in}(E_{j+k}) a_{\nu}(E_{j+k}) N(E_{j+k}) (1 - \theta_{k\nu}^j) \\ + \sum_{\nu \in S_k} \sigma_{in}(E_{j+k+1}) a_{\nu}(E_{j+k+1}) N(E_{j+k+1}) \theta_{k\nu}^j \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{\nu \in S_k} \sigma_{in}(E_{j+k}) a_{\nu}(E_{j+k}) N(E_{j+k}) (1 - \theta_{k\nu}^j) \\
&\quad + \sum_{\nu \in S_{k-1}} \sigma_{in}(E_{j+k}) a_{\nu}(E_{j+k}) N(E_{j+k}) \theta_{k-1, \nu}^j \\
&\hspace{15em} (G-9)
\end{aligned}$$

したがって

$$\left. \begin{aligned}
T_{0k}^j &= \sum_{\nu \in S_k} \sigma_{jn}(E_{j+k}) a_{\nu}(E_{j+k}) (1 - \theta_{k\nu}^j) \\
&\quad + \sum_{\nu \in S_{k-1}} \sigma_{in}(E_{j+k}) a_{\nu}(E_{j+k}) \theta_{k-1, \nu}^j, \\
&\hspace{10em} (0 \leq k < B-j) \\
T_{0, B-j}^j &= \sum_{\nu \in S_{B-j-1}} \sigma_{in}(E_B) a_{\nu}(E_B) \\
&\quad \times \theta_{B-j-1, \nu}^j.
\end{aligned} \right\} (G-10)$$

以上で  $u < u_B$  の場合の積分が求まる。ここでまとめておくと、(G-6)、(G-10) 両式から、

$$\begin{aligned}
T_{0k}^j &= h \sigma_{in}(u_{j+k}) g_c(u_{j+k}, u_j) E_0 e^{u_{j+k}}, \quad k > B-j \\
T_{0k}^j &= \frac{h}{2} \sigma_{in}(u_{j+k}) g_c(u_{j+k}, u_j) E_0 e^{u_{j+k}} \\
&\quad + \sum_{\nu \in S_{k-1}} \sigma_{in}(E_{j+k}) a_{\nu}(E_{j+k}) \theta_{k-1, \nu}^j, \quad k = B-j \\
T_{0k}^j &= \sum_{\nu \in S_k} \sigma_{in}(E_{j+k}) a_{\nu}(E_{j+k}) (1 - \theta_{k\nu}^j) \\
&\quad + \sum_{\nu \in S_{k-1}} \sigma_{in}(E_{j+k}) a_{\nu}(E_{j+k}) \theta_{k-1, \nu}^j, \\
&\hspace{15em} (0 \leq k < B-j)
\end{aligned}$$

が得られ、

$$C_{qk}^{jt} = n_i(x) a_{0q} T_{0k}^{jt}$$

とおけば (G-1) 式は (17) 式になる。

## 附録 H 輸送方程式の積分

(19) 式を  $x$  について積分し次式を得る。

$$\begin{aligned}
&N(x, \omega, u_j) \\
&= N(x', \omega, u_j) \exp \left\{ -\frac{\mu_T(x, u_j)}{\omega} (x - x') \right\} \\
&\quad + \frac{1}{\omega} \exp \left\{ -\frac{\mu_T(x, u_j)}{\omega} x \right\} \int_{x'}^x \exp \left\{ \frac{\mu_T(x, u_j)}{\omega} t \right\} \\
&\quad \times F[N; t, \omega, u_j] dt \hspace{10em} (H-1)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= F[N; x, \omega, u_j] \frac{(x - x')}{\omega} \times \frac{\frac{\mu_T(x, u_j)}{\omega} (x - x') + \exp \left\{ -\frac{\mu_T(x, u_j)}{\omega} (x - x') \right\} - 1}{\left\{ \frac{\mu_T(x, u_j)}{\omega} (x - x') \right\}^2} \\
&\quad + F[N; x', \omega, u_j] \frac{(x - x')}{\omega} \times \frac{1 - \left\{ 1 + \frac{\mu_T(x, u_j)}{\omega} (x - x') \right\} \exp \left\{ -\frac{\mu_T(x, u_j)}{\omega} (x - x') \right\}}{\left\{ \frac{\mu_T(x, u_j)}{\omega} (x - x') \right\}^2} \\
&= \alpha^j \cdot F[N; x, \omega, u_j] + \beta^j F[N; x', \omega, u_j]
\end{aligned}$$

$F[N; t, \omega, u_j]$  が  $x$  について  $(x, x')$  間で 1 次関数で近似できると仮定すると、これを

$$F[N; t, \omega, u_j] \equiv F(t) = a + bt$$

とおくことができる。(H-1) 式の右辺に含まれる積分は次の様に計算できる。

$$\begin{aligned}
&\int_{x'}^x \exp \left\{ \frac{\mu_T(x, u_j)}{\omega} t \right\} F(t) dt \\
&= a \left\{ \frac{1}{\mu_T(x, u_j)/\omega} \exp \left( \frac{\mu_T(x, u_j)}{\omega} x \right) \right. \\
&\quad \left. - \frac{1}{\mu_T(x, u_j)/\omega} \exp \left( \frac{\mu_T(x, u_j)}{\omega} x' \right) \right\} \\
&\quad + b \left\{ \frac{x}{\mu_T(x, u_j)/\omega} \exp \left( \frac{\mu_T(x, u_j)}{\omega} x \right) \right. \\
&\quad \left. - \frac{x'}{\mu_T(x, u_j)/\omega} \exp \left( \frac{\mu_T(x, u_j)}{\omega} x' \right) \right\} \\
&\quad - \frac{b}{\mu_T(x, u_j)/\omega} \left\{ \exp \left( \frac{\mu_T(x, u_j)}{\omega} x \right) \right. \\
&\quad \left. - \exp \left( \frac{\mu_T(x, u_j)}{\omega} x' \right) \right\}
\end{aligned}$$

したがって

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{\omega} \exp \left\{ -\frac{\mu_T(x, u_j)}{\omega} x \right\} \int_{x'}^x \exp \left\{ \frac{\mu_T(x, u_j)}{\omega} t \right\} F(t) dt \\
&= F(x) \frac{1}{\omega} \left[ \frac{1}{\mu_T(x, u_j)/\omega} - \frac{1}{\{\mu_T(x, u_j)/\omega\}^2 (x - x')} \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{\{\mu_T(x, u_j)/\omega\}^2 (x - x')} \right. \\
&\quad \times \exp \left\{ -\frac{\mu_T(x, u_j)}{\omega} (x - x') \right\} \left. \right] \\
&\quad + F(x') \frac{1}{\omega} \left[ -\frac{1}{\mu_T(x, u_j)/\omega} \right. \\
&\quad \times \exp \left\{ -\frac{\mu_T(x, u_j)}{\omega} (x - x') \right\} \\
&\quad \left. + \frac{1}{\{\mu_T(x, u_j)/\omega\}^2 (x - x')} \right. \\
&\quad \left. - \frac{1}{\{\mu_T(x, u_j)/\omega\}^2 (x - x')} \right. \\
&\quad \times \exp \left\{ -\frac{\mu_T(x, u_j)}{\omega} (x - x') \right\} \left. \right]
\end{aligned}$$

ここで

$$\alpha^j = \frac{d}{\omega} \cdot \frac{\gamma^j + \exp(-\gamma^j) - 1}{(\gamma^j)^2},$$

$$\beta^j = \frac{d}{\omega} \cdot \frac{1 - (1 + \gamma^j)\exp(-\gamma^j)}{(\gamma^j)^2},$$

$$\gamma^j = \frac{\mu_T(x, u_j)}{\omega} d,$$

$$d = x - x'.$$

したがって (H-1) 式は

$$N(x, \omega, u_j) = \exp(-\gamma^j) N(x', \omega, u_j) \\ + \alpha^j F[N; x, \omega, u_j] \\ + \beta^j F[N; x, \omega, u_j]$$

となり, これは (20) 式と同じである。