

**KERNFORSCHUNGSZENTRUM
KARLSRUHE**

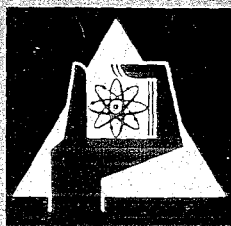
Juli 1970

KFK 1223

Institut für Neutronenphysik und Reaktortechnik

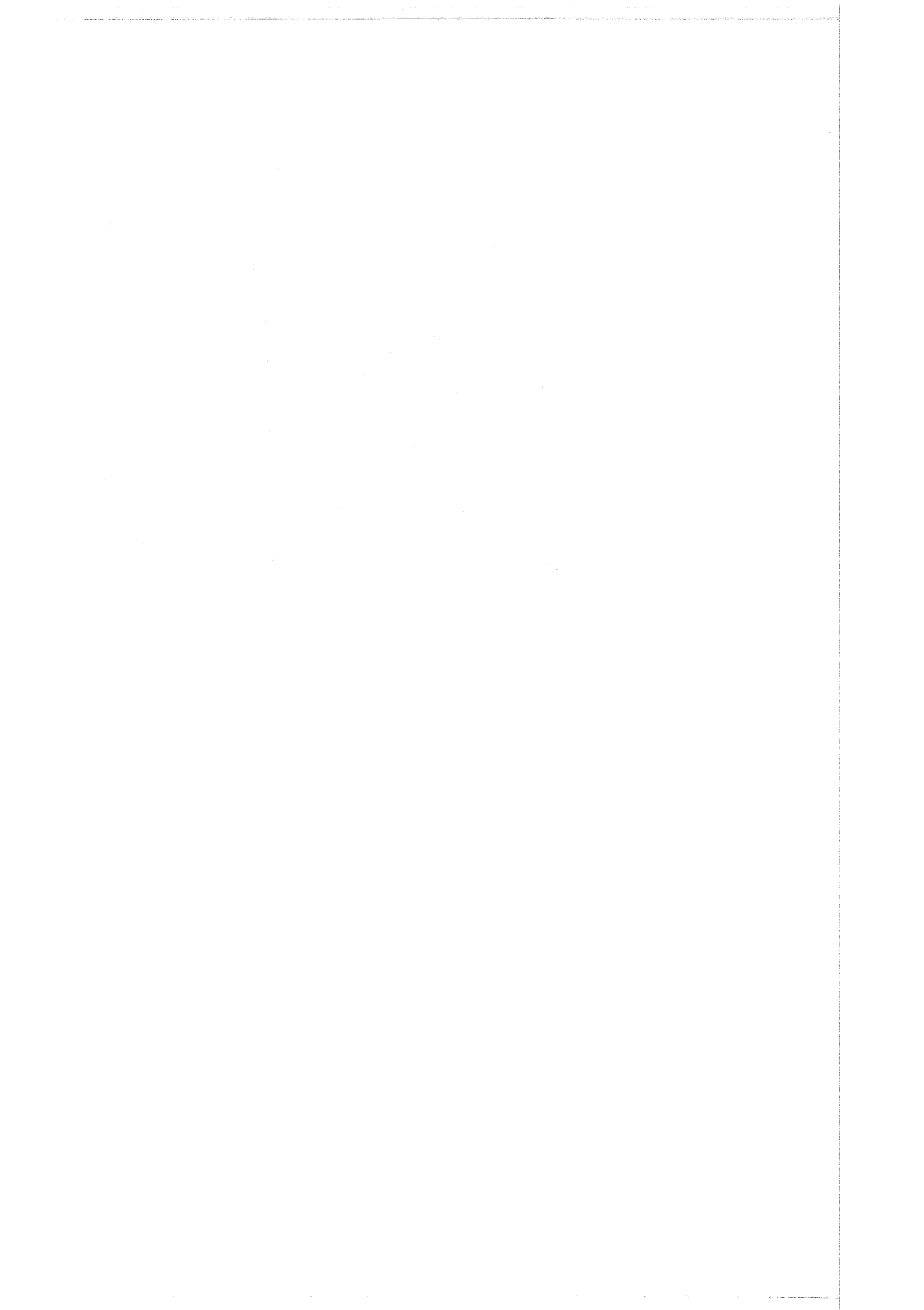
Modale Entwicklung der Neutronentransportgleichung
für ebene Geometrie

W. Schwetje



GESELLSCHAFT FÜR KERNFORSCHUNG M. B. H.

KARLSRUHE



KERNFORSCHUNGSZENTRUM KARLSRUHE

Juli 1970

KFK 1223

Institut für Neutronenphysik und Reaktortechnik

Modale Entwicklung der Neutronentransportgleichung
für ebene Geometrie ^{*}

von

W. Schwetje

Gesellschaft für Kernforschung m.b.H., Karlsruhe

^{*} Dissertation, genehmigt von der Fakultät für Maschinenbau der Universität
Karlsruhe

Zusammenfassung

Durch vier verschiedene Halbraumentwicklungen niedriger Ordnung wird das Problem der Lösung der Neutronentransportgleichung reduziert auf das Problem, lineare Differentialgleichungssysteme erster Ordnung oder Systeme Fredholmscher Integralgleichungen zweiter Art mit entartetem Kern zu lösen. Die Entwicklungsfunktionen können vom Benutzer in jedem Winkelhalbraum dem Problem speziell angepaßt werden. Für die Lösung der reduzierten Gleichungssysteme werden numerische Lösungsverfahren angegeben. An mehreren repräsentativen Beispielen wird gezeigt, daß diese Entwicklungen bei geeigneter Wahl der Entwicklungsfunktionen in sehr viel kürzeren Rechenzeiten die Genauigkeit von totalnumerischen Verfahren erreichen.

Die Arbeit ist an der Universität Karlsruhe als Dissertation angenommen. Referenten sind Prof. Dr. W. Kofink und Prof. Dr. K. Wirtz.

Summary

The problem of solving the neutron transport equation is reduced to the problem of solving systems of linear first-order differential equations or systems of Fredholm integral equations of the second type with degenerate kernel by four different half-range expansions of low order. The expansion functions or modes may be specifically adapted to each problem in both half-spaces. Numerical methods are given for solving the reduced systems of equations. It is demonstrated for several representative examples that these expansions - with suitably chosen modes - yield the same accuracy as numerical discrete ordinate methods, but within much shorter computing time.

This work has been accepted as a thesis by the University of Karlsruhe. References are Prof. Dr. W. Kofink and Prof. Dr. K. Wirtz.

Inhalt

I	Einleitung	1
II	Modale Entwicklung linearer Systeme	6
III	Modale Entwicklung der monoenergetischen Boltzmann-Gleichung für ebene Geometrie	17
	1) Entwicklung nach Funktionen des Winkels	
	2) Entwicklung nach Funktionen des Ortes	
IV	Modale Entwicklung der Multigruppen-Boltzmann-Gleichung für ebene Geometrie	33
	1) Entwicklung nach Funktionen des Winkels	
	2) Entwicklung nach Funktionen des Winkels und der Energie	
	3) Entwicklung nach Funktionen des Ortes	
	4) Entwicklung nach Funktionen des Ortes und der Energie	
V	Numerische Behandlung der reduzierten Boltzmann-Gleichung	51
VI	Ergebnisse der modalen Entwicklung der Boltzmann-Gleichung für Modellprobleme	65
VII	Zusammenfassung	85

Literatur

Abbildungen

I Einleitung

Die exakte Lösung der linearen Boltzmann-Gleichung für den Neutronentransport kann nur für die einfachsten, physikalisch meist bedeutungslosen Probleme angegeben werden. Will man die Boltzmann-Gleichung für realistische Probleme lösen, ist man i. a. auf Näherungsverfahren angewiesen.

Zur Berechnung von Reaktoren wird zumeist die bekannteste Näherung, die Diffusionsnäherung [1], verwendet, da diese auch für größere Probleme mit einem noch tragbaren Rechenaufwand auf modernen Datenverarbeitungsanlagen auskommt und in der Lage ist, die wichtigen Kenngrößen für Reaktoren, wie z. B. Leistungsverteilung, Bruttore, Multiplikationskonstante und kritische Masse, genügend genau zu berechnen.

Bei der Auswertung neutronenphysikalischer Experimente an kleinen Systemen ist jedoch häufig eine genaue Kenntnis der orts-, winkel- und energieabhängigen Neutronenverteilung erforderlich, welche nur mit genaueren Näherungen zur Boltzmann-Gleichung gewonnen werden kann. Die bekanntesten Näherungen, mit denen die orts-, winkel- und energieabhängige Neutronenverteilung berechnet werden kann, sind die sog. S_N -Methode [2], welche die in bestimmter Weise diskretisierte Boltzmann-Gleichung total-numerisch löst, und die P_N -Methode [3 - 9], die auf der Entwicklung der gesuchten Lösung nach einem vollständigen Orthonormalsystem von Funktionen der Winkelvariablen, den Legendre-Polynomen, basiert und in gewissen Fällen der S_N -Methode völlig äquivalent ist [10].

Die P_N -Methode kann allgemein der Klasse der Näherungsverfahren zugeordnet werden, welche auf der Entwicklung der gesuchten Lösung nach gewissen, i. a. vollständigen, Orthogonalsystemen von Funktionen des Ortes, des Winkels oder der Energie beruhen. Die Entwicklung der Lösung nach vollständigen Orthogonalsystemen hat die Vorteile, daß in vielen Fällen die Konvergenz des Verfahrens zur wahren Lösung gezeigt werden kann, daß - aufgrund der Eigenschaften vollständiger Orthogonalsysteme - die Koeffizienten der sich ergebenden Gleichungen für die restlichen Variablen teils direkt angegeben werden können, und daß diese Gleichungen zum Teil analytische Lösungen besitzen.

Der Nachteil dieser Verfahren liegt darin, daß eventuell vorhandene Informationen über die speziellen Eigenschaften des zu untersuchenden Problems nicht verwertet werden können: Ansatz und Lösungsmethode sind allgemein und für alle Probleme gleich. Das hat u.a. zur Folge, daß die mit einer bestimmten Ordnung der Approximation erreichte Genauigkeit von Problem zu Problem sehr verschieden sein kann.

In der Praxis zeigt sich ferner, daß die Konvergenz der Verfahren für zunehmende Approximationsordnung $N \rightarrow \infty$ von keiner oder nur geringer Bedeutung ist, da in fast allen realistischen Problemen die Beschränkung auf eine endliche, meist niedrige Ordnung erforderlich ist, um die Lösung in tragbarer Rechenzeit und auf den zur Verfügung stehenden Datenverarbeitungsanlagen gewinnen zu können. Für Approximationen endlicher Ordnung existieren jedoch i.a. keine Aussagen über die erreichte Genauigkeit.

Auch die Möglichkeit, Koeffizienten der reduzierten Gleichungen oder auch deren Lösung analytisch anzugeben, ist in der Praxis nur für wenige Probleme von Bedeutung, da häufig numerische Schwierigkeiten die Auswertung analytisch gewonnener Formeln verhindern, oder weil diese Auswertung aufwendiger ist, als die numerische Lösung der zugrunde liegenden Gleichungen [20].

Es liegt daher nahe, die Forderung, die Lösung nach einem allgemeinen, vollständigen Orthogonalsystem zu entwickeln, fallen zu lassen, und dafür eine Approximation der Lösung mit wenigen, von Problem zu Problem verschiedenen Entwicklungsfunktionen zu versuchen, die aufgrund physikalischer Überlegung und Erfahrung dem jeweiligen Problem speziell angepaßt werden können. Diese Funktionen brauchen nicht orthogonal zu sein, sondern lediglich linear unabhängig, und sie sind nicht fester Bestandteil des Verfahrens sondern Eingabegrößen der Benutzer. Die Forderung an diese Funktionen ist dann, abgesehen von gewissen Stetigkeits- oder Integrierbarkeitsbedingungen, daß sie mit wenigen Gliedern der Entwicklung eine in einem bestimmten Sinne gute Approximation der gesuchten Lösung ermöglichen [11 - 19].

Die Schwierigkeiten solcher Verfahren sind mannigfaltig. So läßt sich i.a. weder die Konvergenz zeigen noch eine theoretische Aussage über die Genauigkeit der Approximation machen, letzteres allerdings auch nicht bei den erstgenannten Verfahren, wie schon oben erwähnt wurde. Aussagen über die Genauigkeit der Approximation sind jedoch für jeden Benutzer eines Verfahrens von entscheidender Bedeutung. In der vorliegenden Arbeit werden daher einige solcher Verfahren vorgeschlagen und beschrieben und an einigen Modellproblemen hinsichtlich ihrer Güte und ihrer numerischen Schwierigkeiten untersucht.

In der Literatur findet man auf ähnlichen Verfahren beruhende Untersuchungen zur näherungsweise Lösung der Boltzmanngleichung, in denen die monoenergetische Boltzmanngleichung für Halbräume [13], [22] und für homogene, in zwei Richtungen unendlich ausgedehnte Platten [11], [14], [16], [18] behandelt wird. In diesen Arbeiten wird jeweils ein Funktional vorgegeben, dessen Euler-Lagrange'sche Gleichungen gerade die Boltzmanngleichung und die zu ihr adjungierte Gleichung sind. In einem durch die Entwicklungsfunktionen vorgegebenen Unterraum wird ein stationärer Punkt des Funktionals gesucht, das i.a. einen physikalisch sinnvollen integralen Parameter darstellt. Fehler erster Ordnung in den Funktionen bedingen dann lediglich Fehler zweiter Ordnung in dem entsprechenden Parameter. Diese Methode wird in der angelsächsischen Literatur als "variational method" bezeichnet. In [13], [22] sowie in [14], [16] und [18] werden die mit dieser Methode gewonnenen recht genauen integralen Größen der oben skizzierten monoenergetischen Probleme angegeben. Einen Schritt weiter geht M.J. Lancefield in [19]. Dort wird die Lösung der Multigruppen-Boltzmanngleichung für Plattengeometrie durch eine Entwicklung nach Spektren und nach Lösungen der monoenergetischen Boltzmanngleichung approximiert, in dem für jede Schicht der Platte ein repräsentatives Spektrum oder aber für die ganze Platte mehrere repräsentative Lösungen geeignet formulierter monoenergetischer Probleme vorgegeben werden. Durch die oben skizzierte "variational method" wird so die Multigruppen-Boltzmanngleichung im wesentlichen auf zwei gekoppelte Weniggruppen-Boltzmanngleichungen reduziert. Auch M.J. Lancefield gibt in seiner Arbeit lediglich integrale Parameter und ortsabhängige Raten an, welche noch iterativ zu sehr genauen Resultaten verbessert werden können. Der numerische Aufwand ist dabei allerdings recht erheblich und nicht mehr bedeutend kleiner als bei

direkten total-numerischen Verfahren, da bei jeder Iteration zwei gekoppelte Weniggruppen-Boltzmann-Gleichungen total-numerisch zu lösen sind. Lancefield verwendet dazu Weniggruppen-S_N-Rechnungen, die ihrerseits ebenfalls mehr oder weniger ungenaue Approximationen darstellen. Auch ist das Verfahren in seiner Flexibilität sehr begrenzt, denn die "variational method" basiert immer auf einem einzigen Funktional, durch welches dann die Entwicklung immer nur bezüglich des einen zugeordneten Parameters optimiert wird. Auch die vorgeschlagene Entwicklung nach Funktionen der Energie einerseits und nach Funktionen des Ortes und des Winkels andererseits ($\phi(x, \mu, E) = \sum_i \psi_i(E) \rho_i(x, \mu)$) ist, insbesondere weil pro Schicht nur ein Spektrum vorgegeben wird, nicht sehr flexibel, setzt sie doch z.B. voraus, daß Orts- und Winkelverteilung in allen Gruppen durch zwei bis drei Funktionen $\rho_i(x, \mu)$ beschrieben werden können, und daß an allen Ortspunkten die Energieverteilung der in die verschiedensten Richtungen fliegenden Neutronen durch zwei oder drei Spektren beschrieben werden kann. In kleineren Systemen mit u.U. stark anisotrop von außen auffallendem Neutronenfluß ist diese Entwicklung sicher nicht optimal. Lancefield beschränkt seine Berechnungen dann auch auf kritische Anordnungen mit homogenen Randbedingungen.

In der vorliegenden Arbeit werden daher weitaus flexiblere Entwicklungen untersucht, und zwar einmal die Entwicklung nach Funktionen des Ortes oder des Winkels allein, die bei Lösung der Multigruppen-Boltzmann-Gleichung auf ein um eine Dimension reduziertes Multigruppen-Problem führt, und zum anderen die Entwicklung nach Funktionen des Ortes und Funktionen der Energie oder nach Funktionen des Winkels und Funktionen der Energie, die auf einfache Differential- oder Integralgleichungssysteme führen. Zur Bestimmung der jeweils unbekanntenen Funktionen wird im Gegensatz zu den oben zitierten Arbeiten die Methode der "weighted residuals" verwendet, welche erstens i.a. zu kleineren Gleichungssystemen führt und damit geringeren numerischen Aufwand erfordert, zweitens weitaus flexibler in der Optimierung der Entwicklung bezüglich spezieller Größen ist und drittens nach den vorliegenden Untersuchungen [19], [21], [23], [24], [25] bei Anwendung auf Diffusions- und Dynamikgleichungen weder eindeutig zu schlechteren noch eindeutig zu besseren Ergebnissen führt. In einer Reihe von speziellen Formulierungen der "variational method" sind ohnehin beide Methoden identisch. In Abschnitt II wird dieser Punkt genauer diskutiert.

Das Ziel der Untersuchungen der vorliegenden Arbeit ist, mit den oben skizzierten Entwicklungen und der Methode der "weighted residuals" Näherungslösungen zur orts-, winkel- und energieabhängigen Boltzmann-Gleichung zu berechnen, dabei auftretende numerische Schwierigkeiten aufzudecken, die Genauigkeit der Näherungslösungen abzuschätzen sowie Aussagen über die Abhängigkeit der Genauigkeit von den Entwicklungs- und Wichtungsfunktionen zu gewinnen. Alle Aussagen über die Genauigkeit und deren Abhängigkeit von den Eingabegrößen müssen sich dabei auf Vergleiche der Lösungen untereinander und auf Vergleiche mit Lösungen aus anderen Rechenverfahren sowie auf Vergleiche mit experimentellen Ergebnissen stützen.

Gelingt es dann, einen Anwendungsbereich, in dem diese Verfahren genügend genaue Ergebnisse erbringen, abzustecken und gleichzeitig etwa Vorschriften für eine "vernünftige" Auswahl der Entwicklungs- und Wichtungsfunktionen anzugeben, können diese Verfahren in dem abgesteckten Bereich routinemäßig verwendet werden, sollten aber immer bei der Formulierung endgültiger Aussagen, z.B. über die Auslegung eines Experiments, durch eine abschließende total-numerische Rechnung bestätigt werden. Wegen des geringen Rechenaufwandes könnte weiter auch eine Anwendung dieser Verfahren auf Probleme mit komplexerer Geometrie, z.B. Zylindergeometrie, ins Auge gefaßt werden, wenn die Ergebnisse für Probleme mit ebener Geometrie dies als aussichtsreich erscheinen lassen. Man hätte damit sehr schnelle Verfahren, die - insbesondere bei speziellen Fragestellungen - bei geschickter Anwendung ohne großen Rechenzeitaufwand z.B. große Parameterfelder von Auslegungsgrößen zu durchlaufen gestatten, deren endgültige Ergebnisse allerdings stets durch total-numerische Rechnungen bestätigt werden müßten.

II Modale Entwicklung linearer Systeme

In diesem Abschnitt wird eine kurze, allgemeine Darstellung der zur näherungsweisen Lösung der Boltzmann-Gleichung verwendeten Verfahren gegeben, ehe später einige spezielle Verfahren ausführlicher behandelt werden. In der Literatur wird diese Klasse von Verfahren als "Methode der modalen Entwicklung" oder - in der englischsprachigen Literatur - als "modal expansion method" bezeichnet [157].

Die Gleichung zur Beschreibung der stationären Neutronenverteilung in multiplizierenden und nicht-multiplizierenden Medien wird i.a. wegen der geringen Dichte der Neutronen als linear angenommen. Wechselwirkungen der Neutronen untereinander werden vernachlässigt. Da in diesem Abschnitt außer der Linearität keine weiteren Eigenschaften dieser Gleichung betrachtet werden, schreiben wir sie in allgemeiner Form 2.1,

$$2.1 \quad H(\vec{x})\phi(\vec{x}) = q(\vec{x})$$

wobei H ein linearer Operator, ϕ die gesuchte Lösung und q ein - bekannter - Quellterm sind. H , ϕ und q sind Funktionen des Vektors $\vec{x} = (x_1, x_2, \dots, x_N)$.

Über den 2.1 zugrunde liegenden linearen Funktionsraum soll zunächst nichts weiter gesagt werden außer, daß alle ihm angehörenden Funktionen gewissen Randbedingungen genügen.

Unter einer modalen Entwicklung der linearen Gleichung 2.1 bezüglich der Variablen x_1 soll im folgenden das nachstehend beschriebene Verfahren zur approximativen Lösung von 2.1 verstanden werden.

Wir machen für die gesuchte Funktion $\phi(\vec{x})$ den Ansatz 2.2,

$$2.2 \quad \phi(x_1, x_2, \dots, x_N) = \sum_i \psi_i(x_1) \varphi_i(x_2, \dots, x_N)$$

in dem die $\psi_i(x_1)$ bekannte Funktionen der Variablen x_1 sind, die $\varphi_i(x_2, \dots, x_N)$ unbekannte Funktionen der übrigen Variablen.

Damit ist das Problem der näherungsweise Lösung von 2.1 auf die Bestimmung der unbekannt Funktionen $\varphi_i(x_2, \dots, x_N)$ zurückgeführt, welche nur noch von N-1 unabhängigen Veränderlichen abhängen.

Wir merken gleich noch an, daß auch modale Entwicklungen der linearen Gleichung 2.1 bezüglich mehrerer Variablen möglich sind. Entwickeln wir 2.1 bezüglich n Variablen, z.B. durch den Ansatz

$$\phi(x_1, x_2, \dots, x_N) = \sum_i \psi_i(x_1, x_2, \dots, x_n) \varphi_i(x_{n+1}, x_{n+2}, \dots, x_N) ,$$

so ist das ursprüngliche Problem zurückgeführt auf die Bestimmung der unbekannt Funktionen $\varphi_i(x_{n+1}, x_{n+2}, \dots, x_N)$, welche jetzt nur noch von N-n Variablen abhängen. Allgemein wird durch eine modale Entwicklung das Problem der Bestimmung einer Funktion von N Veränderlichen reduziert auf das i.a. leichter zu lösende Problem der Bestimmung mehrerer Funktionen von N-n Veränderlichen.

Die Art der Bestimmung der unbekannt Funktionen des Ansatzes 2.2 charakterisiert die spezielle modale Entwicklung und bestimmt - zusammen mit den vorzuzugenden Entwicklungsfunktionen $\psi_i(x_1)$ - die approximative Lösung 2.2 von 2.1.

Hier soll auf zwei der bekanntesten Verfahren eingegangen werden, die in der Literatur als Variationsmethode (variational method) und als Methode der gewichteten Residuen (weighted residuals method) bekannt sind [11], [12], [15], [19], [21].

Das Variationsverfahren basiert auf einer anderen Formulierung des Problems 2.1, die - wie der Name sagt - aus der Variationsrechnung stammt. Unter gewissen Voraussetzungen läßt sich ein Funktional F angeben, dessen Euler-Lagrange'sche Gleichung gerade 2.1 ist; d.h. die Forderung, daß die erste Variation von F auf dem Raum der zugelassenen Funktionen verschwindet, ist dann äquivalent mit 2.1. Die wichtigste Voraussetzung dafür ist, daß der Operator H selbstadjungiert ist.

Ist H nicht selbstadjungiert wie z.B. der später von uns zu betrachtende Boltzmannoperator, so läßt sich 2.1 nicht mehr allein als Variationsproblem formulieren, sondern 2.1 und die zu 2.1 adjungierte Gleichung 2.3

$$2.3 \quad H^+ \phi^+ = q^+$$

zusammen lassen sich als Variationsproblem formulieren, in dem das Funktional F jetzt sowohl von ϕ als auch von ϕ^+ abhängt.

$$F = F(\phi, \phi^+)$$

Die Forderung, daß die erste Variation von F bezüglich ϕ und ϕ^+ in dem Raum der zugelassenen Funktionen verschwindet, ist jetzt äquivalent mit 2.1 und 2.3.

Das Funktional $F(\phi)$ bzw. $F(\phi, \phi^+)$ ist u.U. ein sinnvoller physikalischer Parameter, der mit Fehlern zweiter Ordnung behaftet ist, wenn die Funktionen, die $\delta F = 0$ näherungsweise erfüllen, noch Fehler erster Ordnung besitzen.

Wie oben gesagt, hat man die exakte Lösung ϕ und ϕ^+ von 2.1 und 2.3 genau dann, wenn die erste Variation von F bezüglich ϕ und ϕ^+ im Raum der zugelassenen Funktionen verschwindet, d.h. wenn F einen stationären Wert annimmt. Sucht man eine Näherungslösung von 2.1 durch den Ansatz 2.2 bzw. eine Näherungslösung von 2.1 und 2.3 durch die Ansätze 2.2 und 2.4,

$$2.4 \quad \phi^+(x_1, x_2, \dots, x_N) = \int_i \psi_i^+(x_1) \varphi_i^+(x_2, x_3, \dots, x_N)$$

so kann man mit 2.2 bzw. 2.4 in das Funktional eingehen, die Integration über die Variable x_1 ausführen, von der nur noch bekannte Funktionen ψ_i und ψ_i^+ abhängen, und erhält ein reduziertes Variationsproblem, das darin besteht, die φ_i bzw. φ_i^+ so zu bestimmen, daß die erste Variation von F bzgl. der φ_i und φ_i^+ in dem Raum der φ_i und φ_i^+ verschwindet. Mit anderen Worten: Man schränkt den Raum der zugelassenen Funktionen ein und löst das auf diesen kleineren Raum reduzierte Variationsproblem. Praktisch bedeutet

dies meist, daß man die Euler-Lagrange'schen Gleichungen des reduzierten Variationsproblems löst.

Die Approximation 2.2 bzw. 2.2 und 2.4 ist dann im reduzierten Funktionsraum in dem Sinne optimal, daß der durch das Funktional dargestellte Parameter in diesem Raum optimal approximiert wird. Dies bedeutet natürlich, daß die Näherungslösung selbst, insbesondere in Intervallen, in denen sie geringen Einfluß auf den Wert des Funktionals hat, sehr viel größere Fehler aufweisen kann als das Funktional.

Die Methode der gewichteten Residuen [11], [12], [15], [19], [21], [23], [26], [27], welche teilweise auch als Kantorowitschverfahren bezeichnet wird, ist eine Verallgemeinerung des bekannten Ritz- bzw. Galerkinverfahrens [26], [27]. Man geht mit dem Ansatz 2.2 ein in 2.1 und erhält 2.5.

$$2.5 \quad H(\vec{x}) \int_i \psi_i(x_1) \psi_i(x_2, x_3, \dots, x_N) - q(\vec{x}) = R(\vec{x})$$

Die Fehlerfunktion $R(\vec{x})$ wird als Residuum bezeichnet. Um die unbekanntenen Funktionen $\psi_i(x_2, \dots, x_N)$ zu bestimmen, fordern wir, daß das Residuum $R(\vec{x})$ orthogonal ist zu einem vorgegebenen Raum von Wichtungsfunktionen w_j . Spannen diese Wichtungsfunktionen den ganzen Raum der zulässigen Funktionen auf und können wir $R(\vec{x})$ orthogonal zu diesem Raum machen, stellt 2.2 die exakte Lösung von 2.1 dar. Spannen jedoch die Wichtungsfunktionen w_j nur einen Teilraum auf und erreichen wir, daß $R(\vec{x})$ orthogonal zu diesem Teilraum ist, so haben wir in 2.2 eine Näherungslösung von 2.1 gefunden, welche in dem Sinne optimal ist, daß das Residuum keine Komponente im Raume der Wichtungsfunktionen w_j besitzt.

Entwickelt man die Lösung nach allen Variablen

$$\phi(\vec{x}) = \sum_i a_i \psi_i(\vec{x})$$

und wählt zur Bestimmung der Konstanten a_i als Wichtungsfunktionen $w_j(\vec{x})$ die Entwicklungsfunktionen,

$$w_j(\vec{x}) = \psi_j(\vec{x}) \quad j=1,2,\dots$$

so geht das Verfahren in das Ritzverfahren über, wenn H positiv-definit ist, oder in das Galerkinverfahren, wenn H nicht positiv-definit ist [27].

Die Bestimmungsgleichungen für die unbekannt Funktionen $\varphi_i(x)$ aus 2.5 lauten

$$2.6 \quad (R(\vec{x}), w_j(x_1)) = 0 \quad j=1,2,\dots,$$

wobei das Skalarprodukt im folgenden identisch ist mit der Integration

$$(R(\vec{x}), w_j(x_1)) = \int dx_1 R(\vec{x}) w_j(x_1)$$

über den zugelassenen Bereich der Variablen x_1 .

In diese Klasse von Entwicklungen gehört z.B. das bekannte PN-Verfahren [3 - 9] zur näherungsweisen Lösung der Boltzmann-Gleichung. Die Entwicklungs- und Wichtungsfunktionen des PN-Verfahrens sind die Legendre-Polynome $P_n(\mu)$. Die Lösung der Boltzmann-Gleichung hängt in einfachen Fällen von zwei Variablen, einer Ortsvariablen x und einer Winkelvariablen μ , ab und wird wie folgt entwickelt:

$$\phi(x, \mu) = \sum_{i=0}^N \varphi_i(x) P_i(\mu)$$

Stellt $H(x, \mu)$ den Boltzmannoperator dar, lauten die Bestimmungsgleichungen für die unbekannt Funktionen $\varphi_i(x)$

$$\int_{-1}^1 P_j(\mu) H(x, \mu) \sum_{i=0}^N \varphi_i(x) P_i(\mu) d\mu = 0 \quad j=0,1,2,\dots,N$$

Hinzu kommen noch $N+1$ Randbedingungen für die $\varphi_i(x)$.

Da in diesem Verfahren Entwicklungs- und Wichtungsfunktionen i.a. keine spezielle physikalische Information enthalten, ist es von allgemeiner Anwendbarkeit. Dies bedingt, daß bei vielen Problemen zur Erreichung einer bestimmten Genauigkeit u.U. eine größere Anzahl von Entwicklungsgliedern benötigt wird als sie bei Entwicklung nach und Wichtung mit physikalisch sinnvolleren Funktionen erforderlich wäre.

Während im Variationsverfahren lediglich eine Freiheit bei der Auswahl der Entwicklungsfunktionen $\psi_1(x_1)$ gegeben ist und während bei einmal gewähltem Funktional in diesem Verfahren die Näherungslösung immer in demselben Sinne optimalisiert wird, bietet das Verfahren der gewichteten Residuen eine weitere Freiheit bei der Auswahl der Wichtungsfunktionen und damit die Freiheit, die Lösung in einem vom Benutzer des Verfahrens vorzugebenden Sinne zu optimalisieren [15].

Ist der Operator H nicht selbstadjungiert, führt die Variationsmethode in vielen Fällen auf die näherungsweise Lösung des normalen und des adjungierten Problems, selbst wenn man nur an der normalen Lösung interessiert ist, während im Verfahren der gewichteten Residuen stets nur ein Problem gelöst zu werden braucht. Der Aufwand der Variationsmethode ist in diesen Fällen natürlich entsprechend größer.

Ferner ist es i.a. möglich, aus physikalischer Erfahrung heraus die Entwicklungsfunktionen $\psi_1(x_1)$ dem speziellen Problem gut anzupassen, da man eine Vorstellung vom Aussehen der Lösung hat. Das Variationsverfahren erfordert jedoch zusätzlich die Entwicklung der Lösung des adjungierten Problems nach den Funktionen $\psi_1^+(x_1)$. Die Lösung des adjungierten Problems ist u.a. aber weitaus weniger anschaulich und bekannt, so daß es häufig schwerfallen wird, dem Problem angepasste Funktionen $\psi_1^+(x_1)$ vorzugeben. Von der "Güte" der vorgegebenen Funktionen hängt aber auch die "Güte" der Approximation ab, so daß i.a. die Entwicklung für das adjungierte Problem schlechter konvergiert.

Ein weiterer Unterschied zwischen beiden Verfahren kann in manchen Problemen ebenfalls spürbare Verbesserungen bzw. Verschlechterungen in der Approximation bedingen. Wie schon oben gesagt, optimalisiert das Variationsverfahren die Näherungslösung im vorgegebenen Raum immer in dem Sinne, daß ein bestimmter Parameter möglichst genau bestimmt wird, während u.U. andere wichtige Forderungen nicht gleichzeitig erfüllbar sind [11], z.B. die "Bilanzforderung", welche im Falle der Boltzmanngleichung besagt, daß die Summe der absorbierten und der das System verlassenden Neutronen im stationären Fall gleich der Summe der Spaltneutronen und der in das System eintretenden Neutronen sein muß. Diese "Bilanzforderung" ist

im Verfahren der gewichteten Residuen durch geeignete Wahl einer Wichtungsfunktion immer erfüllbar. Allgemein kann das Verfahren der gewichteten Residuen durch spezielle Wahl der N verschiedenen Wichtungsfunktionen N verschiedene physikalische Forderungen an die Näherungslösung erfüllen.

Sieht man jedoch von einer Erfüllung plausibler physikalischer Forderungen ab, so kann durch geeignete Wahl der Wichtungsfunktionen das Verfahren der gewichteten Residuen zu demselben reduzierten Gleichungssystem führen wie das Variationsverfahren. Zwei Fälle sollen der Anschaulichkeit halber kurz skizziert werden.

Wie schon vorher fordern wir, daß alle Funktionen aus dem Raum der zulässigen Funktionen gewissen Randbedingungen genügen. Weiter seien alle diese zulässigen Funktionen stetig.

Der Gleichung 2.1,

$$2.1 \quad H(\vec{x}) \phi(\vec{x}) = q(\vec{x})$$

in der der Operator $H(\vec{x})$ jetzt selbstadjungiert und positiv definit sei, ist das Variationsproblem, das Minimum von

$$F(\phi) = \int d\vec{x} \left[\frac{1}{2} q(\vec{x}) \phi(\vec{x}) - \phi(\vec{x}) H(\vec{x}) \phi(\vec{x}) \right]$$

im Raum der zugelassenen Funktionen zu finden, völlig äquivalent.

Der Ansatz 2.2 zur näherungsweise Lösung von 2.1, welcher eine zulässige Funktion darstellen soll, führt im Falle der Methode der gewichteten Residuen auf das Gleichungssystem 2.7

$$2.7 \quad \int dx_1 \left[\frac{1}{2} q(\vec{x}) - H(\vec{x}) \right] \psi_i(x_1) \psi_i(x_2, \dots, x_N) w_j(x_1) = 0$$
$$j=1, 2, \dots$$

Im Variationsverfahren geht man mit 2.2 ein in $F(\phi)$ und erhält 2.8.

$$2.8 \quad F(\phi) = \int d\vec{x} \left[2q(\vec{x}) \prod_i \psi_i(x_1) \varphi_i(x_2, \dots, x_N) - \prod_i \psi_i(x_1) \varphi_i(x_2, \dots, x_N) \cdot H(\vec{x}) \prod_i \psi_i(x_1) \varphi_i(x_2, \dots, x_N) \right]$$

Führt man die Integration über die Variable x_1 , von der nur noch bekannte Funktionen abhängen, aus, ergibt sich das reduzierte Funktional $F(\varphi_i)$,

$$F(\varphi_i) = \int dx_2 \dots dx_N \left\{ \int dx_1 \left[2q \prod_i \psi_i \varphi_i - \prod_i \psi_i \varphi_i H \cdot \prod_i \psi_i \varphi_i \right] \right\}$$

wobei wir jetzt die Argumente fortgelassen haben.

Die Forderung, daß das reduzierte Funktional $F(\varphi_i)$ bei unabhängiger Variation aller φ_i einen Extremwert annimmt, führt auf das Gleichungssystem 2.9.

$$2.9 \quad \int dx_1 \left[q - H \prod_i \psi_i \varphi_i \right] \psi_j = 0 \quad j=1,2,\dots$$

2.9 ist mit 2.7 identisch, wenn wir

$$w_j(x_1) = \psi_j(x_1)$$

setzen; d.h. die beiden Verfahren gehen ineinander über, wenn wir die Wichtungs- gleich den Entwicklungsfunktionen setzen.

Den beiden Gleichungen 2.1 und 2.3,

$$2.1 \quad H(\vec{x})\phi(\vec{x}) = q(\vec{x})$$

$$2.3 \quad H^+(\vec{x})\phi^+(\vec{x}) = q^+(\vec{x})$$

in denen der Operator H nicht selbstadjungiert sei, $H \dagger H^+$, ist das Variationsproblem, einen stationären Punkt von

$$2.10 \quad F(\phi, \phi^+) = \int d\vec{x} \left[q\phi^+ + q^+\phi - \phi^+ H \phi \right]$$

im Raum der zugelassenen Funktionen zu finden, völlig äquivalent.

Der Ansatz 2.2 für eine Näherungslösung von 2.1

$$2.2 \quad \phi(\vec{x}) = \sum_i \psi_i(x_1) \varphi_i(x_2, \dots, x_N)$$

führt im Falle der Methode der gewichteten Residuen wieder auf das Gleichungssystem 2.7 zur Bestimmung der unbekannt Funktionen $\varphi_i(x_2, \dots, x_N)$.

Im Variationsverfahren müssen Näherungslösungen von 2.1 und 2.3 gesucht werden. Geht man mit den Ansätzen 2.2 bzw. 2.4 ein in 2.10, erhält man 2.11.

$$2.11 \quad F(\phi, \phi^+) = \int dx_1 \left[-q \sum_i \psi_i^+ \varphi_i^+ + q^+ \sum_i \psi_i \varphi_i - \sum_i \psi_i^+ \varphi_i^+ H \sum_i \psi_i \varphi_i \right]$$

Führt man in 2.11 die Integration über die Variable x_1 aus, von der nur die bekannten Funktionen ψ_i und ψ_i^+ abhängen, ergibt sich das reduzierte Funktional zu

$$F(\varphi_i, \varphi_i^+) = \int dx_2 \dots dx_N \left\{ \int dx_1 \left[-q \sum_i \psi_i^+ \varphi_i^+ + q^+ \sum_i \psi_i \varphi_i - \sum_i \psi_i^+ \varphi_i^+ H \sum_i \psi_i \varphi_i \right] \right\}$$

Die Forderung, daß das reduzierte Funktional $F(\varphi_i, \varphi_i^+)$ bei unabhängiger Variation aller φ_i und φ_i^+ einen stationären Wert annimmt, führt jetzt auf

$$2.12 \quad \int dx_1 \left[-q - H \sum_i \psi_i^+ \varphi_i^+ \right] \psi_j^+ = 0 \quad j=1,2,\dots$$

$$2.13 \quad \int dx_1 \left[-q^+ - H \sum_i \psi_i \varphi_i \right] \psi_j = 0 \quad j=1,2,\dots$$

Hieraus sind die unbekannt Funktionen φ_i und φ_i^+ zu bestimmen. Die unbekannt Funktionen φ_i , welche für die Näherungslösung 2.1 benötigt werden, sind aus 2.12 zu berechnen. Wählen wir in der Methode der gewichteten Residuen als Wichtungsfunktionen

$$w_j(x_1) = \psi_j^+(x_1) \quad j=1,2,\dots$$

so sind die Gleichungen 2.12 und 2.7 identisch, d.h. beide Methoden führen wieder zum gleichen Ergebnis.

Sind die $\psi_j^+(x_1)$, die vorgegebenen Entwicklungsfunktionen für die Näherungslösung des adjungierten Problems also, Lösungen entsprechender adjungierter Probleme niedrigerer Dimension, so entfällt in der Variationsmethode bis auf die Auswahl dieser Probleme jede Willkürlichkeit bei der Wahl der Wichtungsfunktionen. Sind jedoch die $\psi_j^+(x_1)$ beliebige Entwicklungsfunktionen für das adjungierte Problem, für die es keine adjungierten Bestimmungsgleichungen niedrigerer Dimension gibt, so sind die Funktionen $w_j(x_1)$ der einen Methode ebenso willkürlich wie die $\psi_j^+(x_1)$ der anderen Methode, wobei die $\psi_j^+(x_1)$ lediglich noch dem Gesichtspunkt unterliegen, daß sie Entwicklungsfunktionen des adjungierten Problems sein sollen.

Bislang haben wir gefordert, daß die zugelassenen Funktionen stetig sind und alle gewissen Randbedingungen genügen. Läßt man beide Forderungen fallen, wird also der Raum der zulässigen Funktionen erweitert, so müssen i.a. den oben angeführten Funktionalen noch weitere Glieder hinzugefügt werden, welche die vorgegebenen Randbedingungen und eventuelle Unstetigkeiten der Variationsfunktionen berücksichtigen. Gleichzeitig kommen dann jedoch auch bei der Methode der gewichteten Residuen weitere Bestimmungsgleichungen zur Berücksichtigung der Randbedingungen und eventueller Unstetigkeiten hinzu. Wir wollen auf diesen Punkt nicht weiter eingehen, da wir uns in den folgenden Abschnitten auf das Verfahren der gewichteten Residuen beschränken. Jedoch sei bemerkt, daß sich auch im erweiterten Raum der zulässigen Funktionen i.a. durch geeignete Wahl der Wichtungsfunktionen und der zusätzlichen Bestimmungsgleichungen die Äquivalenz beider Methoden erreichen läßt.

Bisher haben wir nichts über Konvergenz und Fehlerabschätzungen dieser Verfahren gesagt. Unter sehr speziellen Voraussetzungen [13], [20-21] existieren Aussagen zu beiden Fragen, jedoch sind die erforderlichen Voraussetzungen, insbesondere für die Existenz von Fehlerabschätzungen, bei den später behandelten Problemen nicht gegeben. Da ferner die hier vorgesehenen Entwicklungen jeweils gewisse physikalische Kenntnisse berücksichtigen sollen, hängen die Fehler nicht nur von der Anzahl der Glieder der Entwicklung und vom Problem sondern auch von der vom Benutzer

der Verfahren zu treffenden Auswahl der Entwicklungsfunktionen ab. Ziel unserer Untersuchungen ist es daher, anhand von Modellproblemen praktische, sozusagen experimentelle Aussagen über die zu erwartenden Fehler und den erforderlichen numerischen Aufwand bei Approximationen mit wenigen, von Problem zu Problem verschiedenen Entwicklungsfunktionen zu gewinnen und, wenn möglich, gewisse Auswahlkriterien für die Entwicklungs- und Wichtigkeitsfunktionen anzugeben.

III Modale Entwicklung der monoenergetischen Boltzmann-Gleichung für ebene Geometrie

Der in Abschnitt II dargestellte Formalismus der modalen Entwicklung linearer Systeme wird in diesem Abschnitt auf die monoenergetische Boltzmann-Gleichung für ebene Geometrie angewandt. Wir setzen im folgenden immer voraus, daß die Streuung im Laborsystem isotrop ist und daß die Querschnitte konstant (ortsunabhängig) sind. Beides sind keine notwendigen Voraussetzungen, erleichtern jedoch eine übersichtliche Formulierung des Verfahrens. (Bei der numerischen Behandlung von Modellproblemen in Abschnitt VI werden die Querschnitte lediglich als stückweise konstant vorausgesetzt.)

Die stationäre Neutronenverteilung wird dann von der Lösung der Gleichung 3.1 beschrieben (differentielle Form der monoenergetischen Boltzmann-Gleichung).

$$3.1 \quad \mu \frac{\partial}{\partial x} \phi(x, \mu) + \sigma_t \phi(x, \mu) = \frac{\sigma_s}{2} \int_{-1}^1 \phi(x, \mu') d\mu' + f(x, \mu)$$

Die Randbedingungen für eine sich im Vakuum befindende Platte der Dicke d , welche in zwei Richtungen unendlich ausgedehnt ist, lauten

$$3.2 \quad \begin{aligned} \phi(0, \mu) &= r_l(\mu) & 0 \leq \mu \leq 1 \\ \phi(d, \mu) &= r_r(\mu) & -1 \leq \mu \leq 0 \end{aligned}$$

Weiter ist gefordert, daß im Innern $\phi(x, \mu)$ für $\mu \neq 0$ eine stetige Funktion von x ist.

Die hier und auch später verwendeten Symbole haben die folgende Bedeutung:

σ_t	=	totaler makroskopischer Wirkungsquerschnitt
σ_s	=	$\sigma_{\text{streu}} + \nu \sigma_{\text{spalt}}$
σ_{streu}	=	makroskopischer Streuquerschnitt
σ_{spalt}	=	makroskopischer Spaltquerschnitt
ν	=	mittlere Anzahl von Spaltneutronen pro Spaltung
μ	=	$\cos \theta$

- θ = Winkel zwischen x-Achse und Flugrichtung der Neutronen
 d = Dicke der Platte
 $f(x, \mu)$ = unabhängige Neutronenquelle
 $r_l(\mu), r_r(\mu)$ = von links bzw. rechts auf die Platte treffende Neutronenflußdichten
 $\phi(x, \mu) dx d\mu$ = Anzahl der pro sec durch das Intervall dx an der Stelle x fliegenden Neutronen im Richtungsintervall $d\mu$ um μ

Durch 3.2 sowie durch die Stetigkeitsbedingung ist die Lösung von 3.1 eindeutig bestimmt [28].

Wir suchen nun Näherungslösungen von 3.1 und 3.2 durch den Ansatz 3.3.

$$3.3 \quad \phi(x, \mu) = \sum_{i=1}^N \varphi_i(x) \psi_i(\mu)$$

In 3.3 geben wir einmal die $\psi_i(\mu)$ (modale Entwicklung nach der Winkelvariablen) und einmal die $\varphi_i(x)$ vor (modale Entwicklung nach der Ortsvariablen). Die jeweils unbekanntenen Funktionen des Ansatzes werden durch das Verfahren der "weighted residuals" bestimmt, durch das sich bei der Entwicklung nach der Winkelvariablen für die $\varphi_i(x)$ ein lineares Differentialgleichungssystem 1. Ordnung mit konstanten Koeffizienten und bei der Entwicklung nach der Ortsvariablen für die $\psi_i(\mu)$ ein System von Fredholm'schen Integralgleichungen 2. Art mit entartetem Kern ergibt. Durch die modale Entwicklung 3.3 und das Verfahren der "weighted residuals" wird das Problem der Bestimmung einer Näherungslösung von 3.1 also auf das relativ einfache Problem der Lösung von Differential- und Integralgleichungssystemen vom oben genannten Typ reduziert.

In Abschnitt V werden einige Verfahren zur Lösung dieser Gleichungssysteme dargestellt. In Abschnitt VI werden die entwickelten Methoden zur näherungsweise Lösung von 3.1 auf einige Modellprobleme angewandt und die Ergebnisse ausführlich diskutiert.

III.1 Entwicklung nach der Winkelvariablen

Wir suchen eine Näherungslösung von 3.1 durch den Ansatz 3.3, in dem die $\psi_i(\mu)$ vorzugebende, linear unabhängige und integrierbare Funktionen sein sollen. Die Funktionen $\varphi_i(x)$ sind so zu bestimmen, daß unser Ansatz zur in einem gewissen Sinne besten Approximation aus der Klasse der durch 3.3 darstellbaren Funktionen für die Lösung von 3.1 wird.

Zur Bestimmung der Funktionen $\varphi_i(x)$ wählen wir die Methode der "weighted residuals", wodurch unsere Approximation in dem Sinne die beste wird, daß das Residuum nach Einsetzen von 3.3 in 3.1 orthogonal ist zu dem Raum, den die ebenfalls vorzugebenden Wichtungsfunktionen aufspannen.

Wir gehen mit 3.3 ein in 3.1 und erhalten 3.4

$$3.4 \quad \mu \frac{\partial}{\partial x} \sum_{i=1}^N \varphi_i(x) \psi_i(\mu) + \sigma_t \sum_{i=1}^N \varphi_i(x) \psi_i(\mu) = \frac{\sigma_s}{2} \sum_{i=1}^N \varphi_i(x) \int_{-1}^1 \psi_i(\mu') d\mu' + f(x, \mu)$$

Die Gleichung 3.4 multiplizieren wir nacheinander mit je einer der N vorzugebenden, integrierbaren und linear unabhängigen Wichtungsfunktionen $w_j(\mu)$ und integrieren die Gleichung dann über μ . Wir erhalten N Gleichungen:

$$3.5 \quad \begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial x} \sum_{i=1}^N \varphi_i(x) \int_{-1}^1 \mu \psi_i(\mu) w_j(\mu) d\mu + \sigma_t \sum_{i=1}^N \varphi_i(x) \int_{-1}^1 \psi_i(\mu) w_j(\mu) d\mu = \\ & = \frac{\sigma_s}{2} \sum_{i=1}^N \varphi_i(x) \int_{-1}^1 \psi_i(\mu') d\mu' \int_{-1}^1 w_j(\mu) d\mu + \int_{-1}^1 f(x, \mu) w_j(\mu) d\mu \end{aligned}$$

$j=1, 2, \dots, N$

Für die lineare Unabhängigkeit dieser Gleichungen ist die der Funktionen ψ_i und die der Funktionen w_j eine notwendige Voraussetzung.

3.5 stellt ein lineares Differentialgleichungssystem 1. Ordnung mit konstanten Koeffizienten für die Funktionen $\varphi_i(x)$ dar, das wir in folgender Form schreiben:

$$3.6 \quad A \frac{d}{dx} \vec{\varphi}(x) + B \vec{\varphi}(x) = D \vec{\varphi}(x) + \vec{F}^*(x)$$

Die Matrizen A, B und D haben die Elemente

$$a_{ji} = \int_{-1}^1 \mu \psi_i(\mu) w_j(\mu) d\mu$$

$$b_{ji} = \sigma_t \int_{-1}^1 \psi_i(\mu) w_j(\mu) d\mu$$

$$d_{ji} = \frac{\sigma_s}{2} \int_{-1}^1 \psi_i(\mu) d\mu \int_{-1}^1 w_j(\mu') d\mu'$$

$\vec{\varphi}(x)$ und $\vec{f}^{**}(x)$ sind Vektoren mit den Komponenten $\varphi_i(x)$ bzw. $\int_{-1}^1 f(x, \mu) w_j(\mu) d\mu$.

Da wir in den später zu behandelnden Modellproblemen stets $f(x, \mu) \equiv 0$ annehmen, wollen wir den Formalismus mit $f(x, \mu) \equiv 0$ und daher auch mit $\vec{f}^{**}(x) \equiv 0$ weiterführen. Existiert A^{-1} , können wir mit

$$C = A^{-1}(D-B)$$

die Gleichung 3.6 umformen in

$$3.7 \quad \frac{d}{dx} \vec{\varphi}(x) = C \vec{\varphi}(x)$$

3.7 stellt ein lineares homogenes Differentialgleichungssystem 1. Ordnung dar, zu dem noch geeignete Rand- oder Anfangsbedingungen zu bestimmen sind. Wir wollen den Vektor $\vec{\varphi}(x)$ so bestimmen, daß der Ansatz 3.3 nicht nur näherungsweise 3.1 sondern darüber hinaus exakt die Randbedingungen 3.2 befriedigt, da insbesondere in kleinen, schwach oder gar nicht multiplizierenden Systemen die Lösung im Innern stark beeinflusst wird von der Lösung auf dem Rande.

Der Einfachheit halber nehmen wir ohne Beschränkung der Allgemeinheit noch an, daß

$$r_r(\mu) \equiv 0$$

gilt, d.h. daß nur von links Neutronen auf unser System treffen.

Die exakte Befriedigung von 3.2 durch 3.3 gelingt uns sofort, wenn wir im Ansatz 3.3 nur Funktionen $\psi_i(\mu)$ zulassen, die außer den oben angeführten Bedingungen auch noch den zusätzlichen Bedingungen 3.8 genügen, und wenn wir zu dem Differentialgleichungssystem 3.7 die Randbedingungen 3.9 formulieren.

$$3.8 \quad \begin{aligned} \psi_i(\mu) &= 0 & 0 \leq \mu \leq 1 & & i = \frac{N}{2} + 1, \frac{N}{2} + 2, \dots, N \\ \psi_i(\mu) &= 0 & -1 \leq \mu \leq 0 & & i = 1, 2, \dots, \frac{N}{2} \\ \psi_1(\mu) &= r_1(\mu) & 0 \leq \mu \leq 1 & & \end{aligned}$$

$$3.9 \quad \begin{aligned} \varphi_i(0) &= 0 & & & i = 2, 3, \dots, \frac{N}{2} \\ \varphi_i(d) &= 0 & & & i = \frac{N}{2} + 1, \frac{N}{2} + 2, \dots, N \\ \varphi_1(0) &= 1 & & & \end{aligned}$$

Damit sind in unserem Modell die Randbedingungen 3.2 für beliebige integrierbare $r_1(\mu)$ exakt erfüllt, während z.B. im DP_N -Modell die Randbedingungen 3.2 nur für sehr spezielle $r_1(\mu)$ exakt erfüllt werden können. Das DP_N -Modell ist lediglich ein Spezialfall des oben beschriebenen Modells mit fest vorgegebenen Entwicklungs- und Wichtungsfunktionen:

$$\begin{aligned} \psi_i(\mu) = w_i(\mu) &= P_{i-1}(2\mu-1) & 0 \leq \mu \leq 1 & & \\ \psi_i(\mu) = w_i(\mu) &= 0 & -1 \leq \mu \leq 0 & & i = 1, 2, \dots, \frac{N}{2} \\ \psi_i(\mu) = w_i(\mu) &= P_{i-\frac{N}{2}-1}(2\mu+1) & -1 \leq \mu \leq 0 & & \\ \psi_i(\mu) = w_i(\mu) &= 0 & 0 \leq \mu \leq 1 & & i = \frac{N}{2} + 1, \frac{N}{2} + 2, \dots, N \end{aligned}$$

$P_i(\mu)$ = Legendre-Polynome

Wir haben nun das homogene lineare Differentialgleichungssystem 1. Ordnung mit konstanten Koeffizienten 3.7 mit den inhomogenen Randbedingungen 3.9 zu lösen. Die formale Lösung hat unter der Voraussetzung, daß die Matrix C N einfache Eigenwerte und dazugehörige N linear unabhängige Eigenvektoren hat, die Form 3.10,

$$3.10 \quad \vec{\varphi}(x) = \sum_i c_i \vec{e}_i \exp(\lambda_i x)$$

wobei die λ_i die Eigenwerte und die \vec{e}_i zugehörige linear unabhängige Eigenvektoren von C sind, während die Konstanten c_i aus den Randbedingungen zu

bestimmen sind. Für große λ_1 und große x ist die Berechnung der Lösung von 3.7 und 3.9 mit Hilfe der Gleichung 3.10 wegen der großen Werte, die die Exponentialfunktion annimmt, nicht mehr ohne weiteres möglich, und man muß die Lösung auf anderen Wegen gewinnen. In Abschnitt V werden mehrere Methoden zur Lösung von 3.7 und 3.9 ausführlich dargestellt. Hier soll lediglich noch erwähnt werden, daß die Eigenwerte von C für $\sigma_s > 0$ alle reell sind und daß genau $\frac{N}{2}$ dieser Eigenwerte positiv und $\frac{N}{2}$ negativ sind [29,30]. Diese Tatsache wird bei einigen Lösungsverfahren des Abschnitts V benutzt.

Statt dem Ansatz 3.3 die Neben- bzw. Randbedingungen 3.8 und 3.9 aufzuerlegen, um die ursprünglichen Randbedingungen 3.2 exakt erfüllen zu können, können wir auch etwas allgemeinere Bedingungen finden, unter denen 3.3 die Randbedingungen 3.2 exakt befriedigt.

Wir spalten den Neutronenfluß $\phi(x,\mu)$ auf in zwei Terme,

$$3.12 \quad \phi(x,\mu) = \phi^0(x,\mu) + \phi^1(x,\mu)$$

von denen der erste die Verteilung der ungestreuten Neutronen beschreibt, während der zweite die Verteilung aller übrigen Neutronen beschreibt (zu denen auch die Spaltneutronen gehören). (Dieses Vorgehen ist z.B. bei Abschirmrechnungen mit gutem Erfolg angewendet worden.) $\phi^0(x,\mu)$ muß dann der Gleichung 3.13

$$3.13 \quad \mu \frac{\partial}{\partial x} \phi^0(x,\mu) + \sigma_t \phi^0(x,\mu) = 0$$

mit den Randbedingungen 3.14

$$3.14 \quad \begin{array}{ll} \phi^0(0,\mu) = r_1(\mu) & 0 \leq \mu \leq 1 \\ \phi^0(d,\mu) = 0 & -1 \leq \mu \leq 0 \end{array}$$

genügen. Die Lösung von 3.13 und 3.14 läßt sich sofort angeben; sie hat

die Form 3.15.

$$3.15 \quad \phi^0(x, \mu) = r_{\perp}(\mu) \cdot \exp(-\sigma \frac{x}{t\mu}) \cdot H(\mu)$$

$H(\mu)$ bedeutet die Stufenfunktion

$$H(\mu) = \begin{cases} 1 & \mu \geq 0 \\ 0 & \mu < 0 \end{cases}$$

Die Funktion $\phi^1(x, \mu)$ muß dann die Gleichung 3.16

$$3.16 \quad \mu \frac{\partial}{\partial x} \phi^1(x, \mu) + \sigma_t \phi^1(x, \mu) = \frac{\sigma_s}{2} \int_{-1}^1 \phi^1(x, \mu') d\mu' + \frac{\sigma_s}{2} \int_{-1}^1 \phi^0(x, \mu') d\mu'$$

mit den homogenen Randbedingungen 3.17

$$3.17 \quad \begin{aligned} \phi^1(0, \mu) &= 0 & 0 \leq \mu \leq 1 \\ \phi^1(d, \mu) &= 0 & -1 \leq \mu \leq 0 \end{aligned}$$

erfüllen. Suchen wir jetzt eine Näherungslösung für 3.16 und 3.17 mit Hilfe des Ansatzes 3.3, d.h. machen wir für $\phi^1(x, \mu)$ den Ansatz 3.18

$$3.18 \quad \phi^1(x, \mu) = \sum_{i=1}^N \varphi_i^1(x) \psi_i^1(\mu)$$

und bestimmen die $\varphi_i^1(x)$ nach der Methode der "weighted residuals", erhalten wir die Gleichung 3.19.

$$3.19 \quad A \frac{d}{dx} \vec{\varphi}^1(x) + B \vec{\varphi}^1(x) = D \vec{\varphi}^1(x) + \vec{F}^1(x)$$

Die Matrizen A^1 , B^1 und D^1 haben die Elemente

$$\begin{aligned} a_{ji}^1 &= \int_{-1}^1 \mu w_j^1(\mu) \psi_i^1(\mu) d\mu \\ b_{ji}^1 &= \sigma_t \int_{-1}^1 w_j^1(\mu) \psi_i^1(\mu) d\mu \\ d_{ji}^1 &= \frac{\sigma_s}{2} \int_{-1}^1 w_j^1(\mu) d\mu \int_{-1}^1 \psi_i^1(\mu') d\mu' \end{aligned}$$

und die Vektoren $\vec{\varphi}^1(x)$ und $\vec{F}^1(x)$ haben die Komponenten $\varphi_i^1(x)$ bzw.

$$r_j^1(x) = \frac{\sigma_s}{2} \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 r_1(\mu) \exp(-\sigma_{t\mu} x) H(\mu) w_j(\mu') d\mu d\mu'$$

Die Wichtungsfunktionen $w_j^1(\mu)$ und die Entwicklungsfunktionen $\psi_i^1(\mu)$ sind wieder als linear unabhängige und integrierbare Funktionen vorzugeben. Da der Ansatz 3.18 die Bedingungen 3.17 statt 3.3 exakt erfüllen muß, damit 3.12 die Randbedingungen 3.3 exakt erfüllt, genügt es, für die $\psi_i^1(\mu)$ zusätzlich 3.20

$$3.20 \quad \begin{aligned} \psi_i^1(\mu) &= 0 & 0 \leq \mu \leq 1 & \quad i = \frac{N}{2}+1, \frac{N}{2}+2, \dots, N \\ \psi_i^1(\mu) &= 0 & -1 \leq \mu \leq 0 & \quad i = 1, 2, \dots, \frac{N}{2} \end{aligned}$$

statt 3.8 zu fordern und für 3.19 die Randbedingungen 3.21

$$3.21 \quad \begin{aligned} \varphi_i^1(0) &= 0 & i = 1, 2, \dots, \frac{N}{2} \\ \varphi_i^1(d) &= 0 & i = \frac{N}{2}+1, \frac{N}{2}+2, \dots, N \end{aligned}$$

statt 3.9 zu postulieren.

Existiert $(A^1)^{-1}$, schreiben wir 3.19 in der Form 3.22

$$3.22 \quad \frac{d}{dx} \vec{\phi}^1(x) = C^1 \vec{\phi}_1(x) + \vec{F}^{1*}(x)$$

mit

$$\begin{aligned} C^1 &= (A^1)^{-1} (D^1 - B^1) \\ \vec{F}^{1*}(x) &= (A^1)^{-1} \vec{F}^1(x) \end{aligned}$$

Statt des homogenen Gleichungssystems 3.7 mit den inhomogenen Randbedingungen 3.9 haben wir jetzt das inhomogene Gleichungssystem 3.22 mit den homogenen Randbedingungen 3.21 zu lösen.

Die Komponenten des Inhomogenitätsterms $\vec{F}^{1*}(x)$ bestehen aus Summanden der Form

$$g_{ji}(x) = h_{ji} \int_{-1}^1 \phi^0(x, \mu') d\mu' \cdot \int_{-1}^1 w_j(\mu) d\mu$$

Setzen wir $\phi^0(x, \mu')$ aus 3.15 ein und setzen wir

$$h_{ji} \int_{-1}^1 w_j(\mu) d\mu = k_{ji}$$

erhalten wir

$$g_{ji}(x) = k_{ji} \int_0^1 r_1(\mu) \exp(-\sigma_t \frac{x}{\mu}) d\mu$$

Für einige spezielle $r_1(\mu)$ wollen wir die Funktionen $g_{ji}(x)$ explizit angeben

$$\begin{aligned} \text{a) } r_1(\mu) &= \delta(a-\mu) && 0 < a < 1 \\ g_{ji}(x) &= k_{ji} \int_0^1 \delta(a-\mu) \exp(-\sigma_t \frac{x}{\mu}) d\mu = k_{ji} \exp(-\sigma_t \frac{x}{a}) \\ \text{b) } r_1(\mu) &= \mu^n && n=0, 1, 2, \dots \\ g_{ji}(x) &= k_{ji} \int_0^1 \mu^n \exp(-\sigma_t \frac{x}{\mu}) d\mu \\ &= k_{ji} E_{2+n}(\sigma_t x) \end{aligned}$$

Die Funktionen $E_n(z)$ sind die bekannten und tabellierten Exponentialintegrale

$$E_n(z) = \int_0^1 \mu^{n-2} e^{-\frac{z}{\mu}} d\mu$$

Die formale Lösung von 3.22 hat die Gestalt

$$3.23 \quad \vec{\phi}^1(x) = \sum_i c_i \vec{e}_i^1 \exp(\lambda_i^1 x) + \vec{\phi}^{**}(x)$$

Die λ_i^1 sind die Eigenwerte, die \vec{e}_i^1 zugehörige Eigenvektoren von C^1 , und die Konstanten c_i sind aus 3.21 zu bestimmen. $\vec{\phi}^{**}(x)$ ist eine spezielle Lösung von 3.22. Die λ_i^1 haben die gleichen Eigenschaften wie die λ_i aus 3.10, da auch die Matrix C^1 den Voraussetzungen aus [29] und [30] genügt.

Die Bestimmung von $\vec{\phi}^1(x)$ aus 3.23 und 3.21 bereitet für große λ_i^1 und große x wieder numerische Schwierigkeiten, die jedoch mit den in Abschnitt V ausgeführten Lösungsverfahren zu bewältigen sind. Dabei ist die Kenntnis einer speziellen Lösung $\vec{\phi}^{**}(x)$ von 3.22 vorausgesetzt. Kennt man eine solche nicht, bietet sich die total-numerische Lösung von 3.21 und 3.22 an, für die ebenfalls in Abschnitt V ein Verfahren dargestellt wird.

III.2 Entwicklung nach Funktionen des Ortes

Während man i.a. ohne genauere Rechnungen über die Winkelverteilung der Neutronenflugrichtung nur recht grobe Angaben machen kann, wie etwa "die Neutronen fliegen überwiegend in Vorwärtsrichtung", wodurch die Auswahl der Entwicklungsfunktionen bei Entwicklungen nach der Winkelvariablen eine gewisse Willkür enthält, kennt man die Ortsabhängigkeit der Neutronenverteilung aus einfachen Modellen viel besser. So ist z.B. mit Hilfe einfacher Rechnungen nicht nur die Aussage möglich, "der integrale Neutronenfluß fällt exponentiell ab", sondern man kann sich auch die Koeffizienten dieses exponentiellen Abfalls verschaffen. Daher liegt es nahe, zur näherungsweise Lösung von 3.1 und 3.2 auch Entwicklungen nach der Ortsvariablen zu untersuchen [117].

Um die Unstetigkeit der Winkelverteilung der Flugrichtung bei $\mu=0$ besser berücksichtigen zu können, wählen wir zur Entwicklung von 3.1 nach Funktionen des Ortes den leicht modifizierten Ansatz 3.3a.

$$3.3a \quad \phi(x, \mu) = \sum_{i=1}^N (\varphi_i^+(x) \psi_i^+(\mu) + \varphi_i^-(x) \psi_i^-(\mu))$$

Die $\varphi_i^+(x)$ und $\varphi_i^-(x)$ sind vorgegebene, linear unabhängige und integrierbare Funktionen des Ortes. Die zu bestimmenden Funktionen $\psi_i^+(\mu)$ und $\psi_i^-(\mu)$ unterwerfen wir den zusätzlichen Bedingungen 3.24

$$\begin{aligned} & \psi_i^+(\mu) = 0 & 0 \leq \mu \leq 1; & \quad i=2, 3, \dots, N \\ 3.24 \quad & \psi_i^-(\mu) = 0 & -1 \leq \mu \leq 0; & \quad i=1, 2, \dots, N \\ & \psi_1^+(\mu) = r_1(\mu) & 0 \leq \mu \leq 1 & \end{aligned}$$

und von den Entwicklungsfunktionen fordern wir

$$\begin{aligned}
 \varphi_i^+(d) &= 0 & i=1,2,\dots,N \\
 3.25 \quad \varphi_i^-(0) &= 0 & i=1,2,\dots,N \\
 \varphi_1^+(0) &= 1 & (\text{Normierung})
 \end{aligned}$$

Wenn wir -wie in Abschnitt III.1- der Einfachheit halber wieder annehmen, daß $r_r \equiv f \equiv 0$ gilt, so garantieren die Bedingungen 3.24 und 3.25, daß der Ansatz 3.3a die Randbedingungen 3.2 exakt erfüllt.

Gehen wir nun mit dem Ansatz 3.3a ein in 3.1, und fordern wir, daß das Residuum $R(x,\mu)$ im μ -Intervall $[-1,0]$ orthogonal ist zu N vorgegebenen, linear unabhängigen und integrierbaren Wichtungsfunktionen $w_j^+(x)$ und im μ -Intervall $[0,1]$ orthogonal ist zu N vorgegebenen, linear unabhängigen und integrierbaren Wichtungsfunktionen $w_j^-(x)$, erhalten wir mit der Definition 3.26

$$3.26 \quad (f,g) = \int_0^d f(x)g(x)dx$$

des Skalarproduktes das Gleichungssystem 3.27 zur Bestimmung der unbekannt-ten Funktionen $\psi_i^+(\mu)$ und $\psi_i^-(\mu)$:

$$\begin{aligned}
 3.27a \quad & \mu \sum_{i=1}^N \psi_i^+(\mu) (w_j^+, \frac{d}{dx} \varphi_i^+) + \sigma_t \sum_{i=1}^N \psi_i^+(\mu) (w_j^+, \varphi_i^+) = \\
 & = \frac{\sigma_s}{2} \sum_{i=1}^N \int_{-1}^0 \psi_i^+(\mu') d\mu' (w_j^+, \varphi_i^+) + \int_0^1 \psi_i^-(\mu') d\mu' (w_j^+, \varphi_i^-) \int + \frac{\sigma_s}{2} \int_0^1 \psi_1^+(\mu') d\mu' (w_j^+, \varphi_1^+)
 \end{aligned}$$

$$-1 \leq \mu \leq 0; \quad j=1,2,\dots,N$$

$$\begin{aligned}
 3.27b \quad & \mu \sum_{i=1}^N \psi_i^-(\mu) (w_j^-, \frac{d}{dx} \varphi_i^-) + \sigma_t \sum_{i=1}^N \psi_i^-(\mu) (w_j^-, \varphi_i^-) = \\
 & = \frac{\sigma_s}{2} \sum_{i=1}^N \int_{-1}^0 \psi_i^+(\mu') d\mu' (w_j^-, \varphi_i^+) + \int_0^1 \psi_i^-(\mu') d\mu' (w_j^-, \varphi_i^-) \int + \\
 & + \frac{\sigma_s}{2} \int_0^1 \psi_1^+(\mu') d\mu' (w_j^-, \varphi_1^+) - \mu \psi_1^+(\mu) (w_j^-, \frac{d}{dx} \varphi_1^+) - \sigma_t \psi_1^+(\mu) (w_j^-, \varphi_1^+)
 \end{aligned}$$

$$0 \leq \mu \leq 1; \quad j=1,2,\dots,N$$

3.27a und 3.27b stellen zwei über die Streu- und Spaltquelle gekoppelte Integralgleichungssysteme für die unbekannt Funktionen $\psi_i^+(\mu)$ und $\psi_i^-(\mu)$ dar.

Mit den Matrizen $A^\pm = (a_{ji}^\pm)$, $B^\pm = (b_{ji}^\pm)$ und $D^\pm = (d_{ji}^\pm)$, deren Elemente gegeben sind durch

$$a_{ji}^\pm = (w_j^\pm, \frac{d}{dx} \varphi_i^\pm)$$

$$b_{ji}^\pm = (w_j^\pm, \varphi_i^\pm)$$

$$d_{ji}^\pm = (w_j^\pm, \varphi_i^\pm)$$

können wir die Gleichungen 3.27 wie folgt darstellen:

$$3.27a \quad \mu A^+ \psi^+(\mu) + \sigma_t B^+ \psi^+(\mu) = \frac{\sigma_s}{2} \left[-B^+ \int_{-1}^0 \psi^+(\mu') d\mu' + D^- \int_0^1 \psi^-(\mu') d\mu' + r^+ \right]$$

$$-1 \leq \mu \leq 0$$

$$3.27b \quad \mu A^- \psi^-(\mu) + \sigma_t B^- \psi^-(\mu) = \frac{\sigma_s}{2} \left[-D^+ \int_{-1}^0 \psi^+(\mu') d\mu' + B^- \int_0^1 \psi^-(\mu') d\mu' \right] +$$

$$+ \frac{\sigma_s}{2} r^- - s^-(\mu)$$

$$0 \leq \mu \leq 1$$

Die Vektoren $\psi^\pm(\mu)$ haben die Komponenten $\psi_i^\pm(\mu)$, die Vektoren r^\pm haben die konstanten Komponenten $\int_{-1}^1 \psi_1^\pm(\mu') d\mu' \cdot (w_j^\pm, \varphi_1^\pm)$, und der Vektor $s^-(\mu)$ hat die Komponenten $\mu \psi_1^+(\mu) \cdot (w_j^-, \frac{d}{dx} \varphi_1^+) + \sigma_t \psi_1^+(\mu) (w_j^-, \varphi_1^+)$.

Unter der Integration eines Vektors oder einer Matrix wollen wir hier und im folgenden die Integration der Komponenten bzw. der Elemente verstehen.

Existieren $F^+(\mu)^{-1} = (\mu A^+ + \sigma_t B^+)^{-1}$ in $[-1, 0]$ und $F^-(\mu)^{-1} = (\mu A^- + \sigma_t B^-)^{-1}$ in $[0, 1]$ und setzen wir

$$C^1(\mu) = F^+(\mu)^{-1} B^+$$

$$C^2(\mu) = F^+(\mu)^{-1} D^-$$

$$C^3(\mu) = F^-(\mu)^{-1} D^+$$

$$C^4(\mu) = F^-(\mu)^{-1} B^-$$

so erhalten wir aus den Gleichungen 3.27 die Gleichungen 3.28 .

$$3.28a \quad \psi^+(\mu) = \frac{\sigma_s}{2} \left[C^1(\mu) \int_{-1}^0 \psi^+(\mu') d\mu' + C^2(\mu) \int_0^1 \psi^-(\mu') d\mu' \right] + \frac{\sigma_s}{2} F^+(\mu)^{-1} r^+$$

$$-1 \leq \mu \leq 0$$

$$3.28b \quad \psi^-(\mu) = \frac{\sigma_s}{2} \left[C^3(\mu) \int_{-1}^0 \psi^+(\mu') d\mu' + C^4(\mu) \int_0^1 \psi^-(\mu') d\mu' \right] +$$

$$+ \frac{\sigma_s}{2} F^-(\mu)^{-1} r^- - F^-(\mu)^{-1} s^-(\mu)$$

$$0 \leq \mu \leq 1$$

Da r^+ , r^- und $s^-(\mu)$ bekannte Vektoren sind, stellen die Gleichungen 3.28 zwei gekoppelte Systeme inhomogener Integralgleichungen vom Fredholmschen Typ zweiter Art mit entartetem Kern dar. Die Lösung dieser gekoppelten Integralgleichungssysteme reduziert sich durch Integration von 3.28a über das Intervall $[-1, 0]$ und durch Integration von 3.28b über das Intervall $[0, 1]$ auf die Lösung des inhomogenen linearen Gleichungssystems 3.29, dessen eindeutige Lösung genau dann existiert, wenn die Determinante der Matrix des Gleichungssystems von Null verschieden ist.

$$3.29 \quad \begin{aligned} \gamma^+ &= E^1 \gamma^+ + E^2 \gamma^- + p^+ \\ \gamma^- &= E^3 \gamma^+ + E^4 \gamma^- + p^- \end{aligned}$$

Die in 3.29 auftretenden Vektoren und Matrizen sind durch folgende Gleichungen gegeben:

$$\begin{aligned} \gamma^+ &= \int_{-1}^0 \psi^+(\mu) d\mu \\ \gamma^- &= \int_0^1 \psi^-(\mu) d\mu \\ E^i &= \frac{\sigma_s}{2} \int_{-1}^0 C^i(\mu) d\mu \quad i=1,2 \\ E^i &= \frac{\sigma_s}{2} \int_0^1 C^i(\mu) d\mu \quad i=3,4 \end{aligned}$$

$$p^+ = \frac{\sigma_s}{2} \int_{-1}^0 F^+(\mu)^{-1} d\mu \cdot r^+$$

$$p^- = \frac{\sigma_s}{2} \int_0^1 F^-(\mu)^{-1} d\mu \cdot r^- - \int_0^1 F^-(\mu)^{-1} s^-(\mu) d\mu$$

Ist $\det E$ von Null verschieden, wobei die Matrix E des Gleichungssystems 3.29 durch

$$E = \begin{pmatrix} I-E^1 & E^2 \\ E^3 & I-E^4 \end{pmatrix}, \quad I = \text{Einheitsmatrix}$$

gegeben ist, so lassen sich $\tilde{\psi}^+$ und $\tilde{\psi}^-$ eindeutig aus 3.29 bestimmen, und mit $\tilde{\psi}^+$ und $\tilde{\psi}^-$ lassen sich die gesuchten Vektoren $\psi^+(\mu)$ und $\psi^-(\mu)$ aus den Gleichungen 3.28 bestimmen. Unter Berücksichtigung von 3.24 haben wir dann die Näherungslösung 3.3a von 3.1 gefunden, die die Randbedingungen 3.2 exakt erfüllt.

In dem beschriebenen Verfahren ist durch die Bedingungen 3.24 und 3.25 insofern eine gewisse nicht notwendige Willkür enthalten als sich die vorgegebene Winkelverteilung $\psi_1(\mu)$, $0 \leq \mu \leq 1$, mit der ebenfalls vorgegebenen Ortsfunktion $\varphi_1(x)$ durch das ganze System fortpflanzt; bei sehr transparenten Systemen kann dies zu unnötig großen Fehlern führen, welche leicht vermieden werden können, wenn wir - wie in Abschnitt III.1 Gleichung 3.12- die Lösung von 3.1 aufspalten in einen Term, der die Verteilung der ungestreuten Neutronen beschreibt und in einen Term, der die Verteilung aller übrigen Neutronen beschreibt. Die Verteilung der ungestreuten Neutronen ist wieder durch 3.15 gegeben, die Verteilung der übrigen Neutronen erfüllt 3.16 und 3.17. Bestimmen wir mit dem in diesen Abschnitt geschilderten Verfahren eine Näherungslösung von 3.16 und 3.17, entfällt die oben erwähnte Willkür.

Wir gehen daher mit dem Ansatz 3.30,

$$3.30 \quad \phi^1(x, \mu) = \sum_i \varphi_i^{1+}(x) \psi_i^{1+}(\mu) + \varphi_i^{1-}(x) \psi_i^{1-}(\mu)$$

in dem die vorzugebenden Entwicklungsfunktionen $\varphi^{1\pm}(x)$ die üblichen Voraussetzungen sowie die zusätzlichen Bedingungen 3.31

$$3.31 \quad \begin{aligned} \varphi_i^{1+}(d) &= 0 & i=1,2,\dots,N \\ \varphi_i^{1-}(0) &= 0 & i=1,2,\dots,N \end{aligned}$$

erfüllen sollen, und in dem die unbekannt Funktionen $\psi_i^{1\pm}(\mu)$ den Bedingungen 3.32

$$3.32 \quad \begin{aligned} \psi_i^{1+}(\mu) &= 0 & 0 \leq \mu \leq 1; & & i=1,2,\dots,N \\ \psi_i^{1-}(\mu) &= 0 & -1 \leq \mu \leq 0; & & i=1,2,\dots,N \end{aligned}$$

genügen sollen, ein in 3.16. Mit 3.31 und 3.32 befriedigt der Ansatz 3.30 die homogenen Randbedingungen 3.17 exakt. Fordern wir wie in 3.27 Orthogonalität des Residuums in $[-1,0]$ bzw. in $[0,1]$ zu den vorgehenden Wichtungsfunktionen $w_j^{1\pm}(x)$, die ebenfalls den üblichen Voraussetzungen genügen sollen, erhalten wir mit dem Skalarprodukt 3.26 für die Funktionen $\psi_i^{1\pm}(\mu)$ die Bestimmungsgleichungen 3.33,

$$\mu \sum_{i=1}^N \psi_i^{1+}(\mu) (w_j^{1+}, \frac{d}{dx} \varphi_i^{1+}) + \sigma_t \sum_{i=1}^N \psi_i^{1+}(\mu) (w_j^{1+}, \varphi_i^{1+}) =$$

3.33a

$$= \frac{\sigma_s}{2} \sum_{i=1}^N \left[\int_{-1}^0 \psi_i^{1+}(\mu') d\mu' (w_j^{1+}, \varphi_i^{1+}) + \int_0^1 \psi_i^{1-}(\mu') d\mu' (w_j^{1+}, \varphi_i^{1-}) \right] +$$

$$+ \frac{\sigma_s}{2} \int_0^1 \int_{-1}^1 w_j^{1+}(x) \phi^0(x, \mu') d\mu' dx$$

$$-1 \leq \mu \leq 0; \quad j=1,2,\dots,N$$

$$\mu \sum_{i=1}^N \psi_i^{1-}(\mu) (w_j^{1-}, \frac{d}{dx} \varphi_i^{1-}) + \sigma_t \sum_{i=1}^N \psi_i^{1-}(\mu) (w_j^{1-}, \varphi_i^{1-}) =$$

3.33b

$$= \frac{\sigma_s}{2} \sum_{i=1}^N \left[\int_{-1}^0 \psi_i^{1+}(\mu') d\mu' (w_j^{1-}, \varphi_i^{1+}) + \int_0^1 \psi_i^{1-}(\mu') d\mu' (w_j^{1-}, \varphi_i^{1-}) \right] +$$

$$+ \frac{\sigma_s}{2} \int_0^1 \int_{-1}^1 w_j^{1-}(x) \phi^0(x, \mu') d\mu' dx$$

$$0 \leq \mu \leq 1; \quad j=1,2,\dots,N$$

welche sich von den Gleichungen 3.27 nur durch andere Inhomogenitätsterme unterscheiden und infolgedessen wie diese zu lösen sind. Haben wir die $\psi_i^{1\pm}(\mu)$ aus 3.33 bestimmt, so stellt mit 3.31 und 3.32 der Ansatz 3.30 eine Näherungslösung von 3.16 dar, welche die Randbedingungen 3.17 exakt erfüllt.

Das bedeutet, daß durch 3.12 mit $\phi^0(x,\mu)$ aus 3.15 und $\phi^1(x,\mu)$ aus 3.30, 3.31, 3.32 und 3.33 eine Näherungslösung von 3.1 dargestellt wird, welche einmal die Verteilung der ungestreuten Neutronen exakt beschreibt und zum anderen die Randbedingungen für die Gesamtverteilung der Neutronen exakt befriedigt.

In Abschnitt VI werden einige Modellprobleme sowohl mit dem Ansatz 3.3a, 3.24 und 3.25 als auch mit dem Ansatz 3.12, 3.15, 3.30, 3.31 und 3.32 berechnet und die Ergebnisse in vergleichenden Abbildungen dargestellt.

Modale Entwicklung der Multigruppen-Boltzmanngleichung für ebene Geometrie

Während im Abschnitt III die Betrachtungen auf die monoenergetische Boltzmanngleichung beschränkt waren, wird in diesem Abschnitt der Formalismus der modalen Entwicklung auf die Multigruppen-Boltzmanngleichung angewendet. Wir setzen -wie in Abschnitt III- voraus, daß die Streuung im Laborsystem isotrop ist, daß alle Querschnitte (stückweise) konstant sind und behandeln nur Probleme mit ebener Geometrie. Ferner berücksichtigen wir bei den Quelliterationsverfahren keine Aufwärtsstreuung von Neutronen niedriger Energie zu höheren Energien, welche in schnellen Systemen keine wesentliche Rolle spielt.

Die stationäre Neutronenverteilung wird dann durch die Lösung der Gleichung 4.1 beschrieben (differentialle Form der Multigruppen-Boltzmanngleichung).

$$4.1 \quad \mu \frac{\partial}{\partial x} \phi^g(x, \mu) + \sigma_t^g \phi^g(x, \mu) = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{NG} \sigma_s^{j \rightarrow g} \int_{-1}^1 \phi^j(x, \mu') d\mu' + f^g(x, \mu)$$

$g=1, 2, \dots, NG$

In abgekürzter Form läßt sich 4.1 wie folgt schreiben:

$$4.1a \quad \mu \frac{\partial}{\partial x} \vec{\phi}(x, \mu) + \vec{\sigma}_t \vec{\phi}(x, \mu) = \frac{1}{2} \vec{\sigma}_s \int_{-1}^1 \vec{\phi}(x, \mu') d\mu' + \vec{f}(x, \mu)$$

Die Vektoren $\vec{\phi}(x, \mu)$ und $\vec{f}(x, \mu)$ haben die Komponenten $\phi^g(x, \mu)$ bzw. $f^g(x, \mu)$, die Diagonalmatrix $\vec{\sigma}_t$ hat die Elemente σ_t^g und die Streu- und Spaltmatrix $\vec{\sigma}_s = (\sigma_s^{gj})$ hat die Elemente $\sigma_s^{j \rightarrow g}$. Unter der Integration eines Vektors wollen wir -wie zuvor- die Integration aller seiner Komponenten verstehen.

Die Randbedingungen für eine sich im Vakuum befindende Platte lauten

$$4.2 \quad \begin{aligned} \phi^g(0, \mu) &= r_l^g(\mu) & 0 < \mu < 1 \\ \phi^g(d, \mu) &= r_r^g(\mu) & -1 < \mu < 0 \end{aligned} \quad g=1, 2, \dots, NG$$

Ferner wird gefordert, daß $\phi^g(x, \mu)$ für $\mu \neq 0$ und für $x \neq 0$ und $x \neq d$ eine stetige Funktion von x ist.

Die verwendeten Symbole haben die gleiche Bedeutung wie in Abschnitt III, stellen in diesem Abschnitt jedoch über Energiegruppen integrierte Größen (Flußdichten) bzw. über Energiegruppen gemittelte Größen (Wirkungsquerschnitte) dar:

$$\phi^g(x, \mu) = \int_{(\Delta E)^g} \phi(x, \mu, E) dE$$

$$\sigma^g = \frac{\int_{(\Delta E)^g} w(E) \sigma(E) dE}{\int_{(\Delta E)^g} w(E) dE}$$

$w(E)$ ist die zur Mittelung verwendete Gewichtsfunktion, $(\Delta E)^g$ ist die Breite der Energiegruppe mit dem Index g .

Die modale Entwicklung von 4.1 nach der Winkel- und der Energievariablen führt auf lineare Differentialgleichungssysteme 1. Ordnung mit stückweise konstanten Koeffizienten; die Entwicklung von 4.1 nach der Orts- und der Energievariablen führt auf Integralgleichungssysteme von Fredholmschen Integralgleichungen 2. Art mit entartetem Kern.

Die Entwicklung von 4.1 nach der Winkelvariablen allein oder nach der Ortsvariablen allein führt auf NG gekoppelte Differential- bzw. Integralgleichungssysteme vom gleichen Typ wie die oben genannten, wobei NG die Anzahl der Energiegruppen ist.

Durch die modale Entwicklung wird das Problem der näherungsweise Lösung von 4.1 somit auf die Lösung weitaus einfacherer Differential- und Integralgleichungen reduziert, deren numerische Behandlung in Abschnitt V dargestellt wird. In Abschnitt VI werden die hier entwickelten Methoden dann auf einige Modellprobleme angewandt und die Ergebnisse ausführlich diskutiert.

IV.1 Entwicklung nach Funktionen des Winkels

Für eine Näherungslösung von 4.1 und 4.2 machen wir den Ansatz 4.3 .

$$4.3 \quad \phi^g(x, \mu) = \sum_{i=1}^N \varphi_i^g(x) \psi_i^g(\mu) \quad g=1, 2, \dots, NG$$

Die $\psi_i^g(\mu)$ sind -wie in Abschnitt III- vorzugebende, linear unabhängige, integrierbare Funktionen von μ . Die Anwendung des schon in Abschnitt III beschriebenen Verfahrens der "weighted residuals" zur Bestimmung der Funktionen $\varphi_i^g(x)$ liefert mit den ebenfalls vorzugebenden, linear unabhängigen und integrierbaren Wichtungsfunktionen $w_j^g(\mu)$ das Gleichungssystem 4.4 .

$$4.4 \quad \sum_{i=1}^N \frac{d}{dx} \varphi_i^g(x) \int_{-1}^1 w_j^g(\mu) \psi_i^g(\mu) \mu d\mu + \sigma_t^g(x) \sum_{i=1}^N \varphi_i^g(x) \int_{-1}^1 w_j^g(\mu) \psi_i^g(\mu) d\mu =$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{g'=1}^{NG} \sigma_s^{g' \rightarrow g}(x) \sum_{i=1}^N \varphi_i^{g'}(x) \int_{-1}^1 w_j^g(\mu) d\mu \int_{-1}^1 \psi_i^{g'}(\mu') d\mu'$$

$$j=1, 2, \dots, N$$

$$g=1, 2, \dots, NG$$

Dabei haben wir wieder angenommen, daß $f^g(x, \mu) \equiv 0$ ist.

Falls die Funktionen $\psi_i^g(\mu)$ und $w_j^g(\mu)$ gruppenunabhängig gewählt werden, und falls wir der Einfachheit halber hier noch annehmen, daß alle Querschnitte ortsunabhängig sind, erhalten wir die Gleichung 4.5.

$$4.5 \quad B \frac{d}{dx} \vec{\varphi}^g(x) + \sigma_t^g F \vec{\varphi}^g(x) = T \sum_{g'=1}^{NG} \sigma_s^{g' \rightarrow g} \vec{\varphi}^{g'}(x) \quad g=1, 2, \dots, NG$$

Die Vektoren $\vec{\varphi}^g(x)$ und die Matrizen B, F und T sind gegeben durch

$$\vec{\varphi}^g(x) = \begin{bmatrix} \varphi_1^g(x) \\ \varphi_2^g(x) \\ \vdots \\ \varphi_N^g(x) \end{bmatrix}$$

$$B = (b_{ji}), \quad b_{ji} = \int_{-1}^1 \mu w_j(\mu) \psi_i(\mu) d\mu$$

$$F = (f_{ji}), \quad f_{ji} = \int_{-1}^1 w_j(\mu) \psi_i(\mu) d\mu$$

$$T = (t_{ji}), \quad t_{ji} = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 w_j(\mu) d\mu \int_{-1}^1 \psi_i(\mu') d\mu'$$

Wenn B^{-1} existiert, können wir 4.5 noch umformen in 4.6,

$$4.6 \quad \frac{d}{dx} \vec{\varphi}^g(x) + (\sigma_t^g B^{-1} F - \sigma_{str}^g B^{-1} T) \vec{\varphi}^g(x) = B^{-1} T \sum_{g' < g} \sigma_{str}^{g' \rightarrow g} \vec{\varphi}^{g'}(x) +$$

$$+ B^{-1} T \sum_{g'=1}^{NG} \sigma_{spalt}^{g' \rightarrow g} \vec{\varphi}^{g'}(x) \quad g=1, 2, \dots, NG$$

wobei wir berücksichtigt haben, daß wir die Aufwärtsstreuung vernachlässigen wollten.

Zur Lösung von 4.6 verwenden wir das Iterationsverfahren 4.7 (Quelliteration); v ist der Iterationsindex.

$$4.7 \quad \frac{d}{dx} \vec{\varphi}^{g(v+1)}(x) + (\sigma_t^g B^{-1} F - \sigma_{str}^g B^{-1} T) \vec{\varphi}^{g(v+1)}(x) = B^{-1} T \sum_{g' < g} \sigma_{str}^{g' \rightarrow g} \vec{\varphi}^{g'(v+1)}(x) +$$

$$+ B^{-1} T \sum_{g'=1}^{NG} \sigma_{spalt}^{g' \rightarrow g} \vec{\varphi}^{g'(v)}(x) \quad g=1, 2, \dots, NG$$

$$\vec{\varphi}^{g(0)}(x) = s^g(x) \quad (\text{Anfangsschätzung}) \quad g=1, 2, \dots, NG$$

Dieses Iterationsverfahren besteht darin, daß mit der Anfangsschätzung zunächst der zweite Term der rechten Seite von 4.7 (Quellterm) für alle Gruppen berechnet wird. Dann wird -anfangend mit $g=1$ - die Gleichung 4.7 für jede Gruppe gelöst, wobei in den ersten Term der rechten Seite (Streuung) die neuen Lösungen für die bereits berechneten Gruppengleichungen sofort eingesetzt werden. Hat man die Rechnung für alle Gruppen durchgeführt, wird der Quellterm der rechten Seite mit den neuen Lösungen für alle Gruppen neu berechnet, und man beginnt den Rechenzyklus wieder bei Gruppe 1. Dieser Zyklus wird solange fortgeführt bis eine vorzugebende Konvergenzabfrage befriedigt ist.

Jede einzelne Gruppengleichung aus 4.7 hat dieselbe Form wie die Gleichung 3.22 des Abschnitts III und kann mit den in Abschnitt V beschriebenen Methoden gelöst werden. Der größeren Übersicht wegen wird jedoch das ganze System 4.7 in Abschnitt V noch einmal ausführlich behandelt.

Bislang haben wir noch nichts über die zu 4.4 bzw. zu 4.7 gehörenden Anfangs- oder Randbedingungen gesagt. Um mit unserem Ansatz 4.3 die Randbedingungen 4.2 exakt befriedigen zu können, dürfen wir im allgemeinen die Funktionen $\psi_i^g(\mu)$ nicht als gruppenunabhängig annehmen; um die Formulierung möglichst einfach und übersichtlich zu gestalten, wollen wir diese nicht notwendige Annahme jedoch beibehalten und zusätzlich fordern, daß die Funktionen $r_1^g(\mu)$ die Form 4.2a haben.

$$4.2a \quad r_1^g(\mu) = p^g r_1(\mu)$$

Die einfallenden Neutronen sollen in allen Gruppen die gleiche Winkelverteilung besitzen. Wie in Abschnitt III können wir noch ohne Einschränkung der Allgemeinheit annehmen, daß 4.2b

$$4.2b \quad r_r^g(\mu) \equiv 0 \quad g=1,2,\dots,NG$$

gilt, daß also nur von links Neutronen auf unser System treffen.

Fordern wir nun von den vorzugebenden Funktionen $\psi_i(\mu)$, daß sie den Bedingungen 4.8

$$4.8 \quad \begin{array}{lll} \psi_i(\mu) = 0 & 0 \leq \mu \leq 1 & i = \frac{N}{2}+1, \frac{N}{2}+2, \dots, N \\ \psi_i(\mu) = 0 & -1 \leq \mu \leq 0 & i = 1, 2, \dots, \frac{N}{2} \\ \psi_1(\mu) = r_1(\mu) & 0 \leq \mu \leq 1 & \end{array}$$

genügen, und legen wir die zu 4.7 gehörenden Randbedingungen wie folgt fest,

$$4.9 \quad \begin{array}{lll} \varphi_i^g(0) = 0 & i=2,3,\dots,\frac{N}{2} & \\ \varphi_i^g(d) = 0 & i = \frac{N}{2}+1, \frac{N}{2}+2, \dots, N & g=1,2,\dots,NG \\ \varphi_1^g(0) = p^g & & \end{array}$$

so erfüllt unser Ansatz die Randbedingungen 4.2 exakt für alle integrierbaren Funktionen $r_1(\mu)$.

In Abschnitt V wird das sich unter diesen Randbedingungen ergebende Gleichungssystem 4.7 noch einmal ausführlich dargestellt und eine Lösungsmethode angegeben. In Abschnitt VI werden die Ergebnisse für einige Modellprobleme diskutiert.

IV.2 Entwicklung nach Funktionen des Winkels und der Energie

Statt mit dem Ansatz 4.3, welcher einer modalen Entwicklung von 4.1 nach der Winkelvariablen entspricht, wollen wir in diesem Teil eine Näherungslösung zu 4.1 und 4.2 mit dem Ansatz 4.10 suchen, welcher einer modalen Entwicklung nach der Winkel- und Energievariablen entspricht.

$$4.10 \quad \vec{\phi}(x, \mu) = \sum_{i=1}^N \varphi_i(x) \psi_i(\mu) \vec{\rho}_i$$

Im Ansatz 4.10 sind $\vec{\phi}(x, \mu)$ und $\vec{\rho}_i$ Spaltenvektoren mit den Komponenten $\phi^g(x, \mu)$ und ρ_i^g , $g=1, 2, \dots, NG$. Die $\vec{\rho}_i$ sind vorgegebende, linear unabhängige Vektoren, welche je ein Multigruppenspektrum darstellen, die $\psi_i(\mu)$ sind vorgegebende, linear unabhängige und integrierbare Funktionen von μ . Die Funktionen $\varphi_i(x)$ werden durch das Verfahren der "weighted residuals" bestimmt, das in diesem Falle folgender Prozedur entspricht: Wir gehen mit dem Ansatz 4.10 ein in 4.1a, multiplizieren sodann 4.1a skalar mit $w_j(\mu) \vec{v}_j$, wobei die $w_j(\mu)$ vorgegebende, linear unabhängige und integrierbare Wichtungsfunktionen von μ und die \vec{v}_j vorgegebende, linear unabhängige Wichtungsvektoren sind, und integrieren die Gleichung über μ . Der Integration über E entspricht hier im Multigruppenbild die skalare Multiplikation mit \vec{v}_j . Dabei ist zu beachten, daß die Komponenten von \vec{v}_j definiert sind durch

$$v_j^e = \frac{\int (\Delta E)^e v_j(E) dE}{(\Delta E)^e}$$

Mit $r^g(x, \mu) \equiv 0$ erhalten wir 4.11.

$$\begin{aligned}
 & \sum_{i=1}^N \frac{d}{dx} \varphi_i(x) \int_{-1}^1 \mu w_j(\mu) \psi_i(\mu) d\mu \cdot \sum_{k=1}^{NG} \rho_i^k v_j^k + \sum_{i=1}^N \varphi_i(x) \int_{-1}^1 w_j(\mu) \psi_i(\mu) d\mu \sum_{k=1}^{NG} \sigma_t^k \rho_i^k v_j^k = \\
 4.11 \quad & = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \varphi_i(x) \int_{-1}^1 w_j(\mu) d\mu \int_{-1}^1 \psi_i(\mu') d\mu' \sum_{k=1}^{NG} v_j^k \sum_{l=1}^{NG} \sigma_s^{1 \rightarrow k} \rho_i^l \quad j=1,2,\dots,N
 \end{aligned}$$

Mit

$$\begin{aligned}
 a_{ji} &= \int_{-1}^1 \mu w_j(\mu) \psi_i(\mu) d\mu \cdot \sum_{k=1}^{NG} \rho_i^k v_j^k \\
 b_{ji} &= \int_{-1}^1 w_j(\mu) \psi_i(\mu) d\mu \sum_{k=1}^{NG} \sigma_t^k \rho_i^k v_j^k \\
 d_{ji} &= \frac{1}{2} \int_{-1}^1 w_j(\mu) d\mu \int_{-1}^1 \psi_i(\mu') d\mu' \sum_{k=1}^{NG} v_j^k \sum_{l=1}^{NG} \sigma_s^{1 \rightarrow k} \rho_i^l
 \end{aligned}$$

und $A = (a_{ji})$, $B = (b_{ji})$, $D = (d_{ji})$ sowie $\vec{\varphi}(x) = \begin{bmatrix} \varphi_1(x) \\ \vdots \\ \varphi_N(x) \end{bmatrix}$ hat 4.11 die Form

$$A \frac{d}{dx} \vec{\varphi}(x) + B \vec{\varphi}(x) = D \vec{\varphi}(x)$$

Existiert A^{-1} und setzen wir $C = A^{-1}(D-B)$, ergibt sich schließlich 4.12.

$$4.12 \quad \frac{d}{dx} \vec{\varphi}(x) = C \vec{\varphi}(x)$$

Um wiederum die Randbedingungen 4.2 unter den Voraussetzungen 4.2a und 4.2b exakt erfüllen zu können, unterwerfen wir die zugelassenen Funktionen $\psi_i(\mu)$ wieder den zusätzlichen Bedingungen 4.8 und fordern von den Vektoren $\vec{\rho}_i$ noch, daß für sie 4.13 gilt.

$$4.13 \quad \rho_i^g = p^g \quad g=1,2,\dots,NG$$

Legen wir jetzt der Differentialgleichung 4.12 die Randbedingungen 4.14

$$\begin{aligned}
 & \psi_i(0) = 0 && i=2,3,\dots,\frac{N}{2} \\
 4.14 \quad & \psi_i(d) = 0 && i=\frac{N}{2}+1,\frac{N}{2}+2,\dots,N \\
 & \psi_1(0) = 1
 \end{aligned}$$

zugrunde, ist die exakte Befriedigung der Randbedingungen 4.2 durch unseren Ansatz 4.10 gesichert.

Die Differentialgleichung 4.12 mit den Randbedingungen 4.14 hat die gleiche Form wie 3.7 mit 3.9 aus Abschnitt III und kann mit den gleichen Verfahren wie diese gelöst werden (Abschnitt V). Allerdings ist zu beachten, daß die Voraussetzungen aus [29], [30] nicht mehr erfüllt sind, und daß tatsächlich die Matrix C aus 4.12 i. a. auch komplexe Eigenwerte besitzt. Wie in Abschnitt V gezeigt wird, bedingt dies jedoch nur eine geringfügige Modifikation der für 3.7 entwickelten Verfahren.

Eine andere Möglichkeit, die Randbedingungen 4.2 exakt zu befriedigen, besteht wieder darin, den Neutronenfluß aufzuspalten in einen Term $\phi^{0g}(x,\mu)$, welcher die Verteilung der Neutronen der Gruppe g beschreibt, die noch keinen Stoß erlitten haben, und in einen Term $\phi^{1g}(x,\mu)$, welcher die Verteilung aller übrigen Neutronen der Gruppe g beschreibt.

$$4.15 \quad \phi^g(x,\mu) = \phi^{0g}(x,\mu) + \phi^{1g}(x,\mu) \quad g=1,2,\dots,NG$$

$\phi^{0g}(x,\mu)$ befriedigt die folgende Gleichung (mit $f^g(x,\mu) \equiv 0$):

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} \phi^{0g}(x,\mu) + \sigma_t^g \phi^{0g}(x,\mu) = 0 \quad g=1,2,\dots,NG$$

Deren Lösung kann sofort angegeben werden:

$$4.15a \quad \phi^{0g}(x,\mu) = \phi^{0g}(0,\mu) \exp(-\sigma_t^g \frac{x}{\mu}) H(\mu)$$

$$\phi^{0g}(0,\mu) = r_1^g(\mu) \cdot p^g \quad g=1,2,\dots,NG$$

(Hier kann in sehr einfacher Weise auch die allgemeinere Form der Randbedingungen 4.2 befriedigt werden mit $\phi^{0g}(0,\mu) = r_1^g(\mu)$.)

Der zweite Term $\phi^{1g}(x, \mu)$ erfüllt dann die Gleichung 4.16

$$4.16 \quad \mu \frac{\partial}{\partial x} \phi^{1g}(x, \mu) + \sigma_t^g \phi^{1g}(x, \mu) = \frac{1}{2} \sum_{j=1-1}^{NG-1} \int \phi^{1j}(x, \mu') d\mu' \sigma_s^{j \rightarrow g} + \frac{1}{2} \sum_{j=1-1}^{NG-1} \int \phi^{0j}(x, \mu') d\mu' \sigma_s^{j \rightarrow g}$$

mit den Randbedingungen 4.17.

$$4.17 \quad \begin{aligned} \phi^{1g}(0, \mu) &= 0 & 0 \leq \mu \leq 1 & & g=1, 2, \dots, NG \\ \phi^{1g}(d, \mu) &= 0 & -1 \leq \mu \leq 0 & & \end{aligned}$$

Suchen wir eine Näherungslösung von 4.16 und 4.17 mit dem Ansatz 4.3 und verfahren wie zuvor, so gelangen wir zu den Gleichungen 4.18

$$4.18 \quad \frac{d}{dx} \vec{\psi}(x) = C^* \vec{\psi}(x) + (A^*)^{-1} \vec{f}(x)$$

zur Bestimmung der unbekanntenen Funktionen $\psi_i(x)$. Die Elemente der Matrix C^* haben die gleiche Gestalt wie die der Matrix C aus 4.12. Lediglich die Nebenbedingungen für die Funktionen $\psi_i(\mu)$ und die Randbedingungen für 4.18 müssen leicht modifiziert werden, damit der Ansatz 4.3 jetzt 4.17 erfüllt. Statt 4.8 und 4.9 fordern wir in diesem Fall

$$4.8a \quad \begin{aligned} \psi_i(\mu) &= 0 & 0 \leq \mu \leq 1 & & i = \frac{N}{2} + 1, \frac{N}{2} + 2, \dots, N \\ \psi_i(\mu) &= 0 & -1 \leq \mu \leq 0 & & i = 1, 2, \dots, \frac{N}{2} \end{aligned}$$

$$4.9a \quad \begin{aligned} \psi_i^g(0) &= 0 & i = 1, 2, \dots, \frac{N}{2} & & \\ \psi_i^g(d) &= 0 & i = \frac{N}{2} + 1, \frac{N}{2} + 2, \dots, N & & g = 1, 2, \dots, NG \end{aligned}$$

Die Komponenten von $\vec{f}(x)$ haben die Darstellung

$$f_j(x) = \frac{1}{2} \sum_{g=1-1}^{NG-1} \int \phi^{0g}(x, \mu') d\mu' \int_{-1}^1 w_j(\mu) d\mu \cdot \sum_{l=1}^{NG} \sigma_s^{g \rightarrow l} v_j^l$$

Mit 4.8a und der Lösung von 4.18 und 4.9a stellt 4.3 jetzt eine Näherungslösung von 4.16, d.h. für die Verteilung aller Neutronen, die mindestens einen Stoß erlitten haben, dar, welche die Randbedingungen 4.17 für diese

Verteilung exakt erfüllt. Das bedeutet aber, daß 4.15 eine Näherungslösung von 4.1 darstellt, welche die ungestreuten Neutronen exakt erfaßt und außerdem die Randbedingungen 4.2 für die Gesamtverteilung exakt erfüllt.

IV.3 Entwicklung nach Funktionen des Ortes

In den beiden ersten Teilen dieses Abschnittes haben wir Näherungslösungen von 4.1 und 4.2 mit Hilfe von modalen Entwicklungen nach Funktionen des Winkels bzw. nach Funktionen des Winkels und Funktionen der Energie konstruiert. In diesem Teil sollen nun Näherungslösungen von 4.1 und 4.2 mit Hilfe von modalen Entwicklungen nach Funktionen des Ortes gesucht werden.

Wie schon in Abschnitt III.2 für das monoenergetische Problem wählen wir auch hier einen leicht modifizierten Ansatz, um die eventuellen Unstetigkeiten in der Winkelverteilung der Neutronenflugrichtungen bei $\mu=0$ besser berücksichtigen zu können. Mit diesem Ansatz 4.19 zur näherungsweise Lösung von 4.1

$$4.19 \quad \phi^g(x, \mu) = \sum_{i=1}^N (\varphi_i^{g+}(x) \psi_i^{g+}(\mu) + \varphi_i^{g-}(x) \psi_i^{g-}(\mu)) \quad g=1, 2, \dots, NG$$

gehen wir ein in 4.1 und fordern Orthogonalität der Residuen $R^g(x, \mu)$ im μ -Intervall $[-1, 0]$ zu den N Wichtungsfunktionen $w_j^{g+}(x)$ und Orthogonalität im μ -Intervall $[0, 1]$ zu den N Wichtungsfunktionen $w_j^{g-}(x)$. Die $2N$ Wichtungsfunktionen $w_j^{g\pm}(x)$ sowie die $2N$ Entwicklungsfunktionen $\varphi_i^{g\pm}(x)$ sind vorzugeben und werden als integrierbar und linear unabhängig vorausgesetzt. Die Funktionen $\varphi_i^{g\pm}(x)$ sollen ferner den zusätzlichen Bedingungen 4.20 und die Funktionen $\psi_i^{g\pm}(\mu)$ den zusätzlichen Bedingungen 4.21 genügen,

$$4.20 \quad \begin{aligned} \varphi_i^{g+}(d) &= 0 & i=1, 2, \dots, N \\ \varphi_i^{g-}(0) &= 0 & i=1, 2, \dots, N \\ \varphi_1^{g+}(0) &= 1 & \text{(Normierung)} \\ \psi_i^{g+}(\mu) &= 0 & 0 \leq \mu \leq 1 & i=2, 3, \dots, N \\ \psi_i^{g-}(\mu) &= 0 & -1 \leq \mu \leq 0 & i=1, 2, \dots, N \\ \psi_1^{g+}(\mu) &= r_1^g(\mu) & 0 \leq \mu \leq 1 & g=1, 2, \dots, NG \end{aligned}$$

durch die garantiert wird, daß der Ansatz 4.19 die Randbedingungen 4.2 exakt befriedigt, wenn wir wieder annehmen, daß $r_r^g \equiv 0$ für alle Gruppen g erfüllt ist. Wie zuvor nehmen wir weiter an, daß auch $r^g \equiv 0$ für alle Gruppen g erfüllt ist. Die Forderung der Orthogonalität der Residuen $R^g(x, \mu)$ zu den gegebenen Wichtungsfunktionen $w_j^{g\pm}(x)$ liefert mit dem Skalarprodukt 3.26 das Gleichungssystem 4.22 zur Bestimmung der $\psi_i^{g\pm}(\mu)$.

$$\begin{aligned}
 & \mu \sum_{i=1}^N \psi_i^{g+}(\mu) (w_j^{g+}, \frac{d}{dx} \varphi_i^{g+}) + \sigma_t^g \sum_{i=1}^N \psi_i^{g+}(\mu) (w_j^{g+}, \varphi_i^{g+}) = \\
 4.22a \quad & = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \left[\sum_{k=1}^{NG} \sigma_s^{k \rightarrow g} \left\{ \int_{-1}^0 \psi_i^{k+}(\mu') d\mu' (w_j^{g+}, \varphi_i^{k+}) + \int_0^1 \psi_i^{k-}(\mu') d\mu' (w_j^{g+}, \varphi_i^{k-}) \right\} \right] + \\
 & + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{NG} \sigma_s^{k \rightarrow g} \int_0^1 \psi_1^{k+}(\mu') d\mu' (w_j^{g+}, \varphi_1^{k+}) \\
 & \quad -1 \leq \mu \leq 0; \quad j=1, 2, \dots, N; \quad g=1, 2, \dots, NG
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \mu \sum_{i=1}^N \psi_i^{g-}(\mu) (w_j^{g-}, \frac{d}{dx} \varphi_i^{g-}) + \sigma_t^g \sum_{i=1}^N \psi_i^{g-}(\mu) (w_j^{g-}, \varphi_i^{g-}) = \\
 4.22b \quad & = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \left[\sum_{k=1}^{NG} \sigma_s^{k \rightarrow g} \left\{ \int_{-1}^0 \psi_i^{k+}(\mu') d\mu' (w_j^{g-}, \varphi_i^{k+}) + \int_0^1 \psi_i^{k-}(\mu') d\mu' (w_j^{g-}, \varphi_i^{k-}) \right\} \right] + \\
 & + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{NG} \sigma_s^{k \rightarrow g} \int_0^1 \psi_1^{k+}(\mu') d\mu' (w_j^{g-}, \varphi_1^{k+}) - \mu \psi_1^{g+}(\mu) (w_j^{g-}, \frac{d}{dx} \varphi_1^{g+}) - \sigma_t^g \psi_1^{g+}(\mu) (w_j^{g-}, \varphi_1^{g+}) \\
 & \quad 0 \leq \mu \leq 1; \quad j=1, 2, \dots, N; \quad g=1, 2, \dots, NG
 \end{aligned}$$

4.22a und 4.22b stellen zwei Integralgleichungssysteme für je $N \cdot NG$ unbekannte Funktionen dar. Über die Streu- und Spaltquelle sind beide Systeme miteinander gekoppelt.

Um zu einer übersichtlichen Darstellung zu gelangen, machen wir wie in Abschnitt IV.1 die vereinfachende aber nicht notwendige Annahme, daß die

Entwicklungs- und Wichtungsfunktionen $\varphi_i^{\pm}(x)$ bzw. $w_j^{\pm}(x)$ gruppenunabhängig sind.

Mit den Abkürzungen

$$\begin{aligned} a_{ji}^{\pm} &= (w_j^{\pm}, \frac{d}{dx} \varphi_i^{\pm}) \\ b_{ji}^{\pm} &= (w_j^{\pm}, \varphi_i^{\pm}) \\ d_{ji}^{\pm} &= (w_j^{\pm}, \varphi_i^{\pm}) \\ r_j^{k\pm} &= \int_0^1 \psi_1^{k\pm}(u') du' (w_j^{\pm}, \varphi_1^{\pm}) \\ s_j^{g\pm} &= u \psi_1^{g\pm}(u) (w_j^{\pm}, \frac{d}{dx} \varphi_1^{\pm}) + \sigma_t^g \psi_1^{g\pm}(u) (w_j^{\pm}, \varphi_1^{\pm}) \\ \psi_i^{g\pm} &= \int_{-1}^0 \psi_i^{g\pm}(u') du' \\ \psi_i^{g-} &= \int_0^1 \psi_i^{g-}(u') du', \end{aligned}$$

den Matrizen $A^{\pm}=(a_{ji}^{\pm})$, $B^{\pm}=(b_{ji}^{\pm})$, $D^{\pm}=(d_{ji}^{\pm})$ sowie den Vektoren $r^{k\pm}=(r_j^{k\pm})$, $s^{g\pm}=(s_j^{g\pm}(u))$, $\psi^{g\pm}=(\psi_i^{g\pm})$ und $\psi^{g\pm}(u) = (\psi_i^{g\pm}(u))$ schreiben wir die Gleichungen 4.22 wie folgt:

$$\begin{aligned} \mu A^+ \psi^{g+}(u) + \sigma_t^g B^+ \psi^{g+}(u) &= \frac{1}{2} B^+ \sum_{k=1}^{NG} \sigma_s^{k \rightarrow g} \psi^{k+} + \\ 4.23a \quad + \frac{1}{2} D^- \sum_{k=1}^{NG} \sigma_s^{k \rightarrow g} \psi^{k-} &+ \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{NG} \sigma_s^{k \rightarrow g} r^{k+} \end{aligned}$$

$$-1 \leq \mu \leq 0; \quad g=1, 2, \dots, NG$$

$$\begin{aligned} \mu A^- \psi^{g-}(u) + \sigma_t^g B^- \psi^{g-}(u) &= \frac{1}{2} D^+ \sum_{k=1}^{NG} \sigma_s^{k \rightarrow g} \psi^{k+} + \frac{1}{2} B^- \sum_{k=1}^{NG} \sigma_s^{k \rightarrow g} \psi^{k-} + \\ 4.23b \quad + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{NG} \sigma_s^{k \rightarrow g} r^{k-} &- s^{g-}(u) \end{aligned}$$

$$0 \leq \mu \leq 1; \quad g=1, 2, \dots, NG$$

Existieren $F^{g+}(\mu)^{-1} = (\mu A^+ + \sigma_t^g B^+)^{-1}$ in $[-1, 0]$ und $F^{g-}(\mu)^{-1} = (\mu A^- + \sigma_t^g B^-)^{-1}$ in $[0, 1]$ für $1 \leq g \leq NG$, und setzen wir

$$\begin{aligned}
 E_1^g &= \frac{1}{2} \int_{-1}^0 F^{g+}(\mu)^{-1} B^+ d\mu \\
 E_2^g &= \frac{1}{2} \int_{-1}^0 F^{g+}(\mu)^{-1} D^- d\mu \\
 E_3^g &= \frac{1}{2} \int_{-1}^0 F^{g-}(\mu)^{-1} D^+ d\mu \\
 E_4^g &= \frac{1}{2} \int_{-1}^0 F^{g-}(\mu)^{-1} B^- d\mu \\
 p^{g+} &= \frac{1}{2} \int_{-1}^0 F^{g+}(\mu)^{-1} d\mu \sum_{k=1}^{NG} \sigma_s^{k \rightarrow g} r^{k+} \\
 p^{g-} &= \frac{1}{2} \int_{-1}^0 F^{g-}(\mu)^{-1} d\mu \sum_{k=1}^{NG} \sigma_s^{k \rightarrow g} r^{k-} - \int_0^1 F^{g-}(\mu)^{-1} s^{g-}(\mu) d\mu,
 \end{aligned}$$

so erhalten wir die algebraischen Gleichungen 4.24, in dem wir zunächst 4.23a von links mit $F^{g+}(\mu)^{-1}$ und 4.23b von links mit $F^{g-}(\mu)^{-1}$ multiplizieren und dann in üblicher Weise die Fredholmschen Integralgleichungen zweiter Art mit entartetem Kern über $[-1, 0]$ bzw. über $[0, 1]$ integrieren.

$$\begin{aligned}
 4.24 \quad \psi^{g+} &= E_1^g \sum_{k=1}^{NG} \sigma_s^{k \rightarrow g} \psi^{k+} + E_2^g \sum_{k=1}^{NG} \sigma_s^{k \rightarrow g} \psi^{k-} + p^{g+} \\
 \psi^{g-} &= E_3^g \sum_{k=1}^{NG} \sigma_s^{k \rightarrow g} \psi^{k+} + E_4^g \sum_{k=1}^{NG} \sigma_s^{k \rightarrow g} \psi^{k-} + p^{g-}
 \end{aligned}$$

$$g=1, 2, \dots, NG$$

Das lineare, inhomogene Gleichungssystem 4.24 hat die Kantenlänge $2 \cdot NG$ und ist i.a. zu groß, um direkt gelöst werden zu können. Wir benutzen daher eine Art Quelliterationsverfahren, welches durch Gleichung 4.26 beschrieben wird. v ist der Iterationsindex, die Vektoren ψ^g , p^g und die Matrizen E^g sind durch 4.25 definiert. Die Vektoren $\psi^{g(0)}$ sind als Anfangsschätzung dem Iterationsverfahren vorzugeben.

$$\begin{aligned}
 4.25 \quad \psi^g &= \begin{bmatrix} \psi^{g+} \\ \psi^{g-} \end{bmatrix} \\
 p^g &= \begin{bmatrix} p^{g+} \\ p^{g-} \end{bmatrix} \\
 E^g &= \begin{bmatrix} E_1^g & E_2^g \\ E_3^g & E_4^g \end{bmatrix}
 \end{aligned}$$

$$4.26 \quad (I - \sigma_{\text{str}}^{g \rightarrow g} E^g) \psi^{g(v+1)} = E^g \left[\sum_{k < g} \sigma_{\text{str}}^{k \rightarrow g} \psi^{k(v+1)} + \sum_{k=1}^{NG} \sigma_{\text{sp}}^{k \rightarrow g} \psi^{k(v)} \right] + p^g$$

$$g=1,2,\dots,NG$$

I ist die Einheitsmatrix, $\sigma_{\text{str}}^{k \rightarrow g}$ und $\sigma_{\text{sp}}^{k \rightarrow g}$ sind die Elemente der Streu- bzw. Spaltmatrizen. In 4.26 haben wir berücksichtigt, daß gemäß unseren Voraussetzungen $\sigma_{\text{str}}^{k \rightarrow g} = 0$ für $k > g$ gilt (keine Aufwärtsstreuung).

Sofern $(I - \sigma_{\text{str}}^{g \rightarrow g} E^g)$ nicht singulär ist, lassen sich aus 4.26 sukzessive die Vektoren $\psi^{g(v+1)}$ berechnen, wobei die Vektoren der v -ten Näherung $\psi^{g(v)}$ nur in den zweiten Term der rechten Seite (Spaltquelle) eingehen. Ist für ein vorzugebendes $\epsilon > 0$ die Bedingung 4.27 befriedigt, bricht die Iteration ab.

$$4.27 \quad |\psi_i^{g(v+1)} - \psi_i^{g(v)}| < \epsilon |\psi_i^{g(v+1)}| \quad i=1,2,\dots,N; \quad g=1,2,\dots,NG$$

Mit den Vektoren ψ^g liefern die Gleichungen 4.23 die Vektoren $\psi^{g+}(\mu)$ und $\psi^{g-}(\mu)$, die, in unseren Ansatz 4.19 eingesetzt, die gesuchte Näherungslösung bestimmen. Durch den Ansatz 4.19 ist damit das Problem der näherungsweise Lösung von 4.1 im wesentlichen reduziert auf das Problem der Lösung des linearen Gleichungssystems 4.26.

IV.4 Entwicklung nach Funktionen des Ortes und der Energie

Wie schon im Teil 2 dieses Abschnitts bei der Entwicklung nach Funktionen des Winkels gehen wir auch bei der Entwicklung nach Funktionen des Ortes noch einen Schritt weiter und entwickeln in diesem Teil gleichzeitig nach Funktionen der Energie. Wir suchen also Näherungslösungen von 4.1a und 4.2 mit Hilfe des Ansatzes 4.28.

$$4.28 \quad \vec{\phi}(x, \mu) = \sum_{i=1}^N (\vec{\rho}_i^+ \psi_i^+(x) \psi_i^+(\mu) + \vec{\rho}_i^- \psi_i^-(x) \psi_i^-(\mu))$$

Die Spaltenvektoren ρ_i^\pm sind vorzugebende Multigruppenspektren, die $\psi_i^\pm(x)$ vorzugebende integrierbare Funktionen des Ortes. Sowohl die $\vec{\rho}_i^+$ bzw. $\vec{\rho}_i^-$

als auch die $\varphi_i^+(x)$ bzw. $\varphi_i^-(x)$, $i=1,2,\dots,N$, werden als linear unabhängig vorausgesetzt.

Entsprechend den oben beschriebenen Verfahren zur Bestimmung der unbekannt Funktionen $\psi_i^\pm(\mu)$ gehen wir mit 4.28 ein in 4.1a und fordern Orthogonalität des Residiums $\vec{R}(x,\mu)$ in μ -Intervall $[-1,0]$ zu den N Wichtungsvektoren $\vec{v}_j^+ w_j^+(x)$ und Orthogonalität im μ -Intervall $[0,1]$ zu den N Wichtungsvektoren $\vec{v}_j^- w_j^-(x)$. Die $2N$ Wichtungsvektoren \vec{v}_j^\pm und die $2N$ Wichtungsfunktionen $w_j^\pm(x)$ sind ebenfalls vorzugeben; sowohl die \vec{v}_j^+ bzw. \vec{v}_j^- als auch die $w_j^+(x)$ bzw. $w_j^-(x)$, $j=1,2,\dots,N$, werden als linear unabhängig, die $w_j^\pm(x)$ darüber hinaus als integrierbar vorausgesetzt. Außerdem unterwerfen wir die Funktionen $\psi_i^\pm(\mu)$ den zusätzlichen Bedingungen 4.29 und die Funktionen $\varphi_i^\pm(x)$ den zusätzlichen Bedingungen 4.30.

$$\begin{aligned}
 4.29 \quad & \psi_i^+(\mu) = 0 & 0 \leq \mu \leq 1 & \quad i=2,3,\dots,N \\
 & \psi_i^-(\mu) = 0 & -1 \leq \mu \leq 0 & \quad i=1,2,\dots,N \\
 & \psi_1^+(\mu) = r_1(\mu) & 0 \leq \mu \leq 1 &
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 4.30 \quad & \varphi_i^+(d) = 0 & i=1,2,\dots,N \\
 & \varphi_i^-(0) = 0 & i=1,2,\dots,N \\
 & \varphi_1^+(0) = 1 & \text{(Normierung)}
 \end{aligned}$$

Verlangen wir noch

$$\vec{\rho}_1 = \vec{p}$$

so erfüllt der Ansatz 4.28 die Randbedingungen 4.2 exakt, wenn wir wieder die Gültigkeit von 4.2a voraussetzen und ohne Beschränkung der Allgemeinheit

$$r_r^g(\mu) \equiv 0 \quad g=1,2,\dots,NG$$

setzen.

Mit dem Skalarprodukt 4.31

$$4.31 \quad (\vec{f}, \vec{g}, \vec{h}, \vec{p}) = \sum_{i=1}^{NG} f^i h^i \cdot \int_0^d g(x) \cdot p(x) dx$$

liefert die Forderung der Orthogonalität des Residuums zu den vorgegebenen Wichtungsvektoren die Gleichungen 4.32 zur Bestimmung der unbekannt Funktionen $\psi_i^\pm(\mu)$. Wir verwenden dabei die folgenden Abkürzungen:

$$a_{ji}^\pm = (\rho_i^\pm \frac{d}{dx} \varphi_i^\pm, v_{j,w_j}^\pm)$$

$$b_{ji}^\pm = (\alpha_t \rho_i^\pm \varphi_i^\pm, v_{j,w_j}^\pm)$$

$$d_{ji}^\pm = (\frac{1}{2} \alpha_s \rho_i^\pm \varphi_i^\pm, v_{j,w_j}^\pm)$$

$$g_{ji}^\pm = (\frac{1}{2} \alpha_s \rho_i^\pm \varphi_i^\pm, v_{j,w_j}^\pm)$$

$$s_j^+(\mu) = a_{j1}^+ \int_0^1 \psi_1^+(\mu') d\mu'$$

$$s_j^-(\mu) = g_{j1}^+ \int_0^1 \psi_1^+(\mu') d\mu' - \mu \psi_1^+(\mu) (\rho_1^+ \frac{d}{dx} \varphi_1^+, v_{j,w_j}^-) - \psi_1^+(\mu) (\alpha_t \rho_1^+ \varphi_1^+, v_{j,w_j}^-)$$

$$\tilde{\psi}_i^+ = \int_{-1}^0 \psi_i^+(\mu) d\mu$$

$$\tilde{\psi}_i^- = \int_0^1 \psi_i^-(\mu) d\mu$$

und die Matrizen $A^\pm = (a_{ji}^\pm)$, $B^\pm = (b_{ji}^\pm)$, $D^\pm = (d_{ji}^\pm)$ und $G^\pm = (g_{ji}^\pm)$ sowie die Vektoren $s^\pm(\mu)$ mit den Komponenten $s_j^\pm(\mu)$, die Vektoren $\tilde{\psi}^\pm$ mit den Komponenten $\tilde{\psi}_i^\pm$ und die Vektoren $\psi^\pm(\mu)$ mit den Komponenten $\psi_i^\pm(\mu)$.

$$4.32a \quad \mu A^+ \psi^+(\mu) + B^+ \psi^+(\mu) = D^+ \tilde{\psi}^+ + G^+ \tilde{\psi}^- + s^+(\mu)$$

$$-1 \leq \mu \leq 0$$

$$4.32b \quad \mu A^- \psi^-(\mu) + B^- \psi^-(\mu) = G^- \tilde{\psi}^+ + D^- \tilde{\psi}^- + s^-(\mu)$$

$$0 \leq \mu \leq 1$$

Existieren

$$F^+(\mu)^{-1} = (\mu A^+ + B^+)^{-1}$$

und

$$F^-(\mu)^{-1} = (\mu A^- + B^-)^{-1}$$

in $[-1, 0]$ bzw. in $[0, 1]$, und definieren wir die Matrizen E_i durch

$$E_1 = \int_{-1}^0 F^+(\mu)^{-1} d\mu D^+$$

$$E_2 = \int_{-1}^0 F^+(\mu)^{-1} d\mu G^-$$

$$E_3 = \int_0^1 F^-(\mu)^{-1} d\mu G^+$$

$$E_4 = \int_0^1 F^-(\mu)^{-1} d\mu D^-$$

sowie die Vektoren p^\pm durch

$$p^+ = \int_{-1}^0 F^+(\mu)^{-1} s^+(\mu) d\mu$$

$$p^- = \int_0^1 F^-(\mu)^{-1} s^-(\mu) d\mu$$

so finden wir das algebraische Gleichungssystem 4.33, wenn wir 4.32a von links mit $F^+(\mu)^{-1}$ und 4.32b von links mit $F^-(\mu)^{-1}$ multiplizieren und die Fredholmschen Integral-Gleichungssysteme zweiter Art mit entartetem Kern über $[-1, 0]$ bzw. über $[0, 1]$ integrieren.

$$\hat{\psi}^+ = E_1 \hat{\psi}^+ + E_2 \hat{\psi}^- + p^+$$

4.33

$$\hat{\psi}^- = E_3 \hat{\psi}^+ + E_4 \hat{\psi}^- + p^-$$

Dieses inhomogene lineare Gleichungssystem hat die Kantenlänge $2N$ und kann i.a. direkt gelöst werden. Ist die Determinante der Matrix $(I-E)$ von Null verschieden, wobei E aus den Matrizen E_1 besteht, hat 4.33 eine eindeutige Lösung. Eingesetzt in 4.32 liefert diese Lösung die gesuchten Vektoren $\psi^\pm(\mu)$.

Die Bestimmung einer Näherungslösung von 4.1a und 4.2 in der Form 4.28 ist damit zurückgeführt auf einige Inversionen von Matrizen der Kantenlänge $2N$, während die Bestimmung einer Näherungslösung in der Form 4.19 die Inversion einer Matrix der Kantenlänge $2N$ erfordert.

V Numerische Behandlung der reduzierten Boltzmann-Gleichung

Die Methode der modalen Entwicklung führte in den vorhergehenden Abschnitten auf Systeme von Differential- bzw. Integralgleichungen, deren Lösungen nur durch numerische Verfahren und mit Hilfe von elektronischen Rechanlagen gewonnen werden können. Während sich die Lösung der Integralgleichungssysteme auf die Lösung von linearen Gleichungssystemen kleiner Kantenlänge zurückführen ließ, worüber hier nichts weiter gesagt werden soll, erfordert die Lösung der Differentialgleichungssysteme entweder die Lösung eines Eigenwert-Eigenvektor-Problems und eines mit zunehmender Plattendicke schlechter konditionierten kleinen linearen Gleichungssystems oder aber die Lösung eines sehr großen linearen Gleichungssystems. Hierauf soll in diesem Abschnitt näher eingegangen werden, und die verwendeten Verfahren sollen kurz skizziert werden.

Die zu lösenden Differentialgleichungssysteme der vorstehenden Abschnitte hatten stets die Form 5.1,

$$5.1 \quad \frac{d}{dx} \vec{\varphi}(x) = C \vec{\varphi}(x) + \vec{f}(x)$$

wobei $\vec{\varphi}(x)$ und $\vec{f}(x)$ Vektoren der Länge N , N gerade, und C eine quadratische Matrix der Kantenlänge N bedeuten. Wir beschränken unsere Darstellung wieder auf Matrizen C mit konstanten Elementen und führen die abgekürzte Schreibweise

$$\vec{\varphi}^+(x) = \begin{bmatrix} \varphi_1(x) \\ \varphi_2(x) \\ \vdots \\ \varphi_{\frac{N}{2}}(x) \end{bmatrix} \quad \vec{\varphi}^-(x) = \begin{bmatrix} \varphi_{\frac{N}{2}+1}(x) \\ \varphi_{\frac{N}{2}+2}(x) \\ \vdots \\ \varphi_N(x) \end{bmatrix}$$

ein, die besagt, daß die $\frac{N}{2}$ -Vektoren $\vec{\varphi}^+(x)$ und $\vec{\varphi}^-(x)$ aus den ersten bzw. letzten $\frac{N}{2}$ Komponenten des N -Vektors $\vec{\varphi}(x)$ bestehen. Damit können wir die zu 5.1 gehörenden Randbedingungen der vorherigen Abschnitte wie folgt schreiben:

$$5.2 \quad \begin{aligned} \varphi^+(0) &= r^+ \\ \varphi^-(d) &= r^- \end{aligned}$$

V.1 Lösung des homogenen Problems mit inhomogenen Randbedingungen

In diesem Fall wird $\vec{f}(x) \equiv 0$ und mindestens eine Komponente von \vec{r} von Null verschieden vorausgesetzt. Die formale Lösung von 5.1 lautet dann unter der Voraussetzung, daß die Matrix C der Kantenlänge N genau N einfache Eigenwerte λ_i und dazugehörige N linear unabhängige Eigenvektoren \vec{e}_i mit den Komponenten e_{ji} besitzt:

$$5.3 \quad \vec{\varphi}(x) = \sum_{i=1}^N k_i \vec{e}_i \exp(\lambda_i x)$$

Die Konstanten k_i sind aus den Randbedingungen 5.2 zu bestimmen, d.h. aus dem linearen Gleichungssystem 5.4,

$$5.4 \quad \begin{aligned} \sum_{i=1}^N k_i e_i^+ &= r^+ \\ \sum_{i=1}^N k_i e_i^- \exp(\lambda_i d) &= r^- \end{aligned}$$

dessen Koeffizientenmatrix H aus den Elementen

$$\begin{aligned} h_{ji} &= e_{ji} & j=1,2,\dots,\frac{N}{2} & i=1,2,\dots,N \\ h_{ji} &= e_{ji} \exp(\lambda_i d) & j=\frac{N}{2}+1,\frac{N}{2}+2,\dots,N \end{aligned}$$

besteht. Für große Plattendicken d und für $i > \frac{N}{2}$ wachsen die h_{ji} für positive $\text{Re}\lambda_i$ über alle Grenzen oder werden für negative $\text{Re}\lambda_i$ beliebig klein. Da in unseren Fällen stets sowohl negative wie positive $\text{Re}\lambda_i$ auftreten, ist die Lösung von 5.4 für große d auf direktem Wege nicht mit ausreichender Genauigkeit möglich. Für kleine d hingegen und für nicht zu große N ($N < 30$) bereitet die Berechnung der Eigenwerte und Eigenvektoren von C sowie die

Lösung von 5.4 keine Schwierigkeiten, und 5.3 gibt die schnell zu berechnende Lösung von 5.1 und 5.2 an.

Da die Matrizen C in unseren Fällen jedoch stets Eigenwerte besitzen, von denen je zwei dem Betrage nach etwa gleich sind, aber entgegengesetztes Vorzeichen haben [29, 30], können wir 5.4 so umordnen, daß auch für größere d auf diesem Wege noch eine Lösung von 5.1 und 5.2 bestimmt werden kann.

Wir ordnen die λ_i und \vec{e}_i so an, daß gilt

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} \lambda_i < 0 & \quad i=1, 2, \dots, \frac{N}{2} \\ \operatorname{Re} \lambda_i > 0 & \quad i=\frac{N}{2}+1, \dots, N \end{aligned}$$

Weiter setzen wir

$$\begin{aligned} k_i^{\#} &= k_i \exp(\operatorname{Re} \lambda_i \cdot d) \\ e_{ji}^{\#} &= e_{ji} \exp(\sqrt{-1} \operatorname{Im} \lambda_i \cdot d) \end{aligned} \quad i, j=1, 2, \dots, N$$

Die Gleichungen 5.4 lösen wir dann iterativ nach dem Verfahren 5.5,

$$a) \sum_{i=1}^{\frac{N}{2}} k_i^{(v+1)} e_i^+ = r^+ - \sum_{i=\frac{N}{2}+1}^N k_i^{(v)} e_i^+$$

5.5

$$b) \sum_{i=\frac{N}{2}+1}^N k_i^{\#(v+1)} e_i^{\#-} = r^- - \sum_{i=1}^{\frac{N}{2}} k_i^{\#(v)} e_i^{\#-}$$

in dem v der Iterationsindex und die $k_i^{(0)}$, $i=\frac{N}{2}+1, \frac{N}{2}+2, \dots, N$, eine Ausgangsschätzung (i.a. = 0) sind.

Die Elemente der Koeffizientenmatrizen der Gleichungen 5.5a) und 5.5b) sind jetzt für alle Werte von d dem Betrage nach kleiner als die entsprechenden Elemente der Eigenvektoren, die Summen auf den rechten Seiten

von 5.5 sind dem Betrage nach noch klein, da die k_i^{**} für $i \leq \frac{N}{2}$ und die k_i für $i > \frac{N}{2}$ dem Betrage nach klein sind, so daß das Verfahren auch für große d nicht schlechter konditioniert wird.

5.5 entspricht etwa einem Block-Gauß-Seidel-Verfahren für 5.4 mit der Blocklänge $\frac{N}{2}$ und transformierten unteren Blöcken. Das Verfahren bricht ab, wenn die Bedingung 5.6 befriedigt ist.

$$5.6 \quad |k_i^{(v+1)} - k_i^{(v)}| < \varepsilon |k_i^{(v+1)}| \quad i=1,2,\dots,N$$

Bei allen gerechneten Beispielen war 5.6 bei Rechnung in doppelter Genauigkeit und mit einem $\varepsilon = 10^{-13}$ nach weniger als 20 Iterationen erfüllt. Diese Genauigkeitsabfrage ist so streng, daß auch für größere Dicken d noch genaue Ergebnisse zu erwarten sind, bedingt aber auch für die Eigenwert-Eigenvektorberechnung das Rechnen mit doppelter Genauigkeit.

Eine weitere Möglichkeit, 5.1 und 5.2 zu lösen, ergibt sich durch eine naheliegende Verallgemeinerung einer Methode von L.Loiz [20], [33], welche ebenfalls die Eigenart der in unseren Fällen vorkommenden Matrizen C ausnutzt, nämlich die Existenz von paarweise dem Betrage nach etwa gleichen aber mit verschiedenen Vorzeichen behafteten Eigenwerten.

Die Matrix C hat infolge dieser Eigenart eine Darstellung 5.7,

$$5.7 \quad C = UKU^{-1}$$

wobei in K in der Diagonalen die Realteile der Eigenwerte von C stehen, während in den Nebendiagonalen die eventuell vorhandenen Imaginärteile der Eigenwerte und Nullen stehen. Außerhalb der Diagonalen und der Nebendiagonalen enthält K nur Nullen. Ferner können U und K so angeordnet werden, daß für die Diagonalelemente k_{ii} von K 5.8 gilt.

$$5.8 \quad \begin{aligned} k_{ii} &\leq k_{i+1,i+1} & i=1,2,\dots,N-1 \\ k_{ii} &< 0; k_{i+\frac{N}{2},i+\frac{N}{2}} > 0 & i=1,2,\dots,\frac{N}{2} \end{aligned}$$

Da mit $\lambda = \alpha + i\beta$ auch $\bar{\lambda} = \alpha - i\beta$ Eigenwert von C ist, hat K für konjugiert-komplexe Eigenwerte λ_2 und λ_3

$$\begin{aligned}\lambda_2 &= \alpha_2 + i\beta_2 \\ \lambda_3 &= \alpha_2 - i\beta_2\end{aligned}$$

und für reelle Eigenwerte λ_1 und λ_4 z.B. folgende Gestalt:

$$K = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 & 0 & \cdot & \cdot \\ 0 & \alpha_2 & \beta_2 & 0 & \cdot & \cdot \\ 0 & -\beta_2 & \alpha_2 & 0 & \cdot & \cdot \\ \cdot & 0 & 0 & \lambda_4 & 0 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & 0 & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{bmatrix}$$

Die Matrizen U^{-1} und U enthalten die zu den Eigenwerten gehörenden linken bzw. rechten Eigenvektoren.

Gehen wir mit der Darstellung 5.7 ein in 5.1, erhalten wir nach Multiplikation mit U^{-1} von links 5.9

$$5.9 \quad \frac{d}{dx} \vec{\psi}(x) = K \vec{\psi}(x)$$

$$\text{mit } \vec{\psi}(x) = U^{-1} \vec{\phi}(x)$$

Bezeichnen wir mit K^+ und K^- den ersten bzw. zweiten Diagonalblock, die sich bei Aufspaltung von K in quadratische Blöcke der Kantlänge $\frac{N}{2}$ ergeben (nur diese beiden Diagonalblöcke haben von Null verschiedene Elemente), können wir die Lösung von 5.9 wie folgt angeben:

$$5.10a \quad \psi^+(x) = e^{K^+ x} \psi^+(0)$$

$$\psi^-(x) = e^{K^- x} \psi^-(0)$$

Daraus ergibt sich speziell 5.10b.

$$5.10b \quad \psi^+(d) = e^{K^+ d} \psi^+(0)$$

$$\psi^-(0) = e^{-K^- d} \psi^-(d)$$

Spalten wir weiter U^{-1} wie in 5.11 auf,

$$5.11 \quad U^{-1} = \begin{bmatrix} A & B \\ D & E \end{bmatrix}$$

A, B, D und E quadratische Matrizen der Kantenlänge $\frac{N}{2}$, gilt per Definition 5.12.

$$5.12 \quad \begin{aligned} \psi^+(0) &= A \varphi^+(0) + B \varphi^-(0) \\ \psi^-(0) &= D \varphi^+(0) + E \varphi^-(0) \\ \psi^+(d) &= A \varphi^+(d) + B \varphi^-(d) \\ \psi^-(d) &= D \varphi^+(d) + E \varphi^-(d) \end{aligned}$$

Aus 5.12 leiten wir die Beziehungen 5.13 ab.

$$5.13 \quad \begin{aligned} \psi^+(0) &= (A - BE^{-1}D) \varphi^+(0) + BE^{-1} \psi^-(0) \\ \psi^-(d) &= (E - DA^{-1}B) \varphi^-(d) + DA^{-1} \psi^+(d) \end{aligned}$$

Gehen wir mit diesen ein in 5.10b, finden wir 5.14 und 5.15.

$$5.14 \quad \psi^+(d) = \{I - e^{K^+d} (BE^{-1}e^{-K^-d}DA^{-1})\}^{-1} e^{K^+d} \{BE^{-1}e^{-K^-d} \cdot (E - DA^{-1}B)\varphi^-(d) + (A - BE^{-1}D)\varphi^+(0)\}$$

$$5.15 \quad \psi^-(0) = e^{-K^-d} \{DA^{-1}\psi^+(d) + (E - DA^{-1}B)\varphi^-(d)\}$$

$\varphi^+(0)$ und $\varphi^-(d)$ sind durch die Randbedingungen 5.2 vorgegeben. Somit bestimmen 5.14 und 5.15 $\psi^+(d)$ und $\psi^-(0)$, womit die Gleichungen 5.12 $\psi^+(0)$ und $\psi^-(d)$ liefern. Durch 5.10a sind dann $\psi^+(x)$ und $\psi^-(x)$ und damit $\varphi^+(x)$ und $\varphi^-(x)$ für alle x gegeben.

Der entscheidende Vorteil des obigen Verfahrens liegt darin, daß alle von der Dicke d abhängigen Matrizen die Gestalt e^{K^+d} oder e^{-K^-d} besitzen und daher wegen der speziellen Eigenschaften der Matrizen K^+ und K^- keine dem Betrage nach sehr großen Elemente besitzen. Die zu invertierende Matrix in der Gleichung 5.14 nähert sich für große d der Einheitsmatrix, so daß

auch diese Inversion keine Schwierigkeiten bereitet.

Im Teil 3 dieses Abschnitts gehen wir auf eine weitere Alternative, ein totalnumerisches Verfahren, zur Lösung von 5.1 und 5.2 ein.

V.2 Lösung des inhomogenen Problems mit homogenen Randbedingungen

Die im Teil 1 dieses Abschnitts angeführten Methoden lassen sich u.U. auch für den Fall

$$\begin{aligned}\vec{f}(x) &\neq 0 \\ \vec{r} &= 0\end{aligned}$$

verwenden. Unter den gleichen Voraussetzungen wie im Teil 1 hat in diesem Fall 5.1 die Lösung 5.16

$$5.16 \quad \vec{\varphi}(x) = \sum_{i=1}^N k_i \vec{e}_i \exp(\lambda_i x) + \vec{\varphi}_s(x)$$

Die λ_i und \vec{e}_i sind wieder Eigenwerte und zugehörige Eigenvektoren von C , $\vec{\varphi}_s(x)$ ist eine spezielle Lösung von 5.1. Die Konstanten k_i sind wiederum aus den Gleichungen 5.2 mit $r^+ = r^- = 0$ zu bestimmen. Kann man eine spezielle Lösung $\vec{\varphi}_s(x)$ von 5.1 angeben, lassen sich die k_i entweder direkt aus 5.2 oder mit Hilfe eines den Gleichungen 5.5 analogen Iterationsverfahren berechnen, und 5.16 gibt die gesuchte Lösung an. Für $N < 30$ (und nicht zu große d) ist dies der schnellste Lösungsweg.

Auch die Verallgemeinerung der Methode von L. Lois läßt sich verwenden, wenn eine spezielle Lösung $\vec{\varphi}_s(x)$ von 5.1 bekannt ist. Das Verfahren ist dem in Teil 1 beschriebenen ganz analog; der wesentliche Unterschied besteht darin, daß die Gleichung 5.9 auf der rechten Seite den zusätzlichen Term

$$\vec{\psi}_s(x) = U^{-1} \vec{\varphi}_s(x)$$

enthält, durch den die Lösungsformeln 5.10a übergehen in

$$\psi^+(x) = e^{K^+ x} \psi^+(0) + \int_0^x e^{K^+(x-t)} \psi_s^+(t) dt$$

$$\psi^-(x) = e^{K^- x} \psi^-(0) + \int_0^x e^{K^-(x-t)} \psi_s^-(t) dt$$

Die weitere Rechnung ist dann identisch dieselbe wie im Teil 1.

Kann man eine spezielle Lösung $\phi_s(x)$ von 5.1 nicht explizit angeben, bietet sich das im folgenden Teil 3 dieses Abschnitts beschriebene totalnumerische Verfahren zur Lösung von 5.1 und 5.2 an.

V.3 Totalnumerische Lösung des Differentialgleichungssystems durch Diskretisierung

Bei der Verwendung der nachstehend beschriebenen Methode zur Lösung von 5.1 und 5.2 braucht nicht zwischen dem homogenen und dem inhomogenen Problem unterschieden zu werden; weder $\vec{f}(x)$ noch \vec{r} werden daher als identisch mit dem Nullvektor vorausgesetzt.

Wir unterteilen das Intervall $[0, d]$ in Teilintervalle der Länge h_i , $i=1,2,\dots,NX$, wobei

$$\sum_{i=1}^{NX} h_i = d$$

gilt und definieren Stützstellen x_j durch

$$x_0 = 0, \quad x_j = \sum_{i=1}^j h_i \quad j=1,2,\dots,NX$$

und Stützstellen $x_{j+\frac{1}{2}}$ durch

$$x_{j+\frac{1}{2}} = \frac{x_{j+1} + x_j}{2} \quad j=0,1,2,\dots,NX-1$$

Die erste Ableitung der Vektorfunktion $\vec{\phi}(x)$ an der Stützstelle $x_{i+\frac{1}{2}}$ approximieren wir durch

$$\left. \frac{d}{dx} \vec{\phi}(x) \right|_{x=x_{i+\frac{1}{2}}} \approx \frac{\vec{\phi}(x_{i+1}) - \vec{\phi}(x_i)}{h_{i+1}} \quad i=0,1,\dots,NX-1$$

Den Funktionswert an der Stelle $x_{i+\frac{1}{2}}$ approximieren wir durch

$$\vec{\phi}(x_{i+\frac{1}{2}}) \approx \frac{\vec{\phi}(x_{i+1}) + \vec{\phi}(x_i)}{2}, \quad \vec{f}(x_{i+\frac{1}{2}}) \approx \frac{\vec{f}(x_{i+1}) + \vec{f}(x_i)}{2}$$

$$i=0,1,\dots,NX-1$$

Schreiben wir noch

$$\vec{\phi}_i = \vec{\phi}(x_i)$$

geht 5.1 damit über in 5.17.

$$5.17 \quad \frac{\vec{\phi}_{i+1} - \vec{\phi}_i}{h_{i+1}} = C \frac{\vec{\phi}_{i+1} + \vec{\phi}_i}{2} + \frac{\vec{f}_{i+1} + \vec{f}_i}{2}$$

Auflösung nach $\vec{\phi}_{i+1}$ gibt uns 5.18

$$5.18 \quad \vec{\phi}_{i+1} = M_{i+1} \vec{\phi}_i + N_{i+1} \frac{\vec{f}_{i+1} + \vec{f}_i}{2} \quad i=0,1,2,\dots,NX-1$$

mit

$$M_{i+1} = (I - \frac{1}{2} h_{i+1} C)^{-1} (I + \frac{1}{2} h_{i+1} C)$$

$$N_{i+1} = h_{i+1} (I - \frac{1}{2} h_{i+1} C)^{-1}$$

Kennt man $\vec{\phi}_0$, kann man aus 5.18 sukzessive alle Vektoren $\vec{\phi}_i$ berechnen. In unserem Randwertproblem sind jedoch φ_0^+ und φ_{NX}^- vorgegeben, und 5.18 stellt ein lineares Gleichungssystem von der in Bild 1 skizzierten Form dar. Die Matrizen M_i spalten wir dazu auf in quadratische Teilmatrizen,

$$M_i = \begin{bmatrix} M_i^1 & M_i^2 \\ M_i^3 & M_i^4 \end{bmatrix}$$

Die Matrizen M_i und N_i haben die Kantenlänge N , die Gesamtmatrix der Abb. 1 hat demzufolge die Kantenlänge $N \times NX$. Damit 5.17 eine gute Approximation für 5.1 darstellt, müssen alle h_i unter einer gewissen Schranke bleiben, welche i.a. sehr viel kleiner als d ist.

NX ist dann eine größere Zahl, und das Gleichungssystem 5.18 kann nicht mehr direkt gelöst werden. Wir verwenden daher ein Iterationsverfahren zur Lösung von 5.18, welches auf einer speziellen Umordnung der Gleichungen beruht. In [34] wird für den Spezialfall der P_N -Methode gezeigt, daß dieses, unten beschriebene, Verfahren konvergiert und bzgl. Rundungsfehlern stabil ist. Diese Ergebnisse lassen sich auf den allgemeinen Fall nicht ohne weiteres übertragen, und wir haben daher bei einer Reihe von Beispielen zusätzlich den Spektralradius der Iterationsmatrix bestimmt, um Gewißheit über die Konvergenz zu haben. In allen Fällen lag der Spektralradius unter eins, das Verfahren war daher konvergent.

Um die Gleichungen 5.18 für das Iterationsverfahren umformen zu können, führen wir die Matrizen P_i

$$P_i = \begin{bmatrix} P_i^1 & P_i^2 \\ P_i^3 & P_i^4 \end{bmatrix} = M_i^{-1}$$

ein, welche wir ebenfalls in je vier quadratische Teilmatrizen aufspalten, und setzen

$$\begin{aligned} u_i &= \psi_i^+ \\ v_i &= \psi_i^- \\ w_i &= (N_{i+1} \frac{\vec{f}_{i+1} + \vec{f}_i}{2})^+ \\ z_i &= (N_{i+1} \frac{\vec{f}_{i+1} + \vec{f}_i}{2})^- \end{aligned}$$

Statt 5.18 lösen wir nun 5.19

$$5.19 \quad u_{i+1}^{(v+1)} = M_{i+1}^1 u_i^{(v+1)} + M_{i+1}^2 v_i^{(v)} + w_i \quad i=0,1,\dots,NX-1$$

$$v_{i-1}^{(v+1)} = P_i^3 u_i^{(v+1)} + P_i^4 v_i^{(v+1)} - P_{i-1}^3 w_{i-1} - P_{i-1}^4 z_{i-1} \quad i=NX, NX-1, \dots, 1$$

mit

$$\begin{aligned} v_i^{(0)} &= 0 & i=0,1,\dots,NX-1 & \quad (\text{Ausgangsschätzung}) \\ u_0^{(v)} &= r^+ \\ v_{NX}^{(v)} &= r^- & \text{für alle } v & \quad (\text{Randbedingungen}) \end{aligned}$$

v ist der Iterationsindex. Dem Iterationszyklus der Gleichungen 5.19 liegt die in Bild 2 skizzierte Anordnung der Gleichungen 5.18 zugrunde.

Anschaulich bedeutet diese Iterationsanordnung, daß man stets "in Neutronenflugrichtung" rechnet, d.h. die Vektoren φ_i^+ , welche die in positive μ -Richtung fliegenden Neutronen beschreiben, werden von x_1 anfangend bis x_{NX} berechnet, die Vektoren φ_i^- , welche die in negative μ -Richtung fliegenden Neutronen beschreiben, werden bei x_{NX-1} anfangend bis x_0 berechnet. Dadurch wird eine gewisse Stabilität gegen Rundungsfehler gewährleistet, da das globale Verhalten der Vektoren φ_i^+ und φ_i^- in "Rechenrichtung" abfallend ist [34]7.

Formal stellen die Gleichungen 5.19 ein Block-Gauß-Seidel-Verfahren zur Lösung von 5.18 dar, welches als blocktridiagonal angesehen werden kann. Das wirft u.U. die Frage nach einer möglichen Beschleunigung des Verfahrens mit Hilfe von Über- oder Unterrelaxationsparametern auf. Im Rahmen dieser Arbeit wurde diese Frage nicht näher untersucht, sondern lediglich "experimentell" festgestellt, daß bei den gerechneten Beispielen eine Überrelaxation mit einem Beschleunigungsparameter ω mit

$$1.2 \leq \omega \leq 1.3$$

das beste Konvergenzverhalten bedingte.

V.4 Lösung des Multigruppenproblems

Im ersten Teil des vierten Abschnitts ergab sich das Problem, das Gleichungssystem

$$5.20 \quad \frac{d}{dx} \vec{\varphi}^g(x) - A^g \vec{\varphi}^g(x) = B \left(\sum_{k < g} \sigma_{str}^{k \rightarrow g} \vec{\varphi}^k(x) + \sum_k \sigma_{sp}^{k \rightarrow g} \vec{\varphi}^k(x) \right)$$

$$g=1, 2, \dots, NG$$

mit den Randbedingungen

$$\begin{aligned} \varphi_1^g(0) &= p^g \\ \varphi_i^g(0) &= 0 \quad i=2, 3, \dots, \frac{N}{2} \quad g=1, 2, \dots, NG \\ \varphi_i^g(d) &= 0 \quad i=\frac{N}{2}+1, \frac{N}{2}+2, \dots, N \end{aligned}$$

zu lösen. Das schon in Abschnitt IV.1 skizzierte Quelliterationsverfahren zur Lösung von 5.20 geht von einer Ausgangsschätzung $\vec{\varphi}^{g(0)}(x)$ aus und löst 5.20 mit $g=1$ anfangend entsprechend den folgenden Gleichung 5.21, in denen ν der Iterationsindex ist.

$$5.21 \quad \frac{d}{dx} \vec{\varphi}^{g(\nu+1)}(x) - A^g \vec{\varphi}^{g(\nu+1)}(x) = B \left(\sum_{k < g} \sigma_{str}^{k \rightarrow g} \vec{\varphi}^k(\nu+1)(x) + \right.$$

$$\left. + \sum_k \sigma_{sp}^{k \rightarrow g} \vec{\varphi}^k(\nu)(x) \right)$$

$$g=1, 2, \dots, NG$$

Für jeden Index g ist die rechte Seite von 5.21 gegeben durch die Ausgangsschätzung bzw. durch das Ergebnis der ν -ten Iteration und durch die bereits berechneten Lösungen der $(\nu+1)$ -ten Iteration. Jede einzelne Gleichung des Systems 5.21 hat daher die Form der Gleichung 5.1 und kann mit den gleichen Methoden wie 5.1 gelöst werden, insbesondere mit der im dritten Teil dieses Abschnitts skizzierten Methode der Diskretisierung. Approximieren wir Ab-

leitungen und Funktionswerte an den Stützstellen $x_{i+\frac{1}{2}}$ wie im dritten Teil dieses Abschnitts und verwenden wir die gleiche Schreibweise, geht das Differentialgleichungssystem 5.21 über in das lineare Gleichungssystem 5.22.

$$\begin{aligned}
 & \frac{\vec{\varphi}_{i+1}^g(v+1) - \vec{\varphi}_i^g(v+1)}{h_{i+1}} - A^g \frac{\vec{\varphi}_{i+1}^g(v+1) + \vec{\varphi}_i^g(v+1)}{2} = \\
 5.22 & \\
 & = B \left(\sum_{k < g} \sigma_{str}^{k \rightarrow g} \frac{\vec{\varphi}_{i+1}^k(v+1) + \vec{\varphi}_i^k(v+1)}{2} + \sum_k \sigma_{sp}^{k \rightarrow g} \frac{\vec{\varphi}_{i+1}^k(v) + \vec{\varphi}_i^k(v)}{2} \right) \\
 & \qquad \qquad \qquad g=1,2,\dots,NG \qquad i=0,1,\dots,NX-1
 \end{aligned}$$

mit

$$\begin{aligned}
 \varphi_{1,0}^g &= p^g \\
 \varphi_{i,0}^g &= 0 \qquad i=2,3,\dots,\frac{N}{2} \qquad g=1,2,\dots,NG \\
 \varphi_{i,NX}^g &= 0 \qquad i=\frac{N}{2}+1,\frac{N}{2}+2,\dots,N
 \end{aligned}$$

Ordnen wir die Gleichungen 5.22 so um, wie es die Quelliteration (äußere Iteration) und das in Teil 3 beschriebene Iterationsverfahren zur Lösung der einzelnen Gruppengleichungen (innere Iteration) erfordern, nimmt das Gleichungssystem 5.22 die in Abbildung 3 dargestellte Form an.

Mit I gekennzeichnete Kästchen stellen die Einheitsmatrix dar, alle anderen Kästchen sind i.a. vollbesetzte Matrizen der Kantenlänge $\frac{N}{2}$. Außerhalb der Kästchen stehen Nullen. Der Vektor der rechten Seite der Abb. 3 enthält außer den Randwerten nur Nullen.

Bei der numerischen Lösung von 5.22 in der in der Abb. 3 dargestellten Art ist zu beachten, daß unter der Hauptdiagonalen der Abb. 3 i.a. viele Blöcke verschwinden (Herunterstreuung nur über wenige Gruppen) und daß der Querschnitt $\sigma_{sp}^{k \rightarrow g}$ die Form

$$\sigma_{sp}^{k \rightarrow g} = \chi^g (v \sigma_f)^k$$

hat. Ersteres bedeutet, daß bei Bildung des ersten Terms der rechten Seite von 5.22 nicht über alle Indizes summiert werden muß, während letzteres bedeutet, daß die Summation im zweiten Term der rechten Seite von 5.22 nur einmal für alle Gruppen durchzuführen ist. Da überdies χ^g von einer bestimmten Gruppe an verschwindet, verschwinden von dieser Gruppe an alle Blöcke über der Hauptdiagonalen der Abb. 3. Ferner ist die Matrix B aus 5.22 gruppenunabhängig, so daß erst alle Vektoren der rechten Seite aufsummiert werden können und dann mit B multipliziert werden. Das geht aus der Abb. 3 nicht hervor.

I Ergebnisse der modalen Entwicklung der Boltzmann-Gleichung für Modellprobleme

Die in den Abschnitten III und IV dargestellten Verfahren zur näherungsweise Lösung der Boltzmann-Gleichung werden in diesem Abschnitt auf einige Modellprobleme angewendet. Die Ergebnisse der verschiedenen Verfahren werden einander gegenübergestellt und mit Ergebnissen von SN-Rechnungen [31] verglichen. Ziel dieser Vergleiche ist es, Aussagen über die Genauigkeit der verschiedenen Verfahren und über eine "vernünftige" Auswahl der Entwicklungs- und Wichtungsfunktionen zu gewinnen.

Um eventuelle numerische Schwierigkeiten bei der Lösung der reduzierten Gleichungen aufzudecken, wurden diese teils mit verschiedenen numerischen Methoden (Abschnitt V) gelöst. Numerische Instabilitäten sollten sich darin äußern, daß verschiedene numerische Methoden voneinander abweichende Resultate ergeben. Die Anwendung verschiedener numerischer Methoden erlaubt weiter vergleichende Aussagen über deren Schnelligkeit und damit eventuell Aussagen darüber, welches die jeweils "beste" Methode ist.

VI.1 Monoenergetische Probleme

Entwicklungen nach Funktionen des Winkels

Als erstes Problem berechnen wir die Neutronenverteilung in einer homogenen, 10 cm dicken Platte, auf die von einer Seite mit vorgegebener Winkelverteilung

$$\begin{aligned} \phi(0, \mu) &= \text{const} & \mu > 0 \\ \phi(0, \mu) &= 0 & \mu \leq 0 \end{aligned}$$

ein Neutronenstrom trifft (Abb. 4). (Unter Platte wird im folgenden stets eine in zwei Koordinatenrichtungen unendlich ausgedehnte ebene Schicht verstanden.) Die Wirkungsquerschnitte der Platte sind in Tabelle 1 als die der Zone 1 angeführt.

Zone	1	2	3	4
σ_t	0.9	0.5	0.7	0.6
σ_{str}	0.2	0.2	0.4	0.0
$v\sigma_f$	0.1	0.1	0.2	0.0
σ_c	0.6	0.2	0.1	0.6

Tab.1: Eingruppen-Wirkungsquerschnitte [cm^{-1}]

Auswahl der Entwicklungsfunktionen aufgrund der Wirkungsquerschnitte

Die Abbildungen 5 und 6 zeigen die Ergebnisse einer S16-Rechnung, einer DP2- und einer DP5-Rechnung (s. Abschnitt III.1) sowie Ergebnisse verschiedener Approximationen nach Abschnitt III.1.

Die Ergebnisse der DP5-Rechnung stimmen gut mit denen der S16-Rechnung überein, während die der DP2-Rechnung sehr große Fehler aufweisen. Die Ergebnisse der Approximationen nach Abschnitt III.1 (wie die der S16-Rechnung punktweise eingetragen) beruhen auf Rechnungen mit zwei, in beiden Winkelhalbintervallen gleichen Entwicklungsfunktionen (s. Abschnitt III) und einer Wichtung mit den Entwicklungsfunktionen selbst. Der Approximationsgrad entspricht somit dem einer DP2-Rechnung, welche - wie schon in Abschnitt III erwähnt - lediglich ein Spezialfall der allgemeineren Entwicklung ist. Doch während die DPN-Rechnungen keinerlei Informationen über das zu behandelnde Problem berücksichtigen können, ist bei den allgemeineren Entwicklungen solche Information verwertet worden: Da auf die Platte nur einseitig Neutronen treffen und da das Material der Platte nur schwach multiplizierend ist, wird die Winkelverteilung eine starke Vorwärtskomponente besitzen. Die jeweils zweite Entwicklungsfunktion der Approximationen vom Grade 2 enthielt daher ebenfalls eine stärkere Vorwärtskomponente, während die jeweils erste Entwicklungsfunktion - wie in den DPN-Approximationen - eine Konstante war. Da die Winkelverteilung der Streu-

und Spaltneutronen gemäß unseren Voraussetzungen isotrop ist, ist auch diese Entwicklungsfunktion durch einfache physikalische Überlegungen nahegelegt.

Die Entwicklungsfunktionen waren gegeben durch 6.1.

$$6.1 \quad \psi(\mu) = \frac{\mu ab^2 + b(1 + \mu^2(a^2 + b^2 - 1) - a^2)^{\frac{1}{2}}}{1 + \mu^2(b^2 - 1)} \quad \mu \in]-p, q[$$

$$\psi(\mu) = 0 \quad \mu \in]-q, p[$$

Dabei gilt einmal $p=0, q=1$ und einmal $p=0, q=-1$. 6.1 stellt in Polarkoordinaten abgeschnittene Kreise oder Ellipsen dar, deren Mittelpunkt um die Strecke a gegen den Nullpunkt verschoben ist, deren eine Halbachse gleich eins und deren andere Halbachse gleich b ist. Die erste Entwicklungsfunktion entsprach in diesem Bild jeweils einem Halbkreis um den Nullpunkt, d.h. den Parametern $a_1=0, b_1=1$ oder $\psi_1(\mu)=1$ sowohl in $]-1, 0[$ als auch in $]-0, 1[$. Die Parameter a_2 und b_2 der jeweils zweiten Entwicklungsfunktion haben wir bei diesen Rechnungen ebenfalls in beiden Halbintervallen als gleich angenommen, doch stellt dies keine notwendige Bedingung dar. Ebenso gut hätten wir in beiden Halbintervallen verschiedene Entwicklungsfunktionen verwenden können. (Dies wird auch in späteren Beispielen getan). Die Parameter a_2 und b_2 sind in den Abbildungen 5 und 6 angegeben; sie variieren über einen größeren Bereich, entsprechen aber alle abgeflachten und in Vorwärtsrichtung verschobenen Ellipsen.

Approximationen mit Entwicklungsfunktionen der Form 6.1 werden im folgenden und in manchen Abbildungen mit $EN(a_1, b_1, a_2, b_2, \dots, a_N, b_N)$ bzw. mit $EN(a_1^+, b_1^+, a_1^-, b_1^-, \dots, a_N^+, b_N^+, a_N^-, b_N^-)$ bezeichnet. N ist der Approximationsgrad, die $2N$ bzw. $4N$ Argumente sind die in 6.1 verwendeten Parameter: $2N$ Parameter, falls diese in beiden Winkelhalbintervallen als gleich angenommen werden, $4N$ Parameter, falls in beiden Halbintervallen verschiedene benutzt werden.

Diese Möglichkeit, von Fall zu Fall auch in beiden Winkelhalbintervallen verschiedene Entwicklungsfunktionen zu verwenden, bedeutet eine sehr große

Flexibilität, welche in diesem Beispiel noch nicht ausgenutzt wurde. Trotzdem liegen alle Ergebnisse der verwendeten E2-Approximationen weitaus besser als die der vergleichbaren DP2-Rechnung, weil in der zweiten Entwicklungsfunktion die dem gegebenen Problem angepaßte pauschale Erwartung einer stärkeren Vorwärtskomponente in der Winkelverteilung berücksichtigt werden konnte.

Auswahl der Entwicklungsfunktionen aus Lösungen ähnlicher Probleme

Häufig verfügt der Benutzer über detaillierte Kenntnisse aus ähnlichen Problemen, welche es i.a. gestatten, die Entwicklungsfunktionen dem vorliegenden Problem besser anzupassen als es durch einfache physikalische Überlegungen möglich ist. Wie sehr die Berücksichtigung einer besseren Information auch die Ergebnisse weiter verbessert, zeigen die Abbildungen 7 - 10. Die Abbildungen 5 und 6 lassen vermuten, daß in diesem und in ähnlichen Problemen die Winkelverteilung besser durch Funktionen der Form 6.2

$$\begin{array}{ll} \psi(\mu) = \frac{a}{b-c\mu} & \mu \in]-p, q[\\ \psi(\mu) = 0 & \mu \in]-q, p[\end{array}$$

beschrieben werden kann (p,q wie oben). Die Verwendung von 6.2 statt 6.1 als zweite Entwicklungsfunktion mit gleichen Parametern a, b und c in beiden Winkelhalbintervallen (die erste Entwicklungsfunktion weiterhin in beiden Halbinservallen gleich einer Konstanten) liefert für das oben skizzierte Problem (10 cm-Platte) die in Abb. 7 und Abb. 8 dargestellten Resultate. Die verwendeten zweiten Entwicklungsfunktionen der Form 6.2 sind in den Abbildungen angegeben, die Ergebnisse liegen noch besser als die mit Funktionen der Form 6.1 gewonnenen der Abbildungen 5 und 6.

Übertragen wir die hier gewonnene Information auf ein ähnliches Problem (50 cm-Platte mit Querschnitten der Zone 1), indem wir für dieses Problem die gleichen Entwicklungsfunktionen verwenden, erhalten wir wiederum sehr gute Ergebnisse. Abb. 9a und 9b zeigen die Winkelverteilung in der 50 cm-Platte, und Abb. 10 zeigt den Fehler des integralen Flusses bezogen auf

eine S16-Rechnung. Zum Vergleich sind wiederum Ergebnisse einer DP2- und einer DP5-Rechnung sowie hier auch die einer S4-Rechnung eingetragen. Während die DP2-Rechnung bei diesem Problem völlig versagt und die S4-Rechnung sehr schlechte Ergebnisse liefert, sind die Approximationen mit Entwicklungsfunktionen der Form 6.2, deren Parameter aus einem ähnlichen Problem übernommen wurden, trotz ihres niedrigen Approximationsgrades in der Lage, weitgehend richtige Resultate zu liefern.

Approximationen mit Entwicklungsfunktionen der Form 6.2 werden im folgenden und in manchen Abbildungen auch mit $HN(a_1, b_1, c_1, \dots, a_N, b_N, c_N)$ bzw. mit $HN(a_1^+, b_1^+, c_1^+, a_1^-, b_1^-, c_1^-, \dots, a_N^+, b_N^+, c_N^+, a_N^-, b_N^-, c_N^-)$ bezeichnet. N gibt den Approximationsgrad an, die $3N$ bzw. $6N$ Argumente entsprechen den Parametern aus 6.2: $3N$ Parameter, falls diese in beiden Halbintervallen gleich sind, $6N$ Parameter, falls sie in beiden Halbintervallen verschieden sind.

Einfluß der Wichtungsfunktionen

An diesem Beispiel soll auch noch der Einfluß der Wichtung demonstriert werden. Die Ergebnisse der Abb. 5 - 10 basieren sämtlich auf Rechnungen mit einer Wichtung durch die Entwicklungsfunktionen selbst. Da wir als eine der Entwicklungsfunktionen eine Konstante gewählt hatten, war somit auch eine der Wichtungsfunktionen eine Konstante. Durch diese konstante Wichtungsfunktion wird garantiert, daß die gefundene Näherungslösung die integrale Neutronenbilanzforderung (s. Abschnitt II) erfüllt. Der integrale Neutronenfluß selbst ist natürlich noch mit Fehlern behaftet, wie die Abb. 10 zeigt und wie es bei einer Approximation vom Grad 2 auch nicht anders erwartet werden kann. Für die Fehler des integralen Neutronenflusses ist im wesentlichen der Fehler des winkelabhängigen Flusses im Intervall $\underline{0.4, 1.0}$ entscheidend, während recht große relative Fehler im Intervall $\underline{-1., 0.}$ wenig Einfluß auf den integralen Fluß haben. Wählt man daher als zweite Wichtungsfunktion eine Funktion, welche das Intervall $\underline{0.4, 1.0}$ stärker betont als bisher die zweite Entwicklungsfunktion, wird u.U. der Fehler des integralen Flusses kleiner. Abb. 11 zeigt die mit einer im Intervall $\underline{0.4, 1.0}$ stärkeren Wichtung aber gleichen Entwicklungsfunktionen wie zuvor berechneten Flußverhältnisse. Man erkennt eine allerdings nur

unbedeutende Verbesserung der Resultate. Da auch die zweite Entwicklungsfunktion das Intervall $\underline{0.4, 1.0}$ schon relativ stark betonte, bringt eine noch stärkere Wichtung in diesem Intervall keine entscheidende Verbesserung mehr.

Behandlung eines Zwei-Zonen-Problems und Auswahl der entsprechenden Entwicklungsfunktionen

Als zweites Problem berechnen wir die Neutronenverteilung in einer Platte, welche aus zwei verschiedenen Zonen gleicher Dicke (je 10 cm) besteht, und auf die wiederum von einer Seite ein Neutronenstrom mit isotroper Winkelverteilung trifft ($\phi(0, \mu) = \text{const}$, $\mu > 0$). Die erste Schicht, auf die der Neutronenstrom unmittelbar auftrifft, hat die Wirkungsquerschnitte der Zone 3 aus Tabelle 1, während die zweite Schicht einen reinen Absorber ($\sigma_t = \sigma_c$) mit den Wirkungsquerschnitten der Zone 4 aus Tabelle 1 darstellt. Abb. 12a zeigt die mit verschiedenen Approximationen berechnete Winkelverteilung der Neutronen 2 cm vor der Absorberschicht, Abb. 12b zeigt die Winkelverteilung 2 cm tief in der Absorberschicht. Während die E2-Approximation in beiden Zonen schon weit bessere Resultate als die DP2-Rechnung liefert, erreicht die E3-Approximation über weite Bereiche beider Zonen die Genauigkeit der DP5-Approximation, übertrifft diese sogar teilweise. Die Auswahl der Entwicklungsfunktionen geschah wiederum aufgrund einfacher physikalischer Überlegungen. Die Winkelverteilung der Streu- und Spaltneutronen, welche in der ersten Zone einen überwiegenden Einfluß auf die Gesamtverteilung haben, ist isotrop. Daher wird auch die Gesamtverteilung einen starken isotropen Anteil besitzen, und wir wählten als erste Entwicklungsfunktion eine Konstante in beiden Halbintervallen. Wegen der einseitig auftreffenden Neutronen wird jedoch schon in der ersten Zone die Vorwärtsrichtung etwas überwiegen, während im reinen Absorbermaterial der zweiten Zone die Neutronen überhaupt nur noch Flugrichtungen aus dem Intervall $\underline{0, 1}$ haben können. In diesem Intervall wählten wir infolgedessen als zweite Entwicklungsfunktion eine solche, welche die Vorwärtsrichtung bevorzugt. Im Intervall $\underline{-1, 0}$, in dem nur Streu- und Spaltneutronen vorhanden sind, wird die Verteilung im wesentlichen isotrop sein, mit schwachem Überwiegen der Richtung parallel zur Plattenoberfläche. So nahmen

wir als zweite Entwicklungsfunktion eine diese Parallelrichtung betonende Funktion.

In der Absorberzone kann die Verteilung der Neutronen exakt angegeben werden; sie hat die Form 6.3.

$$\begin{aligned} 6.3 \quad \phi(x, \mu) &= \phi(10, \mu) \exp(-\sigma_t \frac{x-10}{\mu}) & 0 < \mu \leq 1 & \quad x > 10 \\ \phi(x, \mu) &= 0 & -1 \leq \mu \leq 0 & \end{aligned}$$

Man sieht, daß in der Absorberzone die Winkelverteilung mit zunehmender Eindringtiefe eine rasch stärker werdende Vorwärtskomponente bekommt. Diese kann man natürlich mit nur zwei Entwicklungsfunktionen, von denen eine konstant ist, nicht sehr gut darstellen. Abb. 12c zeigt den relativen Fehler der Vorwärtskomponente, bezogen auf eine S16-Rechnung. Man erkennt, daß tatsächlich mit zunehmender Eindringtiefe in die Absorberzone die E2-Approximation stetig schlechtere Ergebnisse liefert, und daß die DP2-Approximation schon vor der Absorberzone schlecht und in der Absorberzone noch weitaus schlechter als die E2-Approximation liegt. Die E3-Approximation, welche außer der konstanten weitere zwei, die Vorwärtsrichtung betonende, Entwicklungsfunktionen zur Verfügung hat, vermag die sich rasch ändernde Verteilung im Absorber schon recht genau zu beschreiben.

Numerik und Rechenzeiten

Numerische Schwierigkeiten ergaben sich bei keiner der oben beschriebenen Approximationen. Alle in Abschnitt V aufgeführten Lösungsverfahren für die reduzierten Gleichungssysteme lieferten übereinstimmende Ergebnisse. Die Rechenzeiten der E2-, E3- und H2-Approximationen waren weitaus kürzer als die der S16-Rechnung und vergleichbar mit denen der S4-Rechnung, obwohl die Programmierung der in dieser Arbeit beschriebenen Verfahren keineswegs optimiert wurde. Die drei auf der Eigenwertberechnung beruhenden Verfahren zur Lösung der entstehenden Differentialgleichungssysteme waren für die 10cm-Platte langsamer, für die 50-cm-Platte jedoch schneller als das auf der Diskretisierung der Gleichungen beruhende Iterationsverfahren. Allerdings hängt die

Rechenzeit dieses Iterationsverfahrens wie auch die des Iterationsverfahrens 5.5 und die der SN-Rechnungen von der vorgegebenen Genauigkeitsabfrage ab, welche in den drei genannten Verfahren jeweils einen verschiedenen Einfluß hat. Die obigen Rechenzeitvergleiche sind daher mit einer gewissen Willkür behaftet. Es wurden die Rechenzeiten zugrunde gelegt, die etwa aus der Forderung resultierten, daß sowohl eine weitere Verkleinerung der Schrittweite als auch eine schärfere Genauigkeitsabfrage bei der Iteration die Ergebnisse der einzelnen Approximationen lediglich noch in der vierten Dezimalstelle änderten.

Entwicklungen nach Funktionen des Ortes

Abb. 13 und 14 zeigen Ergebnisse von Approximationen nach Abschnitt III für ein drittes Beispiel, eine homogene 10 cm dicke Platte mit den Querschnitten der Zone 2 (s. Tab. 1), auf die wiederum von einer Seite Neutronen mit isotroper Winkelverteilung treffen. Die Ergebnisse beruhen auf Approximationen mit zwei bzw. drei Entwicklungsfunktionen und auf einer Wichtung mit den Entwicklungsfunktionen.

In Abb. 13 sind Ergebnisse von Entwicklungen nach Funktionen des Winkels (E2-Approximationen, s.o.) und von Entwicklungen nach Funktionen des Ortes eingetragen. Die Funktionen des Ortes waren recht willkürlich gegeben durch 6.4.

$$6.4 \quad \varphi(x) = e^{\alpha x} - e^{\beta d} \quad 0 \leq x \leq d$$

Der zweite Summand in 6.4 gestattet durch geeignete Wahl von β ($\beta = \alpha$ bzw. $\beta = 0$), die Randbedingungen zu erfüllen.

Approximationen mit Entwicklungsfunktionen der Form 6.4 bezeichnen wir im folgenden und in manchen Abbildungen auch mit $ZN(\alpha_1, \dots, \alpha_N)$ bzw. $ZN(\alpha_1^+, \alpha_1^-, \dots, \alpha_N^+, \alpha_N^-)$. N bedeutet wiederum den Approximationsgrad; die Anzahl der Argumente beträgt N , wenn in beiden Winkelhalbintervallen die gleichen Parameter benutzt werden, bzw. $2N$, wenn in beiden Halbintervallen verschiedene Parameter benutzt werden.

Die Ergebnisse von Approximationen mit verschiedenen Entwicklungsfunktionen streuen natürlich wieder etwas und sind daher punktweise (E2- und Z2-Approximationen) und durch senkrechte Balken (Z3-Approximation) gekennzeichnet: Alle Ergebnisse der in den Abbildungen angeführten Z3-Approximationen liegen innerhalb dieser Balken.

Exakte Behandlung der ungestreuten Neutronen

Da in dem schwach multiplizierenden und wenig streuenden Material dieses Beispiels in Vorwärtsrichtung die ungestreuten Neutronen den Hauptteil des Neutronenflusses ausmachen, sollte eine exakte Behandlung der ungestreuten Neutronen (s. Abschnitt III) die Ergebnisse weiter verbessern. Abb. 14 zeigt die Resultate, die sich ergeben, wenn die ungestreuten Neutronen exakt behandelt werden und nur die Verteilung der gestreuten Neutronen mit den in Abb. 13 gekennzeichneten Entwicklungsfunktionen approximiert wird. Wie zu erwarten war, wird der Fehler erheblich kleiner obwohl wir für die Approximation der Gesamtverteilung und für die Approximation der Verteilung der gestreuten Neutronen die gleichen Entwicklungs- und Wichtungsfunktionen gewählt haben.

Einfluß der Wichtungsfunktionen und Berücksichtigung von Ergebnissen ähnlicher Probleme

In den den Abb. 13 und 14 zugrunde liegenden Rechnungen war jeweils eine Wichtung mit den Entwicklungsfunktionen vorgenommen worden. Da unter den verwendeten Entwicklungsfunktionen und somit unter den Wichtungsfunktionen keine Konstante war, ist durch diese Wichtung nicht gewährleistet, daß die integrale Neutronenbilanzforderung erfüllt ist (s. Abschnitt II). Rechnungen mit anderen Wichtungsfunktionen (z.B. $w_j(x) = x^{j-1}$) aber unveränderten Entwicklungsfunktionen brachten lediglich geringfügige Änderungen im Ergebnis, so daß eine weitere Verbesserung durch andere Wichtung hier nicht zu erwarten ist. Ebenso scheint eine Verbesserung der Ergebnisse durch Berücksichtigung besserer Information nicht mehr möglich; die Auswahl der Exponenten in 6.4 spielt, wie die Ergebnisse der Abb. 13 und 14 zeigen,

über einen größeren, sinnvollen Bereich keine wesentliche Rolle. Die Auswahl wird durch die Wirkungsquerschnitte nahegelegt, in unserem Fall z.B. durch $\alpha_1 \approx -\sigma_t$, $\alpha_2 \approx -\frac{1}{2}\sigma_t$, $\alpha_3 \approx 0.1\sigma_t$, wozu bei Approximationen höherer Ordnung dazwischenliegende Werte zugefügt werden können.

Numerik und Rechenzeiten

Numerische Schwierigkeiten ergaben sich weder bei den E2-Approximationen noch bei den Z2- und Z3-Approximationen. Bei der Lösung der aus den ZN-Approximationen resultierenden linearen Gleichungssysteme wurden Eliminationsverfahren benutzt. Alle Ergebnisse liegen besser als die einer entsprechenden DP2-Rechnung. Dabei ist zu berücksichtigen, daß Z3-Approximationen einen deutlich geringeren numerischen Aufwand erfordern als DP2- oder E2-Approximationen, weil - wie in Abschnitt III ausgeführt - bei Entwicklungen nach Funktionen des Ortes lediglich ein lineares Gleichungssystem, bei Entwicklungen nach Funktionen des Winkels hingegen ein lineares Differentialgleichungssystem zu lösen ist.

VI.2 Multigruppen-Probleme

Nachdem wir im ersten Teil dieses Abschnitts die Lösung der monoenergetischen Boltzmann-Gleichung untersucht haben, wenden wir uns jetzt der Lösung der energieabhängigen Boltzmann-Gleichung zu, und zwar im 26-Gruppen-Bild [1], [10], [36]. Allen Rechnungen dieses Abschnitts liegen Gruppenkonstanten für natriumgekühlte schnelle Reaktoren aus [35] zugrunde.

Zuerst berechnen wir mit den Methoden des Abschnitts IV die Neutronenverteilung in einer homogenen, 10 cm dicken Natururanplatte, auf welche von einer Seite Neutronen treffen, deren Winkelverteilung isotrop ist und deren Energieverteilung der des Spaltspektrums entspricht. Die Abb. 15 - 18 zeigen die mit den verschiedenen Approximationen berechneten Winkelverteilungen in der 1. und in der 10. Gruppe, jeweils am Plattenanfang und am Plattenende; die Tabelle 2 zeigt an drei Ortspunkten die prozentualen Fehler der Spalt-rate bezogen auf eine S16-Rechnung. Die verschiedenen Approximationen nach Abschnitt IV sind dabei wie folgt gekennzeichnet:

- GEN(...) : Multigruppen-EN-Approximation
(vergl. Abschnitt IV.1 und VI.1)
- GZN(...) : Multigruppen-ZN-Approximation
(vergl. Abschnitt IV.3 und VI.1)
- TMEN(...) : Approximation mit M Entwicklungsspektren
und N Entwicklungsfunktionen der Form 6.1
(vergl. Abschnitt IV.2)
- TMZN(...) : Approximation mit M Entwicklungsspektren
und N Entwicklungsfunktionen der Form 6.4
(vergl. Abschnitt IV.4)

Entwicklungen nach Funktionen des Winkels bzw. des Ortes

Abb. 15 und 16 zeigen die Ergebnisse verschiedener Multigruppen-Approximationen (GEN, GZN) nach Abschnitt IV.1 und IV.3 sowie zum Vergleich die Ergebnisse einer S4- und einer S16-Rechnung. In allen Approximationen nach Abschnitt IV.1 und IV.3 waren die Wichtungsfunktionen gleich den Entwicklungsfunktionen und diese i.a. in beiden Winkelhalbintervallen gleich.

Auswahl der Entwicklungsfunktionen

Die Auswahl der drei bzw. zwei winkelabhängigen Entwicklungsfunktionen wurde etwa nach folgenden Gesichtspunkten vorgenommen: Eine Konstante, da alle Streu- und Spaltneutronen eine isotrope Richtungsverteilung besitzen; eine Funktion, welche die Vorwärtsrichtung betont, da in den oberen Gruppen wegen der einseitig auftreffenden Neutronen sicher eine gewisse Vorwärtskomponente überwiegt; eine Funktion, welche die Rückwärtsrichtung oder auch die Parallelrichtung bevorzugt, da in den mittleren und unteren Gruppen, in denen keine Neutronen von außen auftreffen, die Winkelverteilung nahe den Rändern auch eine stärkere Rückwärtskomponente oder Parallelkomponente haben wird. Die Auswahl der vier ortsabhängigen Entwicklungsfunktionen stellte in Rechnung, daß der Neutronenfluß in den oberen Gruppen in Vorwärtsrichtung etwas schwächer als mit $\exp(-\sigma_t x)$, in Schrägrichtungen aber auch stärker als mit $\exp(-\sigma_t x)$ abfallen wird, in Rückwärtsrichtungen jedoch zunächst anwachsen

und dann abfallen wird, und daß in den mittleren und unteren Gruppen der Neutronenfluß sowohl in Vorwärts- als auch in Rückwärtsrichtung zur Plattenmitte hin ansteigen und zum Plattenende hin abfallen wird. (Obwohl 6.4 nur monotone Funktionen darstellt, kann eine Summe von Funktionen der Form 6.4 durchaus eine nicht monotone Funktion sein.) Ausgewählt wurden die Exponenten etwa wie folgt:

$$\alpha_1 \approx -1.5 \sigma_{t,\max}$$

$$\alpha_2 \approx -\sigma_{t,\max}$$

$$\alpha_3 \approx -\sigma_{t,\min}$$

$$\alpha_4 \approx +0.3 \sigma_{t,\min}$$

Doch zeigen die Abb. 15 und 16 sowie die Tabelle 2, daß auch dem Betrage nach deutlich kleinere Exponenten noch sehr genaue Ergebnisse liefern. Zur ebenfalls angeführten GE2-Approximation ist zu sagen, daß von ihr die integralen Größen noch sehr genau berechnet werden (Tab. 2), daß jedoch zwei - selbst in beiden Winkelhalbintervallen verschiedene - Entwicklungsfunktionen nicht mehr ausreichen, um die teils sehr verschiedene Winkelverteilung in allen Gruppen richtig zu beschreiben. Ein Ausweg ist die naheliegende, mit keinerlei Schwierigkeiten verbundene Verallgemeinerung des Verfahrens zu gruppenabhängigen Entwicklungsfunktionen. Damit dürften auch zur Beschreibung differentieller Größen zwei Entwicklungsfunktionen ausreichen.

Approximation	x=1 cm	x=5 cm	x=9 cm
GZ4(-1.2,-0.7,-0.3,+0.11)	-0.4	+0.5	-0.4
GZ4(-0.9,-0.6,-0.15,+0.09)	-0.1	+0.4	-1.3
GZ4(-0.6,-0.4,-0.2,+0.07)	-0.2	0	-1.4
GE3(0.,1.,0.25,0.75,-0.25,0.75)	-0.4	0	+0.6
GE2(0.,1.,0.,1.,0.2,0.8,0.1,1.4)	0	-0.1	+0.4
S4	-0.5	+0.1	-1.9
T3Z4(-1.2,-0.7,-0.3,+0.11)	-0.1	+0.5	-1.5
T3Z4(-1.2,-0.7,-0.3,+0.11) (#)	0	+1.5	+1.4
T3Z4(-0.9,-0.6,-0.15,+0.09)	+1.1	+2.0	-0.6
T3Z4(-0.9,-0.6,-0.15,+0.09) (#)	-0.3	+0.4	+1.5
T3E3(0.,1.,0.25,0.75,-0.25,0.75)	+0.8	+1.8	+1.9
T3E3(0.,1.,0.25,0.75,-0.25,0.75) (#)	-0.7	-1.5	+0.4

(#) Wichtung mit einer Konstanten

Tab. 2: Prozentuale Fehler der Spaltrate bezogen auf die Ergebnisse einer S16-Rechnung (10 cm-Platte)

Genauigkeit und Rechenzeiten

Wie die Abb. 15 und 16 sowie die Tabelle 2 zeigen, werden von der GE3- wie von der GZ4-Approximation sowohl differentielle als auch integrale Größen mit einer Genauigkeit bestimmt, die vergleichbar ist mit der höherer SN-Approximationen. Dabei ist noch zu berücksichtigen, daß z.B. die S4-Approximation lediglich für fünf diskrete Richtungen differentielle Größen liefert, zwischen denen mit teilweise großem Fehler zu interpolieren ist.

Numerische Schwierigkeiten ergaben sich weder bei der Inversion von Matrizen noch bei der Lösung der Differentialgleichungssysteme (Abschnitt V). Das verwendete Quelliterationsverfahren (Abschnitt V) konvergierte sehr rasch. Die Rechenzeiten der Verfahren hängen auch hier von den jeweiligen Genauigkeitsabfragen ab. Doch unter den gleichen Voraussetzungen wie im ersten Teil dieses Abschnitts ergeben sich etwa folgende Verhältnisse: Die Rechenzeiten der GE3- und GZ4-Approximationen sind erheblich kleiner als die der S16-Rechnung und kleiner als die der S4-Rechnung; die Rechenzeiten der GZ4-Approximationen sind noch deutlich kleiner als die der GE3-Approximationen und etwa vergleichbar mit denen von Multigruppen-Diffusionsrechnungen.

Entwicklungen nach Funktionen des Winkels und Funktionen der Energie bzw. nach Funktionen des Ortes und Funktionen der Energie

Abb. 17 und 18 und ebenfalls Tabelle 2 zeigen für das gleiche Problem Ergebnisse verschiedener Approximationen nach Abschnitt IV.2 und IV.4 (TMEN, TMZN) und wiederum zum Vergleich die Ergebnisse einer S16-Rechnung.

Auswahl der Entwicklungsfunktionen

Die winkel- bzw. ortsabhängigen Entwicklungsfunktionen waren bei diesen Rechnungen die gleichen wie bei den oben beschriebenen Multigruppen-Rechnungen, welche den Abb. 15 und 16 zugrunde liegen. Die Energieabhängigkeit wurde jedoch nicht durch ein Multigruppen-Quelliterationsverfahren bestimmt sondern durch Vorgabe dreier verschiedener Entwicklungsspektren (s. Abschnitt IV.2 und IV.4). Da wir jede der orts- bzw. winkelabhängigen Entwicklungsfunktionen mit jedem der Entwicklungsspektren zu einer orts- und energieabhängigen bzw. zu einer winkel- und energieabhängigen Funktion kombinierten, lagen den Rechnungen infolgedessen $12(=3 \times 4)$ bzw. $9(=3 \times 3)$ für jeden Winkelhalbraum gleiche Entwicklungsfunktionen zugrunde. Als Entwicklungsspektren haben wir das Spaltspektrum, das Spektrum am Ende der Platte, wie es eine Diffusionsrechnung liefert und das Spektrum in der Plattenmitte, wie es eine der Multigruppen-Rechnung lieferte, gewählt. Die Argumente dafür sind die folgenden:

Zur Beschreibung der Spaltneutronen, welche hier einen wesentlichen Teil des Spektrums ausmachen, bietet sich natürlich das in 1. Näherung materialunabhängige Spaltspektrum an. Da man ferner i.a. aus Multigruppen-Rechnungen für gleiche oder ähnliche Probleme über weitere Informationen verfügt, ist es sinnvoll, diese zu verwerten, d.h. die Spektren aus Multigruppen-Diffusions- oder -Transportrechnungen für ähnliche Probleme bieten sich ebenfalls als Entwicklungsspektren an [39]. Liegen verwertbare Informationen aus ähnlichen Problemen nicht vor, muß man entweder zunächst für die zu behandelnden Probleme eine Multigruppenrechnung durchführen und daraus für weitere Rechnungen Entwicklungsspektren entnehmen, oder man muß versuchen, diese Entwicklungsspektren aus vereinfachten Modellen zu erhalten. Solche Modelle sind z.B. in [37] und [38] beschrieben und liefern sehr genaue Resultate. In unserem Beispiel wäre weiter auch noch das Spektrum der inelastisch gestreuten Neutronen (z.B. aus dem Verdampfungsmodell) ein brauchbares Entwicklungsspektrum [15]. Wir wollen hierauf nicht weiter eingehen, unsere Untersuchungen sollen lediglich die Frage klären, ob beim Vorhandensein geeigneter Spektren diese zu brauchbaren Approximationen verwendet werden können. Infolgedessen spielt der Ursprung der von uns benutzten Entwicklungsspektren keine wesentliche Rolle.

Genauigkeit, Numerik und Rechenzeiten

Wie die Abb. 17 und 18 sowie Tabelle 2 zeigen, liefern auch diese Approximationen Resultate, deren Genauigkeit noch mit der von Multigruppen-SN-Rechnungen vergleichbar ist. Numerische Schwierigkeiten ergaben sich auch hier weder bei der Inversion von Matrizen noch bei der Lösung der Differentialgleichungssysteme. Die Differentialgleichungssysteme der TMEN-Approximationen wurden der Kontrolle wegen mit allen vier in Abschnitt V beschriebenen Verfahren gelöst; die Ergebnisse der drei auf der Eigenwertberechnung beruhenden Verfahren stimmten in 5 Dezimalstellen überein, die des totalnumerischen Verfahrens stimmten mit denen der drei erstgenannten - im wesentlichen wegen einer entsprechenden Genauigkeitsabfrage - in drei Dezimalstellen überein. Der numerische Aufwand der TMZN- und der TMEN-Approximation ist noch beträchtlich geringer als der der GZN- bzw. der GEN-Approximation; er ist kleiner als der einer entsprechenden Multigruppen-

Diffusionsrechnung. In der TMEN-Approximation war im obigen Beispiel das total-numerische Iterationsverfahren am schnellsten, doch da die Rechenzeit der drei anderen Verfahren nicht von der Dicke des Systems abhängt, werden diese für dickere Systeme schneller als das total-numerische Verfahren. Bei den auf der Eigenwertberechnung beruhenden Verfahren ist jetzt zu beachten, daß die Matrix C aus 4.12 auch konjugiert-komplexe Eigenwerte besitzt, wodurch die in Abschnitt V beschriebenen Modifikationen einiger Verfahren erforderlich werden.

Einfluß der Wichtungsfunktionen

Da unter den Entwicklungsspektren und somit unter den Wichtungsspektren bislang kein konstantes Spektrum vorhanden war und da auch bei den TMZN-Approximationen keine konstante Entwicklungsfunktion und somit keine konstante Wichtungsfunktion vorhanden war, ist nicht gewährleistet, daß die berechneten Näherungslösungen die Neutronenbilanzforderungen für das untersuchte System erfüllen (s. Abschnitt II). Rechnungen mit einem konstanten Wichtungsspektrum und einer konstanten Wichtungsfunktion in jedem Halbintervall aber sonst gleichen Entwicklungs- und Wichtungsfunktionen wie zuvor erbrachten die aus Tabelle 2 ersichtlichen Änderungen in der Spaltrate: Die in Tabelle 2 mit(*) gekennzeichneten Approximationen verwendeten in jedem Halbintervall eine Konstante zur Wichtung. Insgesamt wird der Fehler der integralen Größen durch diese Wichtung etwas kleiner; es empfiehlt sich daher, stets eine Konstante als Wichtungsfunktion zu verwenden und als weitere Wichtungsfunktionen - wenn keine spezielle Wahl aufgrund spezieller Benutzerwünsche vorgegeben ist - die Entwicklungsfunktionen zu nehmen.

Behandlung einer dickeren Schicht

Als nächstes Beispiel berechnen wir die Neutronenverteilung in einer sehr viel dickeren Natururanplatte (50 cm), auf welche ebenfalls von einer Seite Neutronen mit isotroper Winkelverteilung treffen, deren Energieverteilung gleich der von Spaltneutronen ist.

Abb. 19 und 20 zeigen die Winkelverteilung nach 5 cm und nach 20 cm jeweils in der ersten und der zehnten Gruppe des 26-Gruppen-Bildes. Eingetragen sind die Ergebnisse einer GE3-Approximation, zweier GZ6-Approximationen und - zum Vergleich - die einer S16-Rechnung.

Auswahl der Entwicklungsfunktionen

In der GE3-Approximation verwendeten wir die gleichen Entwicklungsfunktionen wie bei der Berechnung der 10 cm-Platte, da sich in der dickeren Platte die Winkelverteilung nicht sehr viel anders einstellen wird als in der 10 cm-Platte und diese Entwicklungsfunktionen dort die Lösung gut approximierten (s. Abb. 15 und 16). Bei den Z6-Approximationen berücksichtigten wir den zu erwartenden schwächeren Abfall des Neutronenflusses durch Wahl kleinerer Exponenten. Gleichzeitig wählten wir bei diesem Problem in beiden Winkelhalbräumen verschiedene Exponenten, welche einmal im Intervall $[-0,1]$ und einmal im Intervall $[-1,0]$ dem Betrage nach größer waren, um den Einfluß von in beiden Halbintervallen verschiedenen Exponenten zu erfassen.

Genauigkeit und Rechenzeiten

Auch für diese sehr viel dickere Platte liefern die GZ6- und die GE3-Approximation noch genaue Ergebnisse. Doch zeigen sich bei dieser dicken Platte die Grenzen niedriger GZ6-Approximationen: Mit zunehmender Dicke wird es immer schwieriger, die in den verschiedenen Richtungen teils sehr verschiedene Ortsabhängigkeit des Neutronenflusses durch wenige Ortsfunktionen zu beschreiben. Die größten Fehler treten dabei in dem Winkelintervall $[-0,0.1]$ auf - insbesondere in den ersten Gruppen (Abb. 20). Diese Fehler rühren daher, daß die zur Beschreibung des starken exponentiellen Abfalls des Neutronenflusses in diesen Richtungen notwendigen großen Exponenten in der einen GZ6-Approximation nicht vorhanden waren. Während die Auswahl der Exponenten über weite Bereiche keine große Rolle spielt, zeigt sich in diesem besonders kritischen Intervall eine bedeutende Fehlerreduktion durch Mitnahme eines größeren negativen Exponenten in der Entwicklung. Die GE3-Approximation ergibt in diesem Beispiel fast durchweg

bessere Resultate als die GZ6-Approximationen, da in ihr der Ortsverlauf des Neutronenflusses aus einer Differentialgleichung und nicht aus vorgegebenen Funktionen bestimmt wird. Bei starker Ortsabhängigkeit oder großer Plattendicke ist die GE3-Approximation den GZ6-Approximationen deutlich überlegen. Auch hier treten die größten Fehler in der ersten Gruppe auf - allerdings in der Vorwärtsrichtung.

Die in Abb. 19 zusätzlich eingetragenen Ergebnisse einer GE4-Approximation zeigen jedoch, daß durch Berücksichtigung einer weiteren Entwicklungsfunktion auch diese Fehler völlig verschwinden. Die Ergebnisse der GE4-Approximation stimmen fast genau mit denen der S16-Rechnung überein und sind in der Abb. 19 nur für die 1. Gruppe im Intervall $[0,1]$ eingetragen.

Die Rechenzeit der GZN-Approximationen hängt nicht von der Plattendicke ab, die der GEN-Approximationen wächst mit der Anzahl der bei der Diskretisierung der Differentialgleichungen zu berücksichtigenden Stützstellen und damit auch mit der Plattendicke. Daher erfordert die GE3-Approximation zwar bedeutend weniger Rechenzeit als die S16-Rechnung (etwa ein Drittel) aber auch erheblich mehr als die GZ6-Approximationen (etwa viermal soviel).

Behandlung eines Zwei-Zonen-Problems

Abschließend berechnen wir noch die Neutronenverteilung in einer Zwei-Zonen-Platte, welche 30 cm dick ist und aus einer 20 cm dicken Natururanzone und einer 10 cm dicken Stahlzone besteht. Auf die Natururanzone treffen wieder Neutronen mit isotroper Winkelverteilung und einer dem Spaltspektrum entsprechenden Energieverteilung. Abb. 21 zeigt die Winkelverteilung von Neutronen verschiedener Energiegruppen, welche die Platte aus der Stahlzone heraus verlassen; in Tabelle 3 ist der integrale Neutronenfluß am Ende der Stahlzone aufgeführt. Berücksichtigt wurden dabei die Ergebnisse einer T4DP2- und einer T4DP3-Approximation sowie die einer S16-Rechnung.

Auswahl der Entwicklungsfunktionen

An diesem Beispiel sollte noch einmal deutlich demonstriert werden, wie durch Berücksichtigung detaillierter Kenntnisse aus ähnlichen Problemen mit einfachen Approximationen sehr genaue Ergebnisse gewonnen werden können. Die Entwicklungsfunktionen entnahmen wir daher einer S16-Rechnung für ein ähnliches Problem (2-Zonen-Platte; 15 cm Natururan, 15 cm Stahl). Da die Ergebnisse des ähnlichen Problems zeigten, daß - wegen der starken Rückstreuung aus dem Stahl - die Winkelverteilung fast überall gut durch eine lineare Funktion der Form

$$\varphi(x) = a+bx$$

dargestellt werden kann, wählten wir für unser Problem diesmal als Entwicklungs- und Wichtungsfunktionen in jedem Winkelhalbraum die Legendre-Polynome. Die drei ersten dieser Polynome haben gerade die Form

$$P_0(x) = 1$$

$$P_1(x) = x$$

$$P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2-1)$$

Wir nahmen einmal zwei und einmal drei Entwicklungsfunktionen der Winkelvariablen (DP2- bzw. DP3-Approximationen).

Drei Entwicklungsspektren entnahmen wir ebenfalls den Ergebnissen des ähnlichen Problems, zwei davon aus der Stahlzone, das dritte aus der Uranzone. Als viertes Entwicklungsspektrum wählten wir noch das Spaltspektrum, welches in der Uranzone sicher gut geeignet ist. Diese Approximationen haben wir - entsprechend den oben gewählten Bezeichnungen - mit T4DP2 bzw. mit T4DP3 bezeichnet.

Genauigkeit und Rechenzeiten

Wie die Abbildung 21 und Tabelle 3 zeigen, ist es möglich, durch Berücksichtigung von Ergebnissen aus ähnlichen Problemen mit Approximationen niedriger Ordnung noch sehr genaue Resultate zu erzielen.

Art der Approximation	$\int_0^{\infty} \int_0^1 \phi(30, \mu, E) d\mu dE$
T4DP2	4.425
T4DP3	4.386
S16	4.388

Tabelle 3: Integrale Neutronenflußdichte
am Ende der Stahlzone [$\text{ncm}^{-2}\text{sec}^{-1}$]

Schon die T4DP2-Approximation liefert genaue Ergebnisse; die Mitnahme einer weiteren Entwicklungsfunktion der Winkelvariablen kann keine wesentliche Verbesserung mehr bringen.

Die Rechenzeiten der T4DP2- und der T4DP3-Approximation lagen weit unter denen von SN-Approximationen und waren etwa vergleichbar mit denen von Multigruppen-Diffusionsrechnungen.

Bei diesem Vergleich ist natürlich weiter zu berücksichtigen, daß Diffusionsrechnungen nicht in der Lage sind, Winkelverteilungen zu berechnen oder am Plattenrand integrale Flußdichten einigermaßen richtig wiederzugeben.

VII. Zusammenfassung

In der vorliegenden Arbeit wurden verschiedene Verfahren zur näherungsweisen Lösung der Boltzmann-Gleichung für ebene Geometrie vorgeschlagen und anhand von einigen Modellproblemen hinsichtlich ihrer Güte und Anwendbarkeit getestet. Diese Verfahren basieren auf einer in beiden Halbintervallen getrennten Entwicklung der Lösung der Boltzmann-Gleichung nach den vom Benutzer der Verfahren vorgegebenen Funktionen; sie ermöglichen in allen Fällen die exakte Befriedigung beliebiger Transportrandbedingungen. Die Entwicklungsfunktionen können als Eingabegrößen der Benutzer von Problem zu Problem diesem jeweils speziell angepaßt werden und alle vorhandenen Kenntnisse der Benutzer berücksichtigen. Einige Standardentwicklungen wie z.B. das DPN-Verfahren [36], welches in jedem Winkelhalbraum als Entwicklungs- und Wichtungsfunktionen die Legendre-Polynome verwendet, sind in den vorgeschlagenen neuen Verfahren als Spezialfälle enthalten.

Die vom Benutzer vorgegebenen Entwicklungsfunktionen können Funktionen der Winkelvariablen, Funktionen der Ortsvariablen, Funktionen der Winkel- und der Energievariablen oder Funktionen der Orts- und der Energievariablen sein. Welche dieser vier möglichen Entwicklungen gewählt wird, hängt von den vorhandenen Kenntnissen des Benutzers und vom Problem selbst ab.

Die jeweils unbekanntesten Funktionen der Entwicklungen werden in den betrachteten Verfahren durch die "Methode der gewichteten Residuen" bestimmt. Diese Methode eröffnet dem Benutzer die zusätzliche Möglichkeit, die Näherungslösung in einem von ihm zu bestimmenden Sinne zu optimieren, da auch die Wichtungsfunktionen dieser Methode Eingabegrößen sind und vom Benutzer von Problem zu Problem und von Fragestellung zu Fragestellung verschieden gewählt werden können.

Gegenüber den bisher aus der Literatur bekannten Methoden [11 - 19, 22] sind damit die folgenden Vorteile gegeben:

Die vorgeschlagenen Verfahren beinhalten vier verschiedene Entwicklungen (s.o.), von denen - je nach Problem und vorhandenen Informationen - die

günstigste oder schnellste ausgewählt werden kann. Dadurch ist es möglich, Kenntnisse aus ähnlichen Problemen sowohl über die Orts- als auch über die Winkel- oder Energieverteilung der Neutronen zu verwerten.

Die Lösung der Boltzmann-Gleichung wird in beiden Winkelhalbräumen in allen vier Entwicklungen getrennt entwickelt nach Funktionen, welche in beiden Winkelhalbräumen verschieden gewählt werden können. Damit bietet jedes der vier Verfahren eine große Flexibilität, die ein optimales Ausnutzen vorhandener Informationen ermöglicht. Ferner können dadurch beliebige Transportrandbedingungen exakt erfüllt werden.

Die Bestimmung der jeweils unbekanntenen Funktionen der Entwicklung mit Hilfe der Methode der gewichteten Residuen bedingt einen nur relativ geringen numerischen Aufwand und bedeutet eine zusätzliche Flexibilität bei der optimalen Beantwortung spezieller Fragestellungen [15], welche in den üblichen Formulierungen verwandter Entwicklungen mit Hilfe der Variationsmethode [11 - 19] nicht immer gegeben ist.

Die vergleichende Darstellung und die numerische Anwendung auf einige Modellprobleme, wie sie in der vorliegenden Arbeit durchgeführt wurden, gestatten schließlich die unten angegebenen Aussagen über Anwendbarkeit und Rechenzeiten dieser Verfahren.

Für die aus den Entwicklungen resultierenden Differential- und Integralgleichungssysteme zur Bestimmung der jeweils unbekanntenen Funktionen wurden verschiedene numerische Lösungsverfahren angegeben, welche die mit der Lösung dieser Gleichungssysteme verbundenen numerischen Schwierigkeiten in geeigneter Weise berücksichtigen. Diese Verfahren rechnen an besonders kritischen Stellen teilweise mit doppelter Genauigkeit (etwa 15 Dezimalstellen), um weitgehend Rundungsfehler zu vermeiden. Doch muß festgehalten werden, daß bei ungeschickter Wahl von Entwicklungs- oder Wichtungsfunktionen - insbesondere wenn diese "fast" linear abhängig sind - nicht zu vermeidende numerische Schwierigkeiten auftreten werden in Form von "fast" singulären Matrizen, deren Inversion dann nur mit großen Fehlern möglich ist, oder in Form von schlecht konvergierenden Iterationsverfahren. Bei linearer Abhängigkeit der Entwicklungs-

oder Wichtungsfunktionen werden die zu invertierenden Matrizen singulär, die Verfahren brechen dann ab.

Wie die Rechnungen für einige Modellprobleme zeigen, liefern die Verfahren in kurzen Rechenzeiten relativ genaue Resultate. Allein die Berücksichtigung der Ergebnisse einfacher physikalischer Betrachtungen in den Entwicklungsfunktionen macht diese Verfahren den Standardentwicklungen überlegen und läßt mit vergleichsweise geringem numerischen Aufwand die Genauigkeit höherer SN-Approximationen [36] erreichen. Bei Berücksichtigung detaillierter Kenntnisse, gewonnen aus ähnlichen, bereits berechneten Problemen, vergrößert sich der Gewinn dieser Verfahren noch.

Bezüglich der Anwendbarkeit der Verfahren lassen sich aus den Ergebnissen im einzelnen folgende Schlüsse ziehen:

Für homogene, nicht zu dicke Schichten liefert die Entwicklung nach Funktionen des Ortes und Funktionen der Energie in kürzesten Rechenzeiten sehr genaue Resultate, wenn dem Benutzer einige repräsentative Energiespektren aus ähnlichen Problemen oder aus einfachen physikalischen Modellen zur Verfügung stehen. Die Auswahl der Entwicklungsfunktionen der Ortsvariablen wird durch die Wirkungsquerschnitte der Schicht nahegelegt (s. Abschnitt VI).

Ist die Kenntnis einiger repräsentativer Spektren nicht gegeben und kann der Benutzer auch aus einfachen Modellen keine solche gewinnen, oder ist die Dicke der homogenen Schicht größer als etwa 10 mittlere freie Weglängen, bietet sich eher die Entwicklung nach Funktionen der Ortsvariablen allein an. Auch diese erfordert lediglich sehr kurze Rechenzeiten und liefert auch für dickere homogene Schichten genaue Resultate. Die Rechenzeit hängt von der Anzahl der verwendeten Entwicklungsfunktionen ab; bei weniger als 8 Entwicklungsfunktionen ist sie kleiner oder vergleichbar mit der einer Multigruppendiffusionsrechnung. Mehr als 8 Funktionen zu verwenden, wird sich selten als notwendig und sinnvoll erweisen. In den Testbeispielen wurden maximal 6 Funktionen verwendet.

Für Schichten mit mehreren verschiedenen Zonen empfiehlt sich die Entwicklung nach Funktionen der Winkelvariablen und nach Funktionen der Energievariablen, sofern die Schichten nicht zu dick sind und wieder die Kenntnis mindestens eines repräsentativen Spektrums für jede Zone gegeben ist. Auch für diese Entwicklung hängt die Rechenzeit von der Anzahl der Entwicklungsfunktionen ab. Bei weniger als 15 Funktionen (in unseren Beispielen verwendeten wir maximal 12) ist die Rechenzeit noch kleiner als die einer Multigruppen-Diffusionsrechnung oder mit dieser vergleichbar.

Für dickere Schichten oder Schichten mit vielen Zonen liefert die Entwicklung nach Funktionen der Winkelvariablen die besten Resultate. Bei Verwendung von nur 2 oder 3 sorgfältig ausgewählten Entwicklungsfunktionen erreicht diese Entwicklung die Genauigkeit von SN-Approximationen hoher Ordnung (in unseren Beispielen fast die von S16-Approximationen), erfordert aber nur Rechenzeiten, die noch erheblich unter denen hoher SN-Approximationen und nicht wesentlich über denen von Multigruppen-Diffusionsrechnungen liegen.

Erweiterungen und Ausblick

Die vergleichsweise recht große Genauigkeit und die relativ kurzen Rechenzeiten dieser Verfahren legen eine Erweiterung auf komplexere Geometrien (z.B. Zylindergeometrie) nahe. Dabei bilden die in der vorliegenden Arbeit gewonnenen Ergebnisse eine Erfahrungsgrundlage.

Für die neutronenphysikalische Berechnung von zukünftigen Testreaktoren und anderen fortgeschrittenen experimentellen Anordnungen mit sehr komplexer Geometrie wird demnächst die Lösung der Boltzmann-Gleichung für räumlich dreidimensionale Probleme anzustreben sein. Da die totalnumerische Lösung solcher Probleme wegen überlanger Rechenzeiten auf den gegenwärtigen Datenverarbeitungsanlagen kaum möglich erscheint, ist es daher von Interesse, die Frage zu untersuchen, ob und wie Transport-syntheseverfahren für die Synthese von Näherungslösungen räumlich dreidimensionaler Probleme aus Lösungen zweidimensionaler Probleme angewendet werden können. Der Erfolg ähnlicher Verfahren zur näherungsweise Lösung

der dreidimensionalen Neutronendiffusionsgleichung und die positiven Ergebnisse der vorliegenden Arbeit, welche für einfache Geometrie zeigen, daß prinzipiell Transportsyntheseverfahren gut anwendbar sind, lassen auch dies erfolgsversprechend erscheinen.

Für die Anregung zu dieser Arbeit, für wertvolle Diskussionen und für die kritische Durchsicht danke ich Herrn Dr. H. Küsters.

Herrn Prof. Dr. W. Kofink und Herrn Prof. Dr. K. Wirtz danke ich für ihr förderndes Interesse an dieser Arbeit.

Literatur

- [1] B. Davison, J.B. Sykes, "Neutron Transport Theory", Clarendon Press, Oxford, England (1957)
- [2] B. Carlson, "Numerical Solution of Neutron Transport Problems", Proc. Symp. Appl. Math. 11, 219-232, (1959)
- [3] C. Mark, "The Spherical Harmonics Method I", Atomic Energy of Canada, Rept. CRT-340 (1957)
- [4] W. Kofink, Nuovo Cimento Suppl. 9, 497 (1958)
- [5] W. Kofink, Nucl. Sc. Eng. 6, 475 (1959)
- [6] S.A.W. Gerstl, Nukleonik 10, 227 (1967)
- [7] S.A.W. Gerstl, W. Kofink, Nucl. Sc. Eng. 33, 249 (1968)
- [8] T. Juillerat, Nukleonik 12, 117 (1969)
- [9] M.V. Mataušek, Nukleonik 12, 45 (1969)
- [10] H. Greenspan, C.N. Keller, D. Okrent (editors), "Computing Methods in Reactor Physics", Gordon and Breach Science Publishers, New York-London-Paris (1968), S. 287f
- [11] G.C. Pomraning, M. Clark, Journ. Nucl. Energy 18, 191 (1964)
- [12] S. Kaplan, J.A. Davis, TANS 9, 196 (1966)
- [13] S. Kaplan, J.A. Davis, M. Natelson, Nucl. Sc. Eng. 28, 364 (1967)
- [14] H.S. Zwibel, TANS 10, 213 (1967)

- [15] W.M. Stacey jr., Nucl. Sc. Eng. 28, 438 (1967)
- [16] H.S. Zwibel, TANS 11, 174 (1968)
- [17] K.D. Lathrop, N.S. Demuth, Nucl. Sc. Eng. 32, 120 (1968)
- [18] H.S. Zwibel, Nucl. Sc. Eng. 36, 435 (1969)
- [19] M.J. Lancefield, Nucl. Sc. Eng. 37, 423 (1969)
- [20] H. Greenspan, C.N. Keller, D. Okrent (editors), "Computing Methods in Reactor Physics", Gordon and Breach Science Publishers, New York-London-Paris (1968), S. 339f
- [21] E.L. Fuller, "Weighted Residuals Methods in Space-Dependent Reactor Dynamics" ANL 7565 (1969)
- [22] M. Natelson, S. Kaplan, TANS 9, 197 (1966)
- [23] S. Kaplan, Nucl. Sc. Eng. 13, 22 (1962)
- [24] S. Kaplan, TANS 6, 3 (1963)
- [25] G.C. Pomraning, Nucl. Sc. Eng. 24, 291 (1966)
- [26] L.W. Kantorowitsch, W.I. Krylow, "Näherungsmethoden der höheren Analysis", Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin (1956) S. 242f
- [27] S.G. Mikhailin, K.L. Smolitskiy, "Approximate Methods for Solution of Differential and Integral Equations", American Elsevier Publishing Comp. Inc., New York (1967) S. 250 f
- [28] K.M. Case, P.F. Zweifel, "Linear Transport Theory", Addison-Wesley Publishing Comp., London (1967) S. 17f

- [29] E.M. Gelbard, S. Kaplan, Nucl. Sc. Eng. 26, 569 (1966)
- [30] S. Kaplan, Nucl. Sc. Eng. 29, 456 (1967)
- [31] C. Günther, W. Kinnebrock, Programmbeschreibung Nr. 204, KFK (1969)
- [32] D. Sanitz et al., Programmbeschreibung Nr. 155, KFK (1968)
- [33] L. Lois, "Numerical Solution of the One Velocity Boltzmann Neutron Transport Equation in Slab Geometrie", Dissertation, Columbia University (1966)
- [34] H. Greenspan, C.N. Keller, D. Okrent (editors), Computing Methods in Reactor Physics, Gordon and Breach Science Publishers, New York-London-Paris (1968) S. 295f
- [35] H. Huschke, "Gruppenkonstanten für dampf- und natriumgekühlte schnelle Reaktoren in einer 26-Gruppendarstellung", KFK-770, EUR 3952d (1968)
- [36] M. Clark, K.F. Hansen, "Numerical Methods of Reactor Analysis", Academic Press, New York-London (1964)
- [37] M. Segev, TANS 12, 640 (1969)
- [38] F.E. Dunn, M. Becker, TANS 12, 640 (1969)
- [39] E.U. Vaughan et al., "Spectrum Synthesis in Fast Reactor Analysis", AI-AEC-12820 (1969)

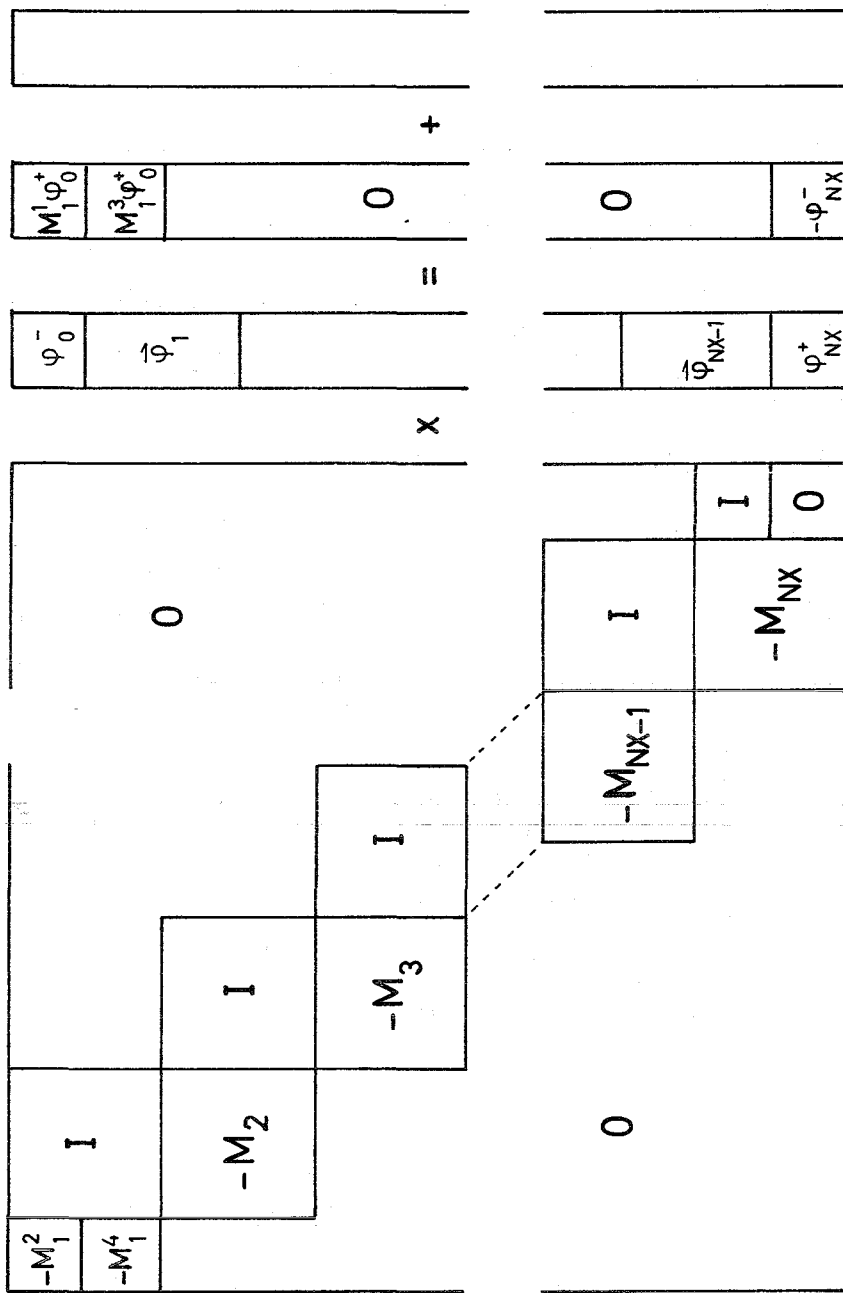


Abb. 1

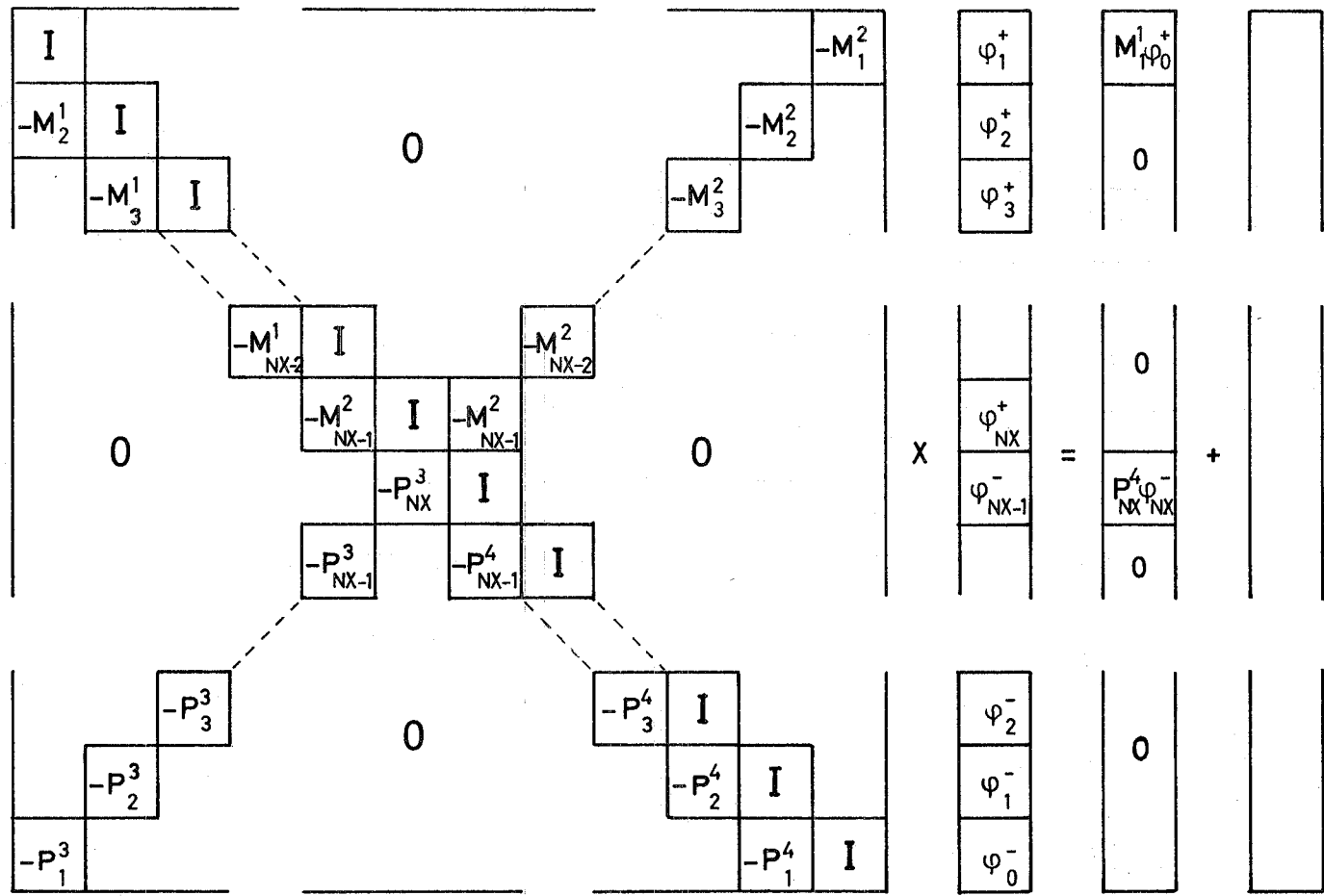


Abb. 2

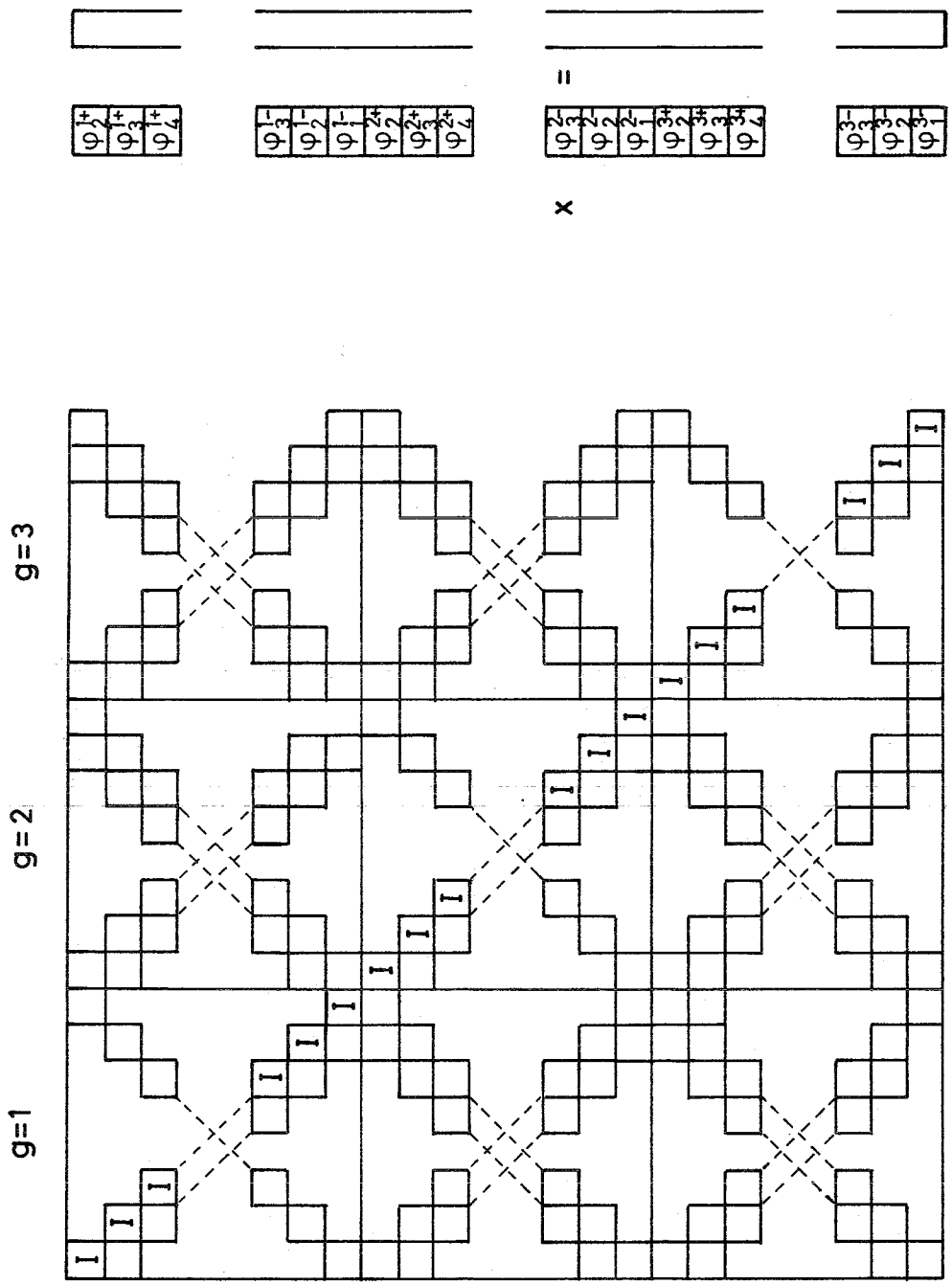


Abb. 3

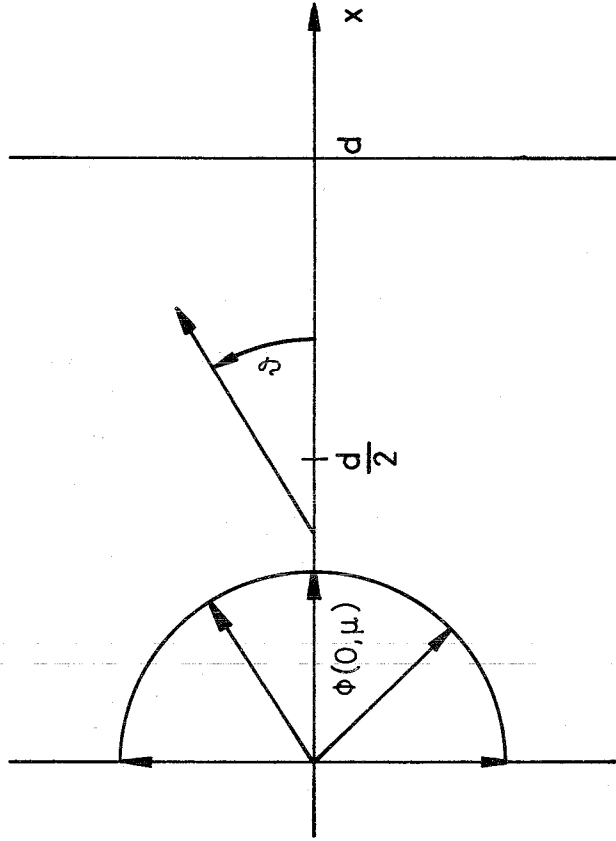


Abb. 4 Homogene Platte

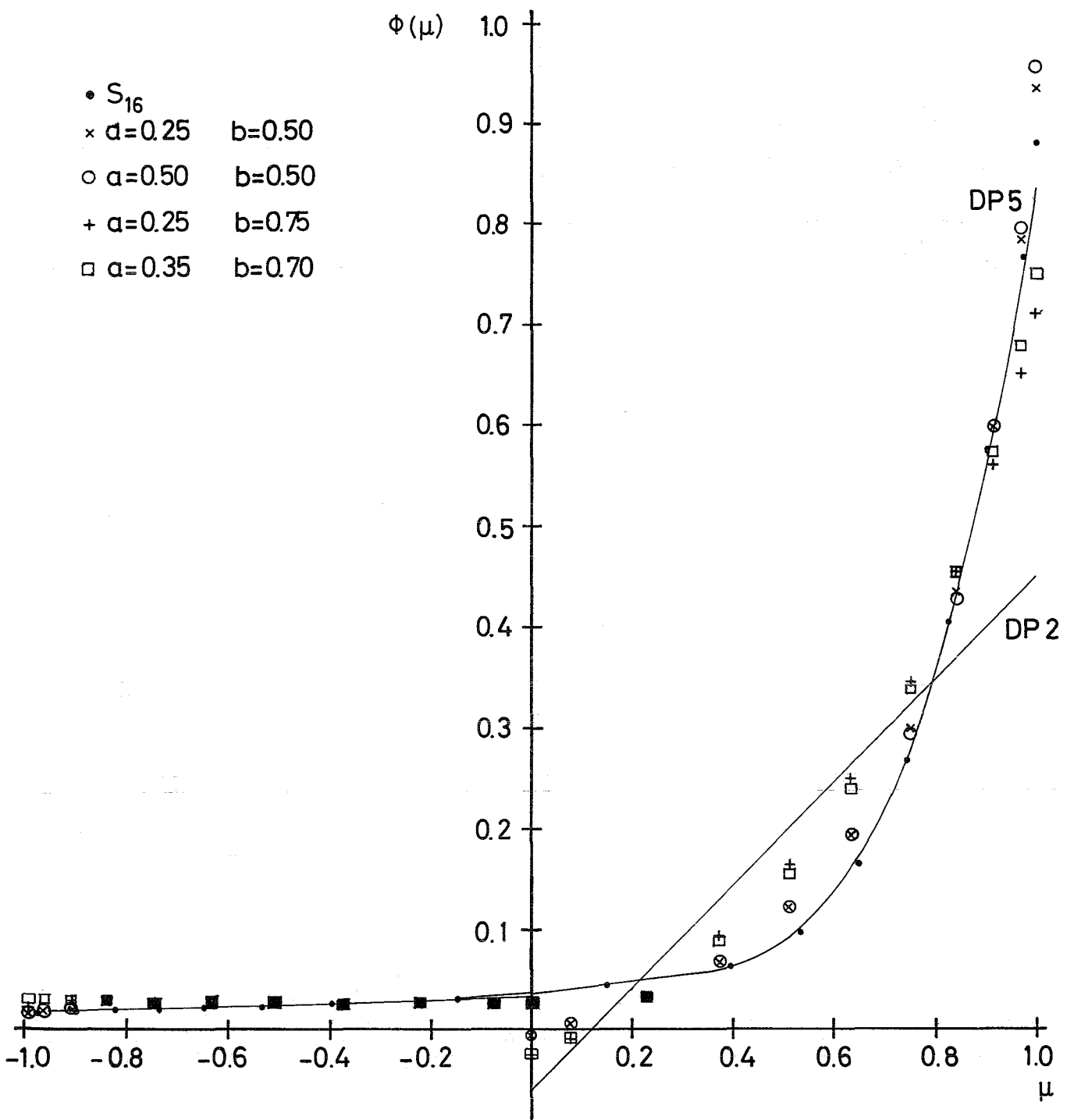


Abb.5 Winkelverteilung in der Plattenmitte (10cm-Platte)

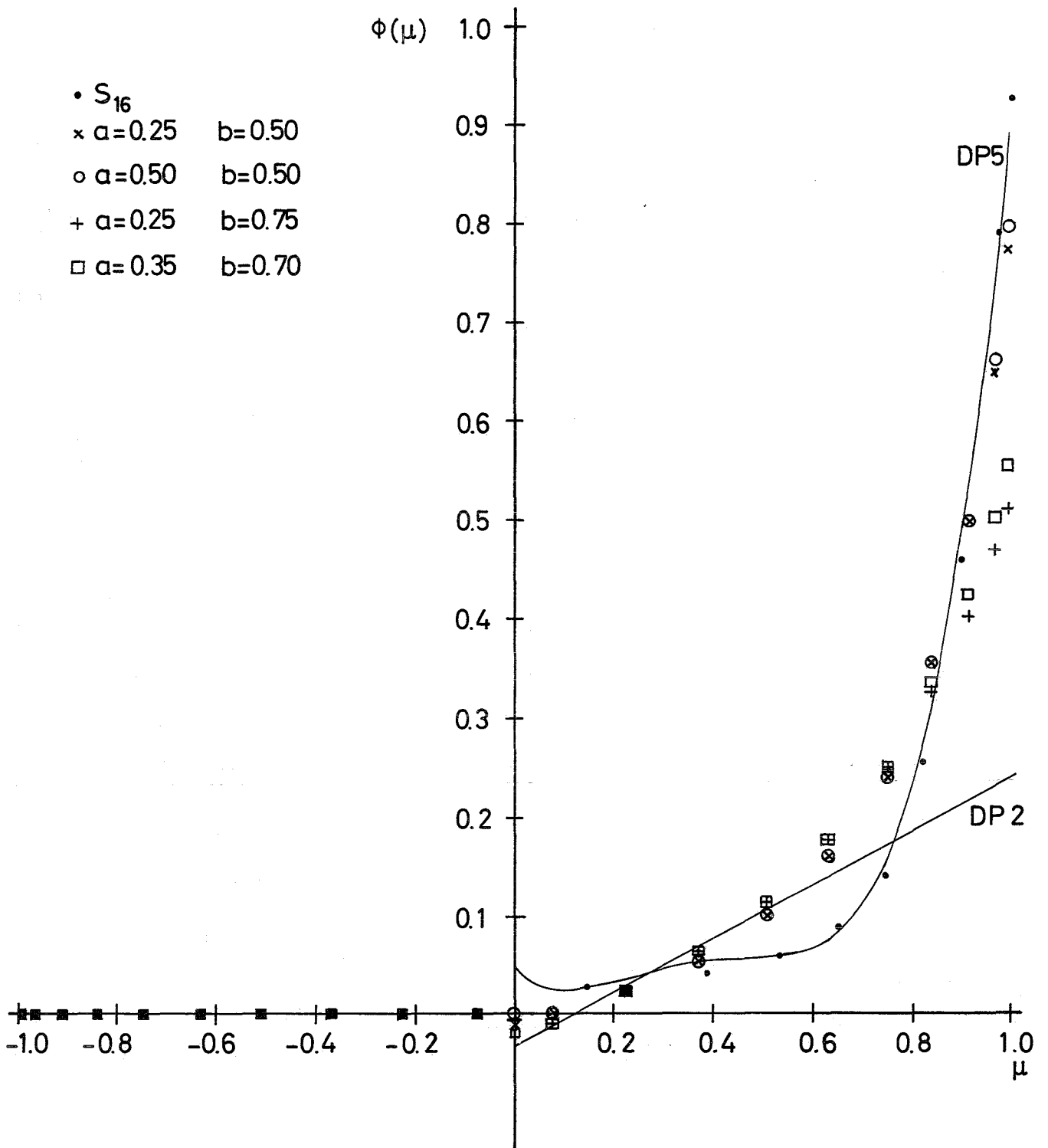


Abb. 6 Winkelverteilung am Plattenende

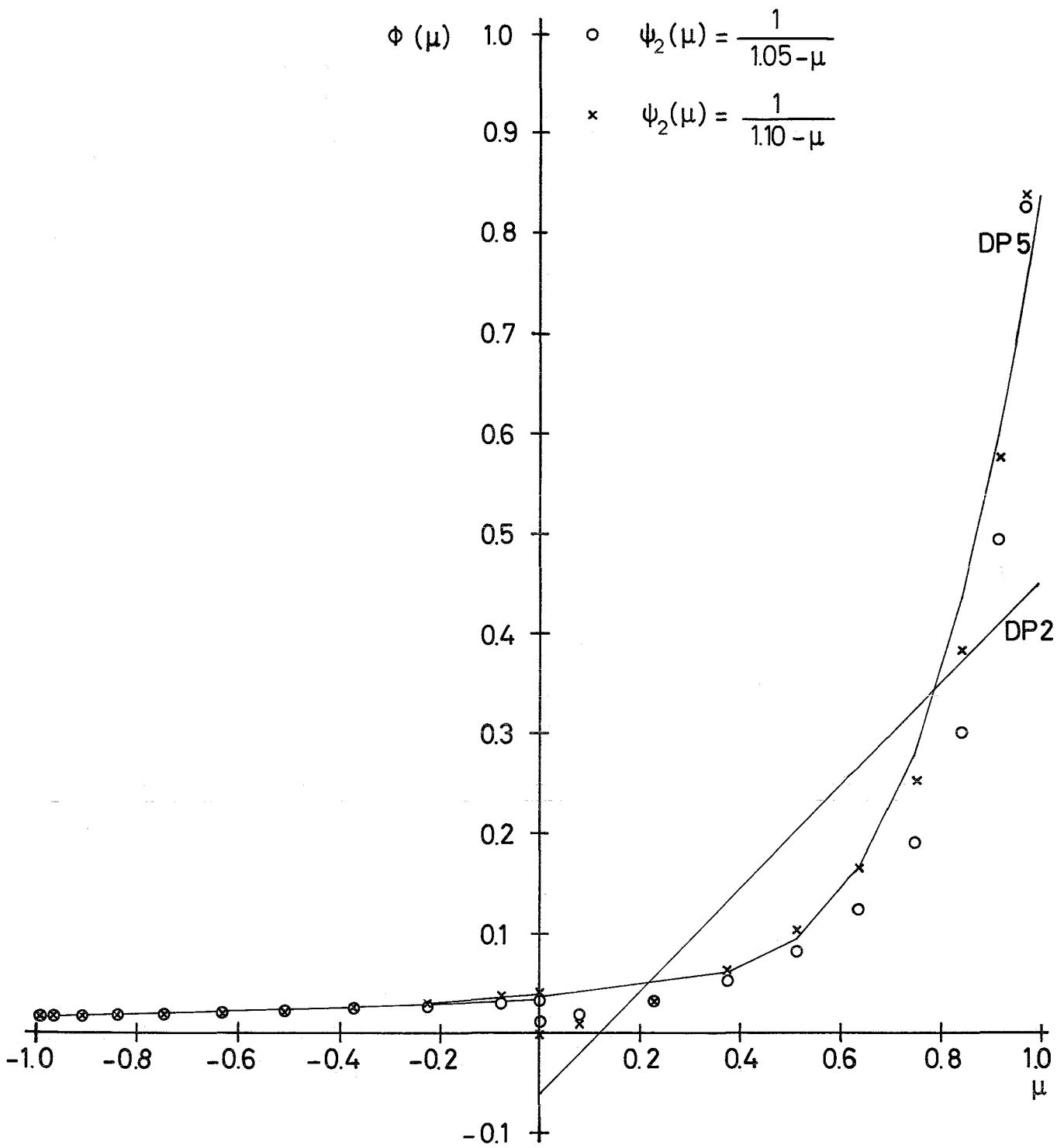


Abb.7 Winkelverteilung in der Plattenmitte

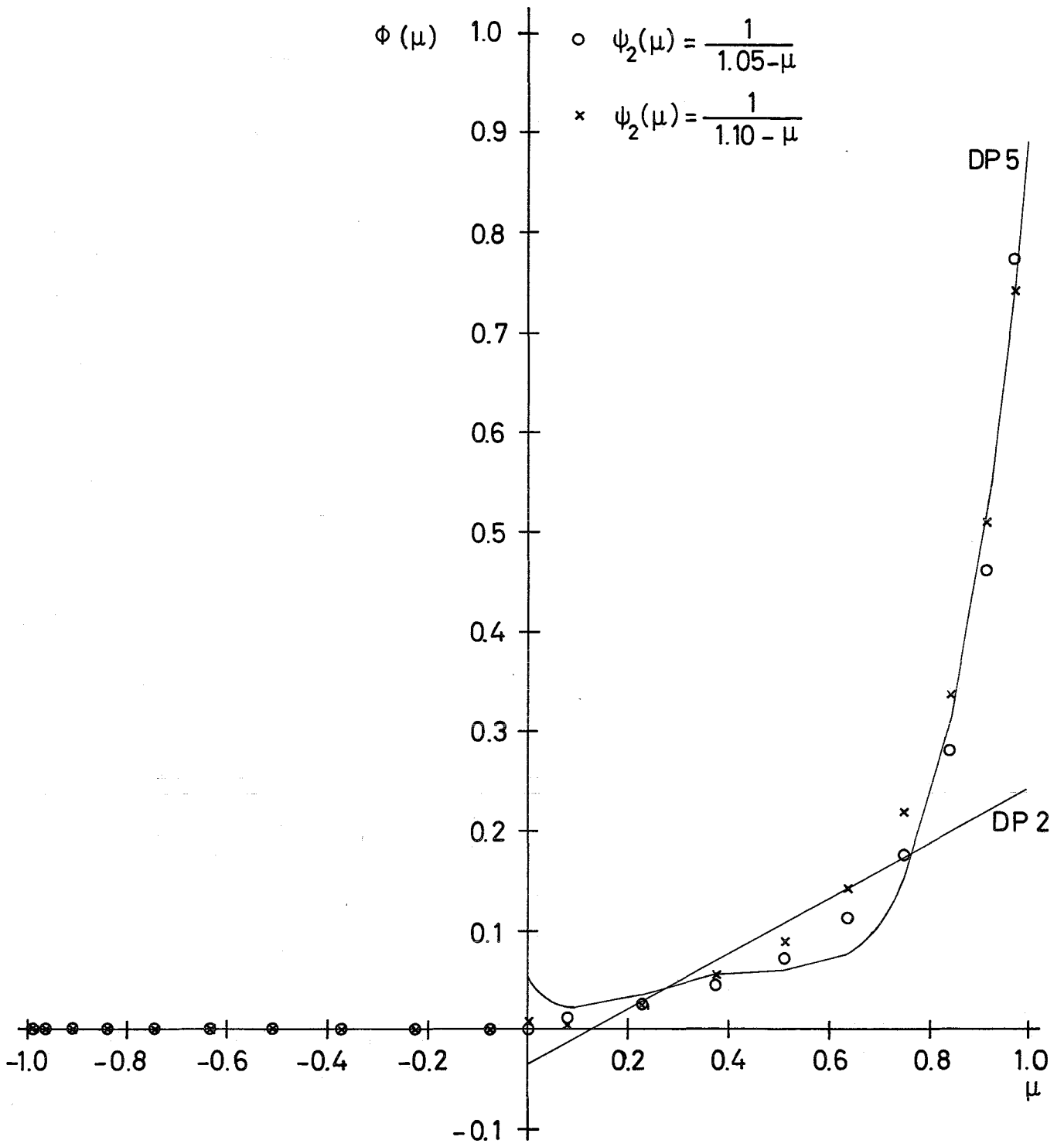


Abb.8 Winkelverteilung am Plattenende

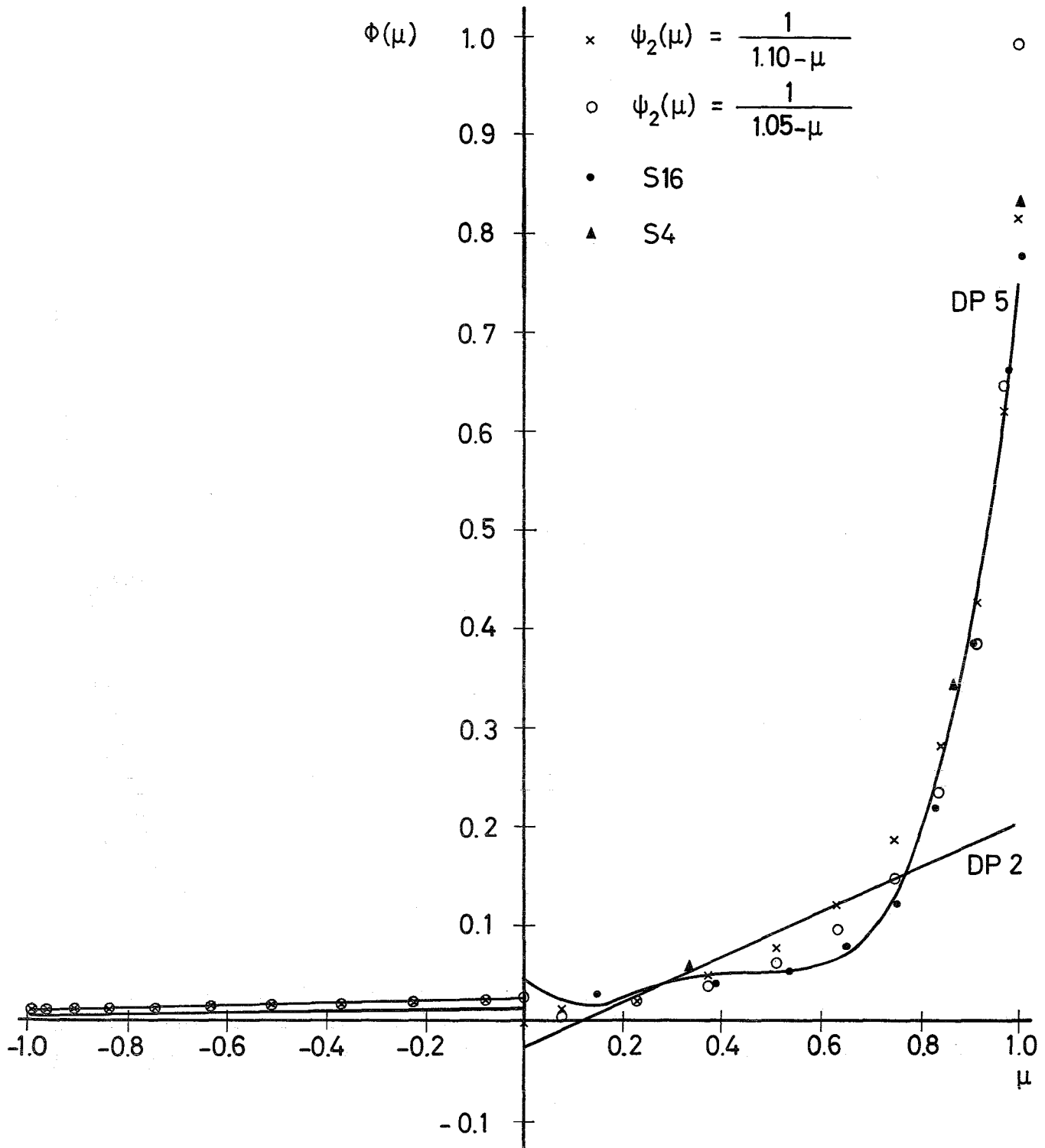


Abb.9a Winkelverteilung bei $x=10$ (50cm-Platte)

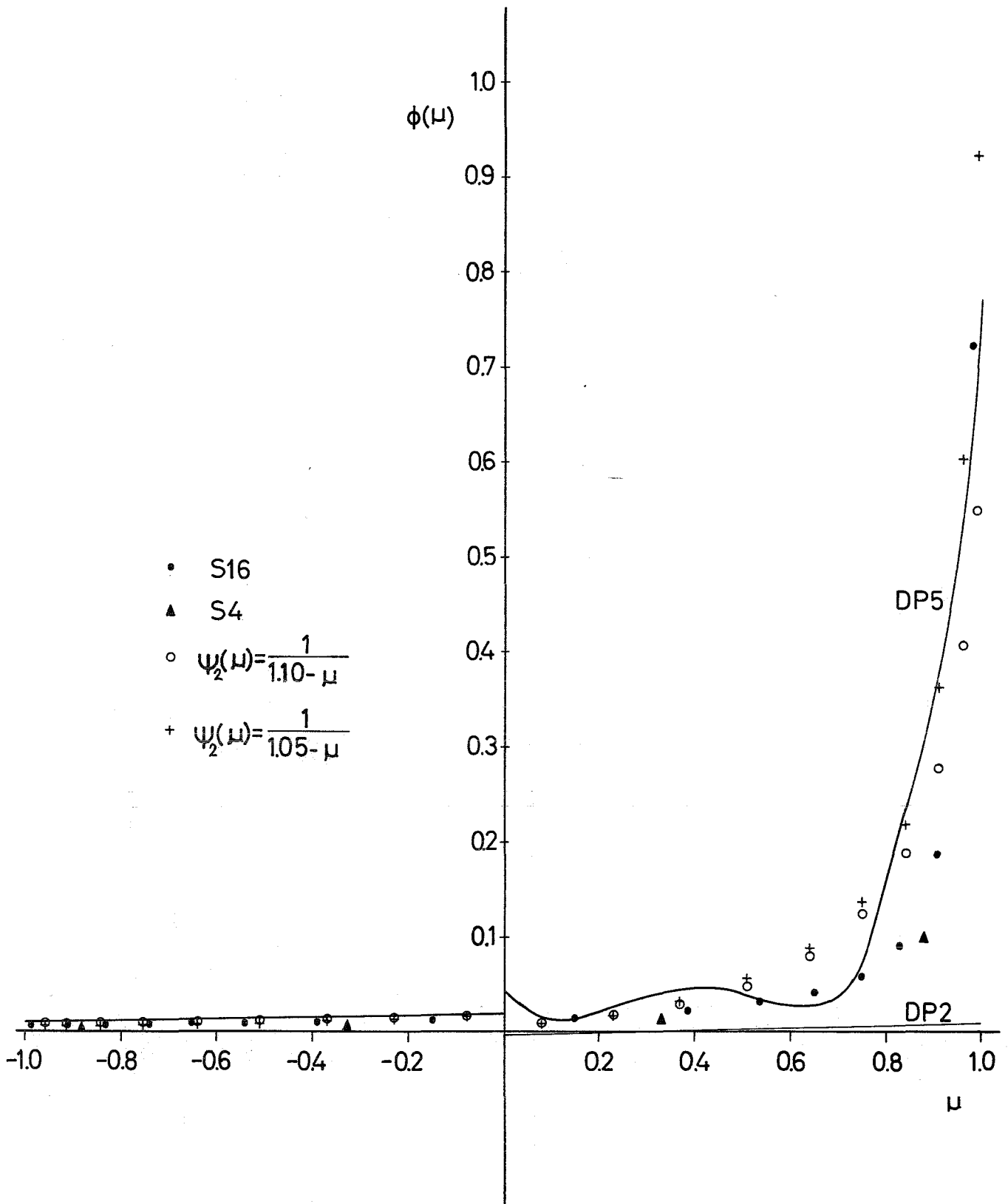


Abb.9b Winkelverteilung bei x=40 (50cm-Platte)

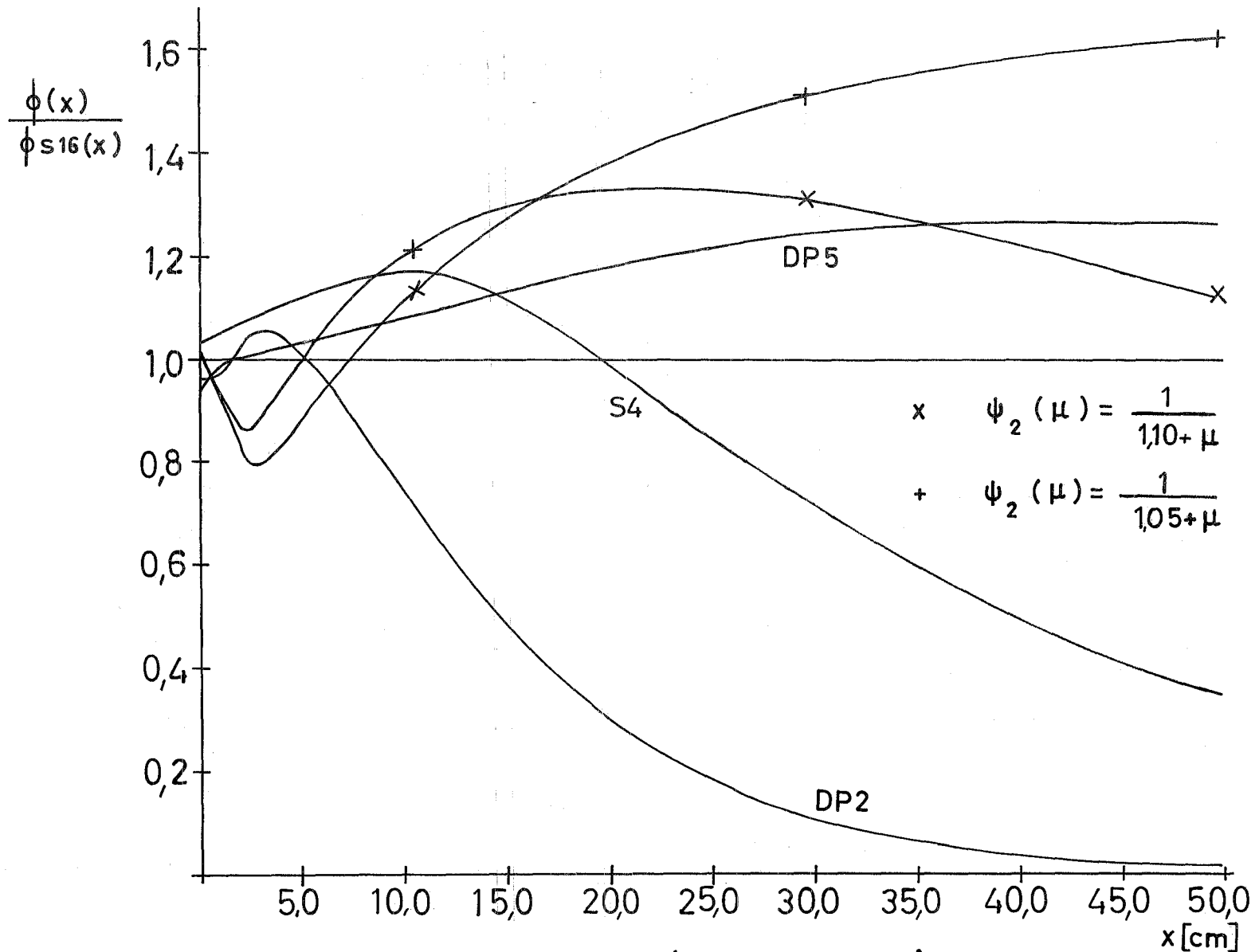


Abb.10 Integrale Flüsse (50cm-Platte)

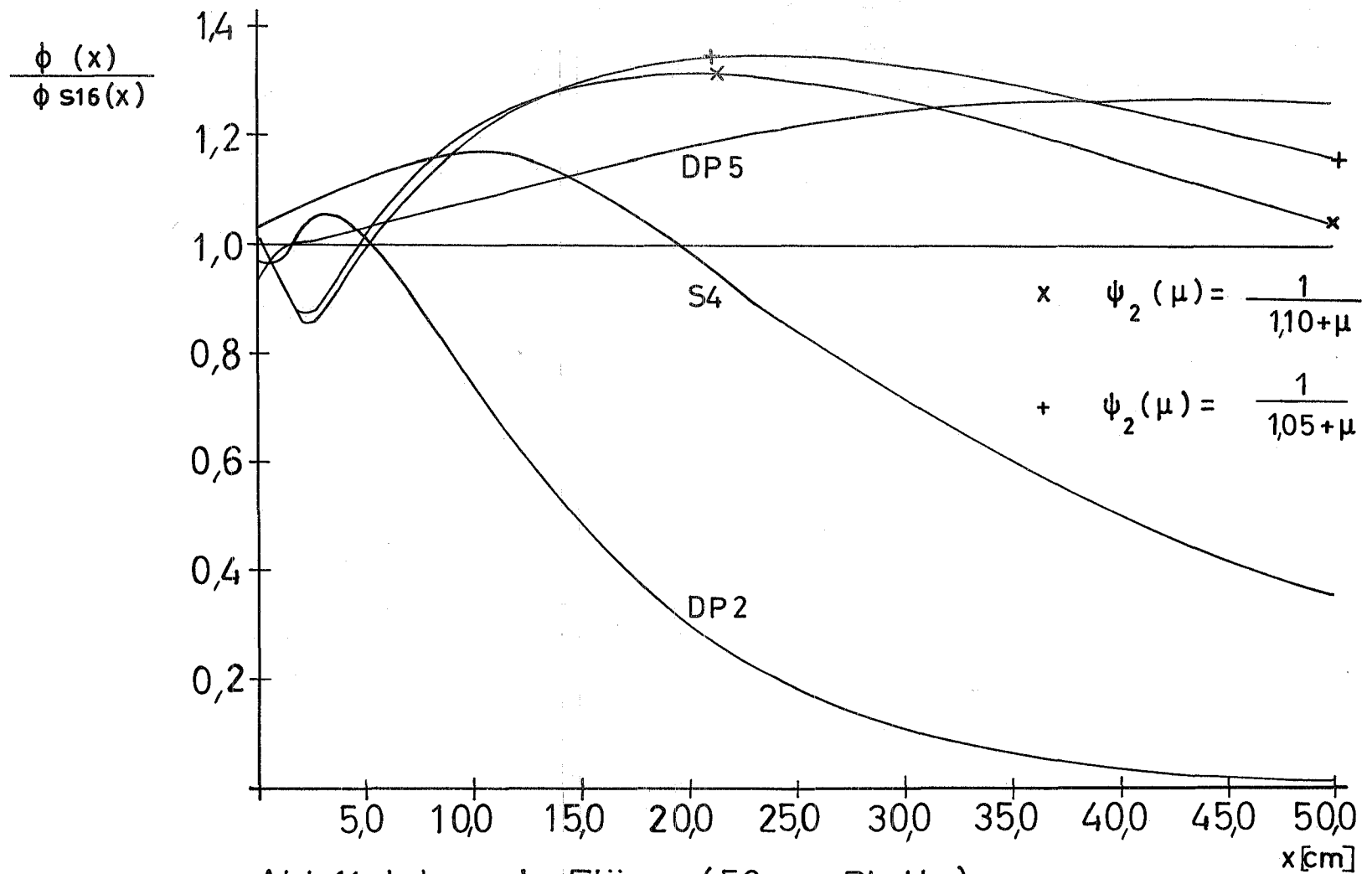


Abb.11 Integrale Flüsse (50 cm-Platte)
 Stärkere Wichtung über [0.4,10]

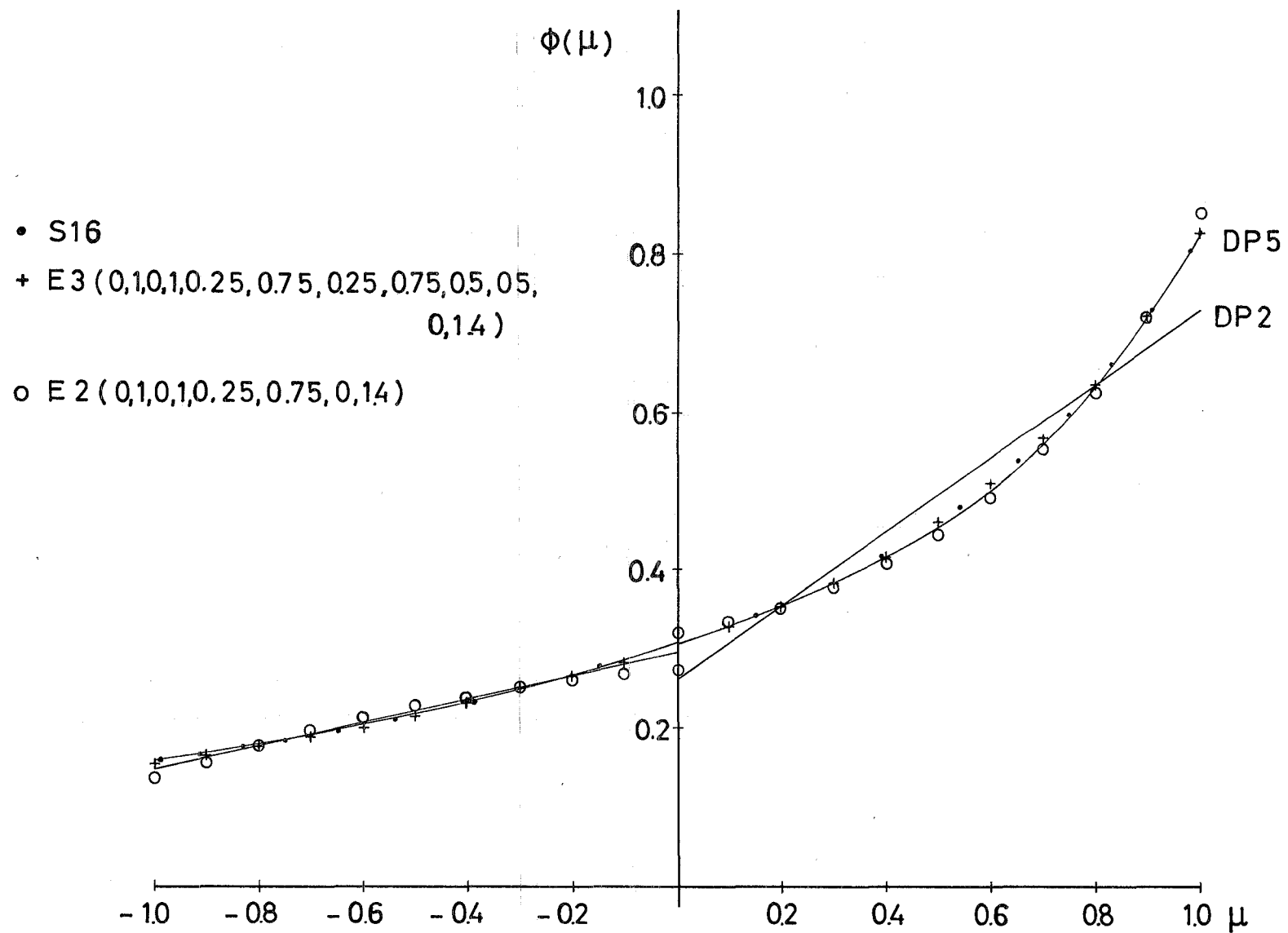


Abb.12 a Winkelverteilung 2cm vor der Absorberzone
(2 Zonen-Platte)

- S16
- + E3 (0,1,0,1,0,25,0,75,0,25,0,75,0,5,0,5,0,14)
- o E2 (0,1,0,1,0,25,0,75,0,14)

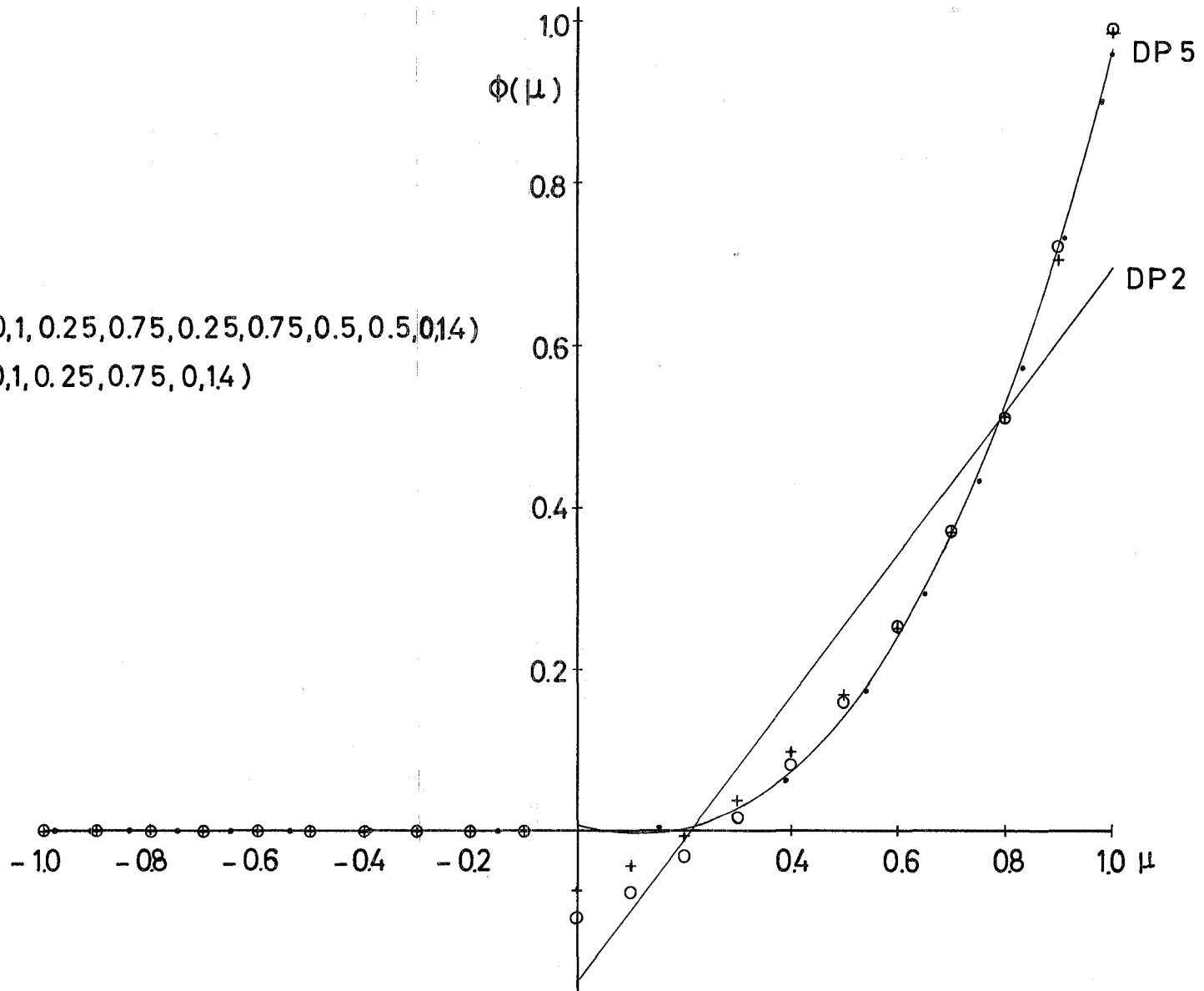


Abb.12b Winkelverteilung 2cm tief in der Absorberzone (2-Zonen-Platte)

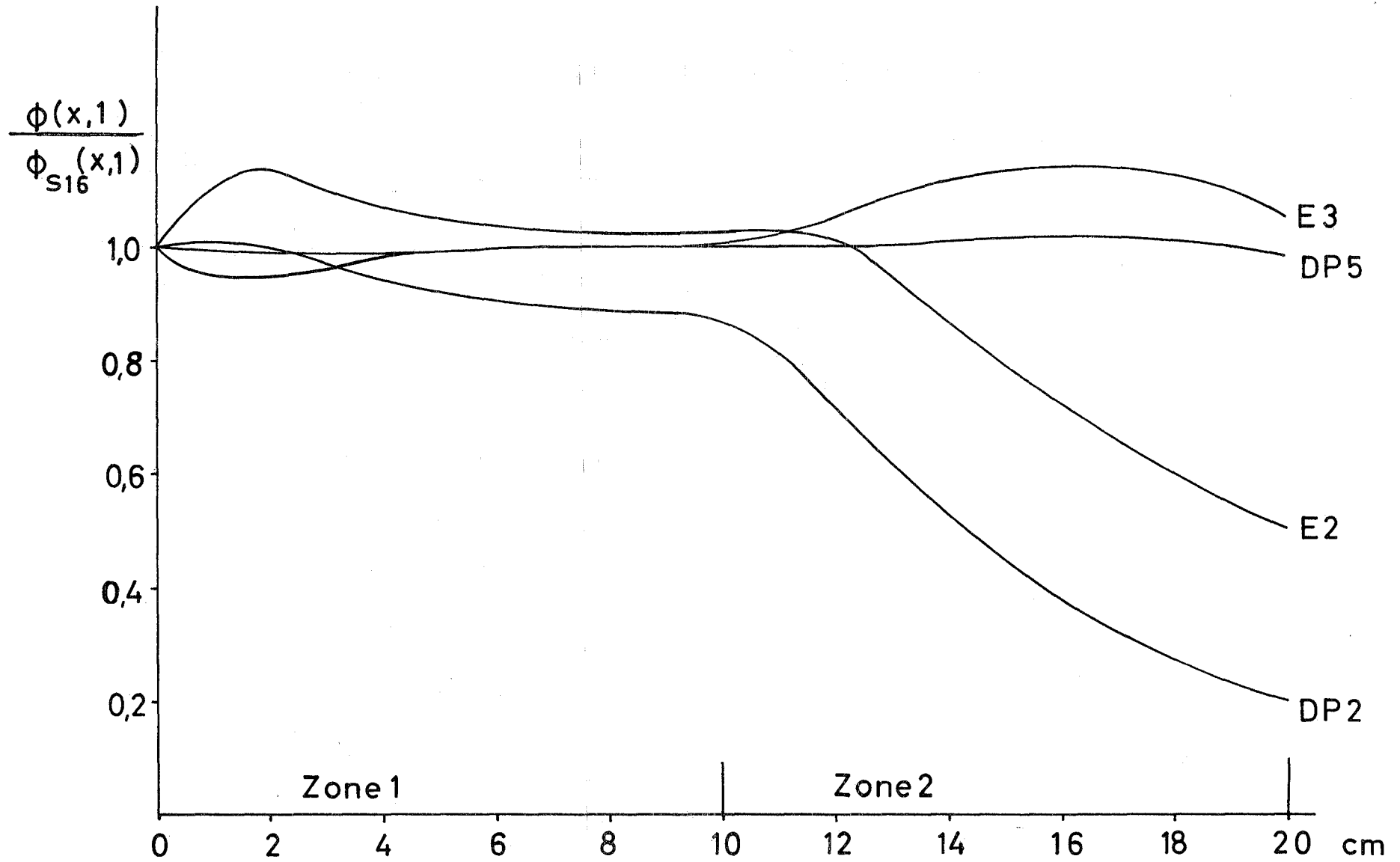


Abb.12c Verhältnis der Flüsse bei $\mu = +1$
 (2-Zonenplatte, 2.Zone reiner Absorber)

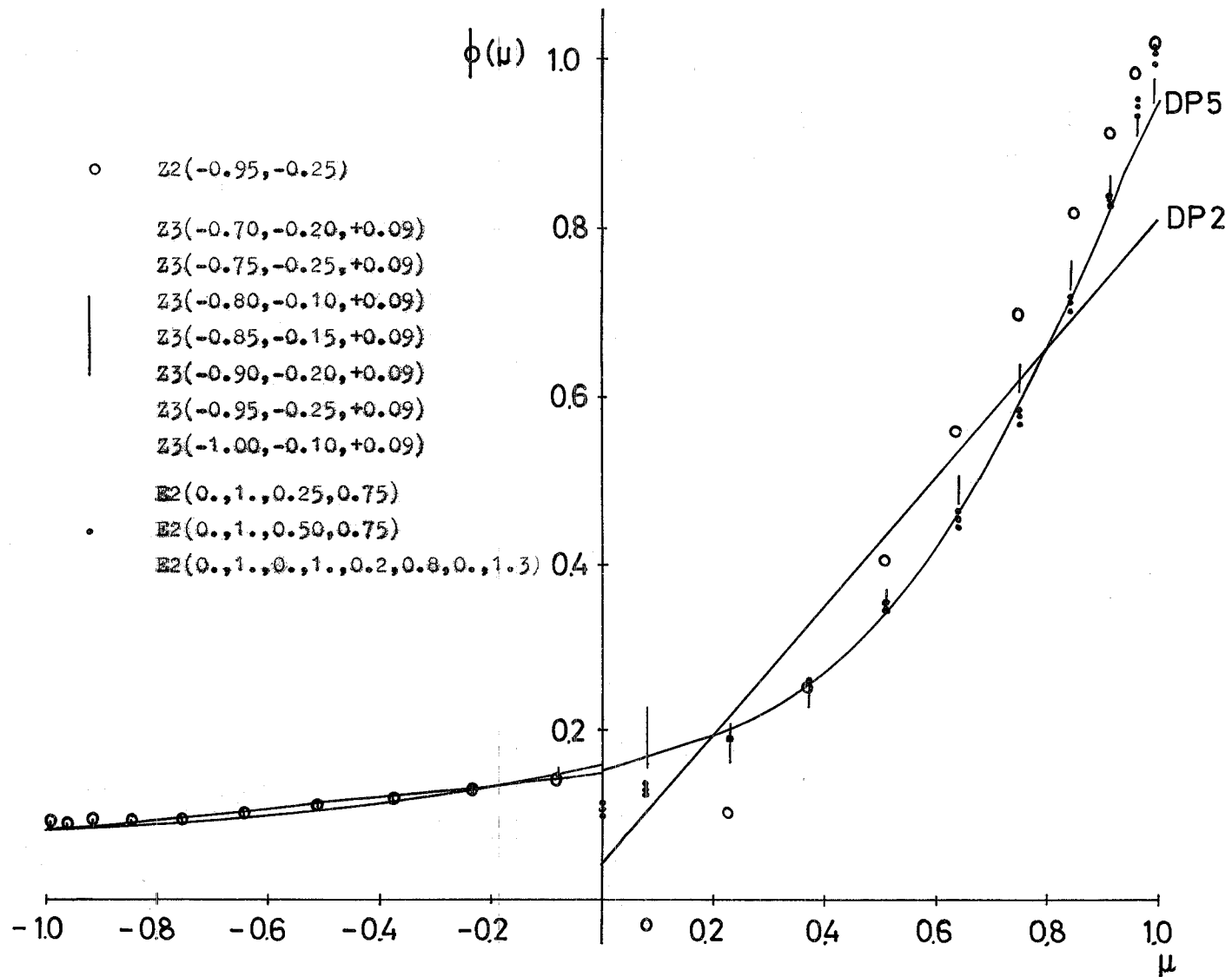


Abb.13 Winkelverteilung in der Plattenmitte (10 cm Platte)

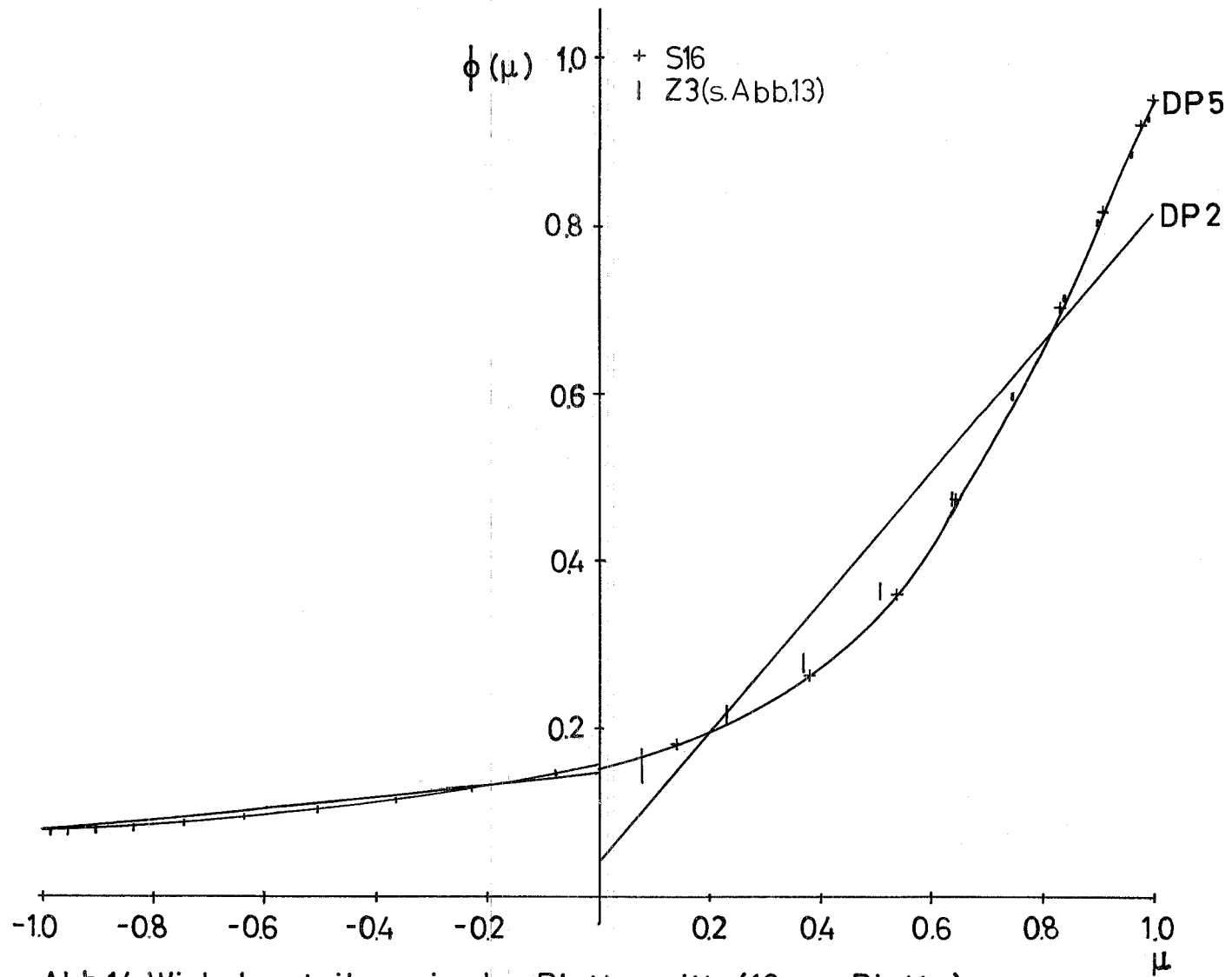


Abb.14 Winkelverteilung in der Plattenmitte(10cm-Platte)
(Ungestrene Neutronen exakt)

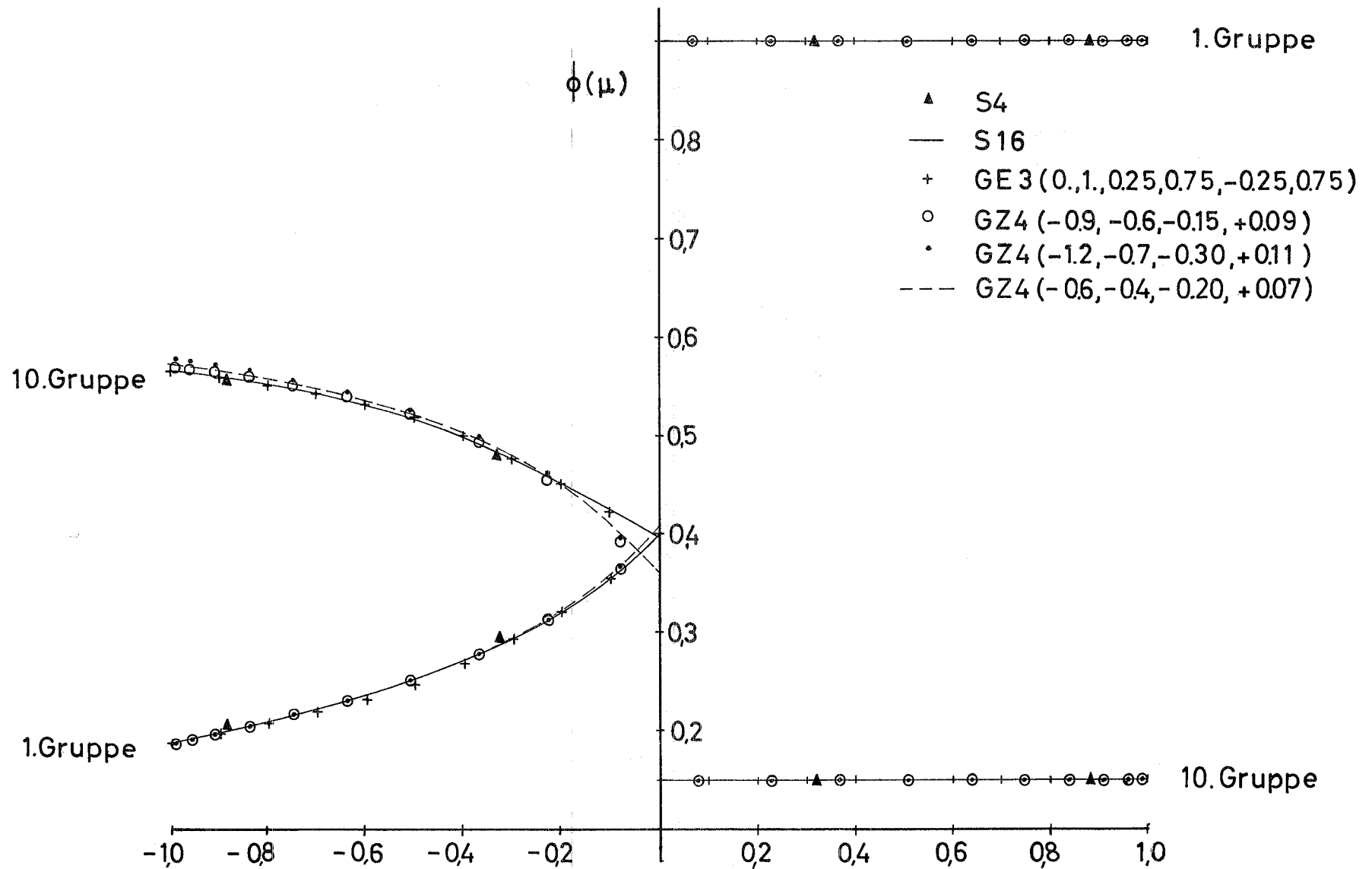


Abb.15 Winkelverteilung am Anfang der 10cm- Natururanplatte
(1. und 10. Gruppe)

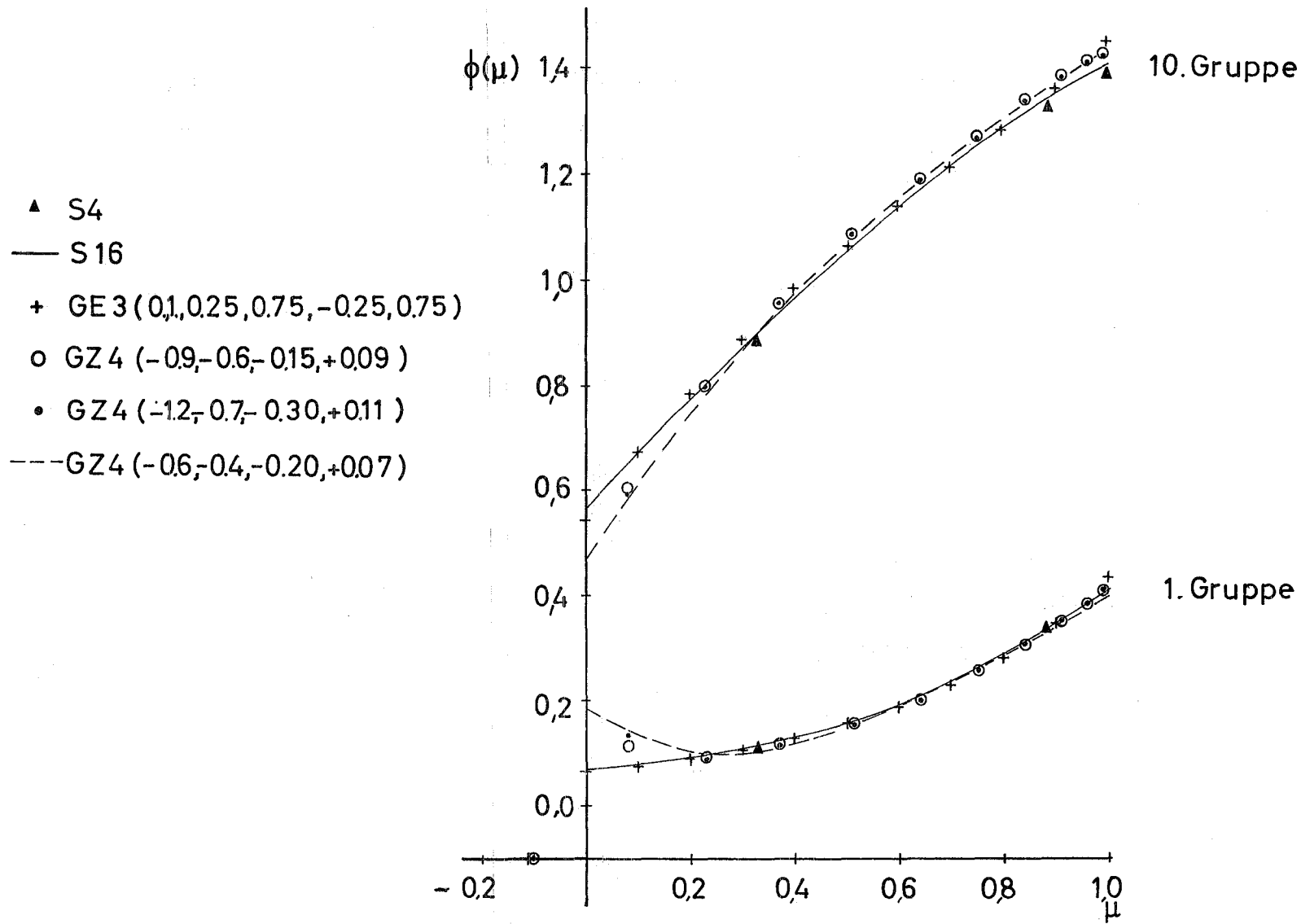


Abb.16 Winkelverteilung am Ende der 10cm-Natururanplatte
(1.und 10. Gruppe)

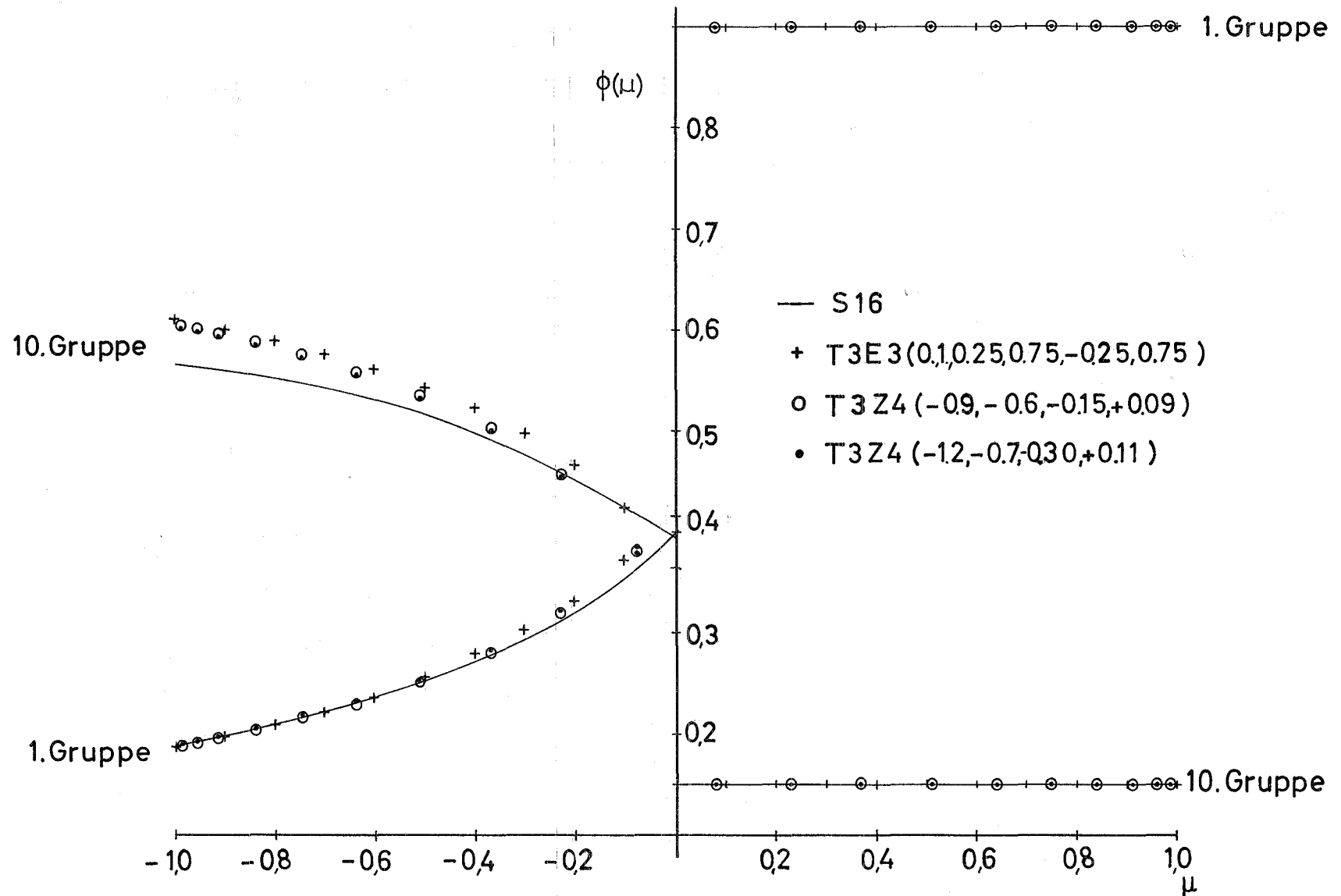


Abb.17 Winkelverteilung am Anfang der 10cm-Natururanplatte
(1.und 10. Gruppe)

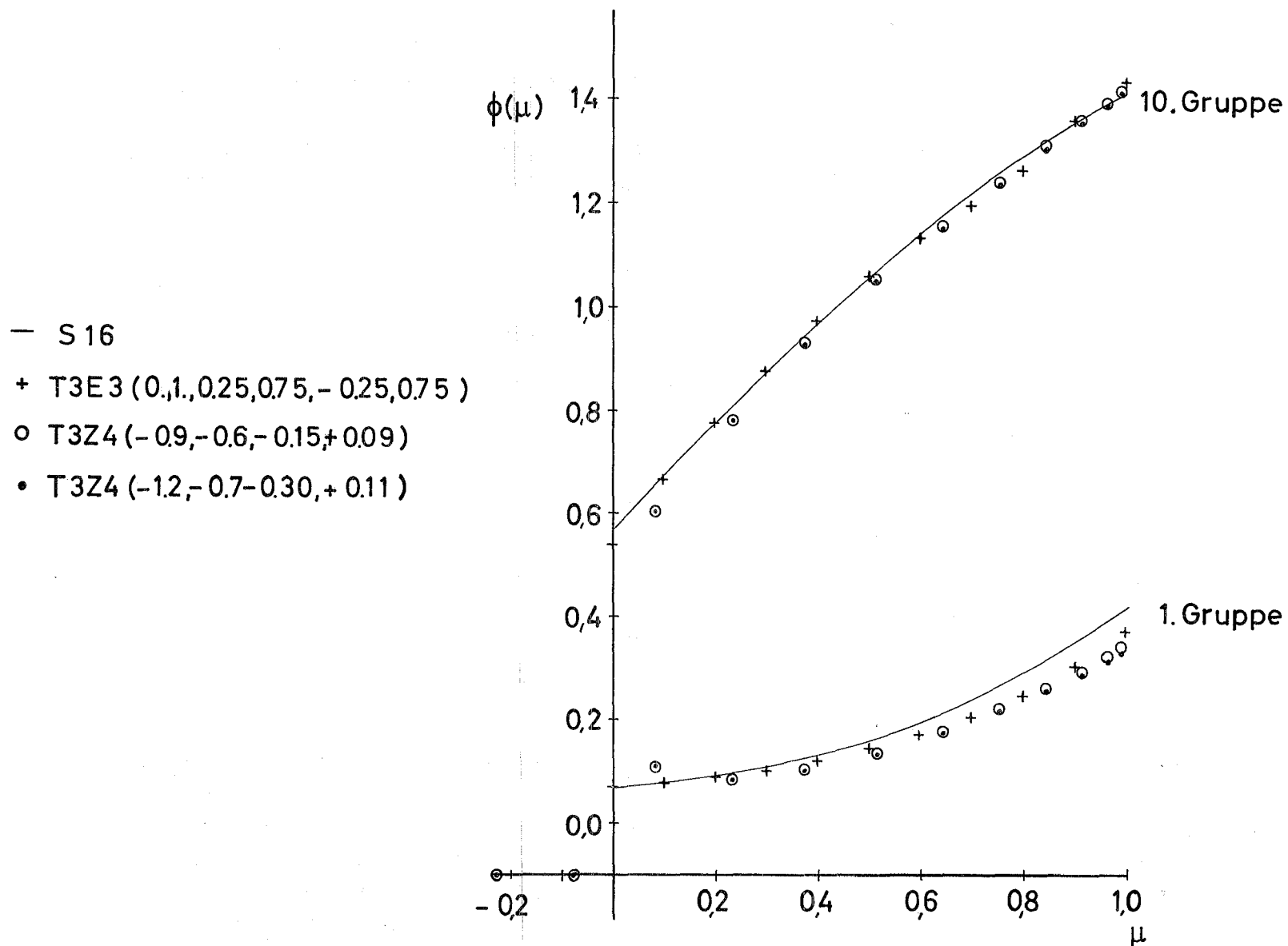


Abb.18 Winkelverteilung am Ende der 10cm - Natururanplatte
 (1.und 10.Gruppe)

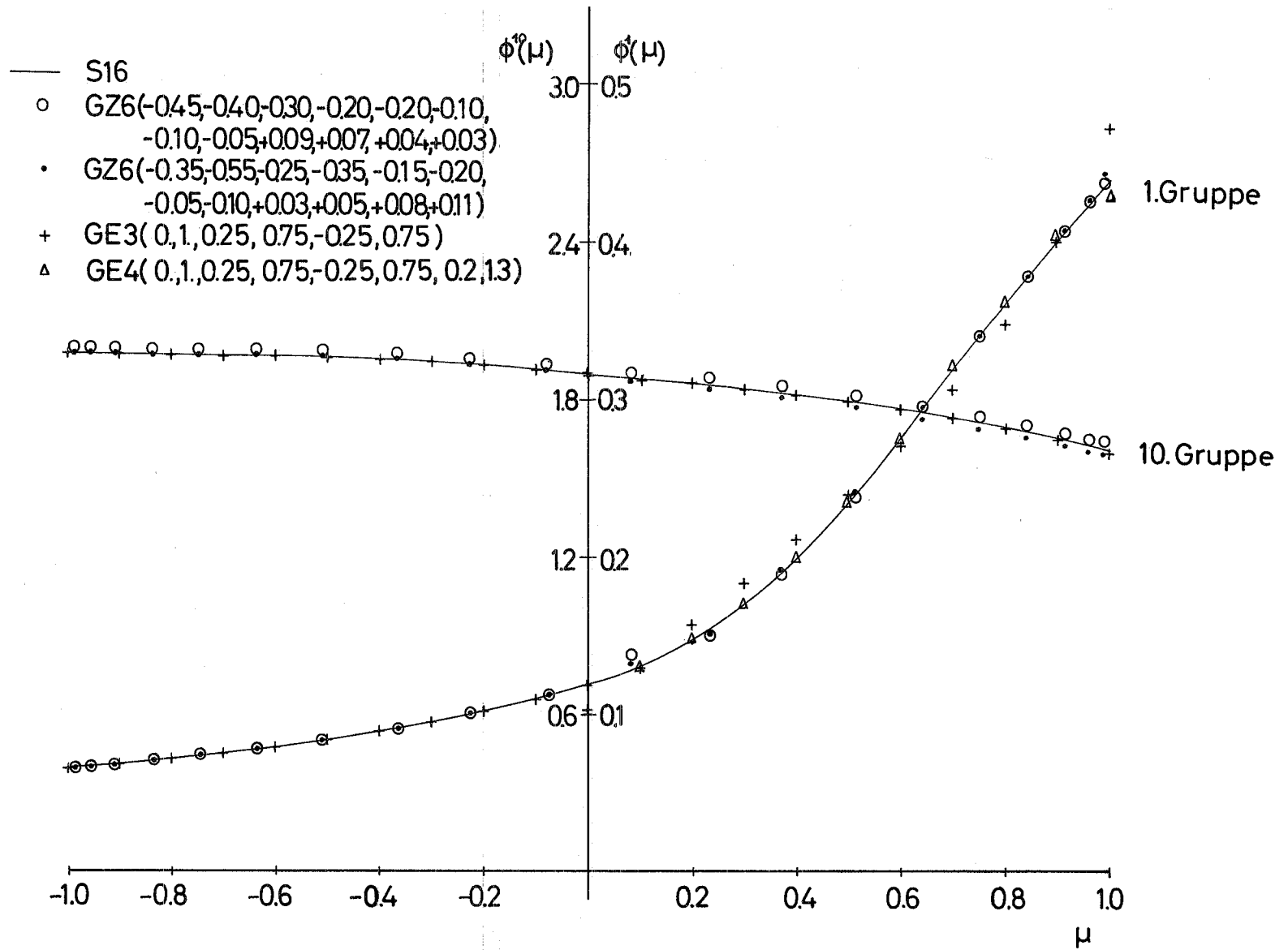


Abb.19 Winkelverteilung 5cm tief in der 50cm-Natururanplatte (1. und 10. Gruppe)

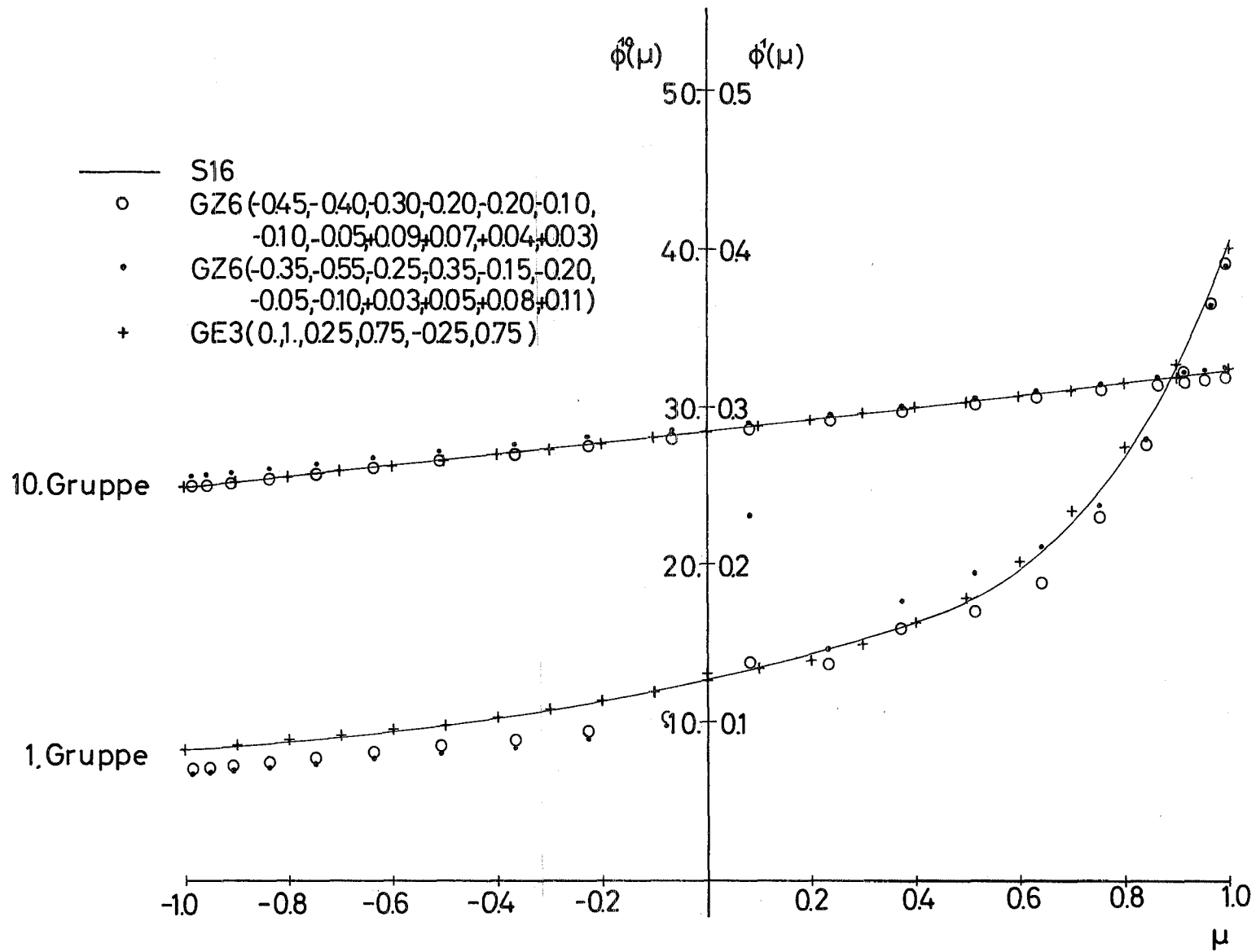


Abb 20 Winkelverteilung 20cm tief in der 50cm-Natururanplatte
(1.und 10.Gruppe)

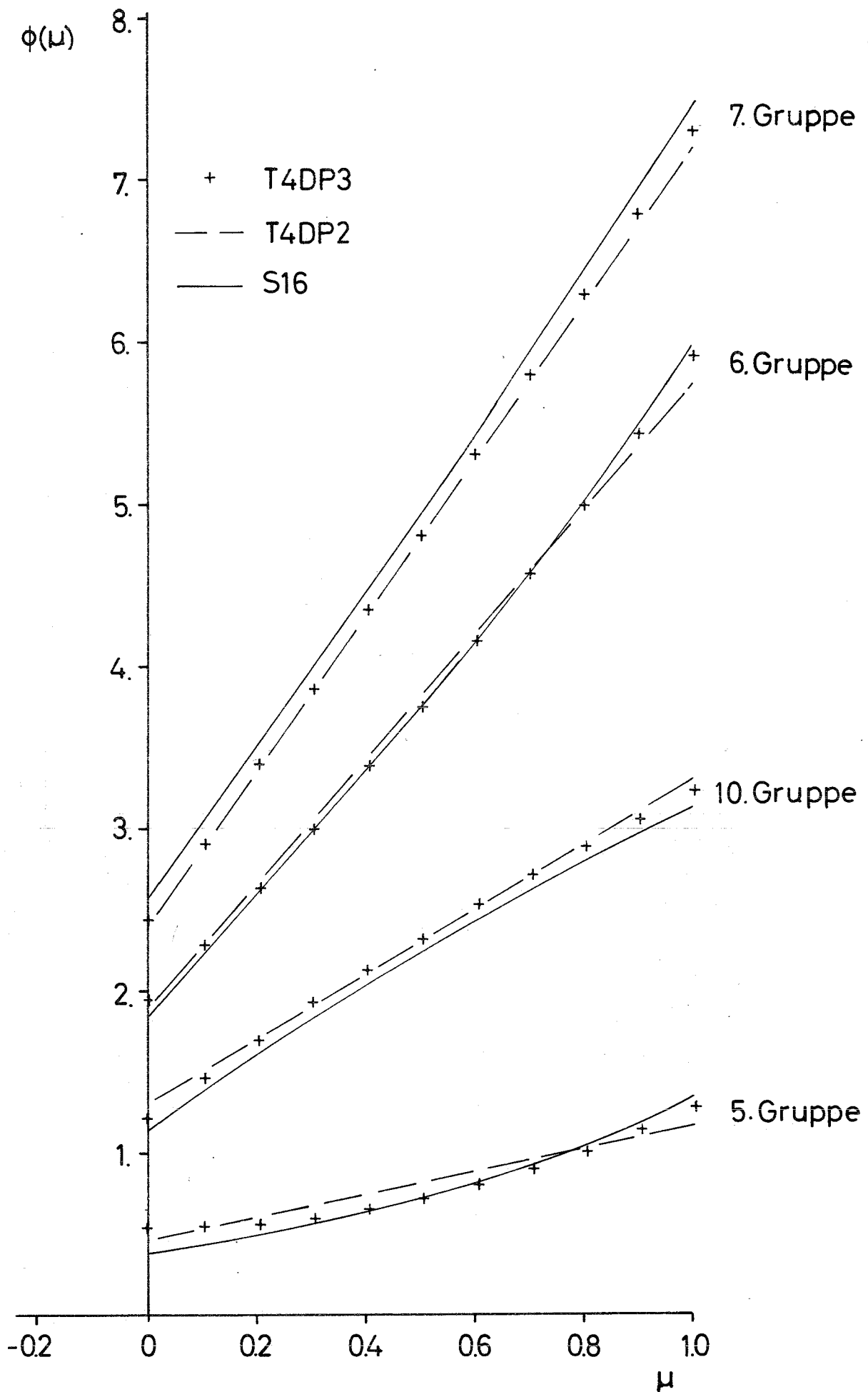


Abb.21 Winkelverteilung am Ende der Stahlschicht