

**KERNFORSCHUNGSZENTRUM  
KARLSRUHE**

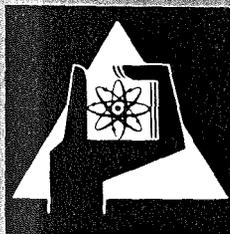
November 1976

KFK 2377

Institut für Neutronenphysik und Reaktortechnik

**Verbesserte Behandlung der anisotropen elastischen  
Neutronenstreuung durch konsistente  
Transportnäherungen energieabhängiger Ordnung**

H. W. Wiese



**GESELLSCHAFT  
FÜR  
KERNFORSCHUNG M.B.H.**

**KARLSRUHE**

Als Manuskript vervielfältigt

Für diesen Bericht behalten wir uns alle Rechte vor

GESELLSCHAFT FÜR KERNFORSCHUNG M. B. H.  
KARLSRUHE

KERNFORSCHUNGSZENTRUM KARLSRUHE

KFK 2377

Institut für Neutronenphysik und Reaktortechnik

VERBESSERTE BEHANDLUNG DER ANISOTROPEN ELASTISCHEN  
NEUTRONENSTREUUNG DURCH KONSISTENTE TRANSPORT-  
NÄHERUNGEN ENERGIEABHÄNGIGER ORDNUNG

---

von

H.W. Wiese

Dissertation genehmigt von der Fakultät für Maschinenbau  
der Universität Karlsruhe

Gesellschaft für Kernforschung mbH., Karlsruhe



## Zusammenfassung

Die vielfach zur Behandlung der anisotropen elastischen Neutronenstreuung in  $S_N$ -Reaktorrechnungen benutzten "extended transport approximations", die im einfachsten Fall die elastische Anisotropie mit Hilfe des mittleren Streukosinus  $\bar{\mu}$  im Transportquerschnitt  $\Sigma_{tr} = \Sigma_t - \bar{\mu}\Sigma_s$  beschreiben, werden durch konsistente Transportnäherungen höherer Ordnung durch Berücksichtigung der anisotropen Einstreuung bei der Bildung des Transportquerschnitts verbessert. Zur Berechnung der anisotropen Gruppenwirkungsquerschnitte werden verschiedene Wichtungsprozeduren im Resonanzbereich verglichen und bewertet. Die mit der Neutronenenergie zunehmende elastische Anisotropie einerseits und der bis etwa 3 MeV teilweise stark ausgeprägte Resonanzcharakter der Wichtungsfunktionen andererseits wird durch eine numerisch vorteilhafte Verwendung von Transportnäherungen energieabhängiger Ordnung verknüpft. Unter Anwendung der üblichen Wichtung bei schweren Materialien wird ein konsistenter Übergang vom Resonanzbereich der Strukturmaterialien zu dem der schweren Kerne erzielt. Es wird gezeigt: der Grobverlauf der Wichtungsfunktionen in einer 208-Gruppenfeineinteilung bei der Bildung der Gruppenquerschnitte ist vernachlässigbar, er ist jedoch von Bedeutung bei der ortsabhängigen Kondensation auf wenige Energiegruppen. Für die Anordnung ZPRIII-56B wird mit den beschriebenen Methoden und mit konsistent verbesserten Transportquerschnitten des KFKINR-Gruppenkonstantensatzes  $k_{eff} = 1.0066$  ermittelt. Bei der Vorhersage von gerichteten Neutronenspektren in einer kleinen Lithiumkugel mit 14 MeV-Neutronenquelle wird eine Genauigkeit von 20 % im Vergleich zum Experiment erzielt.

## Improved Treatment of Anisotropic Elastic Neutron Scattering with Consistent Transport Approximations of Energy-Dependent Order

### Abstract

For the treatment of anisotropic elastic neutron scattering in  $S_N$  reactor calculations extended transport approximations are widely used, which in the simplest case describe the elastic anisotropy by the mean elastic-scattering cosine  $\bar{\mu}$  in the transport cross section  $\Sigma_{tr} = \Sigma_t - \bar{\mu}\Sigma_s$ . In the present paper this approximation is improved by higher-order transport approximations with transport cross sections that consistently take into account anisotropic neutron inscattering. The quality of different weighting procedures for the generation of anisotropic group constants in the resonance region is assessed. Elastic anisotropy increasing with neutron energy on one hand and weighting functions with resonance structure up to about 3 MeV on the other hand are connected by the use of numerically advantageous energy-dependent higher-order transport approximations. With the application of the usual heavy material weighting procedure a consistent transition from the structural-material resonance region to the heavy-material resonance region is achieved. It is shown: in a fine group structure of 208 energy groups the macroscopic shape of the weighting functions may be neglected, this shape however, is important in case of collapsing to coarse groups in different spatial zones. For the critical assembly ZPRIII-56B the above-mentioned methods together with consistently improved transport cross sections of the KFKINR group constant set yield  $k_{eff} = 1.0066$ . The prediction of directional neutron spectra in a small lithium sphere with a 14 MeV neutron source is successful within an accuracy of 20 % with respect to experimental measurements.

## INHALTSVERZEICHNIS

=====

	Seite
1. Einleitung.....	1
2. Die Boltzmann'sche Neutronentransportgleichung (BG) mit anisotroper elastischer Streuung.....	6
3. Die Multigruppenform der Neutronentransportgleichung bei Legendre-Darstellung des diff. elastischen Streuwirkungsquerschnitts.....	11
4. Näherungen der Multigruppentransportgleichung unter Berücksichtigung der anisotropen elast. Streuung	
4.1 Einführung.....	13
4.2 Die $S_N$ - $P_L$ -Näherung.....	15
4.3 Transportnäherungen höherer Ordnung.....	19
4.4 Approximationen für den Transportquerschnitt.....	26
4.5 Transportnäherungen energieabhängiger Ordnung.....	33
5. Berechnung mikroskopischer elastischer Streumatrizen $\sigma_{\ell}^{g' \rightarrow g}$ und totale Gruppenwirkungsquerschnitte $\sigma_{t,\ell}^g$ - das Programm FLUMMI	
5.1 Einführung.....	34
5.2 Zusammenstellung und Diskussion der berechneten Größen; Beschränkung auf $\ell \leq 5$ .....	34
5.3 Numerische Integrationen in FLUMMI.....	39
6. Untersuchung des Einflusses der Wichtung auf 208-Gruppenwirkungsquerschnitte $\sigma_{t,\ell}^g$ und $\sigma_{\ell}^{g' \rightarrow g}$	
6.1 Einführung.....	43
6.2 Einfluß der Grobwichtung bei Eisen.....	44
6.3 Einfluß der Feinstrukturwichtung bei Eisen.....	45
6.4 Feinstrukturwichtungen proportional $1/\Sigma_{tr}^{\ell+1}$ und $1/\Sigma_t^{\ell+1}$ für $\ell > 0$ bei Eisen.....	46
6.5 Feinstrukturwichtung proportional $1/\Sigma_t$ für alle $\ell = 0,1,2,\dots$ (Flußwichtung) bei Eisen.....	48
6.6 Einfluß der Feinstrukturwichtung bei Sauerstoff und Natrium.	49

	Seite
7. Die kritische Anordnung ZPRIII-56B	
7.1 Problemstellung.....	51
7.2 Ausgangsdaten und verwendete Methoden.....	52
7.3 Ergebnisse der Rechnungen für ZPRIII-56B.....	54
8. Lithiumkugel mit zentraler 14 MeV-Neutronenquelle	
8.1 Problemstellung.....	63
8.2 Diskussion des zur Spektrumsberechnung verwendeten Ver- fahrens.....	65
8.3 Berechnete Neutronenspektren, Vergleich zum Experiment bei r = 10 cm und r = 35.5 cm .....	68
8.4 Einfluß anisotroper Näherungen bei der Berechnung von Neutroneneinfangraten.....	68
9. Zusammenfassung.....	71
10. Referenzen.....	78
11. Abbildungen.....	80
12. Anhang	
A. Darstellung differenzieller elastischer Streuwirkungsquer- schnitte durch abgebrochene Entwicklungen nach Legendre- Polynomen.....	116
B. Elastische Streuquelle und totale Stoßdichte im Multi- gruppenbild; Bildung anisotroper Gruppenwirkungsquer- schnitte; Wichtungsfunktionen.....	123
C. Überlegung zur Gültigkeit der "extended transport approximation".....	133
D. Ein verbessertes Integrationsverfahren zur Bestimmung von stoßdichte- und feinstrukturgewichteten Gruppenwirkungs- querschnitten.....	136
E. Kubisch-quadratisch-lineare Interpolation unter Vermeidung zusätzlicher Extremstellen.....	140

## 1. Einleitung

Die Ausbreitung von Neutronen mit Energien oberhalb etwa 100 keV wird wesentlich durch die anisotrope elastische Streuung bestimmt. Dies trifft besonders zu in Bereichen neutronenphysikalischer Anordnungen, in die Neutronen vornehmlich aus angrenzenden Bereichen einströmen. Solche Bereiche sind z.B. die Randzonen schneller Reaktoren, Teilgebiete stark heterogener Cores bei internen Brütern, Blankets von Fusionsreaktoren und Abschirmungen. Ebenfalls eine wichtige Rolle spielt die anisotrope Streuung in kleinen experimentellen Anordnungen, in denen die Leckage hochenergetischer Neutronen für die Gesamtneutronenbilanz von ausschlaggebender Bedeutung ist. So führt z.B. die Berechnung des hochenergetischen Neutronenspektrums in einer Lithiumkugel von 1 m Durchmesser mit zentraler 14 MeV-Neutronenquelle zu erheblichen Diskrepanzen im Vergleich zur Messung /1/, wenn die in Reaktorrechnungen häufig benutzte, vereinfachte Darstellung der anisotropen Streuung über den mittleren Kosinus des Streuwinkels,  $\bar{\mu}$ , im Transportquerschnitt  $\sigma_{tr} = \sigma_t - \bar{\mu}\sigma_s$  benutzt wird. Diskrepanzen zur Messung ergeben sich auch bei der Interpretation spezieller experimenteller Anordnungen wie z.B. der reflektierten kritischen Anordnung ZPR III-563 /18/, wenn diese meist Transportnäherung genannte Näherung zur Bestimmung von  $k_{eff}$  eingesetzt wird /20/. Dies ist, obwohl nicht unmittelbar übertragbar, wichtig für die Behandlung kompakter schneller Anordnungen wie z.B. KNK II auf dem Gelände des Kernforschungszentrums Karlsruhe.

In der Transportnäherung wird über  $\bar{\mu}$  die anisotrope elastische Streuung bis zum ersten Moment des Streuwirkungsquerschnitts im Rahmen einer Kugelfunktionsentwicklung in einer die Neutronenleckage meist überschätzenden Vereinfachung berücksichtigt. Das am häufigsten zur verbesserten Behandlung der anisotropen Streuung angewendete Verfahren besteht naheliegenderweise darin, eine nach wenigen, meist drei oder fünf Gliedern abgebrochene Legendre-Darstellung des Streuwirkungsquerschnitts zu benutzen. Die numerische Lösung der Neutronentransport-

gleichung wird dabei wie auch im Rahmen der Transportnäherung mit dem für Reaktorrechnungen bewährten  $S_N$ -Verfahren /3/ vorgenommen, mit dem als notwendige Voraussetzung für eine zuverlässige Behandlung der anisotropen Streuung die Berücksichtigung der Anisotropie der Neutronenflußdichte sichergestellt ist. Dieses meist  $S_N$ - $P_L$ -Verfahren /4/ genannte Verfahren hat gegenüber dem konsistenten  $P_L$ -Verfahren /5/, bei dem sowohl der Streuwirkungsquerschnitt als auch die Neutronenflußdichte durch eine endliche Entwicklung nach Kugelfunktionen dargestellt werden, den Vorteil, daß häufig auftretende Randbedingungen wie z.B. die Vakuumrandbedingung besser realisiert werden können. Es hat jedoch neben der Vernachlässigung höherer Streumomente den Nachteil einer im Rahmen des Multigruppenformalismus inkonsistenten Bildung totaler Gruppenquerschnitte. Eine Verbesserung des  $S_N$ - $P_L$ -Verfahrens durch Reduzierung des Rechenaufwandes wurde 1974 von Maerker und Muckenthaler /6/ erzielt, indem der Umstand benutzt wurde, daß die Streuanisotropie mit der Neutronenenergie zunimmt und so bei der numerischen Lösung der Neutronentransportgleichung bei einer  $P_3$ - bis  $P_5$ -Darstellung des Streuwirkungsquerschnitts im MeV-Bereich eine  $P_1$ -Darstellung bei niedrigeren Energien ausreicht. Die bisher weitestgehende Verbesserung der Behandlung der anisotropen Streuung wurde von Bell, Hansen und Sandmeier /2/ 1967 durch Erweiterung der Transportnäherung vorgenommen. Kennzeichen dieses Verfahrens ist die volle Berücksichtigung der ersten  $L$  Streumomente, meist  $L \leq 5$ , und die näherungsweise Behandlung der Beiträge zur Streuung mit  $\ell > L$ , hier kurz mit Reststreuung bezeichnet. Im Rahmen dieser sog. "extended transport approximation" wird die Reststreuung durch die Restausstreuung approximiert, genauer:

$$(1.1) \int dE' \Sigma_{\ell}(E', E) \psi_{\ell}(E') \approx \int dE' \Sigma_{\ell}(E, E') \psi_{\ell}(E) \text{ für } \ell > L.$$

Einige spezielle Fragestellungen im Zusammenhang mit der Berücksichtigung der anisotropen elastischen Streuung in Multigruppentransportrechnungen wurden von Becker, Gibbs, Ginsberg, Malaviya und Küsters /7/, /8/, /9/, /10/ untersucht. Im Multigruppenbild stellt sich das Problem,

die bei Beginn der Rechnung naturgemäß unbekannte Energieabhängigkeit der Neutronenflußdichte zur Bildung von Gruppenwirkungsquerschnitten näherungsweise zu berechnen. Die bei Legendre-Darstellung des Streuwirkungsquerschnitts als Wichtungsfunktionen anzugebenden Legendre-Momente der Neutronenflußdichte wurden von Ginsberg und Becker /7/ 1971 im Rahmen der "extended transport approximation" sowie von Küsters /8/ 1972 auf der Basis der  $P_L$ -Darstellung der Neutronentransportgleichung für zonenweise ebene Anordnungen abgeleitet. 1974 schlugen Gibbs, Becker und Malaviya /9/ ein iteratives Verfahren vor, die "iterated sequential transport approximation", mit dem der Einfluß der anisotropen Streuung auf die Wichtungsfunktionen gegenüber dem Verfahren in /7/ in der "extended transport approximation" verbessert berücksichtigt wird. In dieser Weise ermittelte Wichtungsfunktionen werden von Ginsberg in dessen 1974 erschienenen Arbeit /10/ über verbesserte transporttheoretische Methoden im Rahmen des  $S_N$ -Verfahrens verwendet.

Zur Erzielung einer einfachen und zuverlässigen Behandlung der anisotropen elastischen Neutronenstreuung in Multigruppen- $S_N$ -Transportrechnungen sind die folgenden Fragen zu klären:

1. Die Multigruppentransportgleichung in der von Bell, Hansen und Sandmeier /2/ eingeführten "extended transport approximation" beinhaltet bei der Behandlung der Reststreuung eine mit der Boltzmann-Gleichung inkonsistente Näherung zur Bildung des Transportquerschnitts. Es ist zu untersuchen, ob diese inkonsistente Option des Transportquerschnitts eine für Reaktorrechnungen ausreichende Näherung ist und für welche Anordnungen der von Küsters /8/ angegebenen konsistenten Option der Vorzug zu geben ist.
2. Zur Behandlung der anisotropen Streuung in Multigruppenrechnungen sind  $\ell$ -abhängige Gruppenquerschnitte zu bilden. Dies kann numerisch zuverlässig nur durch eine energieabhängige Ordnung der Legendre-Darstellung des Streuwirkungsquerschnitts erfolgen. Diese von der Physik des Streuprozesses naheliegende Behandlung soll in Erweiterung

des in /6/ angewendeten Verfahrens unter Berücksichtigung der Reststreuung erfolgen. Dies ist von Bedeutung für Strukturmaterialien wie Eisen und die wichtigen Reaktormaterialien Natrium und Sauerstoff.

3. Besonders wichtig für die Neutronenmoderation ist eine sorgfältige Behandlung des Resonanzbereiches der mittelschweren und leichteren Materialien. Für diese ist die energetische Resonanzselbstabschirmung in den Karlsruher Gruppenkonstantensätzen zu verbessern.
4. Es ist zu untersuchen, ob das aufwendigere Verfahren der "iterated sequential transport approximation" bei der Bestimmung von Gruppenquerschnitten zur Anwendung in Reaktorrechnungen eingesetzt werden muß oder ob das einfachere, von Küsters /8/ angegebene Verfahren für diesen Zweck ausreichend ist. Die Untersuchung soll außerdem ergeben, wie sich die Unsicherheiten in den nur näherungsweise bekannten Wichtungsfunktionen auf Gruppenquerschnitte auswirken.
5. Bei der zonenweisen Bildung der Gruppenquerschnitte wird der makroskopische, zonenabhängige Verlauf der Wichtung zweckmäßig durch die Stoßdichte beschrieben. Es stellt sich die Frage, ob diese Grobwichtung bei der Bildung anisotroper Gruppenquerschnitte in einer Feingruppeneinteilung von 200 - 300 Energiegruppen zur Vereinfachung der Querschnittsberechnung vernachlässigt werden kann.
6. Mit Hilfe dieser verbesserten Verfahren sollen die bisher ungeklärten Diskrepanzen bei der Interpretation von Neutronenspektrumsmessungen in einer Lithiumkugel mit zentraler 14 MeV-Neutronenquelle /1/ angegangen werden.
7. Ebenfalls sind die im Zusammenhang mit der Berechnung der kritischen Anordnung ZPR III-56B aufgetretenen Unstimmigkeiten zu experimentellen Ergebnissen /20/ zu untersuchen.

Auf der Grundlage der in den folgenden Kapiteln entwickelten Theorie zur Behandlung der anisotropen elastischen Neutronenstreuung wurde ein System von Rechenprogrammen erstellt. Die in den Punkten 1 - 7 angeführten Aufgaben werden geklärt.

## 2. Die Boltzmann'sche Neutronentransportgleichung (BG) mit anisotroper elastischer Streuung

In diesem Kapitel wird die in der vorliegenden Untersuchung für numerische Reaktorrechnungen in höheren Transportnäherungen zur Berücksichtigung der anisotropen elastischen Neutronenstreuung benutzte Darstellung der elastischen Streuquelle in der BG beschrieben.

Die Neutronenflußdichte  $\psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E)$  genügt in einer durch Geometrie, Neutronenquellen und Materialzusammensetzung gegebenen neutronenphysikalischen Anordnung der BG. Um die Behandlung der Anisotropie der elastischen Neutronenstreuung darzustellen, genügt es, die stationäre BG für eine homogene Reaktorzone zu betrachten:

$$(2.1) \quad \vec{\Omega} \nabla \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) + \Sigma_t(E) \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) \\ = \int_E^\infty dE' \int_{4\pi} d\vec{\Omega}' K_{el}(E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E') + Q(\vec{r}, \vec{\Omega}, E)$$

mit

- $E$  = Neutronenenergie im Laborsystem
- $\vec{r}$  = Ort der Neutronen
- $\vec{\Omega}$  = Flugrichtungseinheitsvektor
- $\Sigma_t(E)$  = totaler Neutronenwirkungsquerschnitt bei der Energie  $E$
- $K_{el}(E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega})$  = Streukern im Laborsystem für elastische Neutronenstreuung mit  $E', \vec{\Omega}'$  und  $E, \vec{\Omega}$  als Energie- und Flugrichtung der Neutronen vor bzw. nach der Streuung
- $Q(\vec{r}, \vec{\Omega}, E)$  = inelastische Streuquelle, neutroneninduzierte Spaltquelle und äußere Quelle (Spontanspaltquelle, Ra-Be-Quelle u.ä.) zusammengefaßt.

Denn in Reaktorrechnungen für Anordnungen mit heterogener Materialzusammensetzung, wie sie z.B. in schnellen Reaktoren im Übergang Core/Blanket oder in thermischen Reaktoren durch die Anordnung Brennstoff/

Hülle/Moderator vorliegt, wird die Neutronenflußdichte  $\psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E)$  in jeweils homogenen Bereichen bestimmt und über Randbedingungen mit dem  $\psi$  des nächsten Bereichs verknüpft. Für die Bestimmung der Neutronenflußdichte  $\psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E)$  aus der BG (2.1) unter Beachtung gegebener Randbedingungen wird eine Darstellung des Streukerns  $K_{el}(E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega})$  gesucht, die für numerische Rechnungen bei anisotroper elastischer Streuung vorteilhaft ist.

Bei elastischer Streuung sind nach Definition die kinetische Energie und der Impuls Erhaltungsgrößen. Bei Streuung an einem Atomkern mit dem Atomgewicht  $A$ , bezogen auf das Neutron, hat dies zur Folge, daß der Kosinus des Streuwinkels im Laborsystem,  $\cos \theta_{\text{Labor}} \equiv \mu_0$ , üblicherweise kurz Streukosinus genannt, mit den Neutronenenergien im Laborsystem vor und nach dem Stoß,  $E'$  und  $E$ , durch

$$(2.2) \quad \mu_0 = \frac{A+1}{2} \sqrt{\frac{E}{E'}} - \frac{A-1}{2} \sqrt{\frac{E'}{E}}$$

verknüpft ist. Mit  $\Sigma_{el}^A(E' \rightarrow E)$  als differentiellen Wirkungsquerschnitt für elastische Streuung im Laborsystem von der Neutronenenergie  $E'$  zur Energie  $E$  ergibt sich für den elastischen Streukern bei einem reinen Material aus Atomen mit der Massenzahl  $A$  die bekannte /27/ Darstellung

$$(2.3) \quad K_{el}^A(E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) = \frac{1}{2\pi} \Sigma_{el}^A(E' \rightarrow E) \delta[\vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}' - \mu_0^A(E', E)]$$

mit

$$(2.4) \quad \int_0^{E'} dE \int_{4\pi} d\Omega K_{el}^A(E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) = \int_0^{E'} dE \Sigma_{el}^A(E' \rightarrow E) = \Sigma_{el}^A(E')$$

$\Sigma_{el}^A(E')$  ist der totale elastische Streuwirkungsquerschnitt bei der Neutronenenergie  $E'$ . Aus (2.2) mit  $\Sigma_{el}^A(\mu_0, E')$  als differentiellen Wirkungsquerschnitt für elastische Streuung im Laborsystem von der Neutronenenergie  $E'$  und dem Streuwinkel  $\theta$  mit  $\cos \theta = \mu_0$  folgt weiter, daß

$$(2.5) \quad \Sigma_{el}^A(E' \rightarrow E) = 2\pi \Sigma_{el}^A(\mu_0, E) \frac{d\mu_0^A(E', E)}{dE}$$

Damit ist

$$(2.6) \quad K_{el}^A(E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) = \Sigma_{el}^A(\mu_0, E') \frac{d\mu_0^A(E', E)}{dE} \delta \left[ \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}' - \mu_0^A(E', E) \right].$$

Bei einer Mischung aus mehreren Materialien ist über die einzelnen Materialien zu summieren. In der Darstellung (2.6) ist  $K_{el}^A$  aufgespalten in einen analytischen Anteil, der das Grobcharakteristikum des elastischen Streuprozesses enthält: die Erhaltung der kinetischen Energie und des Impulses, und in den durch experimentelle nukleare Daten gegebenen Teil  $\Sigma_{el}^A(\mu_0, E)$ , der die für den Atomkern A spezifischen Streueigenschaften beinhaltet, nämlich die durch die mikroskopische Struktur des Atomkerns bedingte Energie- und Winkelabhängigkeit (Anisotropie) des Streuprozesses.

Untersucht man mit dem Ziel einer weitergehenden, die numerische Behandlung vereinfachenden analytischen Darstellung von  $K_{el}^A$  die Winkelabhängigkeit des elastischen Streuprozesses, kann man zeigen - Anhang A -, daß aus theoretischen Gründen der differentielle elastische Streuwirkungsquerschnitt im Laborsystem  $\Sigma_{el}^A(\mu_0, E)$ , für die hier betrachteten Anwendungszwecke im Energiebereich unterhalb 15 MeV in guter Näherung durch eine abgebrochene Entwicklung nach Legendre-Polynomen  $P_\ell(\mu_0)$  dargestellt werden kann:\*

$$(2.7) \quad \Sigma_{el}^A(\mu_0, E) = \sum_{\ell=0}^{L^A} \frac{2\ell+1}{4\pi} \Sigma_\ell^A(E) \cdot P_\ell(\mu_0)$$

mit

$$(2.8) \quad \Sigma_\ell^A(E) \equiv 2\pi \int_{-1}^{+1} d\mu_0 \Sigma_{el}^A(\mu_0, E) \cdot P_\ell(\mu_0).$$

Man kann zeigen - Anhang A -, daß die benötigte maximale Legendre-Ordnung  $L^A$  in (2.7) eine zunehmende Funktion der Neutronenenergie ist:

$$(2.9) \quad L^A = L^A(E) \text{ mit } L^A(E) \leq L^A(E') \text{ für } E < E'$$

Dies ist ein Ausdruck der mit der Energie zunehmenden Anisotropie der elastischen Streuung. Die durch numerische Analyse differentieller elastischer Streuwirkungsquerschnitte der Karlsruher Kerndatenbibliothek KEDAK /11/

\* Da  $\Sigma$  in der Reaktorphysik makroskopische Wirkungsquerschnitte bezeichnet, wird in dieser Arbeit  $\tilde{\Sigma}$  anstelle von  $\Sigma$  als Summationszeichen verwendet.

für einige wichtige Reaktormaterialien ermittelten  $L^A(E)$ -Werte sind in den Tab. A2 - A5 zusammengestellt. Für Neutronenenergien unterhalb 10 MeV (Spaltreaktoren) ist für leichte Kerne ( $A \leq 25$ )  $L^A(E) \leq 7$ ; für mittelschwere und schwere Kerne ( $A > 25$ ) ist  $L^A(E) \approx 10$ . Für das im Blanket von Fusionsreaktoren, einem in dieser Untersuchung betrachteten Anwendungsbeispiel, verwendete Li-7 wird für  $E \leq 15$  MeV eine maximal benötigte Legendre-Ordnung  $L^{Li-7}(E) \leq 5$  ermittelt.

Um die Legendre-Darstellung von  $\Sigma_{el}^A(\mu_0, E)$  in die elastische Streuquelle der BG (2.1),

$$(2.9) \quad Q_{el}(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) = \int_E^\infty dE' \int_{4\pi} d\Omega' K_{el}(E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E')$$

einzuführen, verwenden wir  $K_{el}$  gemäß (2.6) (der Materialindex A wird zur Vereinfachung der Schreibweise im folgenden weggelassen) und die Darstellung der  $\delta$ -Funktion /12/

$$(2.10) \quad \delta[\vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}' - \mu_0] = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{2} P_\ell(\vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') \cdot P_\ell(\mu_0).$$

Damit ist

$$(2.11) \quad Q_{el}(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{2} \int_E^\infty dE' \frac{d\mu_0(E', E)}{dE'} \Sigma_{el}[\mu_0(E', E), E'] \cdot P_\ell[\mu_0(E', E)] \cdot \int_{4\pi} d\Omega' P_\ell(\vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E').$$

Dieser Ausdruck läßt sich vereinfachen, wenn wir die Identität

$$(2.12) \quad 2\pi \Sigma_{el}[\mu_0(E', E), E'] \frac{d\mu_0(E', E)}{dE'} P_\ell[\mu_0(E', E)] = \frac{d}{dE} \int_{-1}^{\mu_0(E', E)} d\mu_0 2\pi \Sigma_{el}(\mu_0, E') P_\ell(\mu_0), \quad \ell = 0, 1, 2, \dots$$

benutzen und

$$(2.13) \quad \Sigma_\ell(E', E) \equiv \frac{d}{dE} 2\pi \int_{-1}^{\mu_0(E', E)} d\mu_0 \Sigma_{el}(\mu_0, E') P_\ell(\mu_0), \quad \ell = 0, 1, 2, \dots$$

setzen. Dann ist

$$(2.14) \quad Q_{el}(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{4\pi} \int_E^{\infty} dE' \Sigma_{\ell}(E', E) \int_{4\pi} d\Omega' P_{\ell}(\vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E')$$

Wir erkennen, daß das Integral über die durch (2.13) definierte Größe  $\Sigma_{\ell}(E', E)$  wegen  $\mu_0(E', E') = 1$  nach  $\mu_0(E', \alpha E')$  mit  $\alpha = \left(\frac{A-1}{A+1}\right)^2$  über alle von der Energie  $E'$  durch elastische Streuung erreichbaren Endenergien  $E$  gleich ist dem Legendre-Moment  $\Sigma_{\ell}(E')$  nach (2.8):

$$(2.15) \quad \int_{\alpha E'}^{E'} dE \Sigma_{\ell}(E', E) = 2\pi \int_{-1}^{+1} d\mu_0 \Sigma_{el}(\mu_0, E') P_{\ell}(\mu_0) = \Sigma_{\ell}(E').$$

Für  $\Sigma_{\ell}(E')$  gilt aber wegen (2.7) und (2.8) für  $E' \leq 15$  MeV

$$(2.16) \quad \Sigma_{\ell}(E') \approx 0 \text{ für } \ell \geq 10$$

In der im folgenden Kapitel behandelten Multigruppenform der BG treten aufgrund der beim Übergang im Multigruppenbild vorzunehmenden Energieintegrationen Integrale der Form (2.14) auf, die sich in Abhängigkeit von der Energiegruppeneinteilung teilweise über Teilintervalle  $(E'_1, E'_2) \subset (\alpha E', E')$  und damit über Teilintervalle  $(\mu_{0,1}, \mu_{0,2}) \subset (-1, +1)$  erstrecken. Im weiteren Verlauf der Untersuchung wird gezeigt werden, daß diese Integrale über Teilintervalle, die nach gewichteter Integration über die Einstreuenergien  $E'$  als Multigruppentransferquerschnitte in der Transportrechnung verwendet werden, näherungsweise entsprechend dem Verhalten (2.16) der  $\Sigma_{\ell}(E')$  für große  $\ell$  gegen Null streben. Das daraus resultierende Abbrechen der Summe über  $\ell$  in (2.14) ist der Grund für die Verwendung der Legendre-Darstellung des differentiellen elastischen Streuwirkungsquerschnitts bei der numerischen Lösung der BG unter Berücksichtigung der anisotropen elastischen Streuung.

3. Die Multigruppenform der Neutronentransportgleichung bei Legendre-  
Darstellung des differentiellen elastischen Streuwirkungsquerschnitts

Die numerische Bestimmung der Neutronenflußdichte aus der Neutronentransportgleichung erfolgt aufgrund des großen Rechenaufwandes bei der punktwweisen Berücksichtigung der Energievariablen - wegen der Resonanzstruktur der Wirkungsquerschnitte der schweren Atomkerne mehr als 100 000 Energiestützstellen - meist im Multigruppenbild. Dabei wird der bei der Berechnung von Reaktoren zu berücksichtigende Energiebereich von 0.001 eV bis etwa 15 MeV in Energieintervalle  $(E_g, E_{g-1})$ ,  $g = 1, 2, \dots, G$ , Energiegruppen genannt, unterteilt;  $G$  ist die Anzahl der Energiegruppen. Der Übergang in das Multigruppenbild erfolgt durch Integration der energieabhängigen BG (2.1) über jede der  $G$  Energiegruppen. Es wird so ein gekoppeltes System von  $G$  Integro-Differentialgleichungen gebildet, in denen als Lösungsfunktionen, entsprechend den energieabhängigen Neutronenflußdichten  $\psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E)$  in der BG (2.1), die Gruppenflußdichten

$$(3.1) \quad \psi^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) \equiv \int_{E_g}^{E_{g-1}} dE \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E), \quad g = 1, 2, 3, \dots, G$$

auftreten. Bei gruppenweiser Erhaltung der Reaktionsraten ergeben sich als Koeffizienten des Multigruppen-Gleichungssystems die sog. Gruppenwirkungsquerschnitte, zu bilden als Energiegruppenmittelwerte der energieabhängigen Neutronenwirkungsquerschnitte mit der Neutronenflußdichte  $\psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E)$  als Wichtungsfunktion.

Die Bildung der Gruppenwirkungsquerschnitte unter dem speziellen Aspekt der Anisotropie der elastischen Streuung wird im Anhang B behandelt. Man kann sich dabei auf die Diskussion zweier Terme der BG, der elastischen Streuquelle und der totalen Stoßdichte, beschränken. Es werden dort insbesondere die anisotropen Wirkungsquerschnitte im Gruppenbild für mehrdimensionale Geometrien diskutiert. Durch die zur Bildung der Gruppenwirkungsquerschnitte (und nur dazu!) vorgenommene Entwicklung der Neutronenflußdichte nach Legendre-Polynomen ergeben sich als Wichtungsfunktionen in der Vorschrift

zur Berechnung der anisotropen Gruppenquerschnitte die ortsabhängigen Legendre-Momente  $\psi_\ell(\vec{r}, E)$ . Im Anhang B wird die Elimination der Ortsabhängigkeit der Gruppenquerschnitte durch geeignete Ortszoneneinteilung des zu berechnenden Reaktors und die Approximation der zur Wichtung benutzten, bei der Querschnittsberechnung á priori unbekanntem Legendre-Momente auf der Basis eines zonenweise plattensymmetrischen Modells behandelt.

In diesem Modell zur näherungsweise Bestimmung der Wichtungsfunktionen ergeben sich als Gruppenwirkungsquerschnitte zur Berücksichtigung der Anisotropie der elastischen Streuung nach (B.25) und (B.15) bzw. (B.24) und (B.10)<sup>+</sup>

$$(3.2) \quad \Sigma_{t, \ell}^g = \int_g dE \Sigma_t(E) \psi_\ell(E) / \int_g dE \psi_\ell(E)$$

und

$$(3.3) \quad \Sigma_\ell^{g' \rightarrow g} = \int_{g'} dE' \Sigma_\ell(E' \rightarrow g) \psi_\ell(E') / \int_{g'} dE' \psi_\ell(E')$$

mit den Wichtungsfunktionen  $\psi_\ell(E)$ ,  $\ell = 0, 1, 2, \dots$  gemäß (B.28) oder (B.27).

Als Transportgleichung im Multigruppenbild erhalten wir unter Verwendung von (B.24), (B.25), (B.14), (B.13) und (B.5)

$$(3.4) \quad \vec{\Omega} \nabla \psi^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) + \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{4\pi} \Sigma_{t, \ell}^g \int_{4\pi} d\Omega' P_\ell(\vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') \psi^g(\vec{r}, \vec{\Omega}') \\ = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{4\pi} \sum_{g' \leq g} \Sigma_\ell^{g' \rightarrow g} \int_{4\pi} d\Omega' P_\ell(\vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') \psi^{g'}(\vec{r}, \vec{\Omega}') + Q^g(\vec{r}, \vec{\Omega})$$

$$g = 1, 2, 3, \dots, G$$

Im folgenden werden Näherungen von (3.4) untersucht, die die numerische Bestimmung der Gruppenflußdichten  $\psi^g(\vec{r}, \vec{\Omega})$  unter Berücksichtigung der anisotropen elastischen Streuung mit Hilfe des  $S_N$ -Verfahrens ermöglichen.

<sup>+</sup> Zur Vereinfachung der Schreibweise wird im folgenden  $\int_g dE$  abgekürzt.  $\int_{E_g}^{E_{g-1}} dE$  durch

#### 4. Näherungen der Multigruppentransportgleichung unter Berücksichtigung der anisotropen elastischen Streuung

##### 4.1 Einführung

Die hier diskutierten Transportnäherungen höherer Ordnung der Multigruppentransportgleichung sind Erweiterungen der bei nuklearen Rechnungen häufig benutzten Transportnäherung 1. Ordnung, welche die Anisotropie der Streuung über den mittleren Streukosinus berücksichtigt. Sie ermöglichen eine gegenüber der Transportnäherung 1. Ordnung verbesserte Behandlung der Anisotropie sowohl der Streuung als auch der Neutronenflußdichte. In diesem Kapitel wird die von Bell, Hansen und Sandmeier /2/ eingeführte "extended transport approximation" in der von Küsters /8/ vorgeschlagenen Form verbessert. Es wird dabei ein besonderes Augenmerk auf die physikalische Bedeutung der allein bei der konsistenten Bildung der Gruppenwirkungsquerschnitte vorzunehmenden Näherungen gerichtet.

Der Beschreibung des Prinzips der Transportnäherungen höherer Ordnung wollen wir die eindimensionale Multigruppentransportgleichung in ebener Plattengeometrie zugrunde legen. Mit der Plattennormalen als räumlicher x-Achse und als Bezugsrichtung für die Darstellung der Neutronenflugrichtung in Kugelkoordinaten  $\theta$  und  $\phi$  hängen die Gruppenflußdichten nur vom Ort  $x$  und von  $\cos \theta = \mu$  ab:  $\psi^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) \rightarrow \psi^g(x, \mu)$ ,  $Q^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) \rightarrow Q^g(x, \mu)$ . Unter Verwendung von (B.16) und (B.17) für die Streuquelle und die Stoßdichte werden also die Multigruppentransportgleichung in Plattengeometrie

$$\begin{aligned}
 & \mu \frac{\partial}{\partial x} \psi^g(x, \mu) + \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{2} P_{\ell}(\mu) \Sigma_{t, \ell}^g \int_{-1}^{+1} d\mu' \psi^g(x, \mu') P_{\ell}(\mu') \\
 (4.1) \quad & = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{2} P_{\ell}(\mu) \sum_{g'=1}^G \Sigma_{\ell}^{g' \rightarrow g} \int_{-1}^{+1} d\mu' \psi^g(x, \mu') P_{\ell}(\mu') + Q^g(x, \mu)
 \end{aligned}$$

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

mit nach (3.3) und (3.2) bestimmten Gruppenwirkungsquerschnitten  $\Sigma_{\ell}^{g' \rightarrow g}$  und  $\Sigma_{t,\ell}^g$  betrachtet. Zu beachten ist: In Gl. (4.1) ist die Winkelabhängigkeit der Stoßdichte und der Streuquelle jeweils durch eine Legendre-Entwicklung dargestellt - dies führt zu  $\ell$ -abhängigen Gruppenquerschnitten  $\Sigma_{t,\ell}^g$  und  $\Sigma_{\ell}^{g' \rightarrow g}$ ; eine Legendre-Entwicklung der Neutronenflußdichte wird jedoch nicht vorgenommen. Die Anisotropie der Neutronenflußdichte ist zwar i.a. durch eine Entwicklung nach Legendre-Polynomen darstellbar - man erhält dann das System der  $P_L$ -Gleichungen der Boltzmann-Gleichung /5/; hauptsächlich wegen der schwierigen Realisierungsmöglichkeit von Randbedingungen bei der  $P_L$ -Darstellung für kleine  $L$ , z.B. der Vakuumrandbedingung, wird jedoch meist das  $S_N$ -Verfahren benutzt, bei dem die Richtungsabhängigkeit der Neutronenflußdichte über eine Diskretisierung der Richtungen behandelt wird und das die bei nuklearen Rechnungen auftretenden Randbedingungen in einfacher Weise berücksichtigen kann.

Das für Reaktorrechnungen bewährte  $S_N$ -Verfahren, realisiert z.B. in den Rechenprogrammen DTK /13/ und SNØW /14/, wird als numerische Methode für die hier betrachteten Transportnäherungen höherer Ordnung zugrunde gelegt. Die Verwendung des  $S_N$ -Verfahrens bedeutet, daß die zu lösende Multi-gruppentransportgleichung (4.1) in die Form der Multigruppen- $S_N$ -Gleichungen

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} \phi^g(x, \mu) + C^g \cdot \phi^g(x, \mu)$$

(4.2)

$$= \sum_{\ell=0}^L \frac{2\ell+1}{2} P_{\ell}(\mu) \sum_{g'=1}^G M_{\ell}^{g' \rightarrow g} \int_{-1}^{+1} d\mu' \phi^{g'}(x, \mu') \cdot P_{\ell}(\mu') + Q^g(x, \mu)$$

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

mit Koeffizienten  $C^g$  und  $M_{\ell}^{g' \rightarrow g}$ , die zusammen mit Randbedingungen die zu berechnende neutronenphysikalische Anordnung charakterisieren, zu überführen ist. Die in der numerischen Rechnung vorgenommene Diskretisierung der Richtungsvariablen  $\mu$  und der Ortskoordinate  $x$  wird hier nicht mitgeschrieben.

Im folgenden werden Näherungen der Multigruppentransportgleichung (4.1) in der Form (4.2) gewonnen, die Koeffizienten  $C^g$  und  $M_{\ell}^{g' \rightarrow g}$  werden wie in /2/ durch Koeffizientenvergleich ermittelt.

#### 4.2 Die $S_N$ - $P_L$ -Näherung

Die häufig in Abschirmrechnungen verwendete  $S_N$ - $P_L$ -Näherung /4/ dient hier als Ausgangspunkt für die Herleitung der höheren Transportnäherungen.

Die totalen Gruppenwirkungsquerschnitte  $\Sigma_{t,\ell}^g$  unterscheiden sich nach (3.2) für verschiedene  $\ell$  durch die verschiedenen zur Wichtung benutzten (zonen-gemittelten) Legendre-Momente der Neutronenflußdichte,  $\psi_{\ell}(E)$ . Unter der Voraussetzung, daß die Momente  $\psi_{\ell}(E)$  für alle  $\ell$  in der Gruppe  $g$  dieselbe Energieabhängigkeit besitzen:

$$(4.3) \quad \psi_{\ell}(E) \approx \psi_0(E) \quad \text{für } \ell = 1, 2, \dots,$$

sind die  $\Sigma_{t,\ell}^g$  in der Gruppe  $g$  untereinander gleich:

$$(4.4) \quad \Sigma_{t,\ell}^g = \Sigma_{t,0}^g, \quad \ell = 1, 2, \dots; \quad g = 1, 2, \dots, G.$$

Die Gruppenstoßdichte in Gl. (4.1) reduziert sich dann auf  $\Sigma_{t,0}^g \cdot \psi^g(x, \mu)$ , da bei Entwickelbarkeit der Neutronenflußdichte nach Legendre-Polynomen

$$(4.5) \quad \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{2} P_{\ell}(\mu) \int_{-1}^{+1} d\mu' \psi^g(x, \mu') P_{\ell}(\mu') = \psi^g(x, \mu)$$

ist.

Setzt man weiter voraus, daß es ein  $L$  gibt, so daß

$$(4.6) \quad \Sigma_{\ell}^{g' \rightarrow g} \approx 0 \quad \text{für alle } \ell \geq L+1, \quad g', g = 1, 2, \dots, G,$$

so geht (4.1) über auf

$$(4.7) \quad \begin{aligned} & \mu \frac{\partial}{\partial x} \psi^g(x, \mu) + \Sigma_{t,0}^g \cdot \psi^g(x, \mu) \\ &= \sum_{\ell=0}^L \frac{2\ell+1}{2} P_{\ell}(\mu) \sum_{g'=1}^G \Sigma_{\ell}^{g' \rightarrow g} \int_{-1}^{+1} d\mu' \psi^g(x, \mu') P_{\ell}(\mu') + Q^g(x, \mu) \end{aligned}$$

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

Dies ist die sog.  $S_N$ - $P_L$ -Näherung der Multigruppentransportgleichung. Die Koeffizienten  $C^g$  und  $M_{\ell}^{g' \rightarrow g}$  in Gl. (4.2) bestimmen sich zu

$$(4.8) \quad \left\{ \begin{array}{l} C^g = \Sigma_{t,0}^g \\ M_{\ell}^{g' \rightarrow g} = \Sigma_{\ell}^{g' \rightarrow g}, \quad \ell = 0, 1, 2, \dots, L \end{array} \right\} \quad g, g' = 1, 2, \dots, G$$

Bei der  $S_N$ - $P_L$ -Näherung bleibt wegen (4.3) unberücksichtigt, daß - vgl. (B.28) - das  $\ell$ -te Moment der Neutronenflußdichte näherungsweise  $1/\Sigma_t^{\ell+1}(E)$  proportional ist, daß also in Energiegruppen mit stark fluktuierendem totalen Wirkungsquerschnitt  $\Sigma_t(E)$  Wichtungsfunktionen mit stark unterschiedlicher Energieabhängigkeit auftreten. Abb. 6.1 zeigt als Beispiel die daraus resultierende  $\ell$ -Abhängigkeit des mikroskopischen Querschnitts  $\sigma_{t,\ell}^g$  für reines Eisen für Neutronenenergien zwischen 1.0 und 2.4 MeV.

Ferner ist zu prüfen, ob (4.6) erfüllt ist. In Anhang A wird gezeigt, daß der differentielle elastische Streuwirkungsquerschnitt  $\Sigma_{el}(\mu_0, E)$  im Laborsystem durch eine abgebrochene Entwicklung nach Legendre-Polynomen dargestellt werden kann. Dies bedeutet, daß das totale  $\ell$ -te Legendre-Moment

von  $\Sigma_{el}(\mu_0, E)$  für hinreichend großes  $\ell$  verschwindet:

$$(4.9) \quad 2\pi \int_{-1}^{+1} d\mu_0 \Sigma_{el}(\mu_0, E) P_\ell(\mu_0) \approx 0 \text{ für große } \ell.$$

Da nach (B.2)  $\sum_g \Sigma_\ell(E \rightarrow g) = 2\pi \int_{-1}^{+1} d\mu_0 \Sigma_{el}(\mu_0, E) P_\ell(\mu_0)$ , gilt - vgl. dazu die Definition von  $\Sigma_\ell^{g' \rightarrow g}$  durch (3.3) - zunächst nur, daß die Summe

$$(4.10) \quad \sum_{g \geq g'} \Sigma_\ell^{g' \rightarrow g} \approx 0 \text{ für große } \ell.$$

Da die Transferquerschnitte  $\Sigma_\ell^{g' \rightarrow g}$  bei  $\ell > 0$  für verschiedene Einstreu-  
gruppen  $g$  verschiedene Vorzeichen annehmen können, sagt (4.10) allein  
nichts über das Verhalten einzelner  $\Sigma_\ell^{g' \rightarrow g}$  aus.

Es wurde beispielhaft das Verhalten der Transferquerschnitte  $\Sigma_\ell^{g' \rightarrow g}$  mit  
zunehmendem  $\ell$  für elastische Streuung von Neutronen mit Energien um  
7.5 MeV an den Materialien C, Na, Fe und U238 untersucht. Die berech-  
neten Werte sind in Tabelle 4.1 zusammengestellt. Der Vergleich der

$$\left| \Sigma_5^{1 \rightarrow g} / \Sigma_0^{1 \rightarrow g} \right| = \left| W_5^{1 \rightarrow g} / W_0^{1 \rightarrow g} \right|, \quad g = 1, 2, \dots$$

in der jeweils letzten Spalte von Tabelle 4.1 mit

$$\left| \sum_{g \geq 1} \Sigma_5^{1 \rightarrow g} / \sum_{g \geq 1} \Sigma_0^{1 \rightarrow g} \right| = W_5^1$$

in der jeweils vorletzten Spalte unten zeigt, daß in der Karlsruher  
208-Gruppen-Einteilung bei elastischer Streuung an Eisen und Uran  
(mittelschweres und schweres Element) die Transferquerschnitte  $\Sigma_\ell^{g' \rightarrow g}$   
näherungsweise mindestens ebenso schnell mit wachsenden  $\ell$  gegen Null  
streben wie die totalen  $\ell$ -ten Legendre-Momente  $\sum_{g \geq g'} \Sigma_\ell^{g' \rightarrow g}$  des Gruppen-

**Tabelle 4.1:** Normierte elastische Streuwirkungsquerschnitte  $w_{\ell}^{l \rightarrow g} = \Sigma_{\ell}^{l \rightarrow g} / \Sigma_{el}^l$  und totale normierte elast. Streuwirkungsquerschnitte  $w_{\ell}^l = \left| \sum_{g \geq 1} w_{\ell}^{l \rightarrow g} \right|$ ,  $\ell = 0, 1, \dots, 5$  für C, Na, Fe und U238

C

g/l	0	1	2	3	4	5	$\frac{w_5^{l \rightarrow g}}{w_0^{l \rightarrow g}}$
1	0.19588	0.18664	0.16535	0.13991	0.10833	0.07872	.405
2	0.27931	0.23423	0.15767	0.07164	-0.00146	-0.04654	.166
3	0.12284	0.07829	0.01457	-0.03431	-0.04719	-0.02695	.221
4	0.05484	0.02372	-0.01146	-0.02331	-0.00912	0.01039	.190
5	0.03828	0.00820	-0.01611	-0.01095	0.00746	0.01101	.289
6	0.03532	-0.00020	-0.01728	0.00030	0.01232	-0.00036	.010
7	0.04377	-0.00940	-0.01841	0.01255	0.00850	-0.01261	.288
8	0.05440	-0.02272	-0.01241	0.02303	-0.00763	-0.01154	.211
9	0.06652	-0.04151	0.00626	0.01978	-0.02518	0.01268	.191
10	0.08240	-0.06861	0.04531	-0.01941	-0.00216	0.01487	.181
11	0.02638	-0.02505	0.02254	-0.01914	0.01523	-0.01119	.433
$w_{\ell}^l$	0.9999	0.3636	0.3360	0.1601	0.0591	0.1845	

Na

g/l	0	1	2	3	4	5	$\frac{w_5^{l \rightarrow g}}{w_0^{l \rightarrow g}}$
1	0.49694	0.46144	0.39600	0.31431	0.22821	0.15114	.304
2	0.26748	0.20797	0.11871	0.03864	-0.00811	-0.02157	.081
3	0.07998	0.01998	-0.02966	-0.02331	0.00911	0.01817	.228
4	0.05478	-0.00625	-0.02440	0.00800	0.01394	-0.00748	.136
5	0.04390	-0.02488	0.00110	0.01205	-0.01069	0.00257	.059
6	0.05690	-0.04982	0.03778	-0.02412	0.01211	-0.00379	.067
$w_{\ell}^l$	0.9999	0.6084	0.4995	0.3256	0.2446	0.1372	

Fe

g/l	0	1	2	3	4	5	$\frac{w_5^{l \rightarrow g}}{w_0^{l \rightarrow g}}$
1	0.79079	0.72096	0.59975	0.45574	0.31644	0.20056	.253
2	0.18227	0.11746	0.06559	0.04700	0.02490	-0.00138	.008
3	0.02693	-0.01642	0.00593	-0.00350	0.00644	-0.00757	.281
$w_{\ell}^l$	0.9999	0.8220	0.6713	0.4992	0.3480	0.1916	

U238

g/l	0	1	2	3	4	5	$\frac{w_5^{l \rightarrow g}}{w_0^{l \rightarrow g}}$
1	0.95092	0.81293	0.71212	0.63430	0.55516	0.45874	.482
2	0.04907	0.00735	0.00285	0.00544	0.00807	0.00609	.124
$w_{\ell}^l$	0.9999	0.8203	0.7150	0.6397	0.5632	0.4648	

Gruppengrenzen in MeV: 7.714, 7.455, 7.204, 6.961, 6.727, 6.500, 6.278, 6.064, 5.858, 5.658, 5.465, 5.279

(Gruppengrenzen aus der Karlsruher 208-Gruppen-Einteilung)

querschnitts. Bei elastischer Streuung an den leichten Elementen Natrium und Kohlenstoff dagegen konvergieren die  $\Sigma_{\ell}^{g' \rightarrow g}$  teilweise, insbesondere die Diagonalelemente  $\Sigma_{\ell}^{g \rightarrow g}$ , schwächer als das totale Moment  $\sum_{g \geq g'} \Sigma_{\ell}^{g' \rightarrow g}$  gegen Null. Für schwere und mittelschwere Elemente ist damit (4.6) gleichbedeutend mit der Darstellbarkeit des differentiellen elastischen Streuwirkungsquerschnitts durch eine Legendre-Entwicklung bis zur Ordnung L. Für leichte Elemente dagegen muß L in (4.6) u.U. erheblich größer sein als die Ordnung, die zur Legendre-Darstellung des Streuquerschnitts benötigt wird.

Unter Anwendung der Ergebnisse aus Anhang A ergibt sich als Folgerung: In  $S_N-P_L$ -Näherung werden numerisch aufwendig zur Darstellung des elastischen Streukerns im Energiebereich bis 15 MeV Approximationsordnungen  $L \geq 10$  benötigt. Dies gilt verstärkt -  $L \gg 10$  - für elastische Streuung an leichteren Elementen.

Ausgehend von der  $S_N-P_L$ -Näherung wird im folgenden ein Verfahren angegeben, mit dem numerisch effektiv unter näherungsweise Berücksichtigung höherer Streumatrixelemente die anisotrope elastische Streuung unter konsistenter Bildung totaler Gruppenwirkungsquerschnitte erfolgt.

#### 4.3 Transportnäherungen höherer Ordnung

Zu einer gegenüber der  $P_L$ -Näherung verbesserten Berücksichtigung der Energieabhängigkeit der höheren Momente der Flußdichte bei der Bildung der Gruppenwirkungsquerschnitte gelangt man, indem man nicht wie bei der  $S_N-P_L$ -Näherung für alle  $\ell$ , sondern erst für  $\ell > L$  von einer gleichbleibenden Energieabhängigkeit der höheren Flußdichtemomente ausgeht:

$$(4.11) \quad \psi_{\ell}(E) \approx \psi_{L+1}(E) \quad \text{für } \ell > L \geq 0.$$

Dies bedeutet: Bei der Bildung der Gruppenwirkungsquerschnitte wird die zur Wichtung benutzte Flußdichte  $\psi(\mu, E)$  mit der Legendre-Darstellung -

die Ortsabhängigkeit werde nicht mitgeschrieben (Zoneneinteilung) -

$$(4.12) \quad \psi(\mu, E) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{2} P_{\ell}(\mu) \cdot \psi_{\ell}(E)$$

durch die Legendre-Reihe mit ab der Ordnung  $L + 1$  von  $\ell$  unabhängigen Amplituden,

$$(4.13) \quad \psi^{(L+1)}(\mu, E) \equiv \sum_{\ell=0}^L \frac{2\ell+1}{2} P_{\ell}(\mu) \psi_{\ell}(E) + \psi_{L+1}(E) \sum_{\ell=L+1}^{\infty} \frac{2\ell+1}{2} P_{\ell}(\mu),$$

approximiert:

$$(4.14) \quad \psi(\mu, E) \approx \psi^{(L+1)}(\mu, E).$$

Wegen - vgl. (2.10) -  $\sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{2} P_{\ell}(\mu) = \delta(\mu-1)$  läßt sich (4.14) schreiben als

$$(4.15) \quad \psi(\mu, E) \approx \sum_{\ell=0}^L \frac{2\ell+1}{2} P_{\ell}(\mu) \cdot [\bar{\psi}_{\ell}(E) - \psi_{L+1}(E)] + \psi_{L+1}(E) \cdot \delta(\mu-1).$$

In dieser Schreibweise wird die physikalische Bedeutung der Approximation (4.11) klar: Die Neutronenflußdichte wird in Richtung  $\mu = 1$  gebündelt, d.h. einem Teil der Neutronen mit Flugrichtungen  $\mu < 1$  schräg zur Symmetrieachse - in Plattengeometrie die Plattennormale, in Kugelgeometrie die radiale Richtung - wird die Flugrichtung  $\mu = 1$  (Richtung der Symmetrieachse) zugeordnet.

Die Näherung (4.11) hat nach (3.2) zur Folge, daß

$$(4.16) \quad \Sigma_{t,\ell}^g \approx \Sigma_{t,L+1}^g \quad \text{für } \ell \geq L+1, \quad g = 1, 2, \dots, G$$

Vor Anwendung von (4.16) wurde die elastische Streuquelle in der Multigruppen-Boltzmann-Gleichung (4.1) auf die linke Seite gebracht:

$$(4.17) \quad \mu \frac{\partial}{\partial x} \psi^g(x, \mu) + \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{2} P_{\ell}(\mu) \left[ \Sigma_{t, \ell}^g - \sum_{g'=1}^G \Sigma_{\ell}^{g' \rightarrow g} \psi_{\ell}^{g'}(x) / \psi_{\ell}^g(x) \right] \cdot \psi_{\ell}^g(x) = Q^g(x, \mu), \quad g = 1, 2, \dots, G$$

mit dem zur Abkürzung der Schreibweise eingeführten  $\ell$ -ten Moment der Neutronenflußdichte in der Gruppe  $g$ ,

$$(4.18) \quad \psi_{\ell}^g(x) = \int_{-1}^{+1} d\mu \psi^g(x, \mu) \cdot P_{\ell}(\mu), \quad \ell = 0, 1, 3, \dots$$

Für  $L \geq 10$  und  $\ell > L$  reduziert sich der Ausdruck in der eckigen Klammer von (4.17) auf  $\Sigma_{t, \ell}^g$ , da dann - vgl. Kap. 4.1 -  $\Sigma_{\ell}^{g' \rightarrow g} \approx 0$  ist.

Bei Anwendung von (4.16) erhält man wegen der aus (4.5) folgenden Identität

$$(4.19) \quad \sum_{\ell=L+1}^{\infty} \frac{2\ell+1}{2} P_{\ell}(\mu) \Sigma_{t, L+1}^g \psi_{\ell}^g(x) = \Sigma_{t, L+1}^g \left[ \psi^g(x, \mu) - \sum_{\ell=0}^L \frac{2\ell+1}{2} P_{\ell}(\mu) \psi_{\ell}^g(x) \right]$$

die Näherung

$$(4.20) \quad \begin{aligned} & \mu \frac{\partial}{\partial x} \psi^g(x, \mu) + \Sigma_{t, L+1}^g \psi^g(x, \mu) \\ & = \sum_{\ell=0}^L \frac{2\ell+1}{2} P_{\ell}(\mu) \left\{ \left[ \Sigma_{t, L+1}^g - \Sigma_{t, \ell}^g + \Sigma_{\ell}^{g \rightarrow g} \right] \int_{-1}^{+1} d\mu' \psi^g(x, \mu') P_{\ell}(\mu') \right. \\ & \quad \left. + \sum_{g' \neq g} \Sigma_{\ell}^{g' \rightarrow g} \int_{-1}^{+1} d\mu' \psi^{g'}(x, \mu') P_{\ell}(\mu') \right\} + Q^g(x, \mu) \\ & \qquad \qquad \qquad g = 1, 2, \dots, G, \end{aligned}$$

die die Form (4.2) der  $S_N$ -Gleichungen hat. Man hat damit die verbesserte Berücksichtigung der höheren Flußdichtemomente bei der Bildung der totalen Gruppenwirkungsquerschnitte erreicht. Das wegen  $\Sigma_{\ell}^{g' \rightarrow g}$  für  $\ell > L$  bei voller Berücksichtigung der elastischen Anisotropie vorausgesetzte  $L \geq 10$  schränkt jedoch die Anwendbarkeit der Näherung (4.20) für numerische Rechnungen wegen des großen Bedarfs an Speicherplatz und Rechenzeit ein.

Es soll daher eine Näherung der Multigruppen-Boltzmanngleichung abgeleitet werden, die schon mit kleinem  $L$  ( $L \geq 3$ ) eine näherungsweise Berücksichtigung der anisotropen Streuung ermöglicht.

Zur Herleitung von (4.20) wurde nur die  $\ell$ -Unabhängigkeit des Ausdrucks in der eckigen Klammer von (4.17) für  $\ell > L+1$  benutzt. Dieser Ausdruck, der im weiteren eine zentrale Rolle spielt, werde "Transportwirkungsquerschnitt der Ordnung  $\ell$  in der Gruppe  $g$ " genannt:

$$(4.21) \quad \Sigma_{tr,\ell}^g(x) \equiv \Sigma_{t,\ell}^g - \sum_{g'=1}^G \Sigma_{\ell}^{g' \rightarrow g} \psi_{\ell}^{g'}(x) / \psi_{\ell}^g(x)$$

für  $\psi_{\ell}^g(x) \neq 0$ .

Es wird sich in Kap. 4.3 zeigen, daß der häufig benutzte Transportquerschnitt  $\sigma_{tr} = \sigma_t - \bar{\mu}^g \sigma_{el}^g$  als Spezialfall in (4.21) enthalten ist.

$\Sigma_{tr,\ell}^g(x)$  hängt über  $\Sigma_{t,\ell}^g$  und  $\Sigma_{\ell}^{g' \rightarrow g}$  von der zugehörigen Ortszone ab; er ist außerdem explizit über den Quotienten  $\psi_{\ell}^{g'}(x) / \psi_{\ell}^g(x)$  von der Ortskoordinate  $x$  in dieser Zone abhängig. Für  $\ell$ -Werte mit  $\psi_{\ell}^g(x) = 0$  ist der Transportquerschnitt nicht definiert. In diesem Fall kann jedoch mit Hilfe der im folgenden abgeleiteten Transportnäherung bei energieabhängiger Ordnung dieser Näherung eine Zurückführung auf  $\ell$ -Werte mit  $\psi_{\ell}^g(x) \neq 0$  erfolgen.

Um zu erreichen, daß

$$(4.22) \quad \Sigma_{tr,\ell}^g \approx \Sigma_{tr,L+1}^g \quad \text{für } \ell > L, \quad g = 1, 2, \dots, G,$$

approximieren wir zur Bildung des Transportquerschnitts die elastische Streuquelle in der Neutronentransportgleichung

$$(4.23) \quad Q_{el}(x, \mu, E) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{2} P_{\ell}(\mu) \int dE' \Sigma_{\ell}(E', E) \psi_{\ell}(x, E')$$

mit  $\psi_{\ell}(x, E) = \int_{-1}^{+1} d\mu \psi(x, \mu, E) \cdot P_{\ell}(\mu)$  in Analogie zur Näherung (4.14) für die Neutronenflußdichte durch eine Legendre-Entwicklung mit ab der Ordnung  $L+1$  von  $\ell$  unabhängigen Amplituden:

$$(4.24) \quad \begin{aligned} Q_{el}(x, \mu, E) \\ \approx Q^{(L+1)}(x, \mu, E) \equiv \sum_{\ell=0}^L \frac{2\ell+1}{2} P_{\ell}(\mu) \left[ Q_{\ell}(x, E) - Q_{L+1}(x, E) \right] \\ + Q_{L+1}(x, E) \cdot \delta(\mu-1) \end{aligned}$$

Dabei ist zur Abkürzung der Schreibweise  $Q_{\ell}(x, E) \equiv \int dE' \Sigma_{\ell}(E' \rightarrow E) \psi_{\ell}(x, E')$  gesetzt.

In dieser Näherung für die elastische Streuquelle, die zusammen mit der Näherung (4.14) für die Flußdichte nur zur Bildung der Gruppenwirkungsquerschnitte vorgenommen wird, ist

$$(4.25) \quad \begin{aligned} \Sigma_{tr, \ell}^g(x) &= \Sigma_{t, \ell}^g - \int_g dE Q_{\ell}(x, E) / \int_g dE \psi_{\ell}(x, E) \\ &\approx \Sigma_{t, L+1}^g - \int_g dE Q_{L+1}(x, E) / \int_g dE \psi_{L+1}(x, E) \\ &= \Sigma_{tr, L+1}^g(x) \quad \text{für } \ell > L+1, g = 1, 2, \dots, G \end{aligned}$$

Die physikalische Bedeutung dieser Näherung kann aus (4.24) abgelesen werden: Bei der Bildung der Gruppenwirkungsquerschnitte wird einem durch die Amplitude  $Q_{L+1}(x, E)$  bestimmten Teil der in Richtungen  $\mu < 1$  schräg zur Symmetrieachse gestreuten Neutronen die Richtung der Symmetrieachse  $\mu = 1$  als Flugrichtung zugeordnet.

Auf Abb. 4.1 sind beispielhaft  $\Sigma_{tr,\ell}^g$ -Werte für die in Kap. 7 untersuchte Anordnung ZPRIII-56B in den ersten neun Energiegruppen der üblichen 26-Gruppen-Einteilung /21/ aufgetragen. Wir entnehmen dieser Abb., daß in Übereinstimmung mit (4.25) z.B. von 100 keV bis 1.4 MeV  $\Sigma_{tr,1}^g < \Sigma_{tr,2}^g$ , jedoch  $\Sigma_{tr,2}^g \approx \Sigma_{tr,\ell}^g$ ,  $\ell = 3,4,5$ , ist.

Mit (4.22) ergibt sich, (4.20) entsprechend, die folgende Näherung der Multigruppentransportgleichung:

$$\begin{aligned}
 & \mu \frac{\partial}{\partial x} \psi^g(x, \mu) + \Sigma_{tr,L+1}^g \psi^g(x, \mu) \\
 (4.26) \quad & = \sum_{\ell=0}^L \frac{2\ell+1}{2} P_{\ell}(\mu) \left\{ \left[ \Sigma_{tr,L+1}^g - \Sigma_{t,\ell}^g + \Sigma_{\ell}^{g \rightarrow g} \right] \int_{-1}^{+1} d\mu' \psi^g(x, \mu') P_{\ell}(\mu') \right. \\
 & \quad \left. + \sum_{g' \neq g} \Sigma_{\ell}^{g' \rightarrow g} \int_{-1}^{+1} d\mu' \psi_{\ell}^{g'}(x, \mu') P_{\ell}(\mu') \right\} + Q^g(x, \mu) \\
 & \qquad \qquad \qquad g = 1, 2, \dots, G
 \end{aligned}$$

Diese Näherung nennen wir " $S_N$ -Transportnäherung der Ordnung  $L+1$ " oder kurz " $S_N$ - $T_{L+1}$ -Näherung". Die Koeffizienten  $C^g$  und  $M_{\ell}^{g' \rightarrow g}$  in Gl. (4.2) ergeben sich zu

$$(4.27) \quad \left\{ \begin{array}{l} C^g = \Sigma_{tr,L+1}^g \\ M_{\ell}^{g \rightarrow g} = \Sigma_{tr,L+1}^g - \Sigma_{t,\ell}^g + \Sigma_{\ell}^{g \rightarrow g} \\ M_{\ell}^{g' \rightarrow g} = \Sigma_{\ell}^{g' \rightarrow g} \text{ für } g' \neq g \end{array} \right\} \quad \ell = 0, 1, 2, \dots, L$$

Auf folgendes werde hingewiesen: Gl. (4.26) ist insgesamt eine Näherung der Multigruppentransportgleichung (4.1), der zweite Term auf der linken Seite von (4.26) ist jedoch keine Näherung für den entsprechenden Term in (4.1), die Stoßdichte; ebenso ist der erste Term auf der rechten Seite keine Näherung für die Streuquelle in (4.1). Setzt man nämlich (4.21) unter Verwendung von (4.22) in (4.1) ein, findet man, daß in  $S_N$ - $T_{L+1}$ -Näherung die Stoßdichte

$$\begin{aligned}
 (4.28) \quad & \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{2} P_{\ell}(\mu) \Sigma_{t,\ell}^g \psi_{\ell}^g(x) \\
 & \approx \sum_{\ell=0}^L \frac{2\ell+1}{2} P_{\ell}(\mu) \Sigma_{t,\ell}^g \psi_{\ell}^g(x) + \Sigma_{t,L+1}^g \sum_{\ell=L+1}^{\infty} \frac{2\ell+1}{2} P_{\ell}(\mu) \psi_{\ell}^g(x)
 \end{aligned}$$

und die Streuquelle

$$\begin{aligned}
 (4.29) \quad & \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{2} P_{\ell}(\mu) \sum_{g'} \Sigma_{\ell}^{g' \rightarrow g} \psi_{\ell}^{g'}(x) \\
 & \approx \sum_{\ell=0}^L \frac{2\ell+1}{2} P_{\ell}(\mu) \sum_{g'} \Sigma_{\ell}^{g' \rightarrow g} \psi_{\ell}^{g'}(x) \\
 & \quad + \sum_{g'} \Sigma_{L+1}^{g' \rightarrow g} \psi_{L+1}^{g'} / \psi_{L+1}^g \cdot \sum_{\ell=L+1}^{\infty} \frac{2\ell+1}{2} P_{\ell}(\mu) \psi_{\ell}^g(x)
 \end{aligned}$$

gesetzt wird.

Aus (4.28) und (4.29) entnehmen wir, daß die  $S_N$ - $T_{L+1}$ -Näherung charakterisierbar ist allein durch die folgende Näherung in den Gruppenwirkungsquerschnitten:

$$\begin{aligned}
 (4.30) \quad & \Sigma_{t,\ell}^g \approx \Sigma_{t,L+1}^g \\
 (4.31) \quad & \Sigma_{\ell}^{g' \rightarrow g} \approx \left\{ \begin{array}{ll} \sum_h \Sigma_{L+1}^{h \rightarrow g} \psi_{L+1}^h / \psi_{L+1}^g & \text{für } g' = g \\ 0 & \text{für } g' \neq g \end{array} \right\} \begin{array}{l} \ell > L+1 \\ g', g = 1, 2, \dots, G \end{array}
 \end{aligned}$$

Eine Approximation der Neutronenflußdichte wird nur zur Bildung der Gruppenwirkungsquerschnitte durch (4.14) vorgenommen. Bis zur Ordnung  $L+1$  werden die Entwicklungen für die Stoßdichte und die Streuquelle exakt berücksichtigt. Entwicklungsglieder höherer Ordnung werden gemäß (4.30) und (4.31) näherungsweise behandelt.

Die Näherung (4.31) hat gegenüber (4.6) den Vorteil, daß sie gleichmäßig für elastische Streuung an schweren und leichten Elementen - vgl. dazu Tabelle 4.1 - berücksichtigt:

- die schwache  $\ell$ -Abhängigkeit der Diagonalelemente  $\Sigma_{\ell}^{g \rightarrow g}$  der elastischen Streumatrizen,
- die Eigenschaft der Nicht-Diagonalelemente  $|\Sigma_{\ell}^{g' \rightarrow g}| \ll |\Sigma_{\ell}^{g \rightarrow g}|$ ,  $g' \neq g$  für  $\ell \geq 4$ ,
- Streumatrixelemente der Ordnung  $L+1$ .

Da außerdem die Neutronenflußdichte außer bei der Bildung der Gruppenwirkungsquerschnitte exakt behandelt wird (im Rahmen des  $S_N$ -Verfahrens), sollte die  $S_N$ - $T_{L+1}$ -Näherung schon für  $L \geq 3$  eine ausreichende Beschreibung der anisotropen Streuung ermöglichen.

Die vorliegende Ableitung der  $S_N$ - $T_{L+1}$ -Näherung wurde durch eine Arbeit von Küsters /8/ angeregt, in welcher diese Näherung einschließlich zugehöriger konsistenter Gruppenkonstanten unter dem Gesichtspunkt der Approximation der Restglieder der Streuquelle und der Stoßdichte hergeleitet wird. Diese Arbeit unterscheidet sich von /8/ insofern, als hier erstmals die Rolle des ab  $L+1$  konstanten Transportquerschnitts mit der physikalischen Interpretation durch die Approximation der Neutronenflußdichte und insbesondere der Streuquelle bei der Bildung der Gruppenwirkungsquerschnitte - und nur dabei! - deutlich gemacht wird.

#### 4.4 Approximationen für den Transportwirkungsquerschnitt

Der in (4.21) definierte Transportquerschnitt der Ordnung  $L+1$  in der Gruppe  $g$  schreibt sich zweckmäßig in der von Küsters /8/ eingeführten Form als

$$(4.32) \quad \Sigma_{tr,L+1}^g(x) = \Sigma_{t,L+1}^g - \sum_{g'=1}^G \Sigma_{L+1}^{g' \rightarrow g} \cdot R_{L+1}^{g'g}(x)$$

mit

$$(4.33) \quad R_{L+1}^{g'g}(x) \equiv \psi_{L+1}^{g'}(x) / \psi_{L+1}^g(x), \quad \psi_{L+1}^g(x) \neq 0.$$

Er enthält neben den Gruppenwirkungsquerschnitten  $\Sigma_{t,L+1}^g$  und  $\Sigma_{L+1}^{g' \rightarrow g}$  über  $R_{L+1}^{g'g}(x)$  die ortsabhängigen Momente der Neutronenflußdichte,  $\psi_{L+1}^{g'}(x)$ ,  $g' = 1, 2, \dots, G$ . Zur Bestimmung der Gruppenquerschnitte  $\Sigma_{L+1}^{g' \rightarrow g}$  sind nach (3.3) zonengemittelte Momente  $\psi_{L+1}^g$  der Neutronenflußdichte aus z.B. nach (B.28) angenäherten Wichtungsfunktionen zu berechnen. Setzen wir

$$(4.34) \quad r_{L+1}^{g'g} \equiv \psi_{L+1}^{g'} / \psi_{L+1}^g,$$

so ist daher wegen  $R_{L+1}^{g'g}(x) \approx r_{L+1}^{g'g}$  - bei geeigneter Zoneneinteilung -

$$(4.35) \quad \Sigma_{tr,L+1}^g \approx \Sigma_{t,L+1}^g - \sum_{g'=1}^G \Sigma_{L+1}^{g' \rightarrow g} \cdot r_{L+1}^{g'g}$$

eine in einfacher Weise durch Bereitstellung der  $r_{L+1}^{g'g}$  zu realisierende Näherung für den Transportquerschnitt.

Die Verwendung von (4.35) bedeutet eine mit der Boltzmann-Gleichung (4.1) konsistente Behandlung der Neutroneneinstreuung in die Gruppe  $g$ . Wir bezeichnen deshalb den nach (4.35) berechneten Transportquerschnitt als "konsistenten Transportquerschnitt" und die zugehörige  $S_{N-L+1}^{-T}$ -Näherung als "konsistente  $S_{N-L+1}^{-T}$ -Näherung".

Ein Sonderfall dieser Näherung ergibt sich im Fall einer schwachen Energieabhängigkeit der Flußdichtemomente  $\psi_{L+1}^g$ . Dann ist

$$(4.36) \quad r_{L+1}^{g'g} \approx 1$$

und (4.35) reduziert sich auf

$$(4.37) \quad \Sigma_{tr,L+1}^g \approx \Sigma_{t,L+1}^g - \sum_{g'=1}^G \Sigma_{L+1}^{g' \rightarrow g} .$$

Die am häufigsten zur Beschreibung der anisotropen Streuung verwendete Näherung ist die "extended transport approximation", die 1967 von Bell, Hansen und Sandmeier /2/ eingeführt wurde. In dieser Näherung wird zur Bildung des Transportquerschnitts für  $\ell \geq L+1$

$$(4.38) \quad \int_{E' \geq E} dE' \Sigma_{\ell}(E' \rightarrow E) \psi_{\ell}(E') \approx \int_{E' \leq E} dE' \Sigma_{\ell}(E \rightarrow E') \psi_{\ell}(E)$$

gesetzt. Diese Bedingung ist außer bei speziellen Anordnungen mit näherungsweise energieunabhängigen Wirkungsquerschnitten - s. Anhang C - i.a. nicht erfüllt. Insbesondere ist sie nicht erfüllt bei nicht-multiplizierenden Anordnungen, in denen die Neutronen einer monoenergetischen, räumlich konzentrierten Quelle, z.B. einer 14 MeV-Neutronenquelle nach der Reaktion  $d(T,\alpha)n$ , entstammen. Mit  $E_0$  als Quellenergie ist dann nämlich wegen  $\psi_{\ell}(E') = 0$  für  $E' > E_0$

$$\int_{E' \geq E} dE' \Sigma_{\ell}(E' \rightarrow E_0) \psi_{\ell}(E') = 0 \text{ für alle } \ell ;$$

andererseits ist aber

$$\left| \int_{E' \leq E_0} dE' \Sigma_{\ell}(E_0 \rightarrow E') \psi_{\ell}(E_0) \right| \gg 0 ,$$

da aufgrund der Quellneutronen mit der Energie  $E_0$  auch für große  $\ell$ , etwa  $\ell \geq 5$ ,  $|\psi_{\ell}(E_0)| \gg 0$  sein kann.

Da mit (4.38) und (3.3)

$$(4.39) \left\{ \begin{aligned} \sum_{g'=1}^G \Sigma_{L+1}^{g' \rightarrow g} r_{L+1}^{g'g} &= \frac{\int_g dE \int_{E' \leq E} dE' \Sigma_{L+1}(E' \rightarrow E) \psi_{L+1}(E')}{\int_g dE \psi_{L+1}(E)} \\ &\approx \frac{\int_g dE \psi_{L+1}(E) \int_{E' \leq E} dE' \Sigma_{L+1}(E \rightarrow E')}{\int_g dE \psi_{L+1}(E)} \\ &= \sum_{g'=1}^G \int_g dE \Sigma_{L+1}(E \rightarrow g') / \int_g dE \psi_{L+1}(E) \\ &= \sum_{g'=1}^G \Sigma_{L+1}^{g \rightarrow g'} \end{aligned} \right. ,$$

ist der Transportquerschnitt in der "extended transport approximation"

$$(4.40) \quad \Sigma_{tr,L+1}^g \approx \Sigma_{t,L+1}^g - \sum_{g'=1}^G \Sigma_{L+1}^{g \rightarrow g'}$$

Im Fall  $L = 0$  ist mit (4.39) und (2.13) für ein Isotop

$$(4.41) \left\{ \begin{aligned} \sum_{g'=1}^G \sigma_1^{g \rightarrow g'} &= \int_g dE \psi_1(E) \int_{E' \leq E} dE' \sigma_1(E, E') / \int_g dE \psi_1(E) \\ &= \int_g dE \psi_1(E) \cdot \bar{\mu}(E) \cdot \sigma_0(E) / \int_g dE \psi_1(E) . \end{aligned} \right.$$

Dabei ist  $\bar{\mu}(E)$  der mittlere Kosinus des Streuwinkels im Laborsystem:

$$(4.42) \quad \bar{\mu}(E) = \frac{\int_{E' \leq E} dE' \sigma_1(E \rightarrow E')}{\int_{E' \leq E} dE' \sigma_0(E \rightarrow E')} = \frac{2\pi \int_{-1}^{+1} d\mu_0 \mu_0 \sigma_{el}(\mu_0, E)}{2\pi \int_{-1}^{+1} d\mu_0 \sigma_{el}(\mu_0, E)}$$

und  $\sigma_0(E)$  der totale elastische Streuwirkungsquerschnitt:

$$(4.43) \quad \sigma_0(E) = \int_{E' \leq E} dE' \sigma_0(E \rightarrow E') = 2\pi \int_{-1}^{+1} d\mu_0 \sigma_{el}(\mu_0, E).$$

Definieren wir als mittleren Streukosinus in der Gruppe  $g$  - vgl. z.B. Küsters /8/ - durch

$$(4.44) \quad \bar{\mu}^g \equiv \frac{\int dE \mu(E) \sigma_0(E) \psi_1(E)}{\int_g dE \sigma_0(E) \psi_1(E)},$$

so ist

$$(4.45) \quad \sum_{g'=1}^G \sigma_1^{g \rightarrow g'} = \bar{\mu}^g \cdot \sigma_{el,1}^g$$

mit dem  $\psi_1$ -gewichteten elastischen Gruppenwirkungsquerschnitt

$$(4.46) \quad \sigma_{el,1}^g \equiv \int_g dE \sigma_0(E) \psi_1(E) / \int_g dE \psi_1(E).$$

Der mikroskopische Transportquerschnitt ist damit für  $L = 0$

$$(4.47) \quad \sigma_{tr,1}^g \approx \sigma_{t,1}^g - \bar{\mu}^g \sigma_{el,1}^g.$$

Der makroskopische Transportquerschnitt ergibt sich daraus durch Multiplikation mit den Teilchenzahldichten der beteiligten Atomkerne und Summation über diese Kerne.

Die Transportnäherung 1. Ordnung der Multigruppentransportgleichung - vgl. (4.26) - mit dem nach (4.47) berechneten Transportquerschnitt wird vielfach als "Transportnäherung" schlechthin bezeichnet. Ihr Vorteil gegenüber den konsistenten Näherungen (4.35) und (4.37) ist, daß man zur Bildung des Transportquerschnitts anstelle der Transferquerschnitte  $\sigma_1^{g' \rightarrow g}$  nur den mittleren Streukosinus  $\bar{\mu}^g$  und die elastischen Streuwirkungsquerschnitte  $\sigma_{el,1}^g$  benötigt. Da jedoch die zugrundeliegende Annahme (4.38) i.a. nicht erfüllt ist, ist der konsistenten Näherung der Vorzug zu geben.

Für  $L > 0$  ist unter der Annahme (4.38)

$$(4.48) \quad \sigma_{tr,L+1}^g \approx \sigma_{t,L+1}^g - w_{L+1}^g \cdot \sigma_{el,L+1}^g$$

Dabei ist

$$(4.49) \quad w_{L+1}^g \equiv \int_g dE w_{L+1}(E) \sigma_o(E) \psi_{L+1}(E) / \int_g dE \sigma_o(E) \psi_{L+1}(E)$$

der mit  $\sigma_o(E) \psi_{L+1}(E)$  gewichtete Gruppenmittelwert des auf den elastischen Streuwirkungsquerschnitt  $\sigma_o(E)$  bezogenen Legendre-Momentes der Ordnung  $L+1$  des differentiellen elastischen Streuwirkungsquerschnitts  $\sigma_{el}(\mu_o, E)$ ,

$$(4.50) \quad w_{L+1}(E) \equiv 2\pi \int_{-1}^{+1} d\mu_o \sigma_{el}(\mu_o, E) P_{L+1}(\mu_o) / \sigma_o(E).$$

Ferner ist

$$(4.51) \quad \sigma_{el,L+1}^g \equiv \int_g dE \sigma_o(E) \psi_{L+1}(E) / \int_g dE \psi_{L+1}(E).$$

Die rechte Seite von Gl. (4.48) liefert uns eine Möglichkeit, die Transportnäherung der Ordnung  $L+1$  in "extended transport approximation" für den Transportquerschnitt physikalisch zu interpretieren. Aus der  $\ell$ -Unabhängigkeit des Transportquerschnitts  $\sigma_{tr,\ell}^g$  für  $\ell \geq L+1$  - vgl. (4.22) - und aus der gleichmäßigen Energieabhängigkeit der zur Wichtung bei der Bildung der Gruppenwirkungsquerschnitte benutzten Flußdichtemomente  $\psi_\ell(E)$  für  $\ell \geq L+1$  - vgl. (4.11) - ergibt sich nämlich, daß in dieser Näherung

$$(4.52) \quad w_\ell(E) \approx w_{L+1}(E) \text{ für } \ell \geq L+1$$

gesetzt wird. Das bedeutet aber, daß der differentielle elastische Streuwirkungsquerschnitt  $\sigma_{el}(\mu_0, E)$  in dieser Näherung durch eine Legendre-Entwicklung mit ab der Ordnung  $L+1$  von  $\ell$  unabhängigen Momenten approximiert wird. Mit Hilfe der  $\delta$ -Funktion läßt sich diese Approximation entsprechend (4.15) oder (4.24) schreiben als

$$(4.53) \quad \begin{aligned} \sigma_{el}(\mu_0, E) \\ \approx \sigma_{el}^{(L+1)}(\mu_0, E) \equiv \sigma_{el}(E) \cdot \left[ \sum_{\ell=0}^L \frac{2\ell+1}{4\pi} [w_\ell(E) - w_{L+1}(E)] \cdot P_\ell(\mu_0) \right. \\ \left. + w_{L+1}(E) \cdot \delta(\mu_0 - 1) \right] \end{aligned}$$

In  $T_{L+1}$ -Näherung und in "extended transport approximation" für den Transportquerschnitt wird also einer durch  $w_{L+1}(E)$  bestimmten Anzahl von Neutronen, die durch elastische Streuung ihre Flugrichtung ändern und dabei kinetische Energie auf den gestoßenen Atomkern übertragen, die ursprüngliche Flugrichtung und damit auch die ursprüngliche Energie zugeordnet. Physikalisch bedeutet diese Näherung also eine scheinbare Erhöhung der Transparenz der Anordnung.

#### 4.5 Transportnäherungen energieabhängiger Ordnung

In der in Kap. 4.3, Gl. (4.26) definierten Transportnäherung der Ordnung  $L+1$  enthält die Streuquelle für alle Neutronenenergien dieselbe Anzahl  $L+1$  Entwicklungsglieder. Nun nimmt, wie in Anhang A gezeigt wird, die zur Legendre-Darstellung des differentiellen elastischen Streuwirkungsquerschnitts erforderliche Legendre-Ordnung mit kleiner werdender Neutronenenergie ab. Insbesondere ist für Neutronenenergien unterhalb etwa 100 keV nach Tabelle A.2  $L = 1$  i.a. ausreichend. Dies kann zu einer Vereinfachung bei der Berechnung der für anisotrope Transportrechnungen benötigten Gruppenquerschnitte  $\Sigma_{tr,L+1}^g$  und  $\Sigma_{L+1}^{g \rightarrow g}$  herangezogen werden, insofern, als bei Anwendung höherer Transportnäherungen nur im Energiebereich oberhalb etwa 100 keV die Doppler-Verbreiterung der Resonanzen, insbesondere der mittelschweren Atomkerne der Strukturmaterialien bei der Bildung dieser Gruppenquerschnitte vernachlässigt werden kann. Als Wichtungsfunktionen können dann nämlich die nach (B.28) angenäherten Flußdichtemomente benutzt werden, wobei  $\Sigma_t(E)$  der totale Wirkungsquerschnitt der betreffenden Unterzone des Reaktors bei  $0^\circ\text{K}$  ist, der in der Datenbibliothek KEDAK tabelliert ist. Die Gruppenwirkungsquerschnitte für die  $T_1$ -Näherung im Energiebereich unterhalb 100 keV werden unter Berücksichtigung der Doppler-Verbreiterung der Resonanzen, insbesondere der schweren Atomkerne wie Uran und Plutonium unter Verwendung des üblichen  $f$ -Faktor-Formalismus /16/, /21/ berechnet.

Neben der Vereinfachung bei der Berechnung der Gruppenwirkungsquerschnitte ermöglicht das Verfahren der Transportnäherungen energieabhängiger Ordnung eine Verringerung der Rechenzeit und des Speicherplatzbedarfs. Denn mit abnehmender Neutronenenergie verkleinert sich die Anzahl der bereitzustellenden Gruppenquerschnitte; außerdem erübrigt sich in der Transportrechnung bei niedrigen Energien die Bestimmung der höheren Momente der Streuquelle. Unter diesem Gesichtspunkt wird die Ausbreitung von Neutronen in Natrium von Maerker und Muckenthaler /6/ in  $S_N-P_L$ -Näherung mit energieabhängiger Anzahl von Entwicklungsgliedern in der Streuquelle berechnet.

5. Berechnung mikroskopischer elastischer Streumatrizen  $\sigma_{\ell}^{g' \rightarrow g}$  und  
totaler Gruppenwirkungsquerschnitte  $\sigma_{t,\ell}^g$  - das Programm FLUMMI

5.1 Einführung

Für Transportrechnungen in Transportnäherungen höherer Ordnung sind Gruppenwirkungsquerschnitte erforderlich, die von den Rechenprogrammen zur Erstellung von Gruppenkonstanten für Diffusionsrechnungen oder für Rechnungen in einfacher Transportnäherung nicht bereitgestellt werden. Es wurde daher vom Autor unter detaillierter Berücksichtigung aller Teilaspekte, besonders im Hinblick auf numerische Genauigkeit bei der Darstellung und Integration gewichteter elastischer Übergangswahrscheinlichkeiten in höherer Legendre-Ordnung, das Programm FLUMMI entwickelt. Das Programm FLUMMI berechnet auf der Datenbasis KEDAK die fehlenden Gruppenwirkungsquerschnitte und stellt so die zur Behandlung des anisotropen Neutronentransports erforderliche Ergänzung der bisherigen Karlsruher Gruppenkonstantenerstellungscodes dar. In diesem Kapitel werden nach Definition der zu berechnenden Größen die spezifischen numerischen Verfahren, insbesondere bei der Berechnung von Streumatrixelementen höherer Ordnung, dargestellt.

5.2 Zusammenstellung und Diskussion der berechneten Größen;  
Beschränkung auf  $\ell \leq 5$

Gemäß der Definition (4.26) der Transportnäherung der Ordnung  $L + 1$  und nach der Definition (4.21) des Transportquerschnitts  $\Sigma_{tr,\ell+1}^g$  werden die mikroskopischen Gruppenwirkungsquerschnitte  $k_{\sigma_{t,\ell}}^g$  und  $k_{\sigma_{\ell}^{g' \rightarrow g}}^{g' \rightarrow g}$  benötigt - die Indices  $k$  kennzeichnen die einzelnen Isotope -, aus denen sich makroskopische Gruppenquerschnitte für eine gegebene Reaktorzone durch Multiplikation mit den zugehörigen Teilchenzahlendichten und Summation über die beteiligten Isotope ergeben.

Dabei sind  $k_{\sigma_{t,\ell}}^{g}$  und  $k_{\sigma_{\ell}}^{g' \rightarrow g}$  entsprechend (3.2) und (3.3) definiert durch

$$(5.1) \quad k_{\sigma_{t,\ell}}^{g} \equiv \int_g dE \, k_{\sigma_t}(E) \psi_{\ell}(E) / \int_g dE \, \psi_{\ell}(E)$$

und

$$(5.2) \quad k_{\sigma_{\ell}}^{g' \rightarrow g} \equiv \int_{g'} dE' \, k_{\sigma_{\ell}}(E' \rightarrow g) \psi_{\ell}(E') / \int_{g'} dE' \, \psi_{\ell}(E')$$

mit - vgl. (B.2) -

$$(5.3) \quad k_{\sigma_{\ell}}(E' \rightarrow g) \equiv 2\pi \int_{\mu_0(E', E_g)^{g-1}}^{\mu_0(E', E)} d\mu_0 \, k_{\sigma_{el}}(\mu_0, E') P_{\ell}(\mu_0) \quad \ell = 0, 1, 2, \dots$$

$k_{\sigma_t}(E)$  und  $k_{\sigma_{el}}(\mu_0, E)$  sind der mikroskopische totale Wirkungsquerschnitt, bzw. der differentielle elastische Streuwirkungsquerschnitt im Laborsystem des Isotops  $k$  bei der Neutronenenergie  $E$ . Der Kosinus des Streuwinkels bei elastischer Neutronenstreuung von  $E'$  nach  $E$ ,  $\mu_0(E', E)$ , wurde durch (2.2) definiert. Die Wichtungsfunktionen  $\psi_{\ell}(E)$  sind - vgl. (B.18) - zonengemittelte Legendre-Momente der Neutronenflußdichte, die näherungsweise z.B. nach (B.28) ermittelt werden.

Im folgenden wird zur Vereinfachung der Schreibweise der Isotopindex  $k$  weggelassen.

Zur numerischen Berechnung der  $\sigma_{\ell}^{g' \rightarrow g}$  ist es aufgrund der auf KEDAK vorliegenden Darstellung der die elastische Anisotropie beschreibenden Daten zweckmäßig, elastische Streuwinkelverteilungen  $w(\mu_0, E)$  einzuführen:

$$(5.4) \quad w_{el}(\mu_0, E) \equiv \sigma_{el}(\mu_0, E) / \sigma_{el}(E).$$

Dabei ist

$$(5.5) \quad \sigma_{el}(E) = 2\pi \int_{-1}^{+1} d\mu_0 \, \sigma_{el}(\mu_0, E)$$

der elastische Streuwirkungsquerschnitt bei der Neutronenenergie  $E$ . Definiert man weiter entsprechend (5.3)

$$(5.6) \quad w_{\ell}(E' \rightarrow g) \equiv 2\pi \int_{\mu_0(E', E_g)}^{\mu_0(E', E_{g-1})} d\mu_0 w_{el}(\mu_0, E') P_{\ell}(\mu_0),$$

so ist  $\sigma_{\ell}^{(E' \rightarrow g)} = \sigma_{el}(E') \cdot w_{\ell}(E' \rightarrow g)$ , und man erhält durch Einsetzen in (5.2)

$$(5.7) \quad \sigma_{\ell}^{g' \rightarrow g} = \int_{g'} dE' \sigma_{el}(E') w_{\ell}(E' \rightarrow g) \psi_{\ell}(E') / \int_{g'} dE' \psi_{\ell}(E')$$

Die Größe  $w_0(E \rightarrow g)$  gibt die Wahrscheinlichkeit an, mit welcher ein mit der Energie  $E$  einfallendes Neutron bei elastischer Streuung in das Energieintervall  $(E_g, E_{g-1})$ , die Gruppe  $g$ , gelangt. Es ist nämlich - vgl. dazu (2.13) -

$$(5.8) \quad w_0(E \rightarrow g) = \int_g dE' \sigma_0(E, E') / \sigma_{el}(E).$$

Die Wahrscheinlichkeit, mit welcher ein Neutron in der Energiegruppe  $g'$  bei elastischer Streuung in die Gruppe  $g$  gelangt, ist  $\sigma_0^{g' \rightarrow g} / \sigma_{el}^{g'}$ , wobei

$$(5.9) \quad \sigma_{el}^g = \int_g dE \sigma_{el}(E) \psi_0(E) / \int_g dE \psi_0(E)$$

der elastische Streuwirkungsquerschnitt in der Gruppe  $g$  ist. Da es zur Anwendung zweckmäßig ist, anstelle der Transferquerschnitte  $\sigma_0^{g' \rightarrow g}$  die Übergangswahrscheinlichkeiten  $\sigma_0^{g' \rightarrow g} / \sigma_{el}^{g'}$  zur Verfügung zu haben, führen wir die normierten Streumatrixelemente

$$(5.10) \quad w_{\ell}^{g' \rightarrow g} \equiv \sigma_{\ell}^{g' \rightarrow g} / \sigma_{el}^{g'}, \quad \ell = 0, 1, 2, \dots$$

ein. Explizit ist

$$(5.11) \quad w_0^{g' \rightarrow g} = \int_{g'} dE' \sigma_{el}(E') w_0(E' \rightarrow g) \psi_0(E) / \int_{g'} dE' \sigma_{el}(E') \psi_0(E')$$

und für  $\ell > 0$

$$(5.12) \quad w_{\ell}^{g' \rightarrow g} = \frac{\int_{g'} dE' \sigma_{el}(E') w_{\ell}(E' \rightarrow g) \psi_{\ell}(E')}{\int_{g'} dE' \sigma_{el}(E') \psi_{\ell}(E')} \cdot \frac{\psi_0^{g'}}{\psi_{\ell}^{g'}}$$

mit

$$(5.13) \quad \psi_{\ell}^g = \int_g dE \psi_{\ell}(E)$$

Aus den  $w_{\ell}^{g' \rightarrow g}$  und den elastischen Gruppenquerschnitten  $\sigma_{el}^g$  lassen sich die elastischen Transferquerschnitte  $\sigma_{\ell}^{g' \rightarrow g}$  gemäß

$$(5.14) \quad \sigma_{\ell}^{g' \rightarrow g} = \sigma_{el}^{g'} \cdot w_{\ell}^{g' \rightarrow g}$$

bestimmen.

Das Rechenprogramm FLUMMI, geschrieben in FORTRAN IV für die Rechenanlage IBM/370-165, berechnet für beliebige Energiegruppeneinteilungen

- den elastischen  $\psi_0$ -gewichteten Streuwirkungsquerschnitt in der Gruppe  $g$ ,  $\sigma_{el}^g$ , nach (5.9);
- normierte elastische  $\psi_{\ell}$ -gewichtete Streumatrixelemente  $w_{\ell}^{g' \rightarrow g}$  für  $\ell = 0, 1, \dots, 5$  nach (5.12);
- totale  $\psi_{\ell}$ -gewichtete Gruppenwirkungsquerschnitte  $\sigma_{t, \ell}^g$  für  $\ell = 0, 1, \dots, 5$  nach (5.1);
- die Gruppenintegrale  $\psi_{\ell}^g$  über die Wichtungsfunktionen  $\psi_{\ell}(E)$  nach (5.13) - die  $\psi_{\ell}^g$  werden zur Berechnung des Transportquerschnitts nach (4.35) benötigt.

In FLUMMI werden die Wichtungsfunktionen  $\psi_{\ell}(E)$  für Energien mit vernachlässigbarer Doppler-Verbreiterung der Resonanzquerschnitte der beteiligten Atomkerne, also oberhalb etwa 100 keV, ortszonenweise nach (B.28) durch

$$(5.15) \quad \psi_{\ell}(E) = \frac{F(E)}{[\Sigma_t(E)]^{\ell+1}}, \quad \ell = 0, 1, 2, \dots$$

approximiert.  $F(E)$  ist die totale Stoßdichte,  $\Sigma_t(E)$  ist der makroskopische totale Wirkungsquerschnitt der jeweiligen Unterzone bei  $0^{\circ}\text{K}$ . Im Resonanzbereich mit Doppler-Verbreiterung von  $\Sigma_t(E)$  oberhalb etwa 100 keV können zwar mit FLUMMI nach (5.15) gewichtete Gruppenquerschnitte berechnet werden; da jedoch in diesem Energiebereich eine  $P_1$ -Darstellung der elastischen Streuung ausreicht, werden in Reaktorrechnungen in Transportnähe-

rungen energieabhängiger Ordnung an Stelle der mit (5.15) berechneten Querschnitte temperaturabhängig energetisch abgeschirmte Gruppenquerschnitte in einfacher Transportnäherung eingesetzt - vgl. dazu Kap. 4.5.

Die Legendre-Ordnung, bis zu welcher mit FLUMMI Gruppenquerschnitte berechnet werden, wurde zu  $L = 5$  festgelegt. Diese Festlegung beruht auf Überlegungen zur Verwendung der FLUMMI-Querschnitte, besonders der für schnelle Reaktoren zu erreichenden verbesserten Behandlung der anisotropen Neutronenstreuung, zur erreichbaren Genauigkeit, zum Aufwand an Rechenzeit und zum verfügbaren Computerspeicherplatz. Im einzelnen: Nach Anhang A, Tab. A.2 - A.5, kann der differentielle elastische Streuwirkungsquerschnitt  $\sigma_{el}(\mu_0, E)$  bis zu Neutronenenergien von etwa 2 MeV durch eine  $P_5$ -Entwicklung dargestellt werden. Für schnelle Spaltreaktoren, deren Energiespektrum bei einem Maximum bei einigen 100 keV bis etwa 10 MeV reicht, ist daher mit  $L = 5$  eine ausreichende Berücksichtigung der Anisotropie der elastischen Neutronenstreuung, den oberen MeV-Bereich ausgenommen, möglich. Für den oberen MeV-Bereich, der bei Blanketrechnungen für Fusionsreaktoren Neutronen mit Energien bis zu 15 MeV enthält, wären zur vollständigen Berücksichtigung der elastischen Anisotropie nach Anhang A teilweise höhere Approximationsordnungen, u.U.  $L \geq 10$ , erforderlich. Hinsichtlich der numerischen Ausführung von Transportrechnungen mit  $L \approx 10$  sind zwei Fälle zu betrachten.

- a) Für Vielgruppenrechnungen (200 - 300 Gruppen) könnten die Gruppenquerschnitte  $\sigma_{t,\ell}^g$  und  $\sigma_{\ell}^{g' \rightarrow g}$  - numerisch aufwendig für  $\ell > 3$  - mit einer Feinstrukturwichtung proportional  $1/\Sigma_t^{\ell+1}$  unter Vernachlässigung - vgl. dazu Kap. 6.2 - der systemabhängigen Grobwichtung berechnet werden. Es sind jedoch Vielgruppen- $S_N$ - $P_{10}$ -Rechnungen wegen der langen Rechenzeiten und besonders wegen des großen Speicherplatzbedarfes nur für 1 - 2 Reaktorzonen und wenige Ortspunkte durchführbar.
- b) Für Weniggruppenrechnungen ( $\approx 26$  Gruppen) ist bei Bildung der Gruppenquerschnitte  $\sigma_{t,\ell}^g$  und  $\sigma_{\ell}^{g' \rightarrow g}$  neben der Feinstrukturwichtung die systemabhängige Grobwichtung zu berücksichtigen. Die von  $\ell$  abhängige Grobwichtung kann für  $\ell = 5 \dots 10$  nur ungenau, z.B. aus Vielgruppen- $S_N$ - $T_1$ -Rechnungen, angegeben werden. Die daraus resultierenden Unsicherheiten, besonders in den elastischen Transferquerschnitten höherer Ordnung,

lassen daher bei Weniggruppenrechnungen keine zuverlässige Verbesserung in der Behandlung der elastischen Anisotropie durch Approximationsordnungen  $L > 5$  erwarten.

Beiträge zur anisotropen Streuung zu  $\ell > 5$  werden in dieser Untersuchung näherungsweise durch die Transportnäherung 5. Ordnung,  $T_5$ , berücksichtigt. Nach der damit erreichbaren guten Übereinstimmung zum Experiment - Kap.7 und 8 - ist dies eine gute Näherung für Anordnungen wie die dort untersuchten.

### 5.3 Numerische Integrationen in FLUMMI

Nach dem vorangegangenen Kap. 5.2 sind die folgenden Integrale numerisch zu berechnen:

$$(5.16) \quad w_{\ell}(E \rightarrow g) = 2\pi \int_{\mu_o(E, E_g)}^{\mu_o(E, E_{g-1})} d\mu_o w_{e1}(\mu_o, E) P_{\ell}(\mu_o)$$

$$(5.17) \quad R_{e1, \ell}^{g \rightarrow h} \equiv \int_g dE \sigma_{e1}(E) w_{\ell}(E \rightarrow h) \psi_{\ell}(E)$$

$$(5.18) \quad R_{t, \ell}^g \equiv \int_g dE \sigma_t(E) \psi_{\ell}(E)$$

$$(5.19) \quad \psi_{\ell}^g = \int_g dE \psi_{\ell}(E)$$

$$(5.20) \quad \sigma_{e1}^g = \int_g dE \sigma_{e1}(E) \psi_0(E)$$

}  $\ell = 0, \dots, 5$

Die Integranden enthalten die elastischen Streuwinkelverteilungen  $w_{e1}(\mu_o, E)$  im Laborsystem nach (5.4), die Legendre-Polynome  $P_{\ell}(\mu_o)$ , den elastischen Streuwirkungsquerschnitt  $\sigma_{e1}(E)$ , den totalen Wirkungsquerschnitt  $\sigma_t(E)$  und die Wichtungsfunktionen  $\psi_{\ell}(E)$ . Die Wirkungsquerschnitte  $\sigma_{e1}(E)$  und  $\sigma_t(E)$  und die Streuwinkelverteilungen  $w_{e1}(\mu_o, E)$  werden der Kerndatenbibliothek KEDAK /11/ entnommen, in der sie isotopweise für diskrete Energiewerte  $E_i$

im Laborsystem und diskrete Werte  $\bar{\mu}_{0,i}$  des Kosinus des Streuwinkels im Schwerpunktsystem gespeichert sind. Die Transformation der Streuwinkelverteilungen vom Schwerpunkt ins Laborsystem erfolgt nach den bekannten Beziehungen

$$(5.21) \quad \bar{\mu}_0 = \frac{1}{A}(\mu_0^2 - 1 + \mu_0 \sqrt{\mu_0^2 - 1 + A^2})$$

und

$$(5.22) \quad w_{el}(\mu_0, E) = \bar{w}_{el}(\bar{\mu}_0, E) \frac{d\bar{\mu}_0}{d\mu_0}.$$

Die quergestrichenen Größen sind Größen im Schwerpunktsystem, ungestrichene Größen sind auf das Laborsystem bezogen. A ist die Massenzahl des streuenden Atomkerns, bezogen auf das Neutron.

Die Integrale (5.16) bis (5.20) werden durch endliche Summen approximiert, ausgenommen (5.16) im Fall elastischer Isotropie im Schwerpunktsystem, in dem die Berechnung analytisch erfolgt. Das bei dieser Summation zugrunde gelegte Stützstellennetz enthält die durch die Tabellierung auf KEDAK gegebenen Stützstellen eines jeden Faktors des Integranden. Mit den Wichtungsfunktionen (5.15) bedeutet dies insbesondere, daß neben den Stützstellen der Stoßdichte F die Stützstellen jedes zu  $\Sigma_t$  beitragenden Isotops bei der Integration berücksichtigt werden. Die dazu erforderliche Interpolation der Wirkungsquerschnitte und der Stoßdichte erfolgt linear. Die Integrale (5.17) bis (5.20) werden mit Hilfe der im Anhang D beschriebenen verbesserten Trapezintegration berechnet. Ein besonderes Augenmerk ist auf die Bestimmung der "Übergangswahrscheinlichkeiten"  $w_g(E \rightarrow g)$  nach (5.16) zu richten.

Bei isotroper elastischer Streuung im Schwerpunktsystem ist - vgl. dazu

(5.22) -  $\bar{w}_{el}(\bar{\mu}_0, E) = 1/4\pi = \text{const}$ , so daß unter Verwendung von (5.21)

$$(5.23) \quad w_{el}(\mu_0, E) = \frac{1}{4\pi} \frac{1}{A} \frac{(\mu_0 + \sqrt{\mu_0^2 - 1 + A^2})^2}{\sqrt{\mu_0^2 - 1 + A^2}}$$

unabhängig von der Neutronenenergie E ist. Setzt man

$$(5.24) \quad B_\ell(\omega, A) \equiv \frac{1}{2A} \int_{-1}^{\omega} d\mu_0 P_\ell(\mu_0) \frac{(\mu_0 + \sqrt{\mu_0^2 - 1 + A^2})^2}{\sqrt{\mu_0^2 - 1 + A^2}},$$

so läßt sich  $w_\ell(E \rightarrow g)$  nach analytischer Berechnung der Integrale  $B_\ell(\omega, A)$  aus den für diskrete  $\omega_i$ -Werte gespeicherten  $B_\ell(\omega_i, A)$ -Werten bestimmen. Für  $\ell \leq 5$  erweisen sich 321 äquidistante  $\omega_i$ -Stützstellen im Intervall  $[-1, +1]$  als ausreichend.

Bei anisotroper elastischer Streuung im Schwerpunktsystem wird, da in diesem Fall die Streuwinkelverteilungen  $w_{el}(\mu_0, E)$  nach (5.22) aus an diskreten  $\bar{\mu}_{0,i}$ -Werten auf KEDAK gespeicherten Verteilungen  $\bar{w}_{el}(\bar{\mu}_{0,i}, E)$  berechnet werden, die Integration (5.16) numerisch ausgeführt. Wegen der Legendre-Polynome  $P_\ell(\mu_0)$  im Integranden von (5.16) hat dieser im Intervall  $[-1, +1]$   $\ell$  Nullstellen, so daß sich Beiträge aus Bereichen unterschiedlichen Vorzeichens teilweise kompensieren. Diese Kompensation wird in FLUMMI durch eine mit  $\ell$  zunehmende Verfeinerung des  $\mu_0$ -Stützstellennetzes erfaßt - Tabelle 5.1.

Tabelle 5.1: Anzahl äquidistanter  $\mu_0$ -Stützstellen im Intervall  $[-1, +1]$  zur Berechnung von  $w_\ell(E \rightarrow g)$  bei anisotroper elastischer Streuung im Schwerpunktsystem.

$\ell$	0	1	2	3	4	5
Stützstellenzahl	81	81	161	161	321	321

Die  $\mu_0$ -Stützstellen werden zur Durchführung einer Simpson-Integration /17/ äquidistant gebildet. Die Interpolation auf dieses Stützstellennetz erfolgt mit Hilfe des im Anhang E beschriebenen Verfahrens mit Polynomen bis 3. Grades.

Die Bestimmung des Integrals (5.17) durch verbesserte Trapezintegration - Anhang D - erfordert ein Energiestützstellennetz, in welchem die "Über-

gangswahrscheinlichkeiten"  $w_\ell(E \rightarrow g)$  zwischen benachbarten Stützstellen als linear in der Energie angenommen werden dürfen. Die  $w_\ell(E \rightarrow g)$  haben eine Form, wie sie qualitativ Fig. 5.1 für  $\ell = 5$  zeigt.

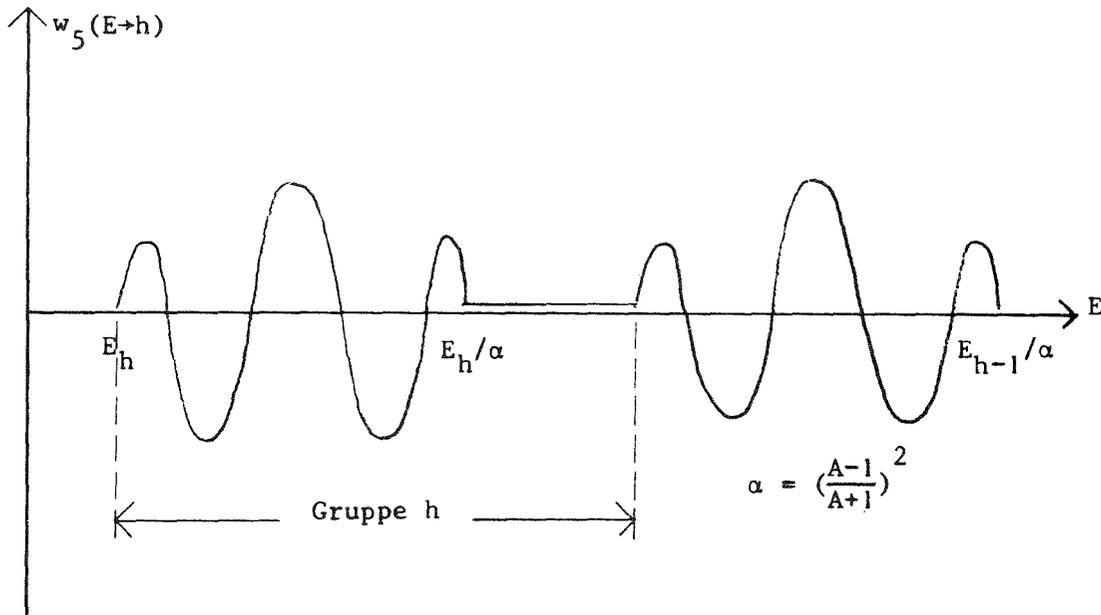


Fig. 5.1: Qualitative Darstellung von  $w_5(E \rightarrow h)$

Es ist daher für Energien  $E$  mit  $E_h \leq E \leq E_h/\alpha$ , für welche die  $w_\ell(E \rightarrow h)$  u.U. mehrmals das Vorzeichen wechseln, eine größere Anzahl von Energiestützstellen erforderlich als für Energien  $E$  mit  $E_h/\alpha \leq E \leq E_{h-1}$ , für die  $w_\ell(E \rightarrow g)$  nur schwach von der Energie abhängt. Im Energieintervall  $[E_h, E_h/\alpha]$ , das über  $\alpha$  von der Massenzahl des streuenden Atomkerns abhängt, erweisen sich 70 Energiestützstellen  $E_i$  mit  $E_i/E_{i+1} = \text{const.}$  für  $\ell \leq 5$  für die lineare Interpolierbarkeit der  $w_\ell(E \rightarrow h)$  als ausreichend. Im Restintervall  $[E_h/\alpha, E_{h-1}]$  genügen dann 16 Energiestützstellen. Im Falle  $E_h/\alpha > E_{h-1}$  entfällt dieses Restintervall, als Stützstellenzahl in der Gruppe  $h$  wird dann  $70 \cdot \ln(E_{h-1}/E_h)/\ln(1/\alpha)$ .

6. Untersuchung des Einflusses der Wichtung auf 208-Gruppen-Wirkungs-  
querschnitte  $\sigma_{t,l}^g$  und  $\sigma_l^{g' \rightarrow g}$

6.1 Einführung

Die in Multigruppen-Neutronentransportrechnungen zur Berücksichtigung der Anisotropie der Neutronenflußdichte und der elastischen Neutronenstreuung benötigten Gruppenwirkungsquerschnitte  $\sigma_{t,l}^g$  und  $\sigma_l^{g' \rightarrow g}$  enthalten als Wichtungsfunktionen die  $l$ -ten Momente  $\psi_l(x,E)$  der Neutronenflußdichte. Diese Momente, zur Bildung ortszonenweise konstanter Gruppenwirkungsquerschnitte in geeigneten Unterzonen des Reaktors durch räumliche Mittelwerte  $\psi_l(E)$  approximiert, weisen in Energiebereichen mit resonanzförmigem Verlauf des totalen Wirkungsquerschnitts u.U. starke Fluktuationen auf, die durch die Approximationen (B.27) oder (B.28) für  $\psi_l(E)$  näherungsweise beschrieben werden. Für den Energiebereich oberhalb etwa 100 keV, also oberhalb der dopplerverbreiterten Resonanzen der schweren und mittelschweren Kerne, für den hier mit Hilfe der Transportnäherungen energieabhängiger Ordnung eine verbesserte Behandlung der elastischen Anisotropie vorgenommen wird, stellt sich die Frage nach dem Einfluß der Wichtung auf die Gruppenwirkungsquerschnitte  $\sigma_{t,l}^g$  und  $\sigma_l^{g' \rightarrow g}$  in Abhängigkeit von der Breite der Energiegruppen. Muß bei insgesamt 200 - 300 Energiegruppen der makroskopische Verlauf der Wichtungsfunktionen (Grobwichtung), beschrieben durch die Stoßdichte  $F(E)$ , berücksichtigt werden? Lösen 200 - 300 Energiegruppen die Resonanzen der schweren und mittelschweren Kerne oberhalb 100 keV auf, so daß 200 - 300 Gruppenquerschnitte ohne Feinstrukturwichtung nach Kondensation mit systemeigenen Spektren oder mit Spektren gemäß  $\psi_l^g = \int \frac{dE}{g} F(E) / [\Sigma_t(E)]^{\ell+1}$  für anisotrope Weniggruppenrechnungen benutzt werden können? Des weiteren wurden die nach Anhang B möglichen Feinstrukturwichtungen proportional  $1/[\Sigma_t(E)]^{\ell+1}$  und  $1/[\Sigma_{tR}(E)]^{\ell+1}$  verglichen; es wird untersucht, ob zur Verminderung des Rechenaufwandes die Feinwichtung proportional  $1/[\Sigma_t(E)]^{\ell+1}$  durch  $1/\Sigma_t(E)$  (Flußwichtung) ersetzt werden darf.

Die Untersuchungen wurden am Beispiel einer aus dem Strukturmaterial Eisen bestehenden Zone für den Energiebereich  $E \geq 1$  MeV durchgeführt, da dieser Bereich nach Abb. 6.1 einerseits einige ausgeprägte Resonanzen des totalen Eisenwirkungsquerschnitts  $\sigma_t(E)$  enthält und da andererseits die elastische Neutronenstreuung dort bereits deutlich anisotrop ist. Es wird weiter untersucht, ob die für Eisen hinsichtlich der anisotropen Feinstrukturwichtung proportional  $1/\Sigma_t^{\ell+1}$  gewonnenen Resultate auch für das Kühlmittel Natrium und den im oxidischen Brennstoff enthaltenen Sauerstoff gelten. Es wird die Karlsruher 208-Gruppeneinteilung zugrunde gelegt, die Gruppengrenzen sind z.B. aus Abb. 6.1 ersichtlich. Die Gruppenquerschnitte  $\sigma_{t,\ell}^g$  und  $\sigma_{\ell}^{g \rightarrow g}$  wurden mit dem Programm FLUMMI berechnet. Der Einfluß der Wichtung von Gruppenquerschnitten in Reaktorrechnungen wird in Kap. 7 am Beispiel der schnellen kritischen Anordnung ZPR III-56B diskutiert.

## 6.2 Einfluß der Grobwichtung bei Eisen

Dazu wurde in den gemäß (B.28) zur Wichtung benutzten  $\ell$ -ten Momenten der Neutronenflußdichte

$$(6.1) \quad \psi_{\ell}(E) = \frac{F(E)}{[\Sigma_t(E)]^{\ell+1}}, \quad \Sigma_t(E) \text{ von Eisen}$$

die Stoßdichte

$$(6.2) \quad F(E) = \begin{cases} 1/E \\ 1 \\ E \end{cases}$$

gesetzt. Die resultierenden Unterschiede in  $\sigma_{t,\ell}^g$  und  $\sigma_{\ell}^{g \rightarrow g}$  sind für  $\ell \leq 5$  kleiner als 1 %. Der Einfluß der mit der Energie schwach veränderlichen Grobwichtung nach (6.2) auf die 208-Gruppen- $\sigma_{t,\ell}^g$  und  $\sigma_{\ell}^{g \rightarrow g}$  ist daher vernachlässigbar.

### 6.3 Einfluß der Feinstrukturwichtung bei Eisen

Abb. 6.1 zeigt neben den totalen Wirkungsquerschnitten  $\sigma_t(E)$  für Eisen mikroskopische Gruppenwirkungsquerschnitte  $\sigma_{t,\ell}^g$  für Neutronenenergien von 1. - 2.4 MeV. Das obere Histogramm ( $\square$ ) stellt den totalen Gruppenquerschnitt ohne Feinstrukturwichtung dar. Darunter liegen, abnehmend mit  $\ell$ , die mit  $\psi_\ell(E)$  nach (6.1) gewichteten  $\sigma_{t,\ell}^g$ -Werte. Zur Grobwichtung, deren Einfluß nach dem vorangegangenen Abschnitt 6.2 vernachlässigbar ist, wurde jeweils  $F(E) = 1/E$  verwendet. Der  $\psi_5$ -gewichtete Querschnitt  $\sigma_{t,5}^g$  liegt in diesem Energiebereich bis zu 30 % unterhalb des Querschnitts ohne Feinstrukturwichtung.

Streumatrixelemente für elastische Neutronenstreuung an Eisen sind auf den Abb. 6.2 bis 6.5 für Neutronenenergie zwischen 1.0 und 2.4 MeV dargestellt. Es sind  $\sigma_\ell^{g \rightarrow g'}$ ,  $\sigma_\ell^{g \rightarrow g+1}$ ,  $\sigma_\ell^{g \rightarrow g+2}$  für  $\ell = 0, 1, 3, 5$  ohne und mit Feinstrukturwichtung nach (6.1) aufgetragen - für  $g' > g+2$  ist in der 208-Gruppeneinteilung für elastische Streuung an Eisen  $\sigma_\ell^{g \rightarrow g'} = 0$ .

Der in die  $\sigma_\ell^{g \rightarrow g'}$  eingehende und für  $\ell > 0$  zu teilweisen Kompensationen führende Verlauf der Legendre-Polynome - vgl. Abschnitt 5.2 - bewirkt bei den Transferquerschnitten  $\sigma_\ell^{g \rightarrow g'}$  eine teilweise deutlich stärkere und außerdem andere Abhängigkeit von der Wichtung als bei den totalen Gruppenwirkungsquerschnitten. Während im betrachteten Energiebereich die Feinstrukturwichtung den totalen Gruppenwirkungsquerschnitt stets reduziert, hat die Feinstrukturkorrektur für die Transferquerschnitte  $\sigma_\ell^{g \rightarrow g'}$  in benachbarten Energiegruppen teilweise verschiedene Vorzeichen. Die Berücksichtigung der Feinstrukturwichtung bewirkt, zunehmend mit  $\ell$ , teilweise große relative Änderungen (u.U. bis zu 100 %) in einzelnen Transferquerschnitten, es kann sogar ein Vorzeichenwechsel der Streumatrixelemente höherer Ordnung eintreten.

Die elastischen Transferquerschnitte und damit die Beschreibung der energetischen Verteilung der Neutronen nach einem anisotropen elastischen Stoß an Strukturmaterialien wie Eisen erweisen sich damit in der 208-Gruppen-

einteilung als relativ empfindlich bezüglich der energetischen Fluktuationen der Momente der Neutronenflußdichte. Als verallgemeinernde Folgerung ergibt sich: Die Bestimmung von 208-Gruppenquerschnitten  $\sigma_{t,\ell}^g$  für Reaktorzonen mit resonanzförmigem Verlauf des totalen Neutronenwirkungsquerschnitts  $\Sigma_t(E)$  oberhalb 100 keV sollte oberhalb 100 keV unter Berücksichtigung der Feinstruktur der Momente der Neutronenflußdichte, die näherungsweise proportional  $1/[\Sigma_t(E)]^{\ell+1}$  ist, erfolgen. Eine Vernachlässigung der Feinstrukturwichtung kann Ungenauigkeiten von  $\approx 50\%$  bis über  $100\%$  in  $\sigma_{t,\ell}^g$  zur Folge haben.

#### 6.4 Feinstrukturwichtungen proportional $1/\Sigma_{tr}^{\ell+1}$ und $1/\Sigma_t^{\ell+1}$ für $\ell > 0$ bei Eisen

Bei Verwendung der numerisch in einfacherer Weise zu realisierenden Wichtungsfunktionen (6.1) bleibt der Einfluß der anisotropen Streuung auf die Wichtung, der bei Ginsberg und Becker /7/ über die "sequential transport approximation" mitgenommen wird - s. Anhang B, (B.27) - unberücksichtigt. Eine Abschätzung dieses Anisotropieeffekts zweiter Ordnung unter Berücksichtigung der Streuanisotropie bis zur 1. Ordnung mit Hilfe des Transportquerschnitts in der oft benutzten Näherung  $\Sigma_{tr} = \Sigma_t - \Sigma_{el,1} = \Sigma_t - \bar{\mu} \Sigma_{el}$  kann über eine Approximation der "sequential transport approximation" erfolgen. Wir vernachlässigen dazu in (B.27) den Anflußterm  $DB^2$  gegenüber  $\Sigma_t$  und setzen  $\Sigma_\ell \approx \Sigma_1$  für  $\ell > 1$  - letzteres bedeutet eine Approximation des differentiellen elastischen Streuwirkungsquerschnitts  $\Sigma_{el}(\mu_0, E)$  durch einen isotropen Anteil plus eine  $\delta$ -Komponente in Vorwärtsrichtung - und erhalten

$$(6.3) \quad \left\{ \begin{array}{l} \psi_0(E) \sim 1/\Sigma_t(E) \\ \psi_\ell(E) \sim 1/\Sigma_t(E) \times 1/[\Sigma_{tr}(E)]^\ell \quad \ell = 1, 2, \dots \end{array} \right.$$

Wird zur Vereinfachung der numerischen Rechnung noch in (6.3) für  $\ell > 0$   $\Sigma_t$  durch  $\Sigma_{tr}$  ersetzt - dies bedeutet einen verstärkten Einfluß der Streuanisotropie auf die Wichtung -, so wird unter Mitnahme der Grobwichtung

$$(6.4) \quad \psi_\ell(E) = \frac{F(E)}{[\Sigma_{tr}(E)]^{\ell+1}} \quad \ell = 1, 2, 3, \dots$$

Die Abb. 6.6 bis 6.8 zeigen elastische Transferquerschnitte  $\sigma_{\ell}^{g \rightarrow g}$  für Eisen für Neutronenenergien von 1.0 - 2.4 MeV, berechnet mit Wichtungsfunktionen nach (6.4) und (6.1).

Es ist zu erkennen, daß ein Einfluß der anisotropen Feinstrukturwichtung über  $1/\Sigma_{tr}^{\ell+1}$  im Bereich der Resonanzen von  $\Sigma_t$  für Eisen unterhalb etwa 1.5 MeV vorhanden ist: Wir finden Abweichungen von 3 % in  $\sigma_1^{g \rightarrow g}$ , 4 % in  $\sigma_3^{g \rightarrow g}$  und 20 % in  $\sigma_5^{g \rightarrow g}$ . Die Abweichungen  $\sigma_5^{g \rightarrow g}$  sind jedoch vernachlässigbar; dies ist z.B. Abb. 6.9 zu entnehmen und überdies zeigt sich bei der Untersuchung der Anordnung ZPRII-56B in Kap. 7., daß im Energiebereich unterhalb 2.5 MeV die elastische Streuung 5. Ordnung praktisch keinen Beitrag liefert - vgl. dazu Abb. 7.8 - . Zur Abschätzung des Beitrages der anisotropen Wichtung für  $\ell = 3$  und  $\ell = 1$  sind in Tabelle 6.1 Gruppenquerschnitte für die Gruppe von 1.242 - 1.292 MeV - vgl. Abb. 6.6 und 6.7 - zusammengestellt.

Tabelle 6.1: Gruppenquerschnitte in barn in der Energiegruppe von 1.242 - 1.292 MeV für Eisen in reinem Eisen

	$\ell = 1$		$\ell = 3$	
	$1/\Sigma_t^2$ -Wicht.	$1/\Sigma_{tr}^2$ -Wicht.	$1/\Sigma_t^4$ -Wicht.	$1/\Sigma_{tr}^4$ -Wicht.
$\sigma_{t,\ell}$	2.6740	2.6810 (0.3)*	2.5750	2.5920 (0.7)*
$\sigma_{\ell}^{g \rightarrow g}$	0.7323	0.7502 (2.5)	0.1887	0.1810 (-4.1)
$\sigma_{\ell}^{g \rightarrow g+1}$	-0.0818	-0.1091	0.0204	0.0296
$\sigma_{\ell}^{g \rightarrow g+2}$	-0.3389	-0.3201	-0.0586	-0.0580
$\sigma_{tr,\ell}^g$	2.3624	2.3599 (0.1)	2.4245	2.4394 (0.6)

\* prozentuale Abweichung gegenüber  $1/\Sigma_t^{\ell+1}$ -Wichtung

Die unterste Zeile in Tabelle 6.1 enthält den in der Option 1 gemäß  $\sigma_{tr,\ell}^g = \sigma_{t,\ell}^g - \sum_{g' \geq g} \sigma_{\ell}^{g \rightarrow g'}$  berechneten Transportquerschnitt. Wir stellen fest, daß bei der Bildung des Transportquerschnitts, der ein Maß für die Leckage ist, der Einfluß der anisotropen Wichtung zum großen Teil kompensiert wird. Die für  $\sigma_{tr,3}^g$  und  $\sigma_{tr,1}^g$  ermittelten Unsicherheiten von 0.6 bzw. 0.1 % fallen nicht ins Gewicht. Ein Einsatz einer aus der  $P_L$ -Darstellung der Boltzmann-Gleichung näherungsweise folgenden, im Vergleich zur  $1/\Sigma_t^{\ell+1}$ -Wichtung etwas aufwendigeren  $1/(\Sigma_t \cdot \Sigma_{tr}^{\ell})$ -Wichtung, sollte daher i.a. nicht erforderlich sein.

#### 6.5 Feinstrukturwichtung proportional $1/\Sigma_t$ für alle $\ell = 0, 1, 2, \dots$ (Flußwichtung) bei Eisen

Bei der numerischen Berechnung von Gruppenwirkungsquerschnitten mit einer Feinstrukturwichtung proportional  $1/\Sigma_t^{\ell+1}$  ist für jedes  $\ell$  eine erneute Bestimmung der Wichtungsfunktion und des Normierungsintegrals  $\psi_{\ell}^g = \int dE F(E) / [\Sigma_t(E)]^{\ell+1}$  erforderlich. Es stellt sich die Frage, ob im Hinblick auf eine Vereinfachung des numerischen Verfahrens die Wichtungsfunktion  $\psi_{\ell}(E) = F(E) / [\Sigma_t(E)]^{\ell+1}$  durch die skalare Flußdichte, approximiert durch  $\psi_0(E) = F(E) / \Sigma_t(E)$  angenähert werden darf. Die Abb. 6.10 bis 6.12 zeigen elastische Streumatrixelemente für Eisen jeweils mit  $\psi_0$ - und  $\psi_{\ell}$ -Wichtung. Auch im Energiebereich schwächer ausgeprägter Resonanzen von  $\Sigma_t$  oberhalb 1.6 MeV - vgl. Abb. 6.1 - sind deutliche Unterschiede zwischen  $\psi_0$ -gewichteten Transferquerschnitten insbesondere für  $\ell = 5$  auf Abb. 6.12 sichtbar; sie erreichen 50 % im dominanten Querschnitt  $\sigma_5^{g \rightarrow g}$ , für  $\ell = 1$  - Abb. 6.10 - betragen sie nahezu 10 % in  $\sigma_1^{g \rightarrow g}$ . Ein Vergleich von Abb. 6.12 und Abb. 6.5 zeigt, daß die reine Flußwichtung zu Ungenauigkeiten in den Transferquerschnitten führt, die mit denen bei Vernachlässigung der Feinstrukturwichtung vergleichbar sind. Als Folgerung ergibt sich: Die Feinstruktur der Wichtungsfunktionen höherer Ordnung  $\psi_{\ell}(E)$ ,  $\ell > 0$ , wird durch die Flußwichtung mit  $\psi_0(E) \sim 1/\Sigma_t$  nicht ausreichend wiedergegeben; es wird empfohlen,  $\sigma_{t,\ell}^g$  und  $\sigma_{\ell}^{g' \rightarrow g}$  für  $\ell > 0$  mit  $\psi_{\ell}(E) \sim 1/\Sigma_t^{\ell+1}$  zu bilden.

6.6 Einfluß der Feinstrukturwichtung bei Sauerstoff und Natrium

In schnellen natriumgekühlten Reaktoren mit oxidischen Brennstoffen ist im Maximum des Neutronenspektrums bei einigen 100 keV die elastische Streuung an Sauerstoff und Natrium, an Strukturmaterialien wie Eisen und an den schweren Brennstoffkernen die überwiegende Neutronenreaktion. Bei der schnellen kritischen Anordnung ZPR III-56B /18/ z.B. finden von den elastischen Streuprozessen bei 500 keV etwa 34 % an Sauerstoff, 17 % an Natrium, 19 % an Eisen und 18 % an U238 statt. Da oberhalb 100 keV die totalen Wirkungsquerschnitte schwerer Kerne im Vergleich zu denen der mittelschweren und leichteren Kerne als glatt angesehen werden können und da außerdem die elastische Degradation wegen der Schwere dieser Materialien eine untergeordnete Rolle spielt, ist damit bei Beschränkung auf die wichtigsten Reaktormaterialien nach der Diskussion von Eisen als Beispiel für die Strukturmaterialien nur noch für Sauerstoff und Natrium die Frage nach dem Einfluß der Feinstrukturwichtung bei der Bildung der  $\sigma_{t,\ell}^g$  und der elastischen Transferquerschnitte  $\sigma_{\ell}^{g \rightarrow g}$  offen. Es ist insbesondere zu klären, welche Unsicherheiten in den Gruppenquerschnitten im Vergleich zu der von Becker und Ginsberg vorgeschlagenen  $1/(\Sigma_t \cdot \Sigma_{tr}^{\ell})$ -Wichtung, die hier durch  $1/\Sigma_{tr}^{\ell+1}$  für  $\ell > 0$  angenähert wird, für Sauerstoff bei der 440 keV-Resonanz auftreten, bei welcher  $\Sigma_{tr}(E)$  aufgrund des negativen mittleren Streukosinus  $\bar{\mu}(E)$  einen anderen Verlauf als  $\Sigma_t(E)$  aufweist. Die bei Ermittlung der maximalen Abweichungen der  $1/\Sigma_{tr}^2$ -gewichteten Gruppenquerschnitte im Energiebereich von 0.2 - 1.0 MeV für O16 sich ergebenden Querschnittswerte sind in Tabelle 6.2 zusammengestellt.

Tabelle 6.2: Gruppenquerschnitte in barn für O16 in der Gruppe  
441.6 - 464.1 keV (O16-Resonanz)

	$1/\Sigma_t^2$ -Wichtung	$1/\Sigma_{tr}^2$ -Wichtung	Mischung
$\sigma_{t,l}^g$	13.78	13.54 (-1.7)*	reiner
$\sigma_l^{g \rightarrow g}$	3.169	3.331 (+5.1)	Sauer-
$\sigma_{tr,l}^g$	8.983	8.721 (-2.9)	stoff
$\sigma_{tr,l}^g$	9.115	8.991 (-1.4)	Core ZPRIII-56B

\* prozentuale Abweichung gegenüber  $1/\Sigma_t^2$ -Wichtung

Bei 440 keV wird der Hauptteil der elastischen Anisotropie durch die  $T_1$ -Näherung mit Hilfe des Transportquerschnitts  $\sigma_{tr,l}^g$  beschrieben, der in der Option 1 - vgl. Kapitel 4.4 - durch  $\sigma_{tr,l}^g = \sigma_{t,l}^g - \sum_{g' \geq g} \sigma_l^{g \rightarrow g'}$  gegeben ist. Für den Transportquerschnitt  $\sigma_{tr,l}^g$  ergibt sich - Tab. 6.1 - in reinem Sauerstoff bei Abweichungen von -1.7 % und 5.1 % in  $\sigma_{t,l}^g$  bzw.  $\sigma_l^{g \rightarrow g}$  eine Abweichung von -2.9 %, wenn anstelle von  $1/\Sigma_t^2$  mit  $1/\Sigma_{tr}^2$  gewichtet wird. Da in Reaktoren die Sauerstoffresonanz durch andere Materialien energetisch abgeschirmt ist, reduziert sich diese Abweichung z.B. bei der Anordnung ZPRIII-56B auf -1.4 %. Da weiter Sauerstoff in dieser Anordnung nur zu etwa 30 % zum makroskopischen Transportquerschnitt  $\Sigma_{tr,l}^g$  beiträgt, verbleibt in  $\Sigma_{tr,l}^g$  bei der 440 keV-Sauerstoffresonanz bei Anwendung der  $1/\Sigma_t^{l+1}$ -Wichtung eine vernachlässigbare Unsicherheit von weniger als 0.5 %.

Bei Natrium liegt die bedeutendste Resonanz bei 3 keV, also in einem Energiebereich, in dem aufgrund der im Schwerpunktsystem isotropen elastischen Streuung- $1/\Sigma_t^2$ - und  $1/\Sigma_{tr}^2$ -Wichtung gleichwertig sind.

## 7. Die kritische Anordnung ZPRIII-56B

### 7.1 Problemstellung

Zur Überprüfung des KFKINR-Gruppenkonstantensatzes /19/ zur Berechnung schneller Reaktoren wurden von Kiefhaber /20/ 1972 für einige kritische Anordnungen der US Cross Section Evaluation Working Group CSEWG der effektive Multiplikationsfaktor  $k_{\text{eff}}$  und Spaltratenverhältnisse unter Verwendung des KFKINR-Satzes bestimmt. Für das Kugelmodell der Anordnung ZPRIII-56B, die aus einem plutoniumhaltigen Kern und einem Reflektor i.w. aus Nickel besteht, ergab sich dabei für  $k_{\text{eff}}$  ein mit dem gemessenen Wert  $k_{\text{eff}}^{\text{exp}} = 1.000 \pm 0.0014$  zufriedenstellend übereinstimmender Wert von  $k_{\text{eff}}^{\text{cal}} = 1.0003$ ; dabei wurde jedoch für Nickel der Transportquerschnitt des KFKINR-Satzes verwendet, der ungenaue f-Faktoren des ABN-Satzes /21/ zur Berücksichtigung der energetischen Selbstabschirmung enthält. Weiter wurde für das Spaltratenverhältnis  $\sigma_f(\text{Pu240})/\sigma_f(\text{U235})$  ein unbefriedigender, im Vergleich zum Experiment um nahezu 20 % zu kleiner Wert ermittelt. Kiefhaber zeigt, daß  $k_{\text{eff}}$  für ZPRIII-56B stark abhängt von den Transportquerschnitten  $\sigma_{\text{tr}} = \sigma_t - \bar{\mu} \cdot \sigma_s$  für den Nickelreflektor, die durch den mittleren Streukosinus  $\bar{\mu}$  wesentlich die Neutronenverluste durch anisotrope Leckage bestimmen.

Es stellt sich die Frage, ob für diese Anordnung durch konsistente Berechnung im Rahmen der Transporttheorie bei verbesserter energetischer Resonanzabschirmung, insbesondere im Reflektor, nach der in dieser Arbeit dargestellten Theorie die Ergebnisse verbessert und damit eine ausreichende Übereinstimmung mit dem Experiment erreicht werden kann.

Es wird außerdem der Einfluß der Feinstrukturwichtung und der ortsabhängigen Grobwichtung, der in Kap. 6 bezüglich Gruppenwirkungsquerschnitte untersucht wurde, hinsichtlich einer eventuellen Verbesserung der theoretischen Vorhersage von Reaktionsraten und  $k_{\text{eff}}$  ermittelt.

Da nach neueren Messungen /22/ die bisher benutzten Einfangwirkungsquerschnitte für Nickel zwischen 10 und 100 keV vermutlich um 50 % zu klein

sind, wird neben den obigen Fragestellungen auch der Einfluß eines erhöhten Einfangquerschnitts für Nickel auf die interessierenden Größen untersucht.

### 7.2 Ausgangsdaten und verwendete Methoden

Die Spezifikationen für die Benchmark-Anordnung ZPRIII-56B, angegeben von Kidman /18/, sind in Tab. 7.1 zusammengestellt.

Tabelle 7.1: Abmessungen und Materialzusammensetzung der kritischen Anordnung ZPRIII-56B

Zone	Rechter Radius	Materialien <sup>+</sup>	Teilchenzahndichten $10^{-24}$
1(Core)	13,0 cm	C	.00103
		FE	.0137
		CR	.00272
		NA23	.008669
		NI	.00109
		MO	.000343
		O 16	.015
		U235	.000014
		U238	.006195
		PU239	.001358
		PU240	.000181
2(Core)	52.72 cm	wie Zone 1	
3(Reflektor)	87.06 cm	FE	.007824
		CR	.002241
		NA23	.007879
		NI	.042261

<sup>+</sup> KEDAK-Nomenklatur

Zur näherungsweise Berücksichtigung der Ortsabhängigkeit der Transferquerschnitte oberhalb 46.5 keV wurde das Core in zwei Unterzonen unterteilt. Der Reflektor wurde als eine Unterzone behandelt.

Die Transportrechnungen wurden mit dem eindimensionalen  $S_N$ -Code DTK /13/ durchgeführt.

Multigruppenquerschnitte wurden teilweise mit dem Programm GRUCAL /23/ in 26 Energiegruppen aus dem KFKINR-Gruppenkonstantensatz erstellt. Abweichend von dem Verfahren der ausschließlichen Verwendung von KFKINR-Daten wurden Transportquerschnitte mit konsistenter energetischer Selbstabschirmung und elastische Streumatrizen nullter Ordnung für  $S_N$ - $T_1$ -Rechnungen mit den Programmen FLUMMI und ELAS bereitgestellt - vgl. dazu Kap.5 und Abb. 7.15. Diese Programme wurden auf der Basis der hier dargelegten Theorie neu erstellt. Ebenfalls wurden mit diesen Programmen die von GRUCAL nicht gelieferten Transportquerschnitte und elastischen Streumatrizen für Transportnäherungen höherer Ordnung bereitgestellt. Die ortsabhängige Kondensation der 208-Gruppen-Querschnitte der ELAS-Datei wurde mit zonen-gemittelten Momenten der Neutronenflußdichte aus einer 208-Gruppen-Rechnung in einfacher Transportnäherung vorgenommen.

Es wurde - dies ist auf Fig. 7.1 veranschaulicht - in Abhängigkeit von der Neutronenenergie

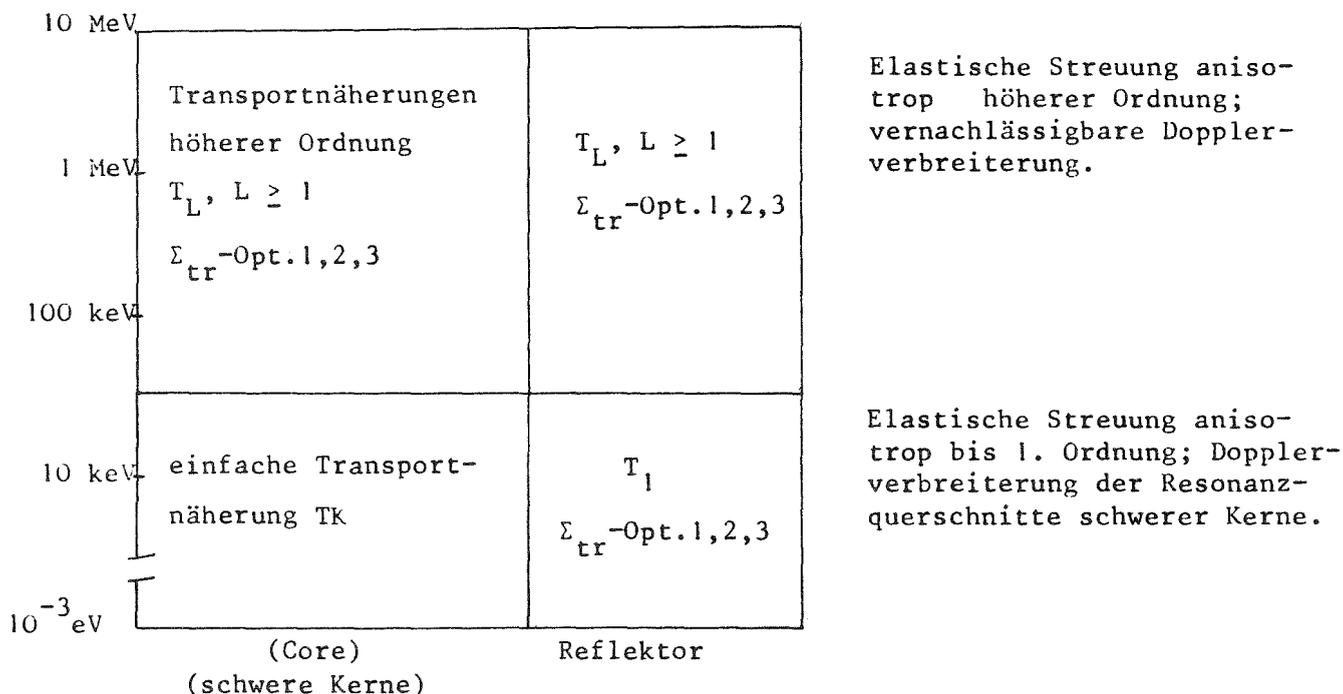


Fig. 7.1: Schematische Darstellung der Anwendung verschiedener Transportnäherungen zur Berechnung von ZPRIII-56B

und der Ortszone die in Kap. 5 definierten Transportnäherungen  $T_L$ ,  $L \geq 1$  oder die einfache Transportnäherung, TK, angewendet. Dabei bezeichnet Option 1,2,3, den gemäß (4.40) bzw. (4.37) bzw. (4.35) in "extended transport approximation" oder in konsistenter Transportnäherung berechneten Transportquerschnitt. Mit den Transportnäherungen  $T_L$ , die in Energie- und Ortsbereichen mit vernachlässigbarer Dopplerverbreiterung der Resonanzquerschnitte angewendet wurden, wird damit neben der verbesserten Beschreibung der elastischen Anisotropie eine konsistente energetische Selbstabschirmung der Transportquerschnitte erreicht. Bei Strukturmaterialien wie Eisen, Nickel, Chrom ist die Dopplerverbreiterung der Resonanzquerschnitte in guter Näherung vernachlässigbar. Es wird daher im Reflektor für alle Energiegruppen die  $T_L$ -Näherung angewendet. Im Core wird im Energiebereich unterhalb 46.5 keV mit schwach ausgeprägter Anisotropie der elastischen Neutronenstreuung die einfache Transportnäherung, TK, mit temperaturabhängig selbstabgeschirmten Gruppenquerschnitten (schwere Kerne!) verwendet.

Da die Rechnungen in eindimensionaler Geometrie und mit homogenisierten Unterzonen durchgeführt wurden, wurde den ermittelten  $k_{\text{eff}}$ -Werten nach /18/ eine Geometrie- und Heterogenitätskorrektur von

$$\Delta k_{\text{eff}}(\text{Geom.}+\text{Het.}) = -.055$$

hinzugefügt.

### 7.3 Ergebnisse der Rechnungen für ZPRIII-56B

Die den durchgeführten Rechnungen zugrundeliegenden Transportquerschnitte sind für den Energiebereich von 46.5 eV bis 4 MeV, in dem die konsistent berechneten Querschnitte deutliche Verbesserungen gegenüber den KFKINR-Werten zeigen, in Tabelle 7.2 zusammengestellt.

Tabelle 7.2: Transportquerschnitte des Reflektors von ZPRIII-56B  
und f-Faktoren für Nickel

Gruppe	Transportquerschnitte $\Sigma_{tr,l}^g$				Ni-f <sub>t</sub> ( $\sigma_o=0$ ) stromgewichtet	
	KFKINR	FLUMMI-ELAS			ABN	MIGRØS2 /24/
		Opt.1	Opt.2	Opt.3	inkonsist.	konsist.
3	.127	.132	.130	.130	.94	.975
4	.124	.135	.134	.133	.86	.990
5	.135	.155	.155	.154	.66	.957
6	.134	.175	.177	.176	.53	.898
7	.170	.239	.239	.238	.47	.814
8	.191	.226	.225	.225	.36	.578
9	.298	.287	.285	.285	.53	.430
10	.475	.432	.432	.430	.83	.642
11	.385	1.25	1.23	1.23	.13	.488
12	.799	.681	.699	.695	1.00	.761
13	1.45	1.27	1.24	1.24	.87	.914
14	.759	.755	.775	.771	1.00	1.000
15	.759	.773	.773	.811	1.00	.997
16	.820	.836	.834	.833	1.00	1.000
17	.835	.851	.851	.850	1.00	1.000
18	.842	.857	.857	.856	1.00	1.000

Die KFKINR-Transportquerschnitte, die mit den f-Faktoren des ABN-Satzes /21/ für Nickel berechnet werden - siehe Spalte 6 für  $\sigma_o = 0$  (reines Nickel) - sind oberhalb 100 keV (bis Gruppe 8) und unterhalb 1 keV (ab Gruppe 15) teilweise wesentlich zu klein im Vergleich zu den konsistent berechneten Werten in Spalte 3 - 5. Für Neutronenenergien zwischen 1 und 100 keV (Gruppe 9 - 14) liefert das konsistente Verfahren Korrekturen unterschiedlichen Vorzeichens zu den KFKINR-Werten. Insbesondere ist der konsistent berechnete Querschnittswert in Gruppe 11, die eine Ni-Resonanz enthält, um einen Faktor drei größer als der KFKINR-Transportquerschnitt. Man er-

kennt, daß diese starke Diskrepanz hauptsächlich auf den viel zu kleinen Selbstabschirmfaktor  $f_t$  zurückgeführt werden kann; denn für  $\sigma_0 = 0$  (reines Nickel) enthält der KFKINR-Satz für Nickel den Wert 0.13, während eine konsistente Rechnung den Wert 0.488 liefert.

Hinsichtlich der Transportquerschnitte wird festgestellt, daß die konsistent berechneten Querschnitte aufgrund der auf der Basis der hier dargestellten Theorie neu entwickelten Verfahren und der verbesserten Daten deutliche Korrekturen an den bisher benutzten Querschnitten anbringen.

Im folgenden werden wir sehen, daß diese Korrekturen wesentlich zu einer zufriedenstellenden Interpretation der kritischen Anordnung ZPRIII-56B führen.

Die durch  $S_g$ -Transportrechnungen bestimmten  $k_{eff}$ -Werte sind - unter Berücksichtigung der Geometrie- und Heterogenitätskorrektur - in den Tabellen 7.3 und 7.4 zusammengestellt.

Tabelle 7.3: Berechnete  $k_{eff}$ -Werte für ZPRIII-56B in verschiedenen Transportnäherungen unter Verwendung ortsabhängiger und feinstrukturgewichteter  $\Sigma_{tr,l}^g$  und  $\Sigma_{el,l}^{g \rightarrow g}$

Transportnäherung				$k_{eff}$	Gruppenwirkungsquerschnitte	
Fall	Core	Reflek.	Option			
[1]	TK	TK	(1)	1.0003	KFKINR, $f_{tr}$ -Nickel inkonsist.	
[2]	TK	$T_1^x$	1	1.0147	Core wie [1], Reflekt. wie [3] - [9]	
[3]	$T_1^x$	$T_1^x$	1	1.0151	KFKINR-Satz, verbessert und erweitert durch $\Sigma_{tr,l}^g$ und $\Sigma_{el,l}^{g \rightarrow g}$ aus FLUMMI-ELAS mit konsistenter energetischer Selbstabschirmung	
[4]			3	1.0129		
[5]	$T_1^x$	$T_1$	1	1.0102		
[6]			2	1.0095		
[7]			3	1.0087		
[8]	$T_{5,3,1}^x$	$T_{5,3,1}$	1	1.0101		
[9]			3	1.0087		
[10]	$T_1^x$	$T_1$	3	1.0066		$\sigma_{capt}^{-Ni}$ zwischen 10 und 100 keV um 50 % erhöht; sonst wie [3] - [9]

- $T_1^x$  :  $T_1$  bis Gruppe 9 ( $E \geq 46.5$  keV), sonst TK  
 $T_{5,3,1}$  :  $T_5$  Gruppe 1-3,  $T_3$  Gruppe 4-6,  $T_1$  ab Gruppe 7;  
 $T_{5,3,1}^x$  : wie  $T_{5,3,1}$  bis auf TK ab Gruppe 10

Tabelle 7.4: Berechnete  $k_{eff}$ -Werte für ZPRIII-56B in Abhängigkeit von der Wichtung für  $\Sigma_{tr,l}^g$ ,  $\Sigma_{el,l}^{g' \rightarrow g}$

Fall	Grobwichtung	Feinwichtung	$k_{eff}$	Transportnäherung		
				Core	Refl.	Option
<u>5</u>	zonenabhängig	$1/\Sigma_t^{l+1}$	1.0102	$T_1^x$	$T_1$	1
<u>11</u>		keine	1.0174			
<u>12</u>	zentrales Spektrum für alle Zonen	$1/\Sigma_t^{l+1}$	1.0223			

Durch die für 1 verwendeten Reflektortransportquerschnitte - Tabelle 7.2, Spalte 2 - mit inkonsistenten, oberhalb 100 keV zu kleinen f-Faktoren des ABN-Satzes - Tabelle 7.2, Spalte 6,7 - zur Bestimmung der effektiven Nickeltransportquerschnitte wird die Reflektorwirkung des Nickelmantels oberhalb 100 keV unterschätzt, während sie bei kleineren Energien überschätzt wird. Es ergibt sich zwar aus der üblichen TK-Rechnung 1 ein  $k_{eff} = 1.0003$ ; dieser Wert beruht jedoch auf teilweiser Fehlerkompensation in der Neutronenleckage. Denn schon die konsistente Berücksichtigung der energetischen Selbstabschirmung allein im Reflektor für Neutronenenergien oberhalb 46.5 keV in 2 läßt  $k_{eff}$  auf 1.0147 anwachsen. Wird auch im Core oberhalb 46.5 keV die Selbstabschirmung konsistent mitgenommen, erhöht sich nach 3  $k_{eff}$  auf 1.0151.

In 1, 2 und 3 wurde die inkonsistente Option 1 des Transportquerschnitts verwendet, in welcher zur Bildung von  $\Sigma_{tr}^g$  die anisotrope Einstrahlung in die Gruppe g inkonsistent durch den mittleren Streukosinus der Ausstrahlung aus dieser Gruppe beschrieben wird. In 4 wurde die Option 3 benutzt. In dieser Option enthält der Transportquerschnitt in

Konsistenz mit der Boltzmann-Gleichung die anisotrope Einstreuung in die Gruppe  $g$ , die aufgrund der mit der Energie abnehmenden Anisotropie der elastischen Streuung größer ist als die Ausstreuung und so wegen  $\Sigma_{tr} = \Sigma_t$ -anisotrope Einstreuung zu kleineren konsistent berechneten Transportquerschnitten führt - vgl. Tabelle 7.2, Spalte 3 und 5. Die Anwendung dieser Option in [4] oberhalb 46.5 keV erhöht die Neutronenleckage in diesem Energiebereich und liefert eine Verbesserung von  $k_{eff}$  auf 1.0129.

Die bisher diskutierten Transportrechnungen [1] bis [4] zeigen die Verbesserungen, die durch konsistent berechnete Transportquerschnitte oberhalb 46.5 keV in  $T_1$ -Näherung erzielbar sind. Aus Tabelle 7.2 ist ersichtlich, daß auch unterhalb 46.5 keV ab Gruppe 10 die KFKINR-Transportquerschnitte im Reflektor deutliche Abweichungen zu den konsistent berechneten Querschnitten aufweisen. In den Rechnungen [5], [6] und [7] wurden im Reflektor für alle Energiegruppen Transportquerschnitte und elastische Transferquerschnitte mit konsistenter energetischer Selbstabschirmung benutzt. In der Option 1 bzw. 3 wird dadurch der effektive Multiplikationsfaktor um etwa 0.5 % auf  $k_{eff} = 1.0102$  bzw. 1.0087 verbessert. In der Option 2, in welcher bei der konsistenten Bildung des Transportquerschnitts  $\Sigma_{tr,l}^g = \Sigma_{t,l}^g - \sum_{g' \leq g} \Sigma_l^{g' \rightarrow g} \psi_l^{g'} / \psi_l^g$  der Strom  $\psi_l^{g'}$  für alle Gruppen  $g'$ , aus denen in die Gruppe  $g$  eingestreut wird, durch den Strom  $\psi_l^g$  approximiert wird, liegen - vgl. Tabelle 7.2 - die Querschnittswerte zwischen denen der Option 1 und 3. Dementsprechend ergibt sich in [4] ein bezüglich [3] und [5] mittleres  $k_{eff} = 1.0095$ .

Zur Interpretation dieser Ergebnisse sind auf den Abb. 7.1 bis 7.5 signifikante Spektren und ortsabhängige Gruppenflüsse jeweils aus den Rechnungen [3] und [5] zusammengestellt. Die Reflektorspektren auf Abb. 7.1 lassen erkennen, wie sich im Fall [5] zu denen im Vergleich zu den KFKINR-Querschnitten bis Gruppe 18 (46.5 eV) i.w. größeren, konsistent berechneten Transportquerschnitten ein insgesamt flacherer Verlauf des Reflektorspektrums einstellt. Bei einem Schnittpunkt der Spektren bei etwa 20 eV bedeutet dies eine Verringerung der Neutronenzahl oberhalb und eine Zunahme der Neutronenbevölkerung unterhalb 20 eV. Da weiter die Neutronenflußdichte im Reflektor ab Gruppe 12 - dies ist auf Abb. 7.2 bis 7.5 zu erkennen - zum äußeren Rand und zum Core hin abnimmt, ist im Fall [5] der Neutronen-

strom vom Reflektor ins Core kleiner als im Fall [3]. Dadurch entsteht im Core für Energien bis herab zu etwa 20 eV ein zunehmendes Neutronen-defizit. Da in diesem Energiebereich die Neutroneneinflußfunktion  $\phi^+(E)$ , die näherungsweise  $v\Sigma_f/\Sigma_a$  proportional ist, nach Abb. 7.6 zu kleineren Energien hin zunimmt, ergibt das im Fall [5] oberhalb 20 eV härtere Neutronenspektrum ein kleineres  $k_{eff}$ . Die unterhalb 10 eV erkennbaren, teilweise auf eine Erhöhung von  $k_{eff}$  hinwirkenden spektralen Änderungen, nämlich eine Zunahme der Neutronenzahl bei größeren Werten der Neutroneneinflußfunktion fallen wegen des insgesamt harten Spektrums im Core - siehe Abb. 7.7 - nur wenig ins Gewicht.

Eine wesentliche Fragestellung in der vorliegenden Untersuchung ist die nach dem Einfluß der Anisotropie der elastischen Neutronenstreuung. Am in Kap. 8 behandelten Beispiel der Li-Kugel mit 14-MeV-Neutronenquelle werden wir sehen, daß für kleine Anordnungen, in denen die Neutronen überwiegend Energien im oberen MeV-Bereich besitzen und dort hauptsächlich elastische Stöße ausführen, die Berücksichtigung der elastischen Anisotropie eine deutlich verbesserte Vorhersage des Leckagespektrums ermöglicht. Für die Anordnung ZPRIII-56B, bei welcher das Maximum des Neutronenspektrums bei einigen 100 keV liegt, sind die relativen Verbesserungen bei der Berechnung der Leckage oberhalb 100 keV aus dem Core und aus dem Reflektor bezüglich der konsistenten  $T_1$ -Näherung auf Abb. 7.8 dargestellt. Die elastische Anisotropie wurde durch die energieabhängigen Transportnäherungen  $T_{5,1}$ ,  $T_{5,3,1}$  und  $T_{3,1}$ , deren Energieabhängigkeit auf Abb. 7.8 erklärt ist, beschrieben. Die Transportquerschnitte wurden jeweils in der konsistenten Option 3 berechnet. Es wird festgestellt, daß die Leckage aus dem Core in  $T_1$ -Näherung auf etwa 1 % richtig beschrieben wird; das liegt an der im Core im Vergleich zum Reflektor schwächeren Anisotropie der Neutronenflußdichte, die bedingt ist durch die dort befindliche isotrope Spaltquelle und die eine teilweise Kompensation der anisotropen Streuung zur Folge hat. Es resultiert daraus das beim Übergang von der  $T_1$ - zur  $T_{5,3,1}$ -Näherung praktisch unveränderte  $k_{eff}$  - vgl. Tabelle 7.3, [7], [9].

Für den Reflektor liefert die verbesserte Behandlung der elastischen Anisotropie für Neutronenenergien um 5 MeV eine Korrektur von -17 % in der Neutronenleckage nach außen. Der Grund dafür ist, daß der im Reflektor

im MeV-Bereich ausgeprägte Anteil der sich in radialer Richtung nach außen bewegenden Neutronen bei elastischer Streuung in  $T_1$ -Näherung schwächer abgelenkt wird als in höheren Näherungen, die die Winkelabhängigkeit des Streuprozesses und damit die Streuung unter größeren Winkeln (Seitwärtsstreuung) besser berücksichtigen.

Die in  $T_1$ -Näherung zu klein berechnete Leckage aus dem Core in den Reflektor und zu groß berechnete Leckage aus dem Reflektor führen insgesamt in  $T_1$ -Näherung zu einer Unterschätzung der Neutronendichte im Reflektor, die eine Unterschätzung der Neutroneneinfangraten nach sich zieht. Abb. 7.9 zeigt für den Energiebereich oberhalb 100 keV die ortsabhängige relative Abweichung der Einfangrate in  $T_1$ -Näherung von der in  $T_{5,3,1}$ -Näherung. Sie erreicht im Reflektor -0.75 %.

Zur Überprüfung des Konzepts der energiegruppenabhängigen Ordnung  $L = L_g$  der Transportnäherung  $T_L$  wurden, wie Abb. 7.8 zu entnehmen ist,  $T_{5,1}$ ,  $T_{5,3,1}$  und  $T_{3,1}$ -Rechnungen durchgeführt. Die  $T_{5,1}$ -Näherung unterscheidet sich von der  $T_{5,3,1}$ -Näherung im Energiebereich von 0.4 - 2.5 MeV durch eine Legendre-Entwicklung des differentiellen elastischen Streuwirkungsquerschnitts bis zur fünften anstatt bis zur dritten Ordnung. Wir erkennen jedoch, daß in Übereinstimmung mit den im Anhang A gewonnenen Abschätzungen der erforderlichen Approximationsordnung  $L = 3$  für Neutronenenergien bis 2.4 MeV ausreichend ist. Weiter wird festgestellt, daß - wiederum in Übereinstimmung mit Anhang A -,  $L = 5$  oberhalb 2.5 MeV in der Näherung  $T_{5,3,1}$  eine Verbesserung in der berechneten Leckage ergibt. Der überwiegende Anteil des Einflusses der anisotropen elastischen Streuung wird jedoch für die untersuchte Anordnung bereits durch die  $T_{3,1}$ -Näherung beschrieben.

Im Zusammenhang mit der Frage nach den Wichtungsfunktionen bei der Bildung der Gruppenwirkungsquerschnitte wurde der Einfluß der Ortsabhängigkeit sowie der energetischen Feinstruktur oberhalb 46.5 MeV auf Reaktionsraten und  $k_{eff}$  untersucht. Bei üblichen 26-Gruppen-Reaktorrechnungen in einfacher Transportnäherung oder in Diffusionsnäherung zur Bestimmung von Kenngrößen schneller Reaktoren wie  $k_{eff}$ , der Leistungsverteilung, der

Brutrate usw. wird bekanntlich meist zur Grobwichtung ortsunabhängig die Stoßdichte im Core eines typischen schnellen Reaktors - beim KFKINR-Gruppenkonstantensatz die Stoßdichte des SNR300 - verwendet, während die energetische Feinstruktur mit Hilfe von f-Faktoren und eventuell durch eine REMO-Korrektur für die elastische Streuung /29/ berücksichtigt wird.

Das in dieser Arbeit angewendete Verfahren der Erstellung von totalen Gruppenquerschnitten und elastischen Transferquerschnitte in einer 208-Feingruppen-Einteilung mit anschließender Kondensation ermöglicht über zonenabhängige Kondensationsspektren bei den (abgeleiteten) Transportquerschnitten und den elastischen Transferquerschnitten in 26 Energiegruppen eine näherungsweise Berücksichtigung der Ortsabhängigkeit der Wichtung. Auf Abb. 7.10 und 7.11 sind Transportquerschnitte im Reflektor und in der zweiten Corezone bei voller ( $\square$ ) und bei teilweiser ( $0, \Delta$ ) Berücksichtigung der Grob- und Feinwichtung dargestellt. Im Reflektor, insbesondere im Energiebereich von 2 - 200 keV und dort besonders ausgeprägt bei der 15.6 keV-Nickelresonanz, wird der Einfluß des bei Vernachlässigung der Ortsabhängigkeit des Grobspektrums zur Kondensation benutzten, in Coremitte berechneten Grobspektrums deutlich (vgl.  $0$  und  $\square$ ). Dieses Corespektrum enthält naturgemäß nicht die in der Nickelresonanz im Reflektor auftretende Absenkung der Neutronenflußdichte und führt so in der Umgebung der Resonanz zu einer Vernachlässigung des Hauptteils der energetischen Selbstabschirmung. Aus Abb. 7.11 ist zu entnehmen, daß in der zweiten Corezone oberhalb 50 keV - darunter werden KFKINR-Querschnitte verwendet - wegen der relativ schwachen Ortsabhängigkeit des Spektrums im Core die Kondensation mit dem zentralen Spektrum keine ausgeprägten Änderungen - weniger als 1 % - in den Transportquerschnitten zur Folge hat. Abb. 7.12 zeigt beispielhaft die Änderung der Einfangrate für ausgewählte Energiebereiche bei vernachlässigter Ortsabhängigkeit der Grobwichtung; sie beträgt im Energiebereich von 1 - 100 keV im Reflektor bis zu 35 %. Für  $k_{\text{eff}}$  ergibt sich - vgl. Tabelle 7.4,  $\square$  - ein Wert von 1.0223; dieser Wert liegt um mehr als 1 % über dem Wert 1.0102 aus der Rechnung  $\square$  mit ortszugehöriger Grob- und Feinwichtung.

Das auf den Abb. 7.10 und 7.11 durch  $\Delta$  gekennzeichnete Histogramm stellt die mit dem zugehörigen Grobspektrum kondensierten, jedoch ohne Fein-

strukturwichtung berechneten Transportquerschnitte dar. Wir erkennen, daß die so ermittelten Transportquerschnitte oberhalb bei 100 keV im Core um 5 % und im Reflektor um 18 % zu groß im Vergleich zu den feinstrukturgewichteten Querschnitten (□) sind. Abb. 7.13 zeigt die zugehörige Änderung der Einfangraten; sie erreicht im Reflektor im Energiebereich von 100 - 800 keV 8 %. Der effektive Multiplikationsfaktor wird zu  $k_{\text{eff}} = 1.0174$  ermittelt. Bei Vernachlässigung der Feinstrukturwichtung (außer im Core unterhalb 50 keV) wird damit  $k_{\text{eff}}$  um etwa 0.7 % überschätzt.

Die bisher angebrachten methodischen Verbesserungen wie die energieabhängige  $T_L$ -Näherung und die konsistente Option 3 des Transportquerschnitts münden in eine transporttheoretisch begründete Korrektur der Gruppenquerschnitte. Korrekturen in den Gruppenquerschnitten können andererseits durch veränderte Grunddaten erzielt werden. Da nach Barré /22/ die bislang benutzten Wirkungsquerschnitte  $\sigma_{\text{capt}}$  für Neutroneneinfang in Nickel für Neutronenenergien von 10 - 100 keV u.U. um 50 % zu klein sind, wurde zur eventuell weiteren Verbesserung von  $k_{\text{eff}}$  versuchsweise eine entsprechende Korrektur von  $\sigma_{\text{capt}}$ -Nickel vorgenommen. Sie ergab  $k_{\text{eff}} = 1.0066$  - vgl. Tabelle 7.3, [10]. Die dadurch bis auf eine Abweichung von 0.5 % verbesserte Übereinstimmung mit dem Experiment bestätigt qualitativ die Vermutung über die zu kleinen Ni- $\sigma_{\text{capt}}$ -Werte.

Die Auswertung der durchgeführten Rechnungen zur Ermittlung insbesondere des Spaltratenverhältnisses  $\sigma_f(\text{PU240})/\sigma_f(\text{U235})$  bestätigt den von Kiefhaber /20/ ermittelten Wert, der im Vergleich zum Experiment um 20 % zu groß ausfällt. Abb. 7.14 zeigt ortsabhängige berechnete und im Zentrum gemessene Spaltratenverhältnisse von PU239, PU240 und U238 bezogen auf U235, die berechneten Werte bestimmt aus [3] und [5]. Der am Corerand erkennbare geringe Unterschied zwischen [3] und [5] zeigt, daß die Spaltratenverhältnisse, die bei ungeänderten Spaltquerschnitten nur vom Neutronenspektrum abhängen, gegenüber den vom Reflektor induzierten spektralen Änderungen relativ unempfindlich sind.

## 8. Lithium-Kugel mit zentraler 14 MeV-Neutronenquelle

### 8.1 Problemstellung

In Lithium-haltigen Blankets von Fusionsreaktoren, die auf der Reaktion  $D + T = \alpha + n + 17.6 \text{ MeV}$  basieren, soll über die Reaktionen  ${}^7\text{Li} + n = \alpha + T + n'$  und  ${}^6\text{Li} + n = \alpha + T$  Tritium zur Verwendung als Brennstoff erzeugt werden. Zu einer zuverlässigen Vorhersage z.B. der Tritiumerzeugungsrate sind Methoden und Daten erforderlich, die sich von den üblicherweise zur Berechnung schneller Reaktoren verwendeten durch den von 10 auf 15 MeV erweiterten Anwendungsbereich unterscheiden. Charakteristisch für diesen Energiebereich bezüglich der Neutronenreaktionen ist die ausgeprägte Anisotropie der elastischen Neutronenstreuung; daneben spielt die inelastische und die  $(n, 2n)$ -Streuung an Strukturmaterialien hinsichtlich der energetischen Verteilung der Sekundärneutronen eine Rolle. Da die Neutronen außerhalb des Blankets im Plasma erzeugt werden, entsteht im Blanket durch den über den inneren Blanketrand eintretenden Neutronenstrom eine stark anisotrope Neutronenflußdichte mit ausgeprägter Vorwärtskomponente. Die Rechenmethode muß daher in der Lage sein, sowohl die anisotrope elastische Streuung als auch eine anisotrope Neutronenflußdichte zufriedenstellend zu behandeln. Geeignete Rechenverfahren sind  $S_N$ - und Monte-Carlo-Verfahren. An die Daten ist die Forderung nach Verfügbarkeit bis 15 MeV einschließlich differentieller elastischer Streuwirkungsquerschnitte zu stellen.

Zur wechselseitigen Überprüfung des in Rechnungen für schnelle Reaktoren bewährten  $S_N$ -Transportprogramms DTK /13/, von auf KEDAK-Format transformierten Lithiumdaten aus ENDF/B-III /25/ und von Meß- und Auswerteverfahren zur experimentellen Bestimmung von Neutronenausflußspektren waren von Rusch und Kappler /1/ Messungen und Berechnungen an einem vereinfachten Modell eines Fusionsreaktorblankets, einer Lithium-Kugel von 1 m Durchmesser mit zentraler 14 MeV-Neutronenquelle, vorgenommen worden. Es war dabei durch Flugzeitmessungen ortsabhängig bei den Radien 10 und 32 cm der winkelfluß ( $n/\text{cm}^2 \cdot \text{sec} \cdot \text{sterad}$ ) in radialer Richtung ermittelt worden. Fig. 8.1 zeigt schematisch den Aufbau der experimentellen Anordnung.

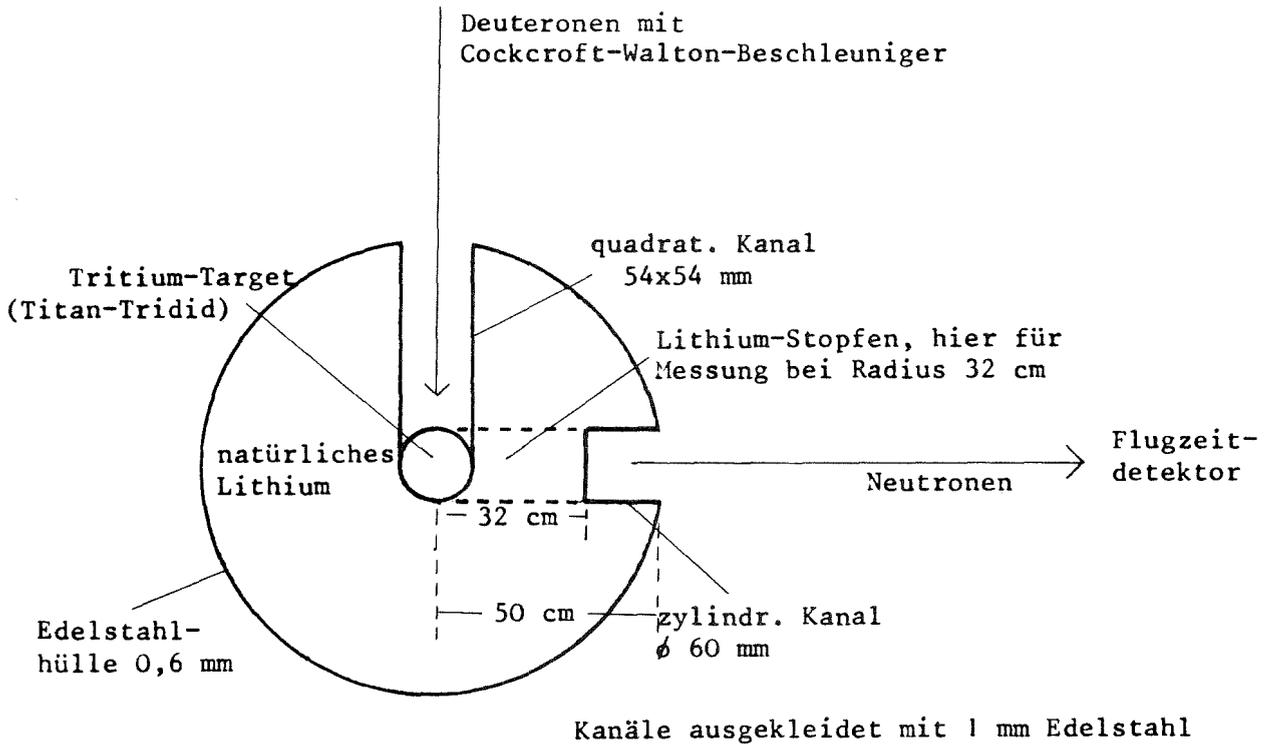


Fig. 8.1: Lithium-Kugel mit 14 MeV-Neutronenquelle  
(Aufbau des Experiments, schematisch)

Die Rechnungen waren in einer 26-Gruppeneinteilung mit einer in der ersten Gruppe von 13.90 - 14.95 MeV befindlichen, auf 1000 Quellneutronen/sec normierten Neutronenquelle in einfacher Transportnäherung durchgeführt worden. Auf Abb. 8.1, die Ref. /1/ entnommen wurde, sind - bei einer Anpassung im Bereich der Li-Resonanz bei 240 keV - deutliche Diskrepanzen zwischen gemessenen und berechneten Ausflussspektren im MeV-Bereich festzustellen. Im Quellbereich und bei Neutronenenergien um 8 MeV liefert die Rechnung Werte, die teilweise nahezu um eine Größenordnung oberhalb der Messung liegen; für Energien von 0.6 - 2 MeV liegt die Rechnung um 20 - 30 % unterhalb des gemessenen Spektrums.

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit stellte sich die Frage, ob eine Klärung der Diskrepanzen bei der Interpretation des Lithiumexperiments mit Hilfe der auf der Basis der dargestellten Theorie entwickelten Verfahren zur verbesserten Behandlung der im oberen MeV-Bereich ausgeprägten Anisotropie der elastischen Streuung möglich sein würde. Da die Anisotropie der Neutronenflußdichte in der Lithiumkugel primär eine Folge der im Zentrum der Kugel lokalisierten Neutronenquelle ist, war dazu zunächst der Einfluß der oben beschriebenen Darstellung der Quelle, einer durch ein "Rechteck" approximierten  $\delta$ -Funktion bei 14 MeV, zu untersuchen.

Als erstes Resultat ergab sich bei diesen theoretischen Untersuchungen eine weitgehende Zuverlässigkeit der verwendeten Daten und des  $S_N$ -Verfahrens. Da daher eher Unzulänglichkeiten bei der Durchführung oder Auswertung der Messungen zu vermuten waren, wurde von Rusch u.a. eine Überprüfung der experimentellen Ergebnisse ins Auge gefaßt. Im folgenden werden die Schritte, die zu einer wesentlich verbesserten Übereinstimmung zwischen Rechnung und Experiment führen, im einzelnen erläutert.

## 8.2 Diskussion des zur Spektrumsberechnung benutzten Verfahrens

Die Energieverteilung der Neutronen aus dem Tritiumtarget kann unter Berücksichtigung der Targetgeometrie und der inelastischen und (n, 2n)-Streuprozesse an den Strukturmaterialien des Targets z.B. durch eine Monte-Carlo-Rechnung bestimmt werden /26/. Um die damit verbundenen Effekte im Quellspektrum zu berücksichtigen, wurde hier - als einfacherer Weg - das experimentell bestimmte Quellspektrum direkt in die Transportrechnungen eingesetzt. Es wurde dazu eine Feinunterteilung des Energiebereichs von 2.003 - 14.95 MeV in 55 Energiegruppen entsprechend der Karlsruher 275-Gruppeneinteilung im MeV-Bereich vorgenommen. Zur Reduzierung des Rechenaufwandes bei detaillierter Behandlung des diskrepanten MeV-Bereichs wurde der Energiebereich unterhalb 2.003 MeV zu einer Energiegruppe zusammengefaßt.

Im Zusammenhang mit der Bildung der Gruppenwirkungsquerschnitte in dieser 56-Gruppeneinteilung stellt sich die Frage, welchen Verlauf das Neutronenspektrum in diesen Energiegruppen hat. Beim zentralen elastischen Stoß

eines Neutrons mit Li-7-Kernen, die zu 92.6 % in natürlichem Lithium enthalten sind, verliert das Neutron 44 % seiner kinetischen Energie. Für ein 14-MeV-Quellneutron reicht damit das elastische Degradationsintervall von 14 - 7.84 MeV. Da der überwiegende Teil der Quellneutronen mit Energien um 14 MeV aus dem Target emittiert wird und die elastische Streuung an Lithium bei dieser Energie bei einer mittleren freien Weglänge von ca. 15 cm im Mittel unter einer Änderung der Flugrichtung um  $45^\circ$  erfolgt, nimmt der skalare Neutronenfluß innerhalb der Lithiumkugel wegen der unmittelbaren Leckage eines Teils der Quellneutronen bis 8 MeV auf etwa die Hälfte seines Spitzenwertes ab. Die Berücksichtigung dieses Grobverlaufs des Neutronenflusses bei der Bildung der Gruppenwirkungsquerschnitte erweist sich jedoch in der gewählten 56-Gruppeneinteilung, in welcher auf das Degradationsintervall für elastische Streuung an Li-7 17 Energiegruppen entfallen, als nicht erforderlich. So unterscheiden sich z.B. die mit der Stoßdichte in der Lithiumkugel beim Radius  $r = 32.5$  cm und die mit der gegenläufigen (!) Grobwichtung proportional  $1/E$  gewichteten Transportquerschnitte für Li-7 in der Energiegruppe von 12.01 - 15.45 MeV um vernachlässigbare 0.6 %.

Wegen des glatten Verlaufs des totalen Wirkungsquerschnitts von natürlichem Lithium und wegen der im Vergleich zum Degradationsintervall kleinen Gruppenbreite braucht des weiteren eine Feinwichtung nicht vorgenommen zu werden.

Zur Ermittlung der Verbesserungen in der Behandlung der elastischen Anisotropie, die im Vergleich zur einfachen Transportnäherung zu erwarten sind, wurden  $T_L$ -Rechnungen mit  $L > 1$  in den Optionen 1 und 3 für den Transportquerschnitt durchgeführt. Die in der Option 3 benötigten zonen-gemittelten Gruppenmomente  $\psi_l^g$  der Neutronenflußdichte wurden mit einer  $P_5$ -Rechnung ermittelt. Da die Neutronenflußdichte  $\psi^g(r, \mu)$ ,  $r =$  Radius,  $\mu =$  Kosinus des Winkels zwischen der Neutronenflugrichtung und der radialen Richtung, für Energien oberhalb etwa 10 MeV eine ausgeprägte Anisotropie in Gestalt einer dominierenden Vorwärtskomponente aufweist:  $\psi^g(r, \mu > 0.8) \gg \psi^g(r, \mu < 0.8)$ , wurden die DTK-Transportrechnungen in einer  $S_{19}$ -Näherung mit 11 diskreten  $\mu$ -Stützstellen im  $\mu$ -Bereich von 0.8 - 1.0 durchgeführt.

### 8.3 Berechnete Neutronenspektren, Vergleich zum Experiment bei

r = 10 cm und r = 32.5 cm

Bei der Überprüfung der Spektrumsmessungen an der Lithiumkugel durch Rusch u.a., bei der ein Flugzeitdetektor mit erhöhter Energieauflösung und ein verbessertes Auswerteverfahren /26/ eingesetzt wurden, ergaben sich bei nur wenig abweichenden Werten bei Energien um 1 MeV im Energiebereich von 6 - 10 MeV im Vergleich zu den früheren Messungen - Abb. 8.1 und Abb. 8.3 - Korrekturen bis zu einem Faktor 10 im Winkelfluß in radialer Richtung. Die neueren Messungen zeigen nicht mehr das früher bei 8 MeV ausgeprägte Neutronendefizit. Das bei 2.5 MeV erscheinende Maximum im Spektrum wird durch Neutronen aus der Reaktion  $D + D = n + {}^3\text{He}$  verursacht.

Die unter Verwendung dieses neu gemessenen Targetspektrums in  $T_3$ - bzw.  $T_5$ -Näherung in der Option 1 für den Transportquerschnitt berechnete Neutronenflußdichte in radialer Richtung,  $\psi^g(r, \mu=1)$ , bei den Radien  $r = 10$  cm (Pos. 11) und  $r = 32.5$  cm (Pos. 33) zeigt insgesamt eine sehr zufriedenstellende Übereinstimmung mit den gemessenen Werten - Abb. 8.2 und Abb. 8.3.

Wie Abb. 8.3 zu entnehmen ist, ergibt sich bei  $r = 32.5$  cm unterhalb 12 MeV eine gute Übereinstimmung von  $T_3$ - bzw.  $T_5$ -Näherung und dem experimentellen Ergebnis. In einfacher Transportnäherung dagegen wird der radiale Winkelfluß für diese Neutronenenergien bei  $r = 32.5$  cm um teilweise mehr als 60 % zu groß berechnet. Die in Quellnähe bei  $r = 10$  cm in einfacher und höherer Transportnäherung noch wenig unterschiedlichen Winkelflüsse in radialer Richtung - Abb. 8.2 - divergieren mit zunehmendem Abstand des Aufpunktes von der Quelle. Der Vergleich mit dem Experiment auf Abb. 8.3 zeigt, daß die Transportnäherungen  $T_3$  und  $T_5$  die räumliche Änderung der  $\psi^g(r, \mu=1)$  für Energien unterhalb 12 MeV gut wiedergeben. Die Abweichungen zwischen Messung und Rechnung betragen höchstens etwa 20 % bei einer Meßunsicherheit von etwa 10 % /26/. Im Energiebereich oberhalb 12 MeV, der die ungestreuten und unter kleinem Winkel gestreuten Neutronen enthält, ist neben der durch die  $T_3$ -Näherung im Vergleich zum Experiment erzielten Verbesserung der zusätzliche Gewinn an Genauigkeit durch die  $T_5$ -Näherung zu erkennen - Abb. 8.2 und 8.3.

Die für den Radius  $r = 50$  cm am Rand der Lithiumkugel berechneten Winkelflüsse in radialer Richtung sind auf Abb. 9.4 dargestellt. Kennzeichnend für diese wie bereits für die Spektren bei  $r = 32.5$  cm ist die mit der Energie zunehmende Abweichung der verschiedenen Näherungen untereinander, bedingt durch die zu höheren Energien zunehmende Anisotropie der elastischen Neutronenstreuung. Die einfache Transportnäherung TK enthält über die Approximation des differentiellen elastischen Streuwirkungsquerschnitt durch einen isotropen Anteil und einen  $\delta$ -funktionsförmigen Anteil in Vorwärtsrichtung eine mit der Energie zunehmende Überschätzung des Neutronenausflusses. Beim Übergang zu höheren Transportnäherungen vergrößert sich erstens der zugehörige Transportquerschnitt und wird zweitens eine genauere Beschreibung der Streuung unter größeren Streuwinkeln vorgenommen. Beides zusammen führt zu einer gegenüber der einfachen Transportnäherung verringerten Neutronenleckage.

#### 8.4 Einfluß anisotroper Näherungen bei der Berechnung von Neutroneneinfangraten

In diesem Abschnitt wird die Empfindlichkeit der berechneten Neutroneneinfangrate hinsichtlich des verwendeten Transportquerschnitts - inkonsistente Option 1 nach (4.40) und konsistente Option 3 nach (4.35) - sowie hinsichtlich der Ordnung der Transportnäherung untersucht. Diese Untersuchung gibt Aufschluß über die z.B. bei der Berechnung der Tritiumbrutrate in Fusionsreaktorblankets anzuwendende anisotrope Näherung.

Es wurde dazu in Abhängigkeit vom Radius  $r$  die relative prozentuale Änderung der Einfangrate in Energieintervallen  $(E_1, E_2)$  beim Übergang von der  $T_3$ -Opt.1- zur  $T_3$ -Opt.3-Näherung gebildet:

$$(8.1) \quad P(r; E_1, E_2; T_3^1 \rightarrow T_3^3) \\ \equiv \frac{R_{\text{capt}}(r; E_1, E_2; T_2^3) - R_{\text{capt}}(r; E_1, E_2; T_3^1)}{R_{\text{capt}}(r; E_1, E_2; T_3^1)} \cdot 100$$

Dabei ist z.B.

$$(8.2) \quad R_{\text{capt}}(r; E_1, E_2; T_3^1) \equiv \int_{E_1}^{E_2} dE \Sigma_{\text{capt}}(r, E) \psi_0^{(T_3^1)}(r, E)$$

die in  $T_3$ -Opt.1-Näherung im Intervall  $(E_1, E_2)$  berechnete Neutroneneinfangrate. Abb. 8.5 und Abb. 8.6 zeigen  $P(r; E_1, E_2; T_3^1 \rightarrow T_3^2)$  und die entsprechend berechnete Änderung  $P(r; E_1, E_2; T_5^1 \rightarrow T_5^3)$ . Die Intervallgrenzen  $E_1, E_2$ , die entsprechend dem Verlauf der skalaren Flußdichte  $\psi_0(r, E)$  gewählt wurden - vgl. dazu etwa Abb. 8.3 -, sind jeweils an den Kurven notiert. Die ausgeprägteste Änderung der Einfangrate ist im Energiebereich des Quellpeaks von 11.57 - 14.95 MeV zu erkennen; sie nimmt dort ihr Maximum von 1 % beim Vergleich der  $T_3$ -Näherungen und von 0.5 % beim Vergleich der  $T_5$ -Näherungen in der Nähe der Quelle bei  $r \approx 10 \dots 20$  cm an. (Die zackenförmige Struktur dieser Kurve auf Abb. 8.5 ist numerischen Ursprungs; sie entsteht durch die im  $S_N$ -Programm DTK /13/ angewendete Methode des "negative flux fix-up".) Das Ansteigen der Neutroneneinfangrate außer im Randbereich der Lithiumkugel bei hohen Energien zeigt, daß in der inkonsistenten Option des Transportquerschnitts die Neutronenpopulation größtenteils zu niedrig berechnet wird.

Auf Abb. 8.7 sind die relativen Änderungen der Einfangrate beim Übergang von der üblichen einfachen Transportnäherung TK zur  $T_3$ - und  $T_5$ -Näherung jeweils in der Option 1 für den Transportquerschnitt,  $P(r; E_1, E_2; TK \rightarrow T_3^1)$  und  $P(r; E_1, E_2; TK \rightarrow T_5^1)$ , aufgetragen. Diese Änderungen erreichen 10 % in der Umgebung der Quelle bei  $r \approx 3 \dots 4$  cm im Energiebereich von 11.57 - 14.95 MeV (Quellpeak) und etwa 18 % am Rande der Lithiumkugel für Energien von 8.03 - 11.57 MeV. Der Hauptteil der Anisotropiekorrektur in den Einfangraten wird durch die  $T_3$ -Näherung erzielt;  $T_3$ - und  $T_5$ -Näherung liefern um etwa 1 % voneinander abweichende Werte.

Auf Abb. 8.8 ist die resultierende Änderung der Einfangrate beim Übergang  $TK \rightarrow T_3, T_5$  im gesamten untersuchten Energiebereich von 2.00 - 14.95 MeV dargestellt. Es ergibt sich insgesamt eine Zunahme dieser Rate; in der Nähe der Quelle bei  $r \approx 6$  cm beträgt diese Zunahme 10 %, sie fällt auf 1 % bei  $r \approx 30$  cm ab und steigt zum Kugelrand auf 4 %.

Zusammenfassend wird festgestellt: Zur Berechnung von Tritiumbrutraten muß mindestens die  $T_3$ -Näherung eingesetzt werden. Bei genaueren Rechnungen sollte bei höheren Energien,  $E \geq 8$  MeV, jedoch die  $T_5$ -Näherung mit konsistent berechnetem Transportquerschnitt bevorzugt werden. Dadurch werden um 0.5...1 % verbesserte Raten ermittelt. Diese Verbesserung liegt im Bereich der z.Zt. erreichbaren experimentellen Meßgenauigkeit /26/.

## 9. Zusammenfassung

Mit der vorliegenden Untersuchung und den dabei entwickelten Rechenprogrammen wird eine energiegruppenabhängige Transportnäherung höherer Ordnung mit konsistent berechneten Transportquerschnitten entwickelt und angewendet. Dieses Verfahren ist eine theoretisch fundierte Verbesserung der bisherigen Methoden zur Behandlung der anisotropen elastischen Neutronenstreuung in Multigruppen-S<sub>N</sub>-Reaktorrechnungen, nämlich der einfachen Transportnäherung, der "extended transport approximation" und des S<sub>N</sub>-P<sub>L</sub>-Verfahrens. Die hierauf beruhenden Rechenprogramme wurden zur Verknüpfung mit den bei der GfK verfügbaren S<sub>N</sub>-Codes unter weitestgehender Benutzung vorhandener Gruppenkonstantenerstellungsprogramme bereitgestellt und ermöglichen eine einfache und zuverlässige Behandlung der anisotropen elastischen Neutronenstreuung. Die erzielten theoretischen Verbesserungen, deren Vergleich mit anderen Verfahren und die Ergebnisse bei der Anwendung auf interessierende Fragestellungen der Reaktorphysik werden im folgenden kurz zusammengestellt. Die dabei gewählte Reihenfolge entspricht derjenigen der Problemstellungen in Kapitel 1 (Einleitung).

1. Die bereits über die in Reaktorrechnungen meist benutzte einfache Transportnäherung des elastischen Streukerns hinausgehende verbesserte Behandlung der anisotropen elastischen Streuung mittels der "extended transport approximation" /2/, bei der i.w. die über den bei einer Legendre-Entwicklung bis zur Ordnung  $l = L$  hinausgehende anisotrope Reststreuung vereinfacht behandelt wird, ist theoretisch unbefriedigend. Und zwar insofern, als die zugrunde gelegte Näherungsannahme (1.1) i.a. nicht erfüllt und zudem inkonsistent mit der BG ist. Dem Vorgehen von Küsters /8/ folgend, wurde ein konsistenter Transportquerschnitt definiert, bei dessen Bildung die bei der Gruppenquerschnittsberechnung näherungsweise bestimmten Momente  $\psi_l^{g'}$  der Neutronenflußdichte eingehen:

$$(9.1) \quad \Sigma_{tr,l}^g = \Sigma_{t,l}^g - \sum_{g' \leq g} \Sigma_l^{g' \rightarrow g} \cdot \psi_l^{g'} / \psi_l^g .$$

Es wurde gezeigt: Wenn

$$(9.2) \quad \Sigma_{tr,\ell}^g \approx \Sigma_{tr,L+1}^g \quad \text{für } \ell \geq L+1,$$

kann die Multigruppentransportgleichung in die Form der  $S_N$ -Basisgleichungen mit  $L$  Streumatrizen überführt werden, die z.B. von dem bei der GfK verfügbaren  $S_N$ -Programm DTK /13/ numerisch gelöst werden. Die physikalische Bedeutung von (9.2) ist, daß zur Bildung des Transportquerschnitts - und nur dazu - von einer mit wachsendem  $L$  abnehmende Bündelung der Neutronen in Richtung der  $x$ -Achse als räumliche Symmetrieachse ausgegangen wird. In der mathematischen Formulierung heißt dies z.B. für die Streuquelle  $Q(x,\mu,E)$ , daß zur Bildung von  $\Sigma_{tr,L+1}^g$  in dieser hier mit " $S_N$ - $T_{L+1}$ -Näherung" bezeichneten Näherung unter Verwendung der  $\delta$ -Funktion  $\delta(\mu-1)$

$$(9.3) \quad Q(x,\mu,E) \approx \sum_{\ell=0}^L \frac{2\ell+1}{2} P_{\ell}(\mu) \left[ Q_{\ell}(x,E) - Q_{L+1}(x,E) \right] + Q_{L+1}(x,E) \cdot \delta(\mu-1)$$

approximiert wird, wobei  $Q_{\ell}(x,E)$  das  $\ell$ -te Moment der Streuquelle ist. Ein (9.2) entsprechendes Verhalten der Transportquerschnitte wurde am Beispiel der Anordnung ZPRIII-56B gezeigt.

Beim Vergleich der konsistenten Option (9.1) für den Transportquerschnitt und der inkonsistenten Option

$$(9.4) \quad \Sigma_{tr,\ell}^g = \Sigma_{t,\ell}^g - \sum_{g' \geq g} \Sigma_{\ell}^{g \rightarrow g'},$$

wie sie in der vielfach verwendeten einfachen Transportnäherung ( $L=0$ ) benutzt wird, wurde für die kleine kritische Anordnung ZPRIII-56B, deren  $k_{eff}$  empfindlich von der Neutronenleckage abhängt, folgendes festgestellt: Bei bis 5 % unterschiedlichen  $\Sigma_{tr,1}^g$ -Werten im Nickelreflektor liefert das konsistente Verfahren ein um 0.15 % verbessertes  $k_{eff}$ . Bei der Bestimmung von Neutroneneinfangraten in einer Lithiumkugel mit 14 MeV-Neutronenquelle

ergeben sich im Energiebereich von 11.57 - 14.95 MeV Ratenkorrekturen von 1 % und 0.5 % in  $T_3$ - bzw.  $T_5$ -Näherung. Die für  $k_{\text{eff}}$  und für Einfangraten mit Hilfe des konsistent berechneten Transportquerschnitts ermittelten Korrekturen sind ungefähr gleich den bei der experimentellen Bestimmung dieser Größen z.Zt. angegebenen Fehlerschranken. Bei kleinen experimentellen Anordnungen wie den hier untersuchten ist daher für genauere, mit Messungen zu vergleichenden Rechnungen der konsistenten Option des Transportquerschnitts der Vorzug zu geben.

2. Bei Legendre-Entwicklung des elastischen Streuwirkungsquerschnitts sind im Multigruppenbild die anisotropen Gruppenwirkungsquerschnitte mit den Legendre-Momenten  $\psi_\ell(E)$  der Neutronenflußdichte als Wichtungsfunktionen zu bilden. Dabei besitzen die  $\psi_\ell(E)$  eine von den Resonanzen des totalen Wirkungsquerschnitts abhängige Feinstruktur proportional  $1/[\Sigma_t(E)]^{\ell+1}/8/$ , die mit  $\ell$  zunimmt, jedoch bei höheren Energien wegen des dann flacheren Verlaufs von  $\Sigma_t(E)$  auch für größere  $\ell$  nur schwach ausgeprägt ist. Es ist klar, daß im Bereich ausgeprägter Resonanzen, der bei den mittelschweren und leichten Materialien in den unteren MeV-Bereich hineinreicht, die Berechnung von Gruppenquerschnitten zu größerem  $\ell$ , etwa  $\ell > 3$ , wegen der starken Fluktuation der  $\psi_\ell(E)$  ein numerisches und wegen des Näherungscharakters dieser Wichtungsfunktionen auch ein prinzipielles Problem ist.

Dieses Problem wurde in der vorliegenden Arbeit erstmals erkannt und durch die Einführung des Konzepts der Transportnäherungen energieabhängiger Ordnung gelöst. Ausgehend von der Zunahme der Anisotropie der elastischen Streuung mit der Energie wird dabei für Energien unterhalb etwa 50 keV die dort die Anisotropie gut beschreibende einfache Transportnäherung  $S_N-T_1$  unter konsistenter Berücksichtigung der energetischen Resonanzselbstabschirmung angewendet. Von 50 keV bis etwa 3 MeV wird die  $S_N-T_3$ -Näherung eingesetzt. Es wird dadurch einerseits die stärkere elastische Anisotropie den Gesetzen des Streuprozesses entsprechend gut dargestellt; andererseits wird im sich ebenfalls bis ungefähr 3 MeV erstreckenden Bereich ausgeprägter Resonanzen der Strukturmaterialien und der leichteren Kerne wie Natrium und Sauerstoff erreicht, daß bei der Bildung anisotroper Gruppenquerschnitte stark fluktuierende Wichtungsfunktionen zu höherem  $\ell$  nicht zu unnötigen numerischen Fehlern führen. Unter Anwendung der üblichen

Wichtung bei schweren Materialien wird so eine konsistente Verknüpfung des Resonanzbereichs der Strukturmaterialien mit dem der schweren Kerne erzielt. Im Energiebereich ausgeprägter elastischer Anisotropie oberhalb 3 MeV muß die  $S_N-T_5$ -Näherung angewendet werden. Wegen des bei diesen Energien glatteren Verlaufs des totalen Wirkungsquerschnitts ist dort die numerische Bestimmung von Gruppenquerschnitten zu  $\ell = 5$  ohne Schwierigkeiten zuverlässig durchführbar.

3. Zur Berücksichtigung der energetischen Resonanzselbstabschirmung bei mittelschweren und leichteren Materialien enthalten die Karlsruher Gruppenkonstantensätze teilweise noch die inkonsistent berechneten f-Faktoren des ABN-Satzes /21/. Es wurde gezeigt, daß die konsistent mit den für diese Untersuchung und für Anwendungszwecke entwickelten Programmen FLUMMI und ELAS berechneten effektiven Transportquerschnitte für den Nickelreflektor der Anordnung ZPRIII-56B und die entsprechenden, aus dem 26-Gruppen-KFKINR-Satz /14/ bestimmten Gruppenquerschnitte, sich um maximal einen Faktor drei unterscheiden. Für das  $k_{eff}$  dieser Anordnung ergeben sich dabei um mehr als 1 % voneinander abweichende Werte.
4. Für die bei der Bildung anisotroper Gruppenquerschnitte als Wichtungsfunktionen eingehenden, á priori unbekanntes Momente  $\psi_\ell(E)$  der Neutronenflußdichte werden von Becker, Gibbs, Ginsberg, Malaviya und Küsters /7/, /8/, /9/, /10/ unterschiedliche Näherungen angegeben. Es wurde der Einfluß dieser Näherungen auf die anisotropen Gruppenquerschnitte der wichtigen Reaktormaterialien Eisen, Sauerstoff und Natrium untersucht. Zur näherungsweise Berücksichtigung der anisotropen Wichtungen /7/, /9/, /10/ wurde dabei vereinfachend eine  $\ell$ -abhängige Feinstrukturwichtung proportional  $1/[\bar{\Sigma}_{tr}(E)]^{\ell+1}$  vorgenommen. In der einfacheren, von Küsters /8/ vorgeschlagenen Form wird der Feinverlauf der  $\psi_\ell(E)$  durch  $1/[\bar{\Sigma}_t(E)]^{\ell+1}$  approximiert. Die Anwendung dieser Feinwichtungen bei der Berechnung anisotroper 208-Gruppen-Querschnitte für reines Eisen für Energien von 1.0 - 2.4 MeV ergeben für die die Neutronenleckage wesentlich bestimmenden Transportquerschnitte  $\sigma_{tr,\ell}^g$  höchstens um 0.1 und 0.6 % für  $\ell = 1$  bzw.  $\ell = 3$  voneinander abweichende Werte. Wegen des dort stärker unterschiedlichen Verlaufs von  $\Sigma_{tr}(E)$  und  $\Sigma_t(E)$  ist für Sauerstoff der Energiebereich um die 440 keV- $^{16}O$ -Resonanz von besonderem Interesse. Maximale Abweichungen der

unterschiedlich gewichteten Gruppenquerschnitte ergeben sich dabei in der Energiegruppe von 441.6 - 464.1 keV, in der bei integraler Normierung die durch  $1/\Sigma_t^2$  und  $1/\Sigma_{tr}^2$  approximierten  $\psi_1(E)$  sich unter Überschneidung um bis einen Faktor 1.5 unterscheiden. Für den mikroskopischen Transportquerschnitt zu  $\ell = 1$ ,  $\sigma_{tr,1}^g$ , ergeben sich dort in reinem Sauerstoff um 2.9 % und in der ZPR-Coremischung um 1.4 % voneinander abweichende Werte. Für den makroskopischen Transportquerschnitt  $\Sigma_{tr,1}^g$  des ZPR-Cores reduziert sich diese Abweichung auf vernachlässigbare 0.5 %. Für  $\ell = 3$  werden bei einem Faktor von höchstens 2.0 in  $\psi_3(E)$  entsprechend für  $\sigma_{tr,3}^g$  3.2 % und 1.5 % und für  $\Sigma_{tr,3}^g$  nicht ins Gewicht fallende 0.6 % ermittelt. Bei Natrium liegt die bedeutendste Resonanz bei 3 keV, also in einem Energiebereich, in dem aufgrund der im Schwerpunktsystem isotroper Streuung  $1/\Sigma_t^2$ - und  $1/\Sigma_{tr}^2$ -Wichtung gleichwertig sind. Für andere als die untersuchten Energiebereiche sind wegen des weniger unterschiedlichen Verlaufs von  $\Sigma_t(E)$  geringere Unterschiede in den Gruppenquerschnitten zu erwarten.

Das Ergebnis der speziellen Untersuchung an der Resonanz des  $O^{16}$  bei 440 keV läßt sich auch anders interpretieren. Denn man kann mit gleicher Berechtigung die hier vorhandenen großen Unterschiede (auch in der Form) in den mit Hilfe von  $\Sigma_t$  und  $\Sigma_{tr}$  approximierten  $\psi_\ell$  auffassen als ein gewisses Maß für mögliche Unsicherheiten der á priori unbekanntes Wichtungsfunktionen. Diese Interpretation führt zu der Schlußfolgerung, daß durchaus größere Unterschiede im Verlauf der Wichtungsfunktionen zugelassen werden können (im obigen Beispiel in der betrachteten Energiegruppe von etwa einem Faktor 2 bei verschiedener Form), da der resultierende Einfluß auf die effektiven Gruppenquerschnitte kleiner ist als der z. Zt. anzunehmende Fehler der experimentell bestimmten Wirkungsquerschnitte bis etwa 5 %.

Zur Bildung anisotroper Gruppenquerschnitte in 208 Gruppen wird daher die einfachere Feinstrukturwichtung proportional  $1/[\Sigma_t(E)]^{\ell+1}$  empfohlen.

5. Bei breiteren Energiegruppen, z.B. in einer 26-Gruppen-Einteilung, hat der durch die totale Stoßdichte angenäherte Grobverlauf der Wichtungsfunktionen einen ausgeprägten Einfluß besonders auf die Gruppenwirkungsquerschnitte der elastischen Streuung. Dieser Einfluß nimmt mit der Breite der Energiegruppen ab. Es wurde gezeigt, daß in einer Feingruppeneinteilung von 208

Energiegruppen bei der Bildung anisotroper Gruppenquerschnitte eine zusätzliche Grobichtung nicht erforderlich ist. Dieses Faktum ermöglicht es, für anisotrope Transportrechnungen die die elastische Anisotropie beschreibenden Gruppenquerschnitte  $\Sigma_{tr,L+1}^g$  und  $\Sigma_{\ell}^{g' \rightarrow g}$ ,  $\ell \leq L$ , in 208 oder 275 Gruppen vereinfachend ohne Grobichtung zu erstellen. Für 26-Gruppen-Rechnungen können dann diese Vielgruppenquerschnitte mit Hilfe systemeigener Kondensationsspektren, die den zonenabhängigen Grobverlauf der Wichtung enthalten, auf 26 Gruppen kondensiert werden.

6. Die bei der Interpretation von Messungen gerichteter Neutronenspektren in einer Lithiumkugel von 1 m Durchmesser mit zentraler 14 MeV-Neutronenquelle bisher aufgetretenen Diskrepanzen /1/ konnten sehr zufriedenstellend geklärt werden. Die in früheren Rechnungen in einfacher Transportnäherung besonders bei Neutronenenergien etwa von 8 - 10 MeV und im Bereich des Quellpeaks bei 14 MeV zwischen Messung und Rechnung festgestellten Abweichungen wurden

- durch den Einsatz der in dieser Arbeit entwickelten  $T_5$ -Näherung und
- durch die Darstellung der Neutronenquelle mit Hilfe des experimentell ermittelten Targetspektrums (früher "Rechteck"-Quelle bei 14 MeV) auf höchstens etwa 20 % reduziert. Die experimentellen Fehlerschranken betragen  $\approx 10$  % /26/.

Einen Teilbetrag zur Verbesserung der Übereinstimmung zwischen Messung und Rechnung lieferte ein verbessertes Auswerteverfahren von Rusch und Kappler /26/.

7. Des weiteren wurde für das Kugelmodell der kleinen kritischen Anordnung ZPRIII-56B, einem plutoniumhaltigen Kern von 105.44 cm Durchmesser mit einem 34.34 cm starken Nickelreflektor, eine zufriedenstellende Übereinstimmung in  $k_{eff}$  bis auf etwa 0.5 % zum Experiment erreicht. Durch den Einsatz von Transportquerschnitten

- in der konsistent die anisotrope Einstreuung berücksichtigenden Option
- mit konsistenter energetischer Resonanzselbstabschirmung

- mit zonenabhängiger Berücksichtigung der Grobwichtung

sowie durch

- korrigierte  $\sigma_{\text{capt}}$ -Werte für Nickel zwischen 10 und 100 keV

wurde bei einem experimentellen Wert von  $1.0000 \pm 0.0014$  /18/ ein  $k_{\text{eff}}$ -Wert von 1.0066 berechnet.

Die Untersuchung hinsichtlich des Einflusses der Wichtung bei der Bildung der 26-Gruppen-Transportquerschnitte aus 208-Feingruppen-Querschnitten ergab bei Vernachlässigung der Zonenabhängigkeit der Grobwichtung Änderungen der Neutroneneinfangrate von 35 % im Reflektor im Energiebereich von 1 - 100 keV bei einer Vergrößerung von  $k_{\text{eff}}$  um mehr als 1 %. Die teilweise Vernachlässigung der Feinstrukturwichtung in 208-Gruppen führt zu Unsicherheiten von 0.7 % in  $k_{\text{eff}}$ . Dies zeigt, daß anisotrope Gruppenquerschnitte für Anordnungen wie der hier untersuchten unter sorgfältiger Berücksichtigung der Wichtung zu bilden sind. Durch Verwendung der energieabhängigen Transportnäherung  $T_{5,3,1}$  ( $T_5$  von 2.5 - 10.5 MeV,  $T_3$  von 0.4 - 2.5 MeV,  $T_1$  unterhalb 0.4 MeV) konnte die Neutronenleckage aus dem Reflektor um 17 % gegenüber der normalerweise benutzten  $T_1$ -Näherung korrigiert werden.

Damit sind alle eingangs gestellten Aufgaben im Zusammenhang mit der Berücksichtigung der Anisotropie der elastischen Neutronenstreuung in Reaktorrechnungen gelöst. Ein zuverlässiges und einfaches, für Anwendungszwecke entwickeltes Verfahren zur Behandlung der anisotropen elastischen Streuung steht bereit und wird mit Erfolg eingesetzt.

## 10. Referenzen

- /1/ F. Kappler, D. Rusch, H. Werle, H.W. Wiese: Determination of Neutron Spectra in a Lithium Sphere, Proc. of the 8th Symposium on Fusion Technology (1974), EUR 5182e
- /2/ G.I. Bell, G.E. Hansen, H.A. Sandmeier: Multitable Treatments of Anisotropic Scattering in  $S_N$  Multigroup Transport Calculations, Nucl. Sci. Eng., 28, 376 (1967)
- /3/ B.G. Carlson: Solution of the Transport Equation by  $S_N$ -Approximations, LA-1891 (1955)
- /4/ K.D. Lathrop: DTF-IV, A FORTRAN-IV Program for Solving the Multigroup Transport Equation with Anisotropic Scattering, LA-3373 (1965)
- /5/ B. Davison: Neutron Transport Theory, S. 157 Oxford University Press 1958
- /6/ R.E. Maerker, F.J. Muckenthaler: The ORNL Benchmark Experiment for Fast Neutron Transport in Thick Sodium, Nucl. Techn. 22, 275 (1974)
- /7/ A. Ginsberg, M. Becker: Models for Anisotropic Weighting Spectra, ANS Trans., 14, 368 (1971)
- /8/ H. Küsters: Konsistente Darstellung von Gruppenkonstanten zur Berechnung physikalischer Eigenschaften Schneller Reaktoren (noch unveröffentlicht)
- /9/ D.C. Gibbs, M. Becker, B.K. Malaviya: An Iterated Sequential Transport Approximation for Anisotropic Spectral Moments Nucl. Sci. Eng. 53, 327 (1974)
- /10/ A. Ginsberg: Improvements in Transport Theory and their Application to Fast Neutron Spectra, Troy, NY; Rensselaer Polytechnic Institute (1973) (Thesis)
- /11/ B. Goel, B. Krieg: Status of the Nuclear Data Library KEDAK-3 KFK 2234 (1975)
- /12/ B. Davison: Neutron Transport Theory, S. 287 Oxford University Press 1958
- /13/ C. Günther, W. Kinnebrock: Das eindimensionale Transportprogramm DTK, KFK 1381 (1971)
- /14/ C. Günther, W. Kinnebrock: SNOW, Ein zweidimensionales  $S_N$ -Programm zur Lösung der Neutronentransportgleichung in Platten- und Zylindergeometrie, KFK 1826 (1973)
- /15/ D.I. Garber u.a.: Angular Distributions in Neutron-Induced Reactions, Vol. 1, BNL 400 (1970)
- /16/ H. Huschke: Die Behandlung der Ortsabhängigkeit der energetischen Resonanzselbstabschirmung an Grenzflächen homogener Zonen in Reaktoren, KFK 1353 (1971) S. 15

- /17/ E. Madelung: Die mathematischen Hilfsmittel des Physikers, Springer-Verlag 1957, S. 45
- /18/ R.B. Kidman u.a.: Cross Section Evaluation Working Group, Benchmark Specifications (1974) BNL 19302 (ENDF-202)
- /19/ E. Kiefhaber: The KFKINR-Set of Group Constants; Nuclear Data Basis and First Results of its Application to the Recalculation of Fast Zero-Power Reactors, KFK 1572 (1972)
- /20/ E. Kiefhaber: Nachrechnung einiger Benchmark-Probleme der Cross Section Evaluation Working Group (CSEWG) KFK 1272/3, S. 122-1
- /21/ L.P. Abagjan, N.O. Bazazjanc, I.I. Bondarenko, N.N. Nicolaev: Gruppenkonstanten schneller und intermediärer Neutronen für die Berechnung von Kernreaktoren, KFK-tr-144 (1965)
- /22/ J.Y. Barré: Importance of the Capture Cross Section of Structural Materials for Fast Power Reactors, EACRP Working Group Meeting, Karlsruhe 1973, KFK 2046, S. 258
- /23/ D. Woll: GRUCAL, Ein Programmsystem zur Berechnung makroskopischer Gruppenkonstanten, KFK 2108 (1975)
- /24/ H. Huschke, B. Krieg: MIGROS-2: A Programm written in FROTRAN for the Calculation of Microscopic Group Constants from Nuclear Data, KFK 1784 (1973)
- /25/ O. Ozer, D. Garber: ENDF-201, ENDF/B Summary Documentation (1973), BNL 17541
- /26/ F. Kappler, D. Rusch (private Mitteilung)
- /27/ B. Davison: Neutron Transport Theory, S. 19, Oxford University Press (1958)
- /28/ E.T. Whittaker, G.N. Watson: A Course of Modern Analysis, S. 327 Cambridge, At the University Press (1958)
- /29/ K.E. Schroeter: Einfluß von Berechnungsmethoden auf den Multiplikationsfaktor  $k_{eff}$  und den Voideffekt  $\Delta k_v$  für einen großen schnellen natriumgekühlten Reaktor (REMO-Konzept dort noch R-Konzept genannt!) KFK 1180 (1970)

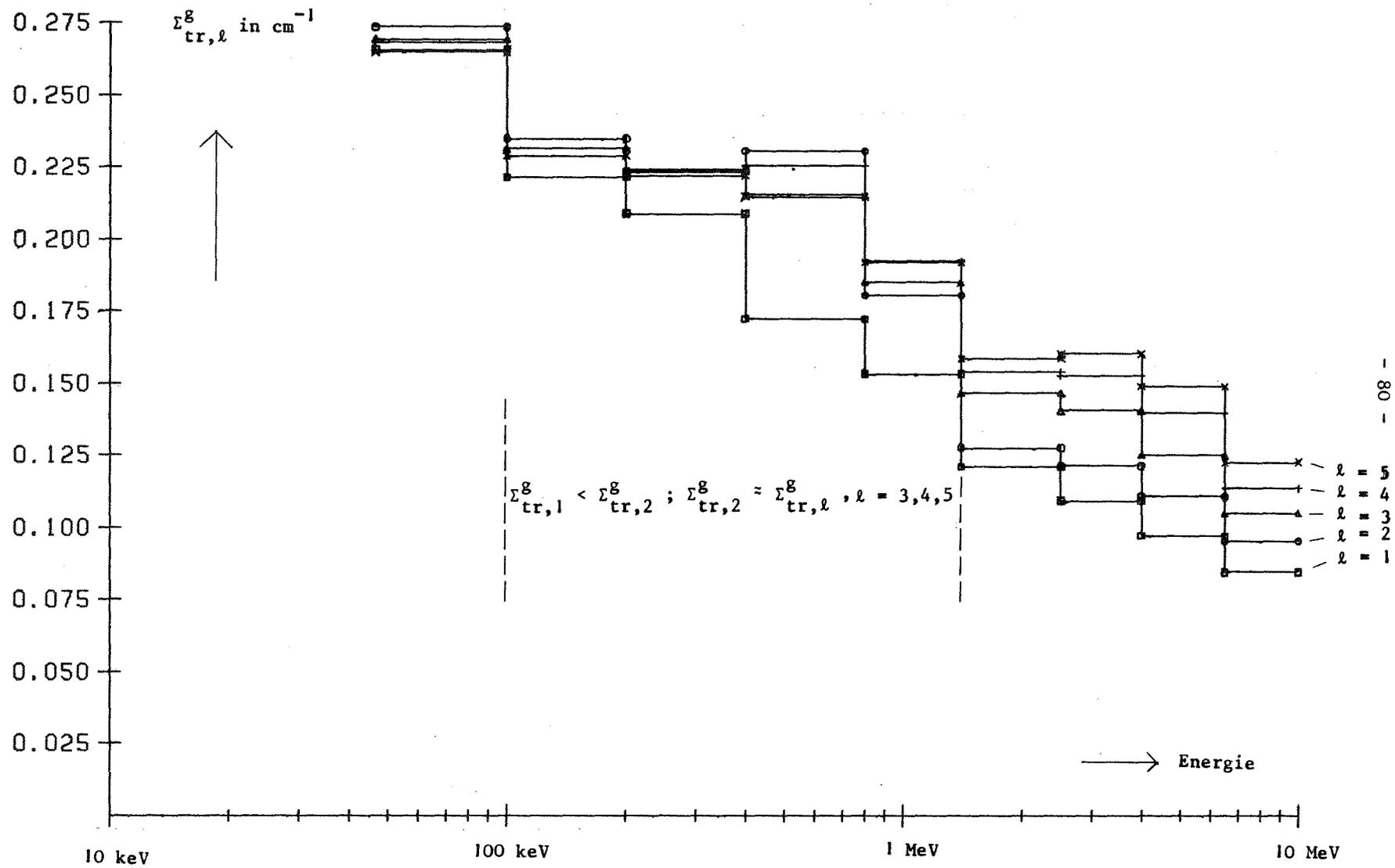


Abb. 4.1: TRANSPORTQUERSCHNITTE 1.-5. ORD. FUER CORE ZPR3-56B

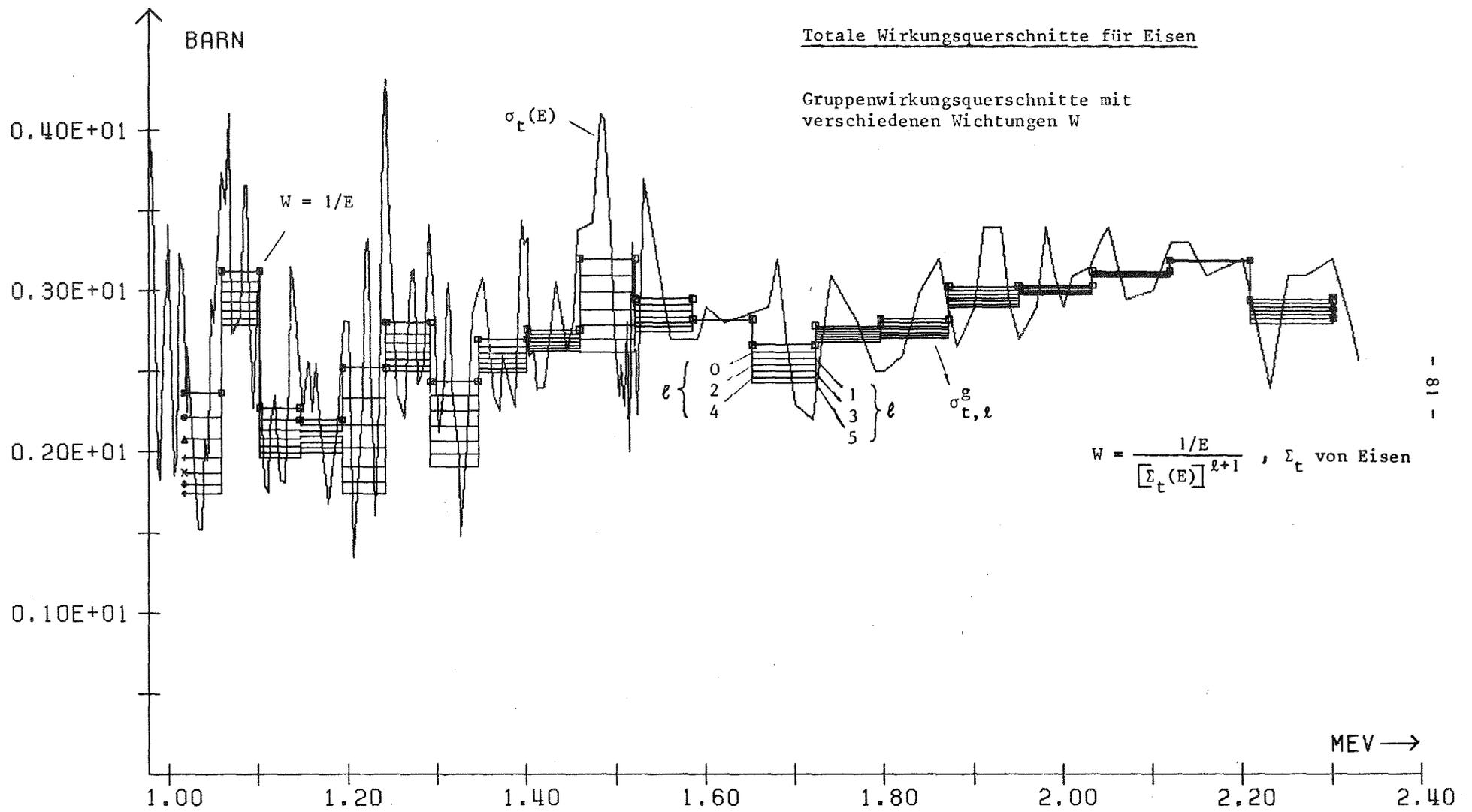


Abb. 6.1

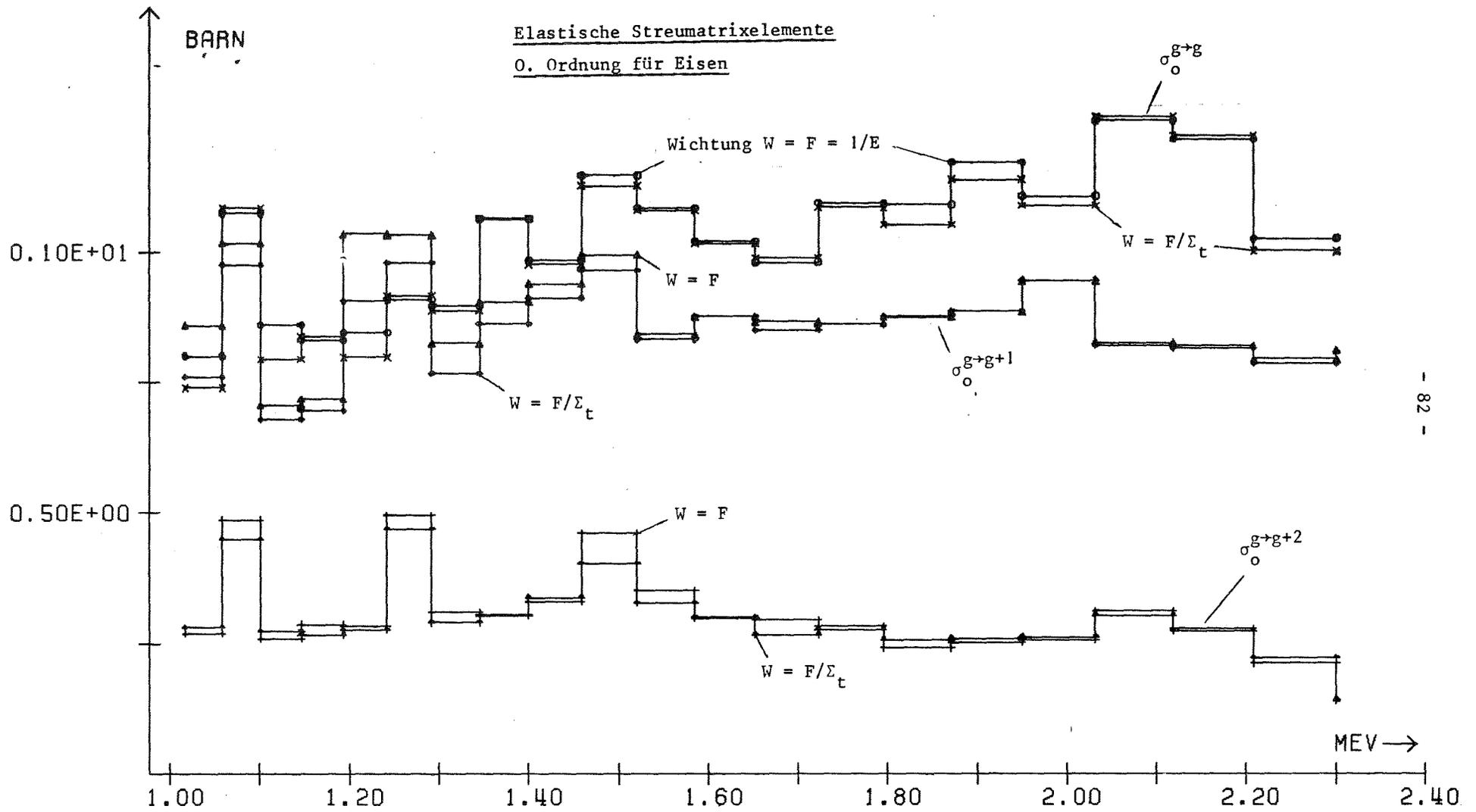


Abb. 6.2

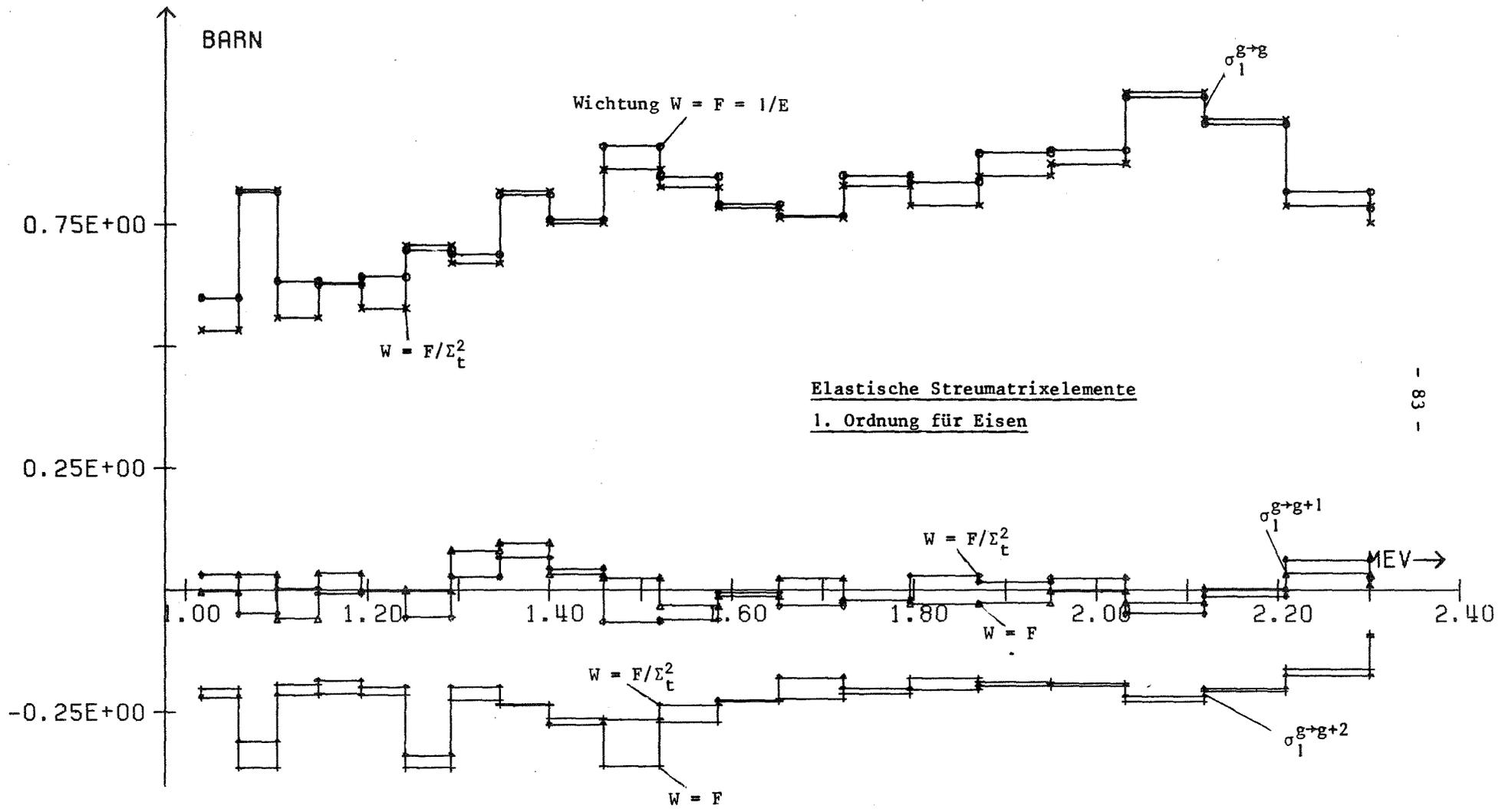


Abb. 6.3

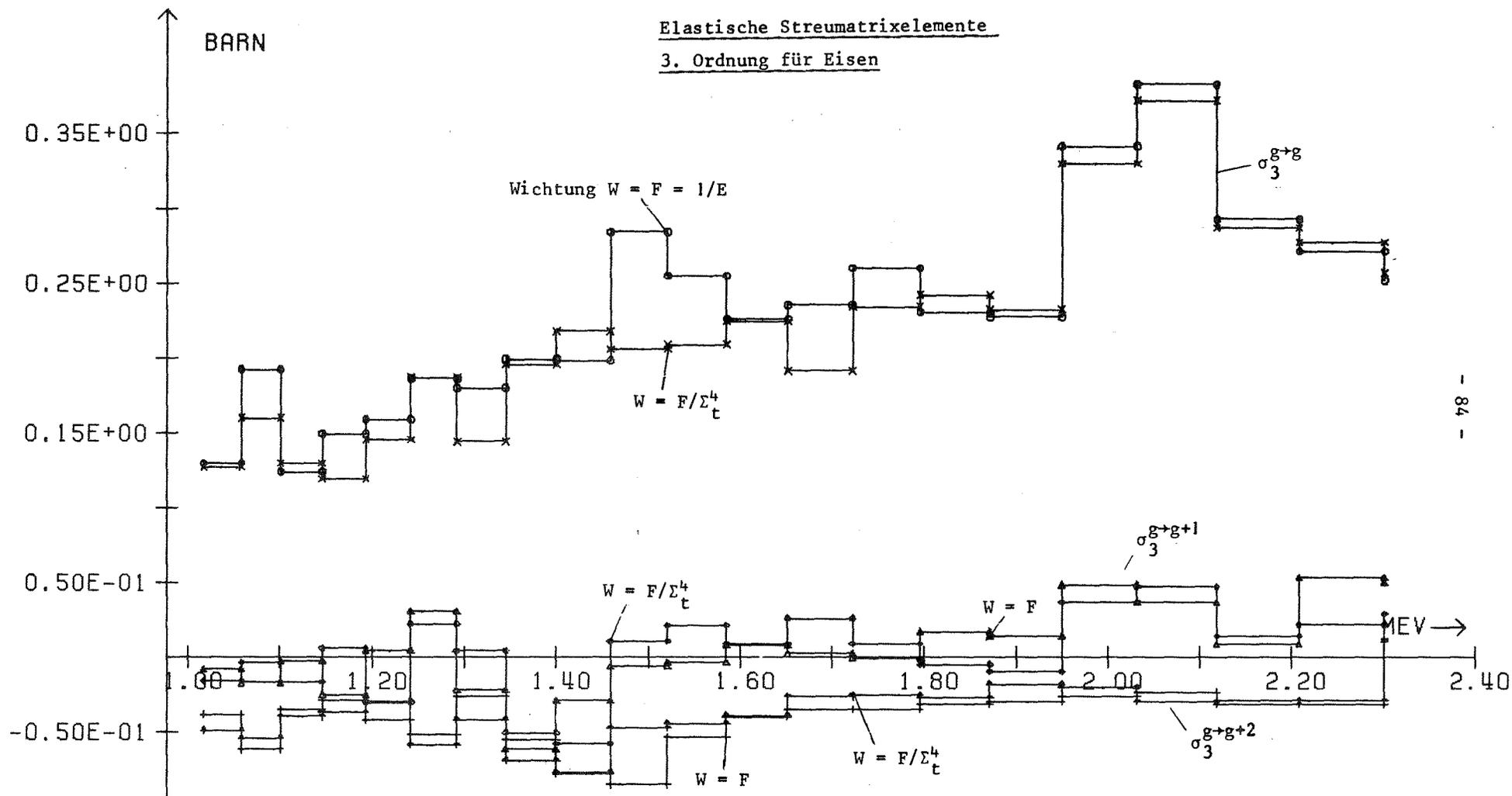


Abb. 6.4

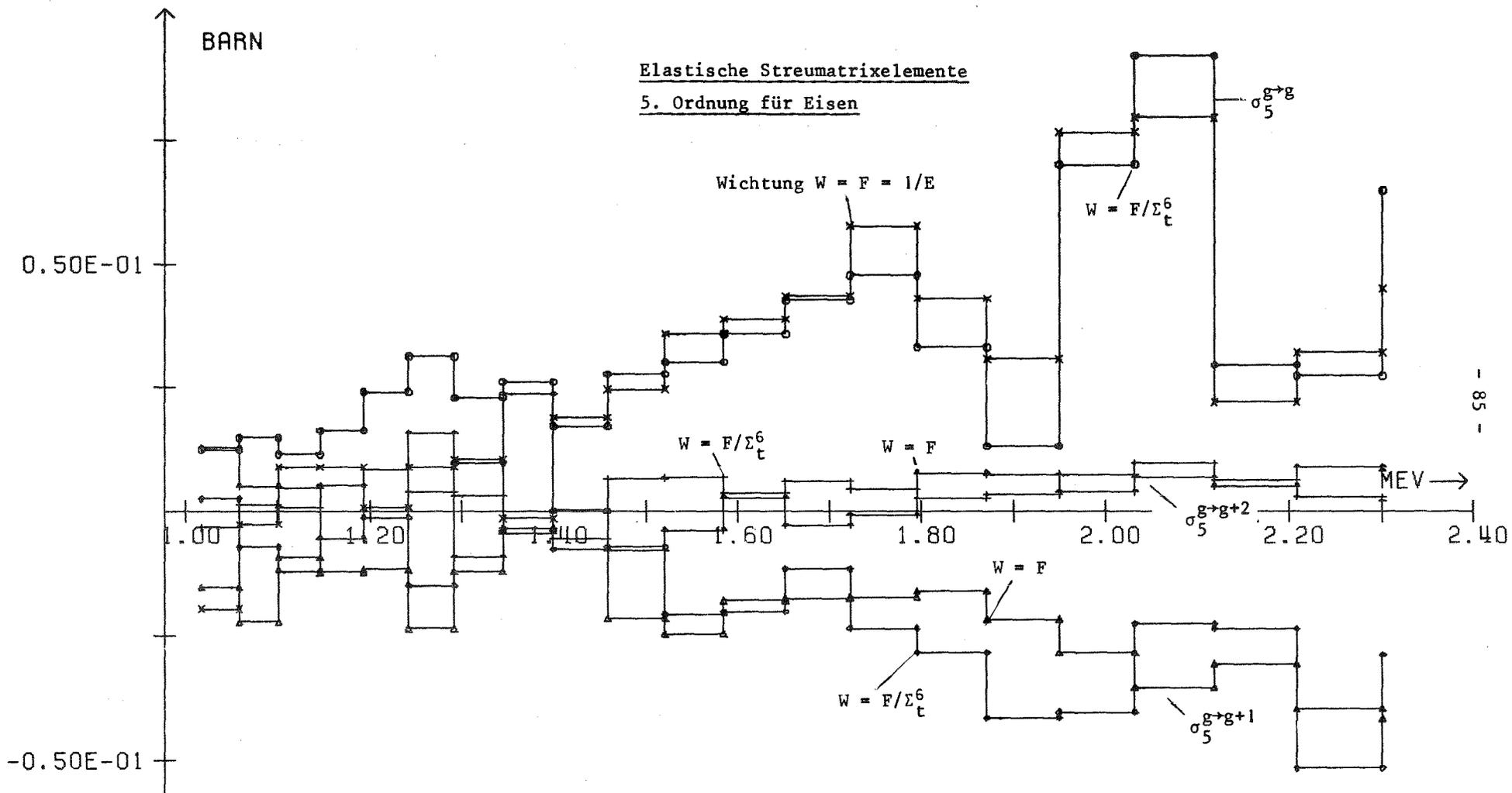


Abb. 6.5

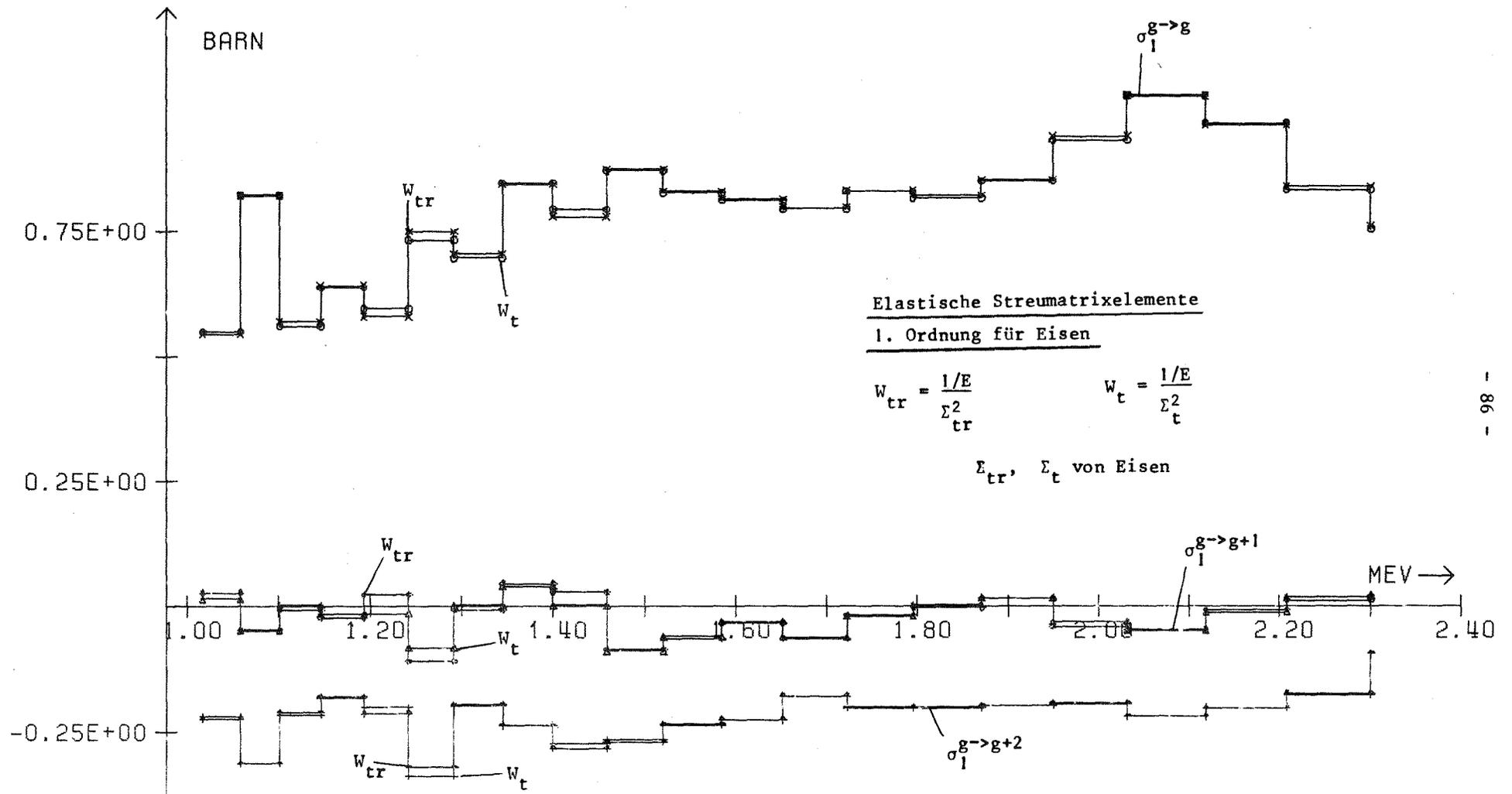


Abb. 6.6: Vergleich Feinstrukturwichtung  $1/\Sigma_{tr}^2$  und  $1/\Sigma_t^2$

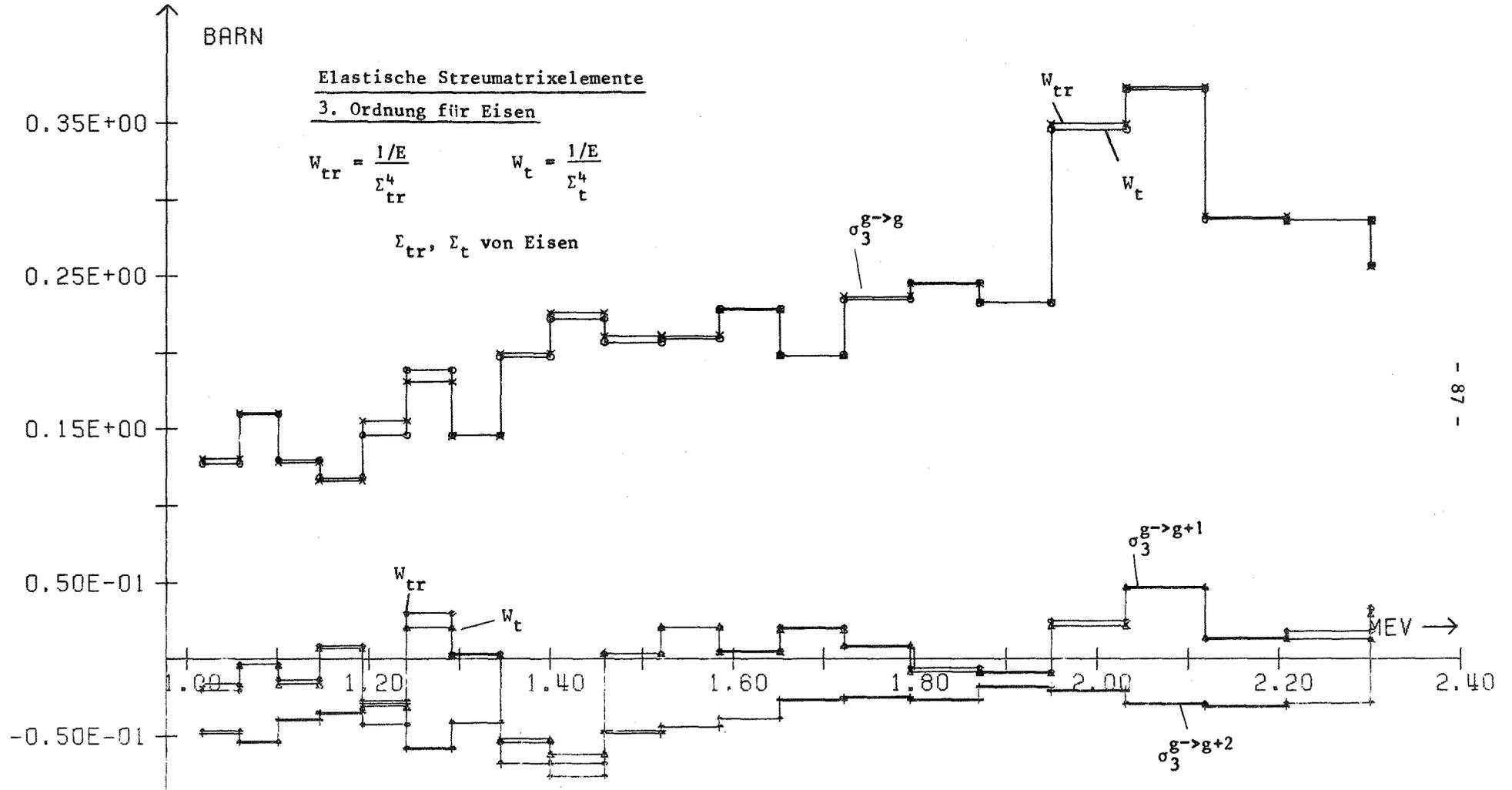


Abb. 6.7: Vergleich Feinstrukturwichtung  $1/\Sigma_{tr}^4$  und  $1/\Sigma_t^4$

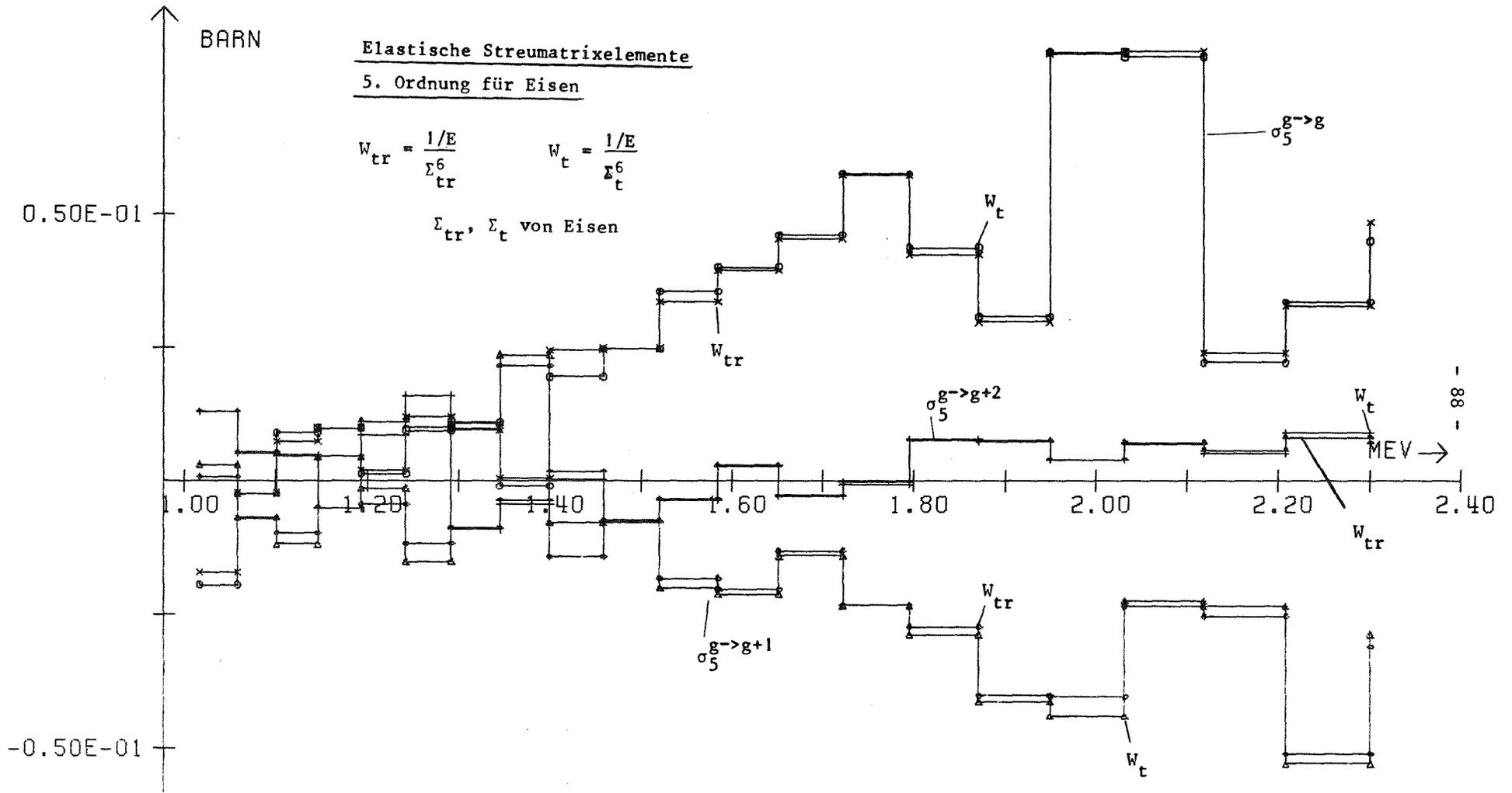


Abb. 6.8: Vergleich Feinstrukturwichtung  $1/\Sigma_{tr}^6$  und  $1/\Sigma_t^6$

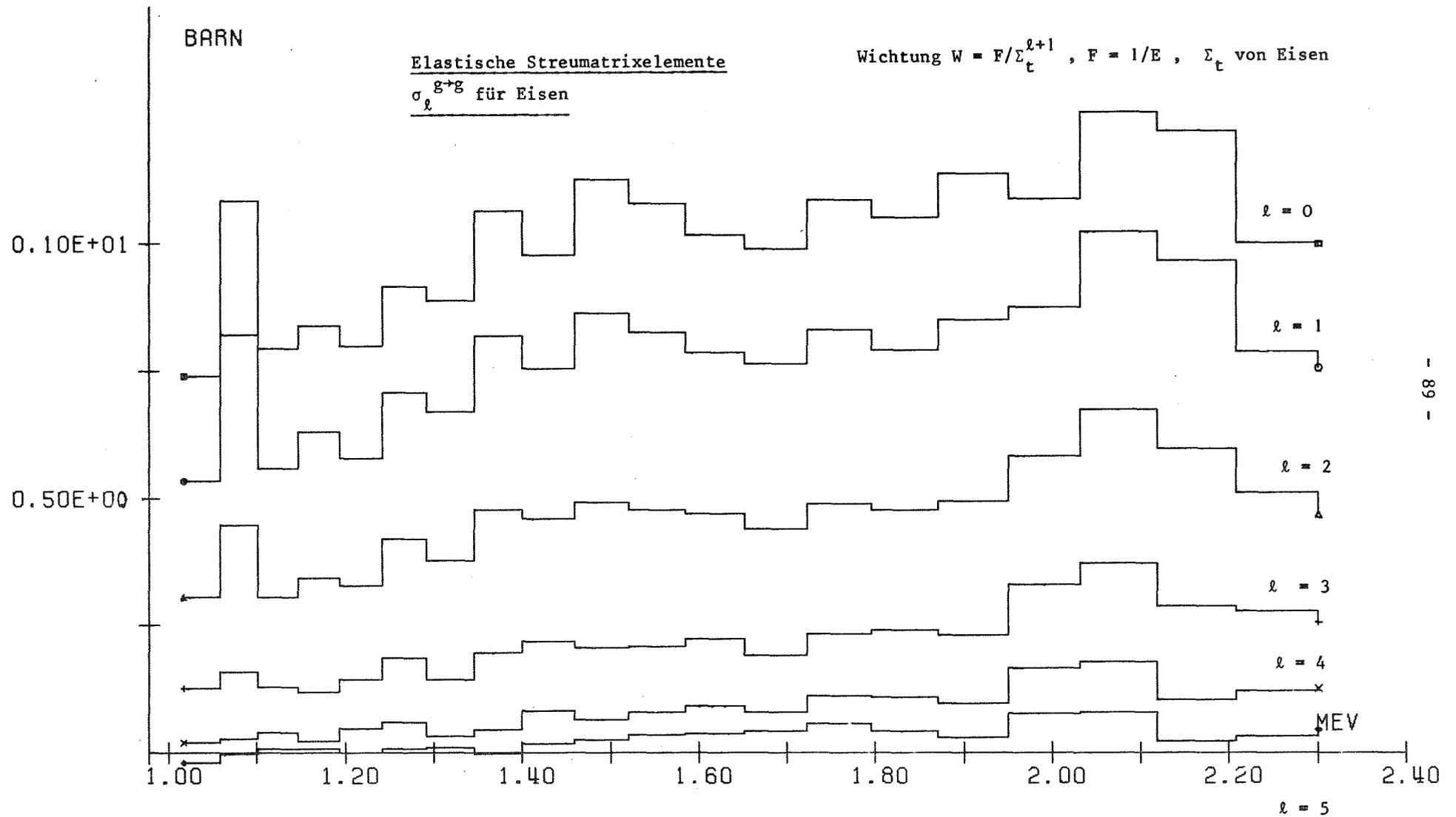


Abb. 6.9

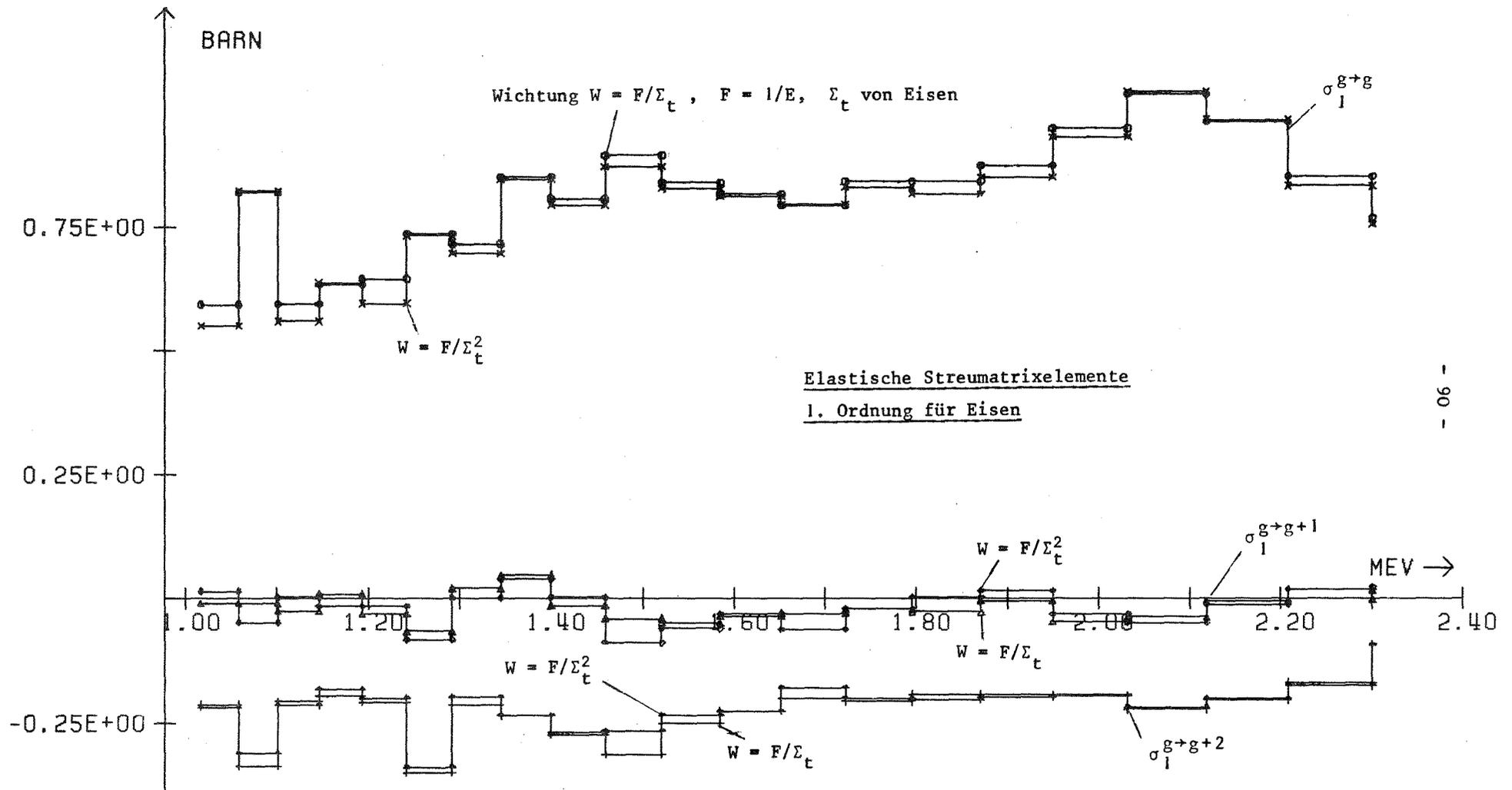


Abb. 6.10: Vergleich  $\psi_1$ -Wichtung mit  $\psi_0$ -Wichtung

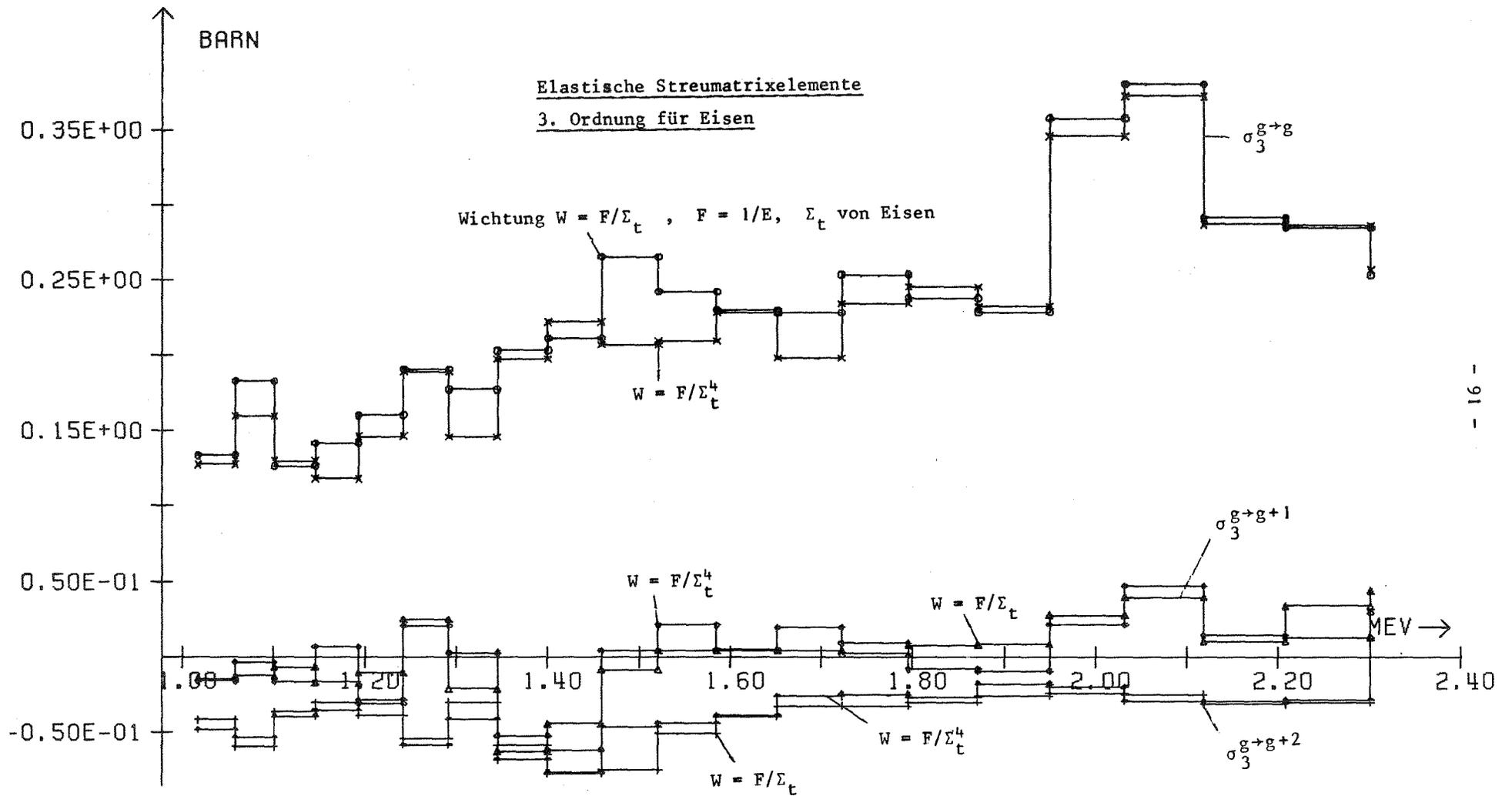


Abb. 6.11: Vergleich  $\psi_3$ -Wichtung mit  $\psi_0$ -Wichtung

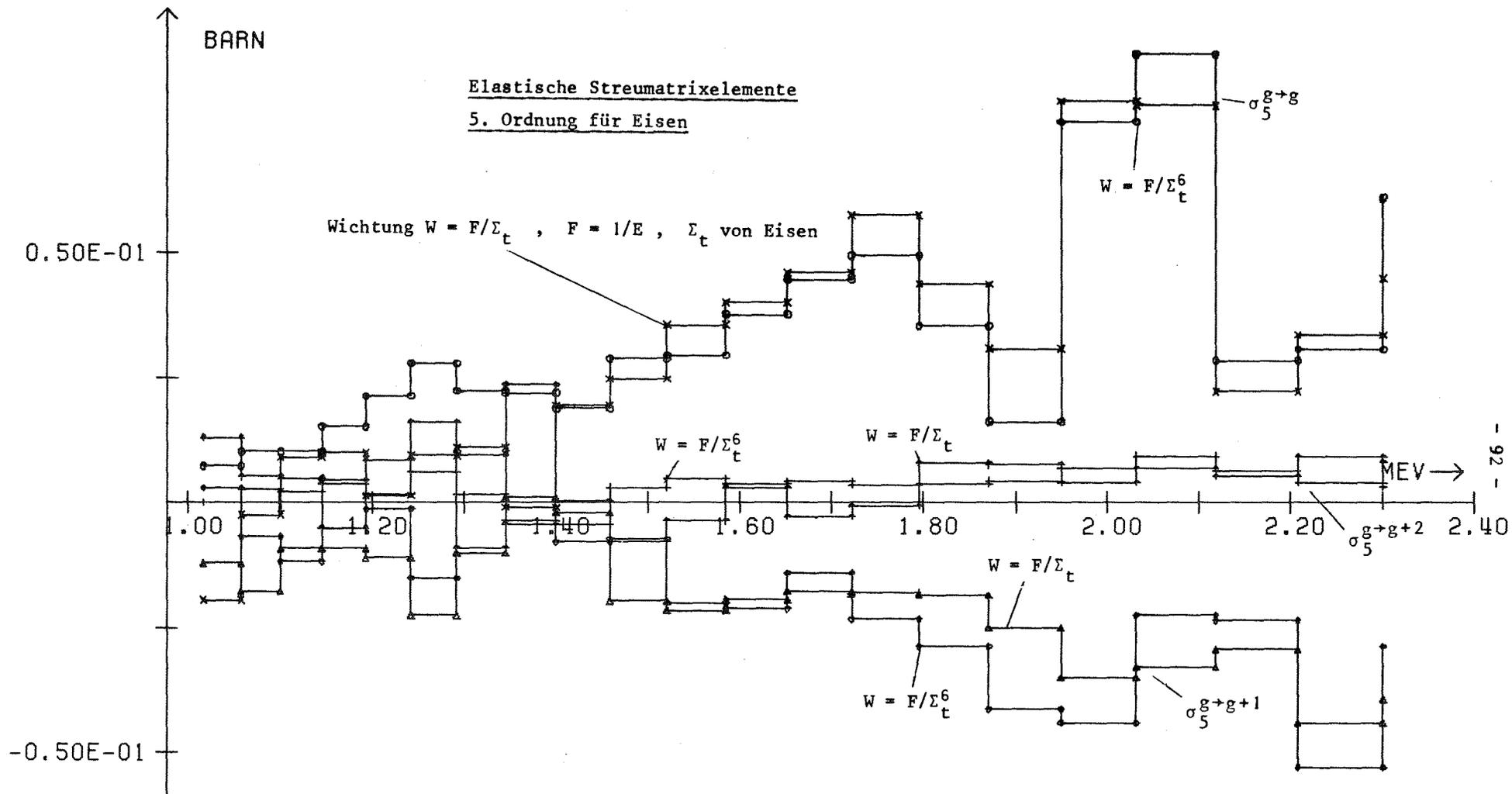


Abb. 6.12 ;

Vergleich  $\psi_5$ -Wichtung mit  $\psi_0$ -Wichtung

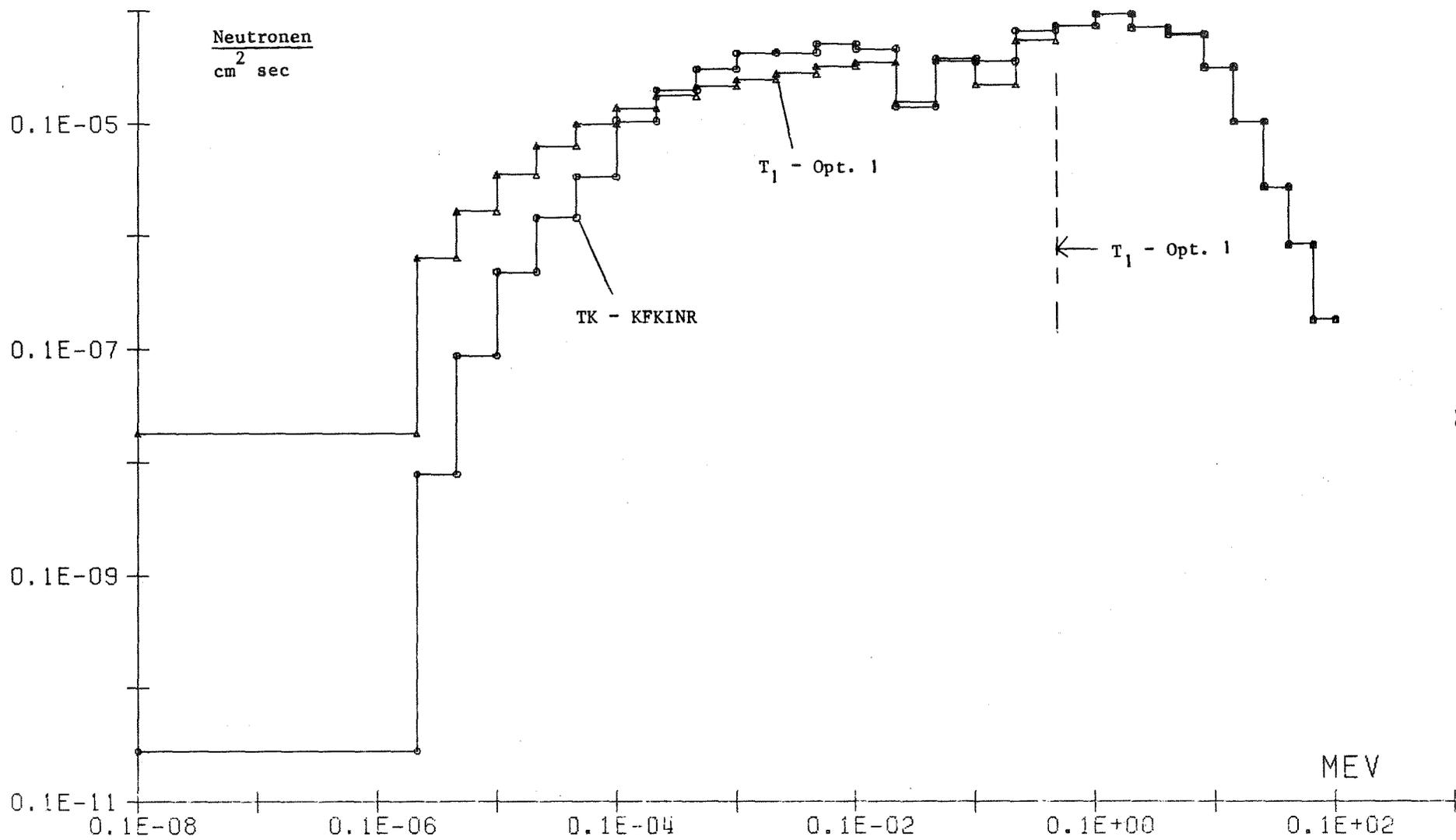


Abb. 7.1:

ZPR3-5GB SPEKTREN BEI R=69.0CM (Reflektormitte)

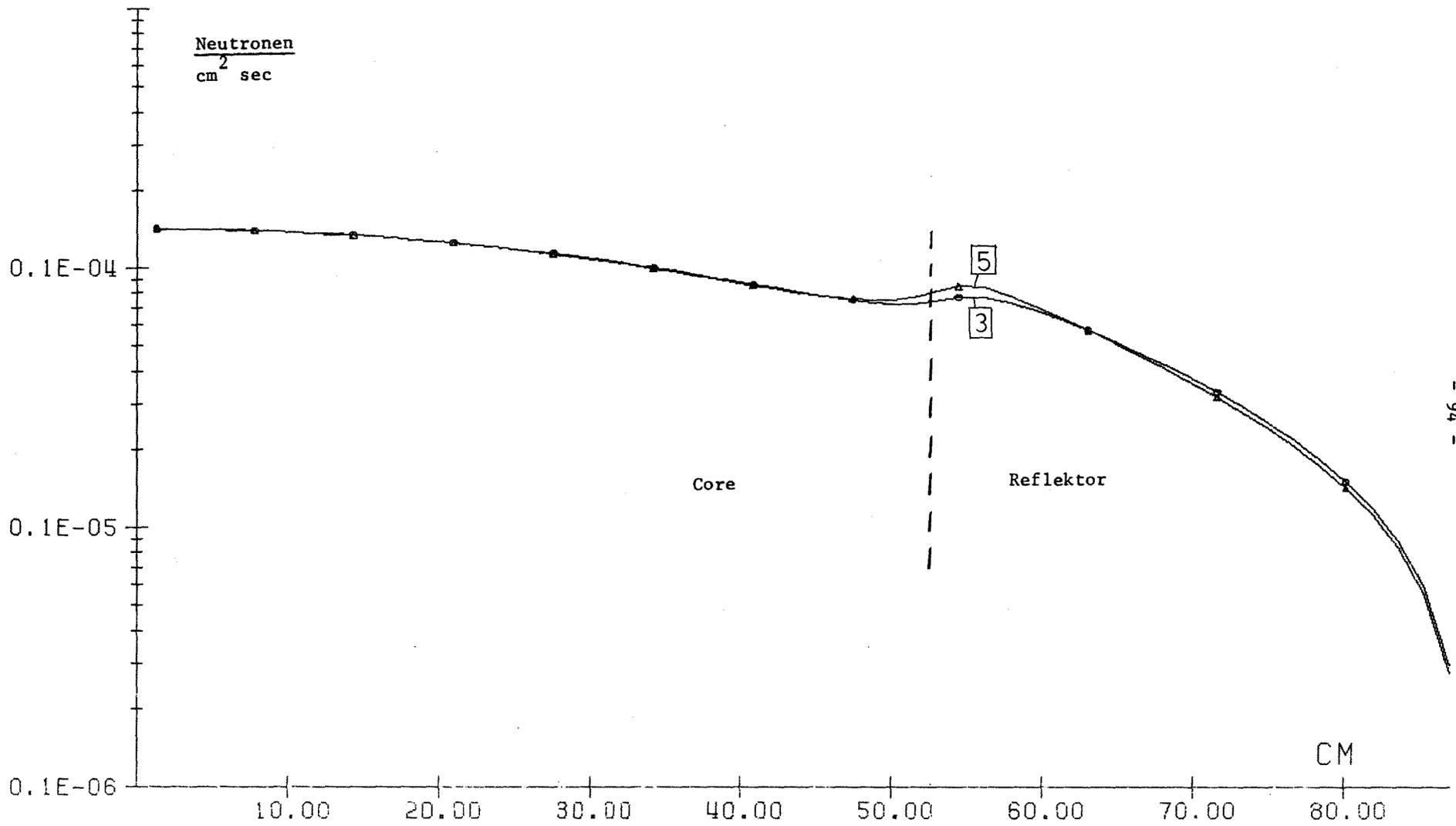


Abb. 7.2:

ZPR3-56B SKALARFLUESSE IN GRUPPE 12

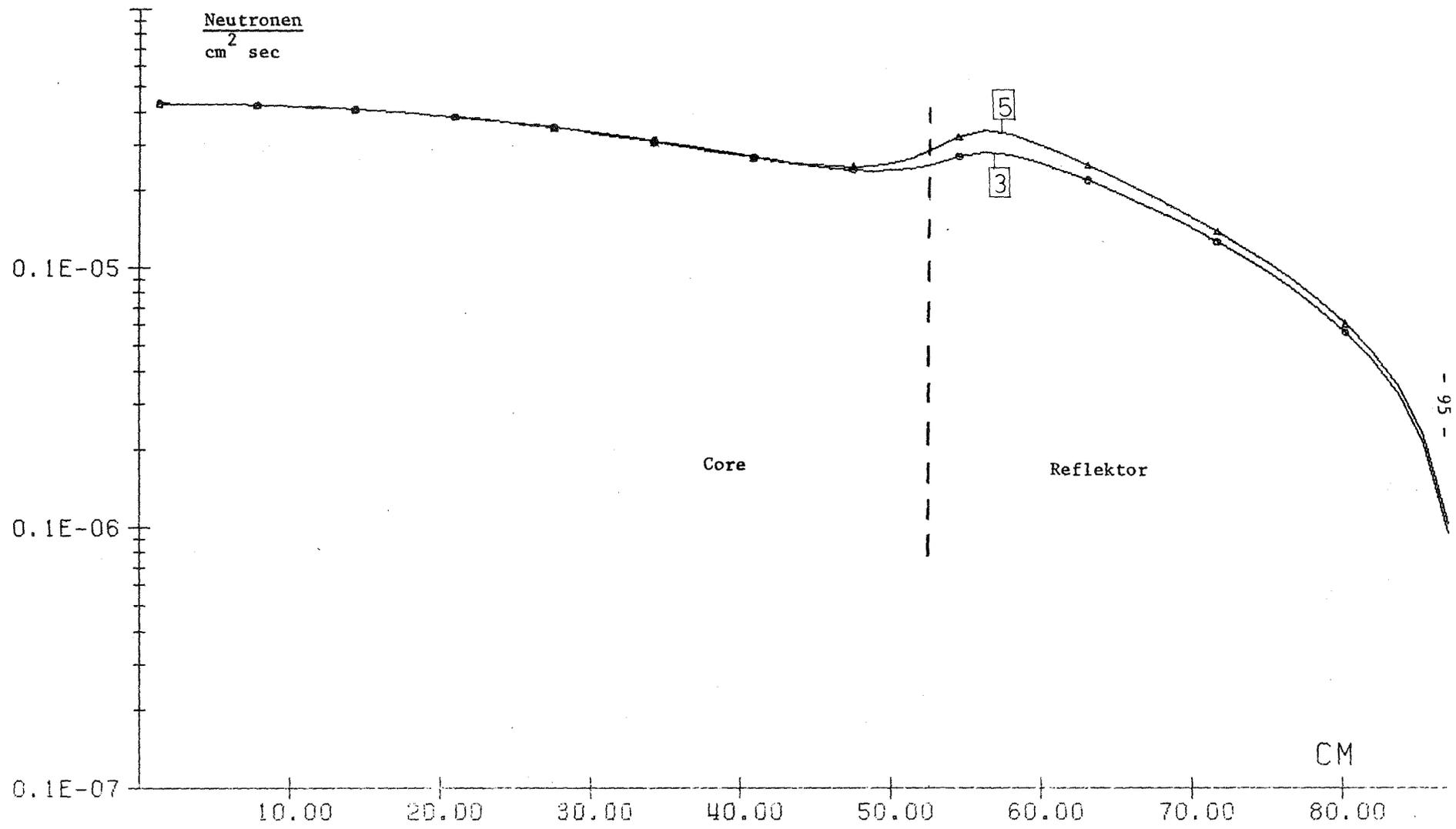


Abb. 7.3: ZPR3-568 SKALARFLUESSE IN GRUPPE 13

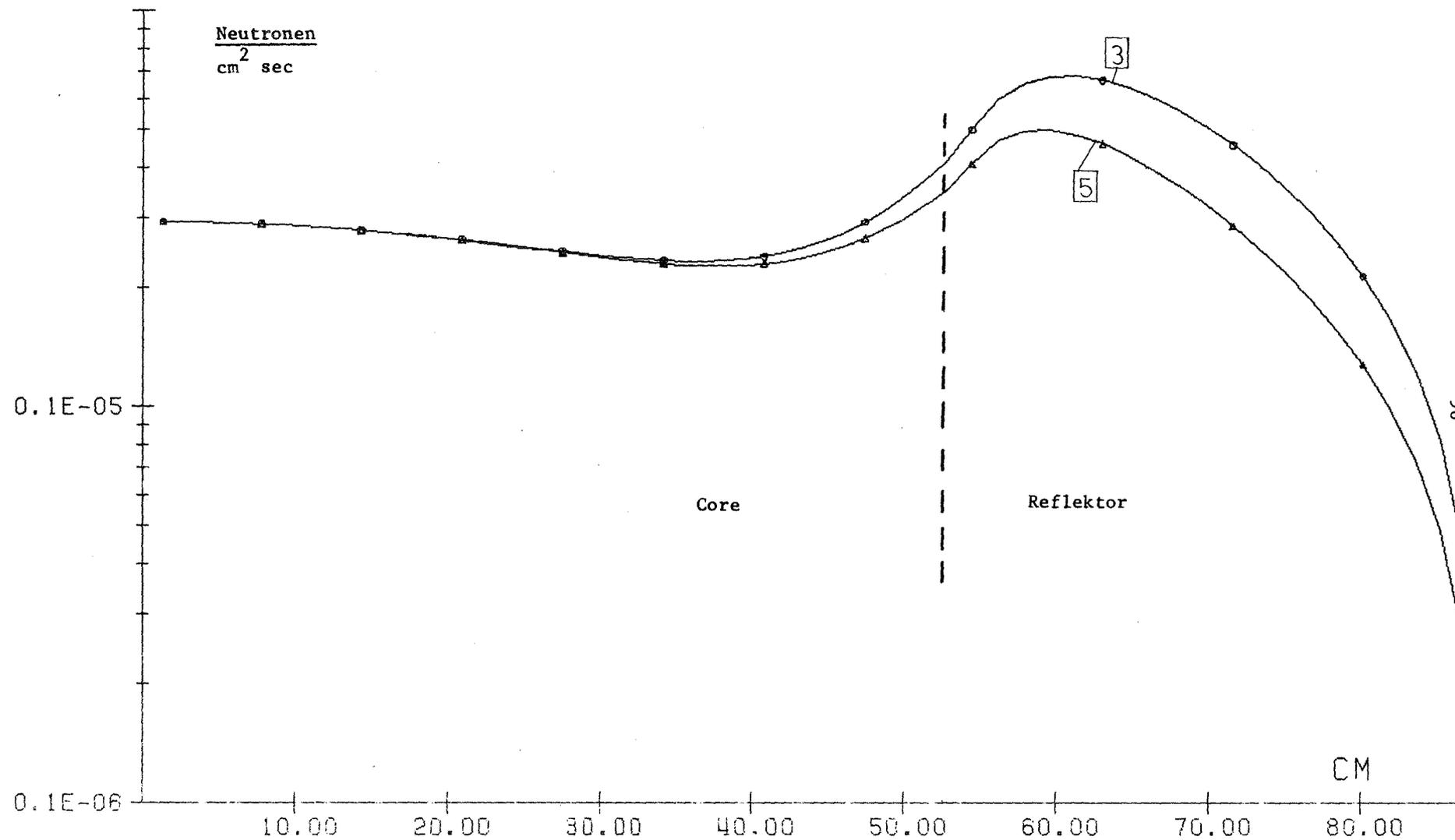


Abb. 7.4: ZPR3-56B SKALARFLUESSE IN GRUPPE 15

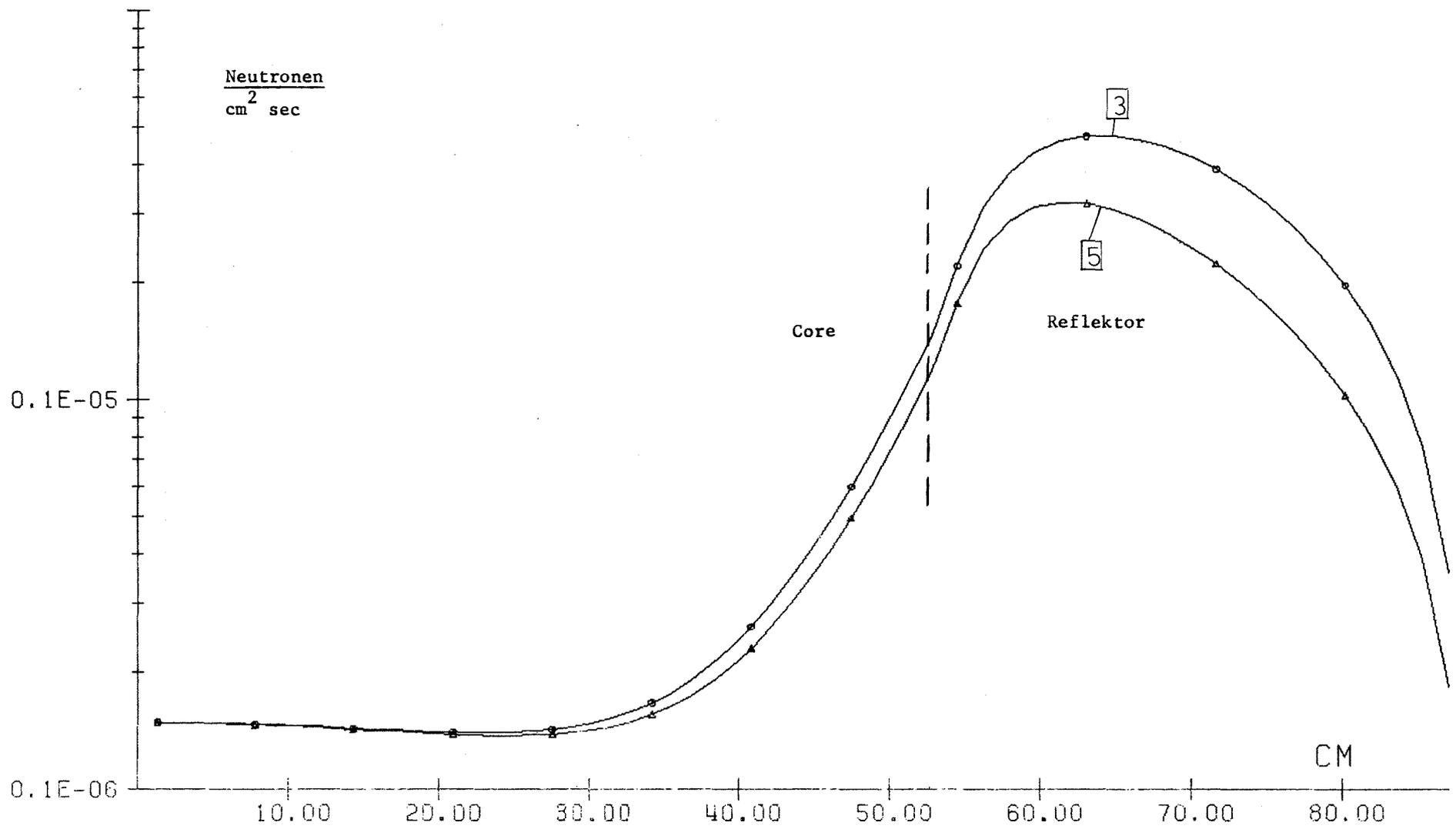


Abb. 7.5: ZPR3-56B SKALARFLUESSE IN GRUPPE 17

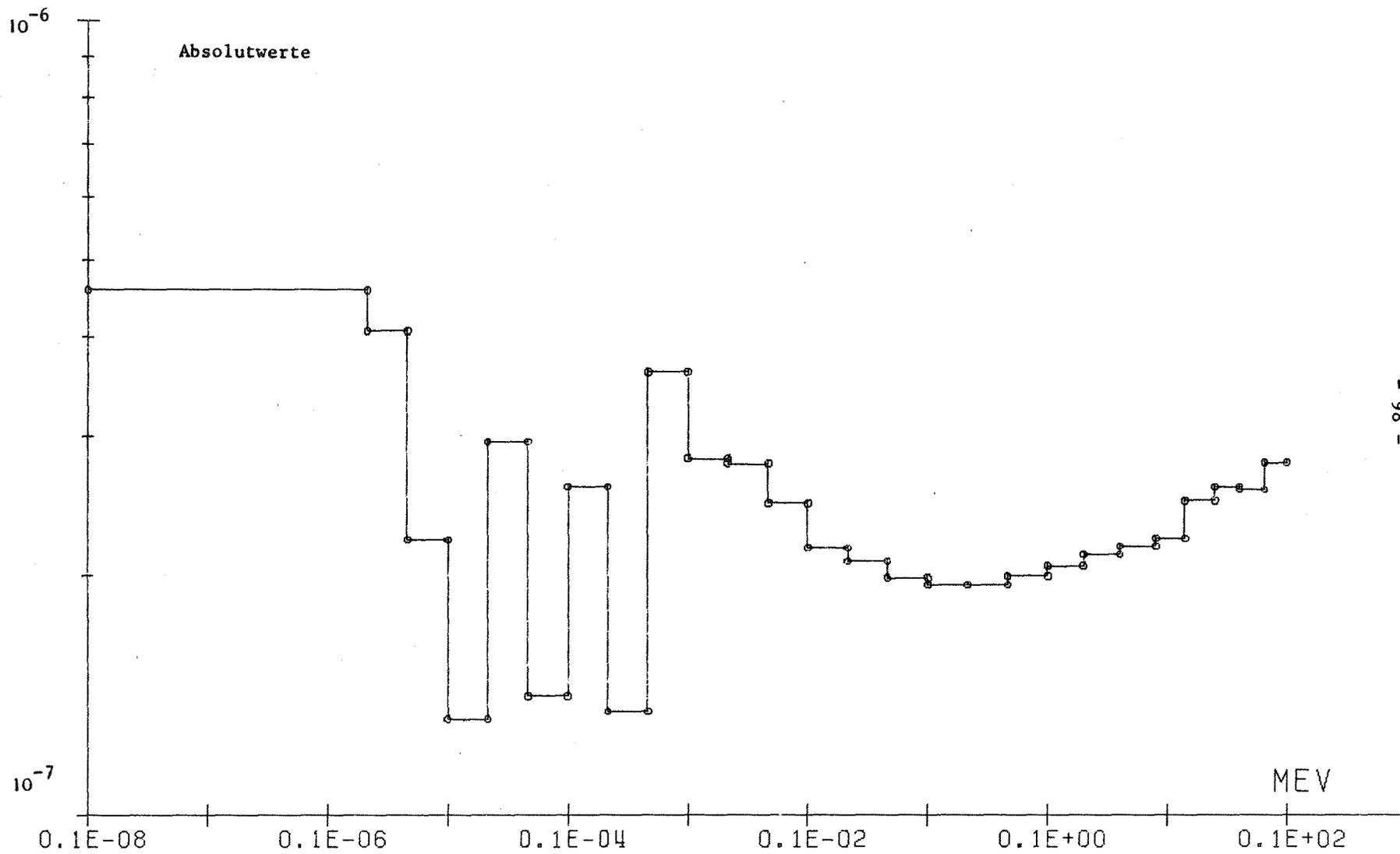


Abb. 7.6: ZPR3-56B ADJUNGIERTES SPEKTRUM BEI 40.1 CM

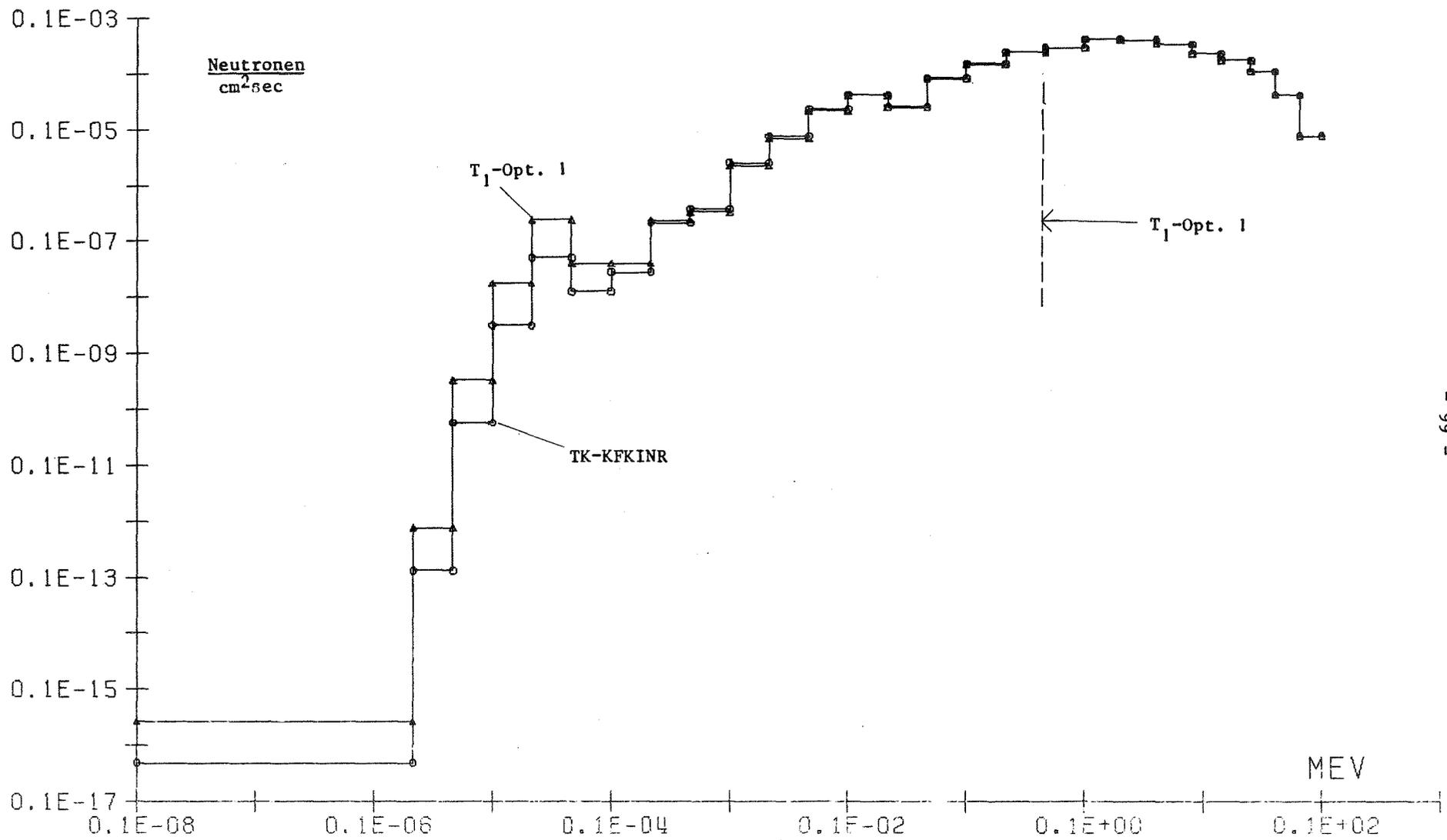


Abb. 7.7: ZPR3-56B - SPEKTREN BEI R=40.1CM

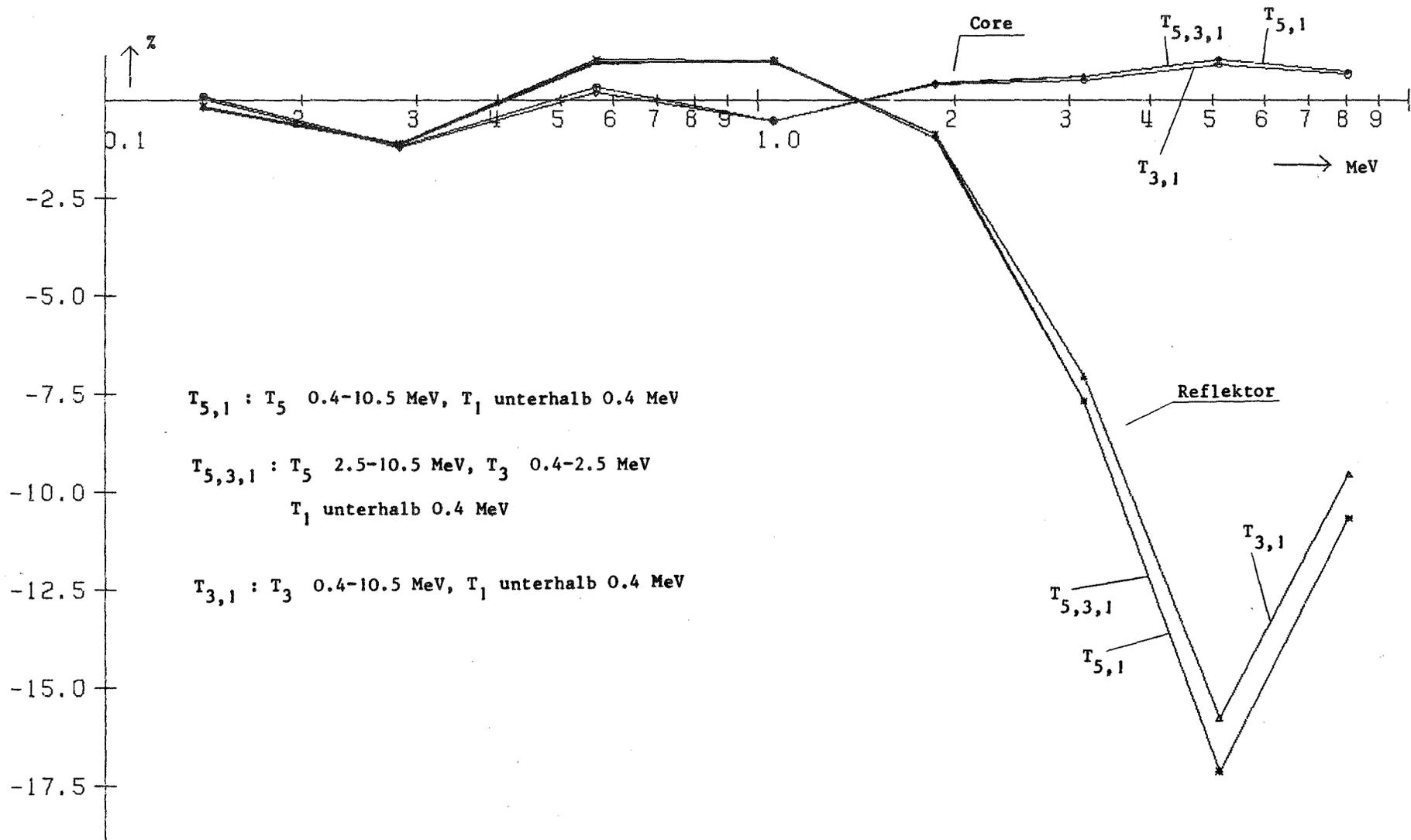


Abb. 7.8: ZPR3-558 PRÖZENTUALE ÄNDERUNG DER LECKAGE BZGL. T1-NAEH.

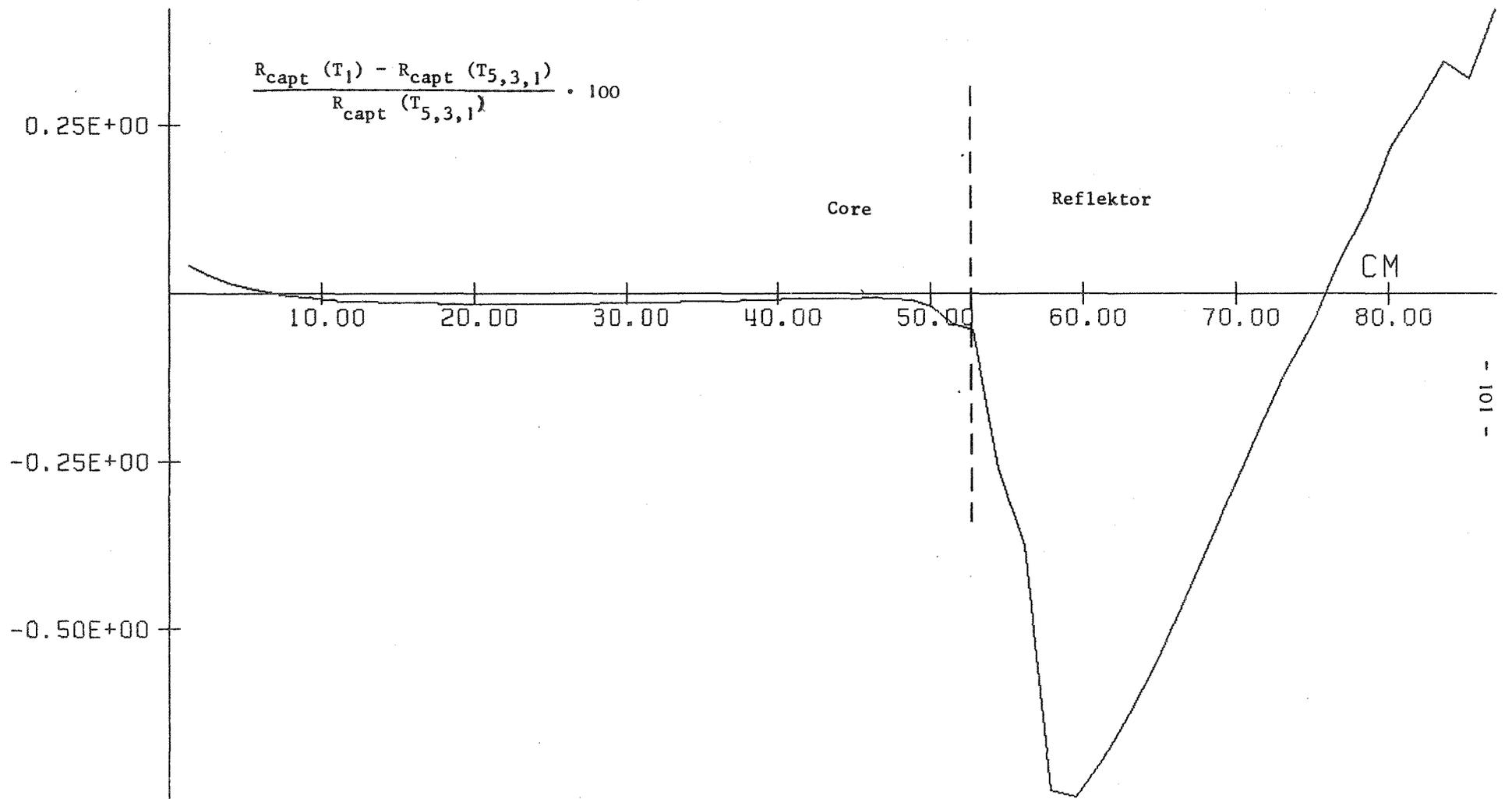


Abb. 7.9: ZPR3-56B AENDERUNG DER EINFANGRATE ÜBERHALB 100KEV

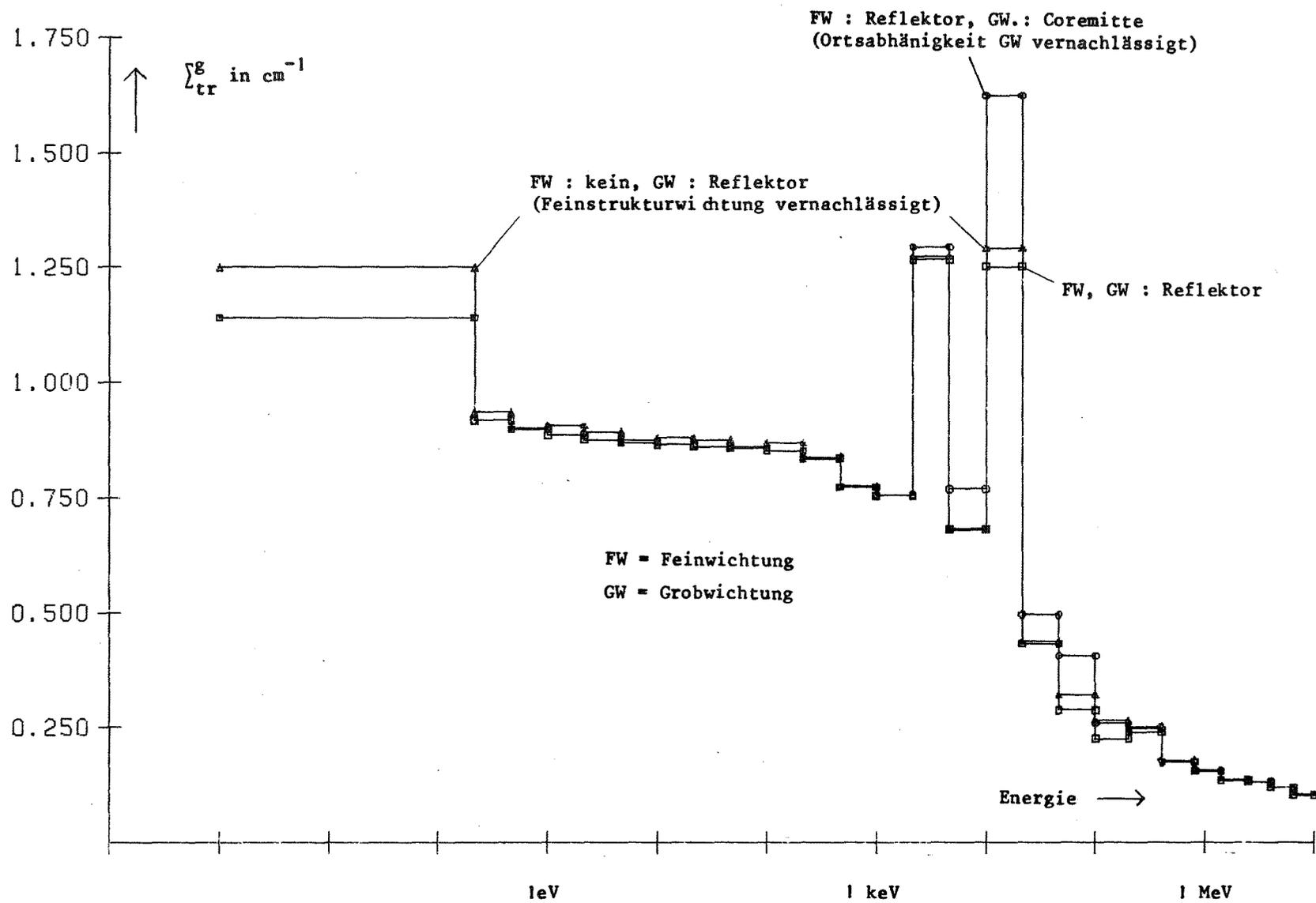


Abb. 7.10: ZPR3-56B TRANSPORTQUERSCHNITTE IM REFLEKTOR

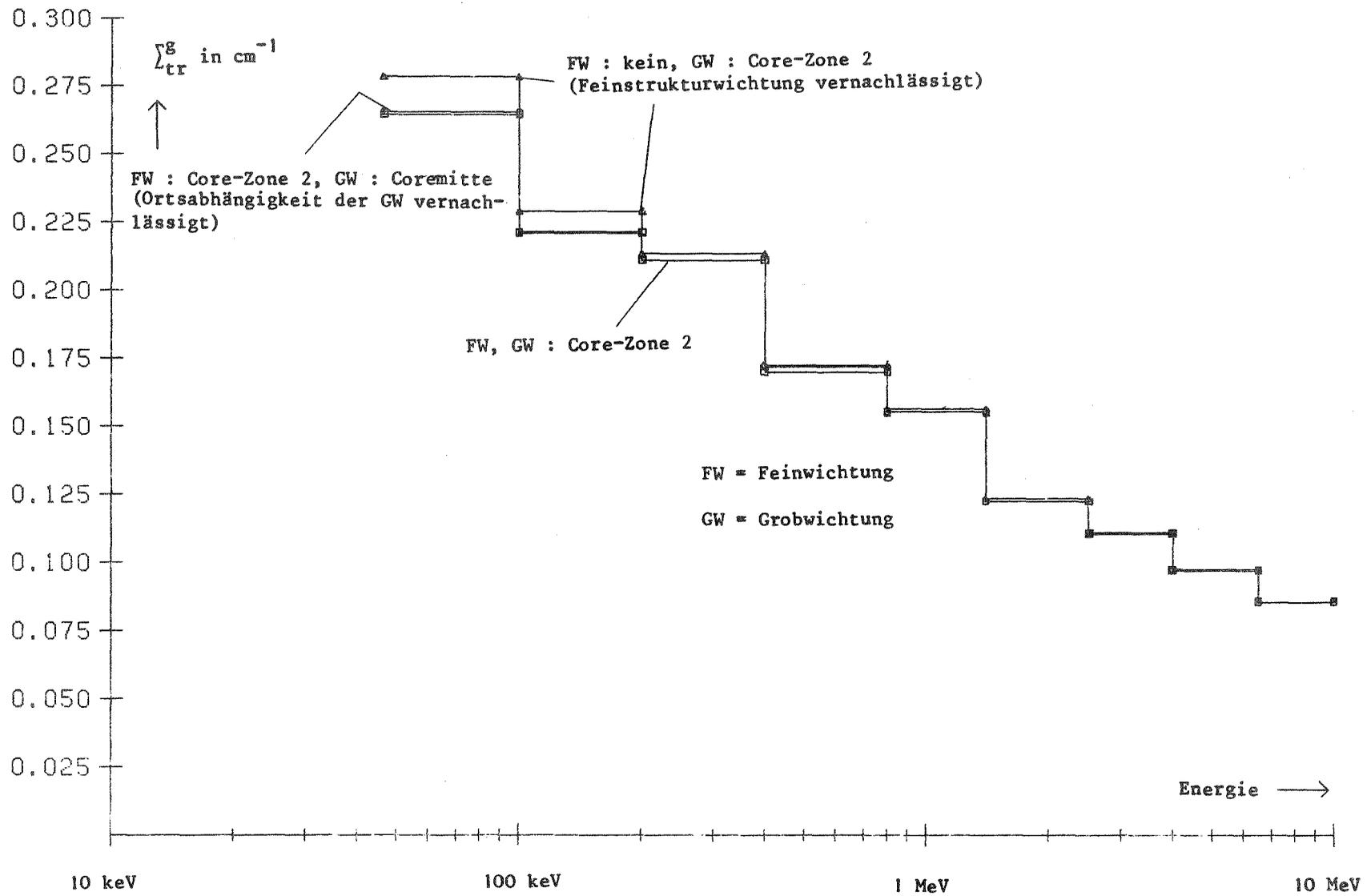


Abb. 7.11: ZPR3-563 TRANSPORTQUERSCHNITTE CORE (Zone 2)

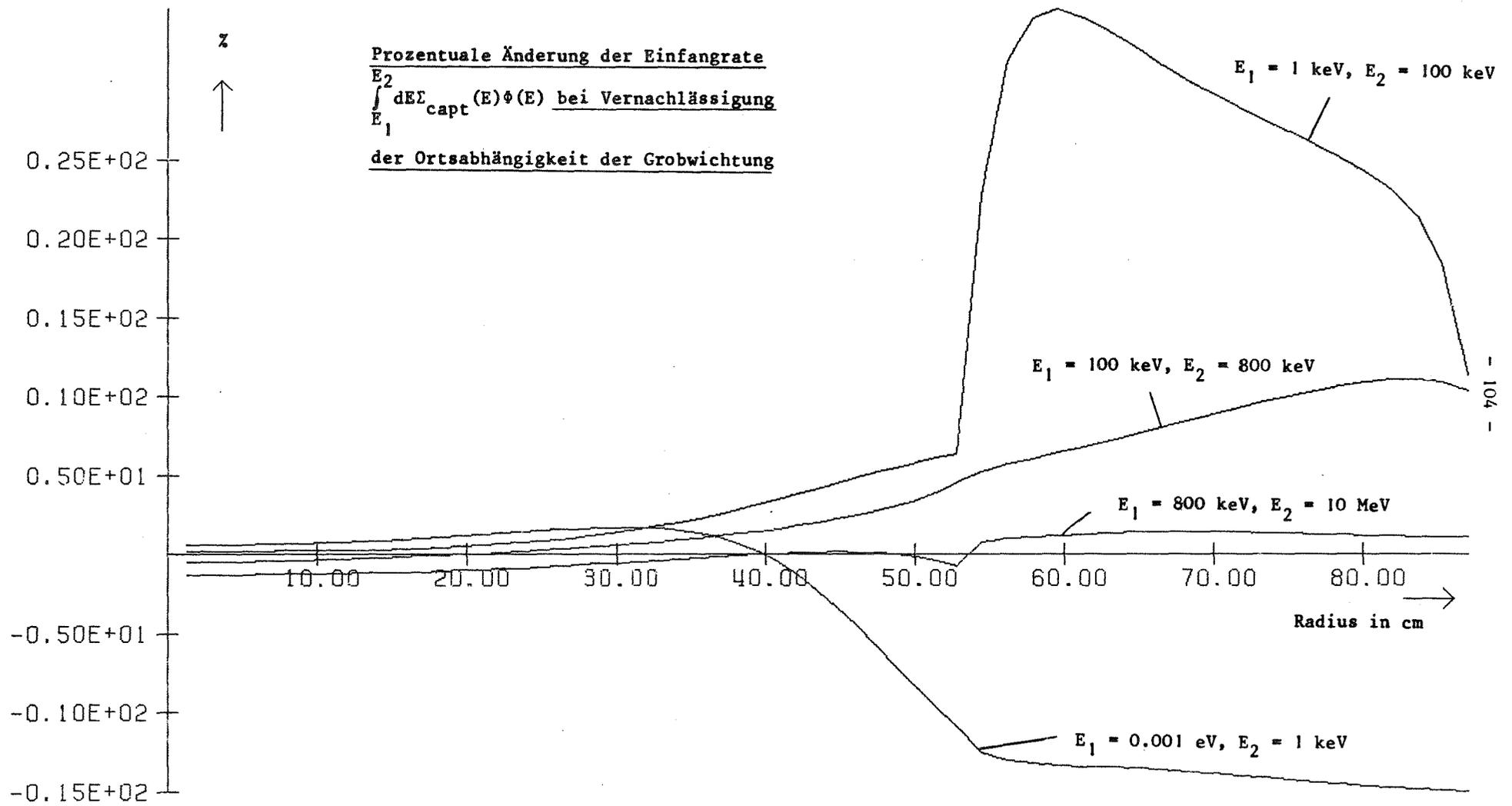


Abb. 7.12: ZPR3-56B ÄNDERUNG DER EINFANGRATE

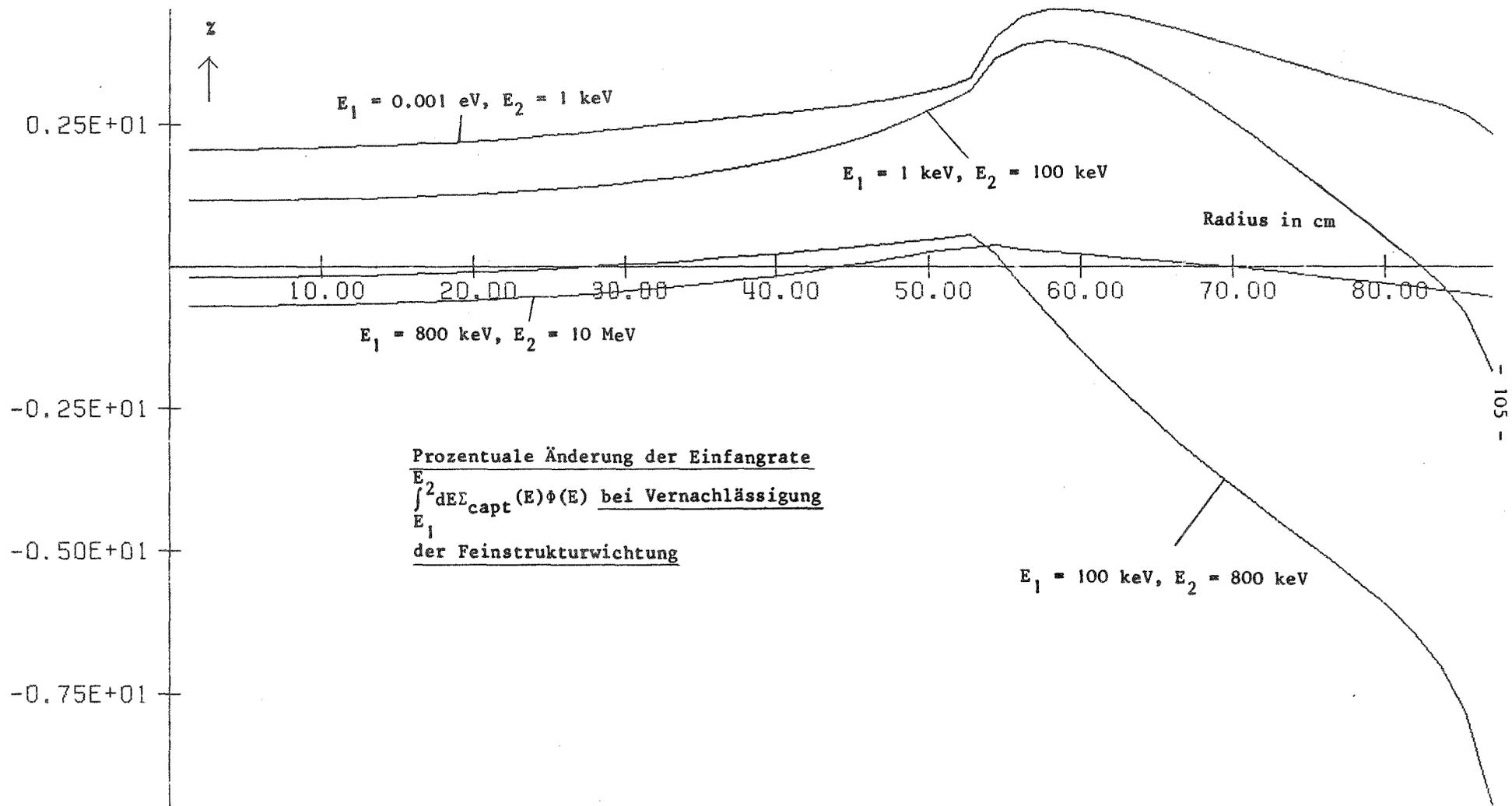


Abb. 7.13: ZPR3-566 RENDERING DER EINFANGRATE

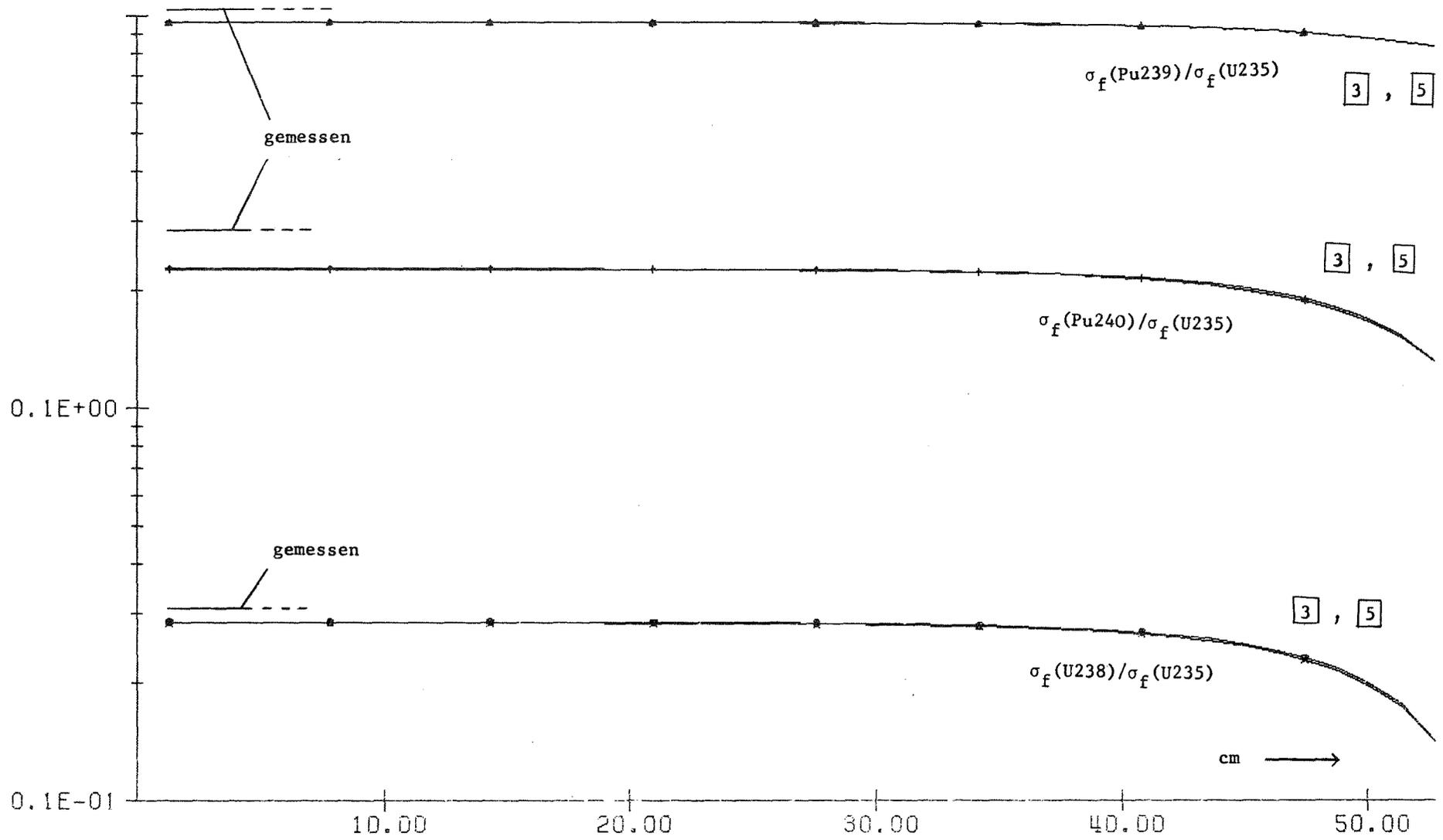


Abb. 7.14: ZPR3-56B SPALTRATENVERHÄLTNISSE ORTSABHÄNGIG

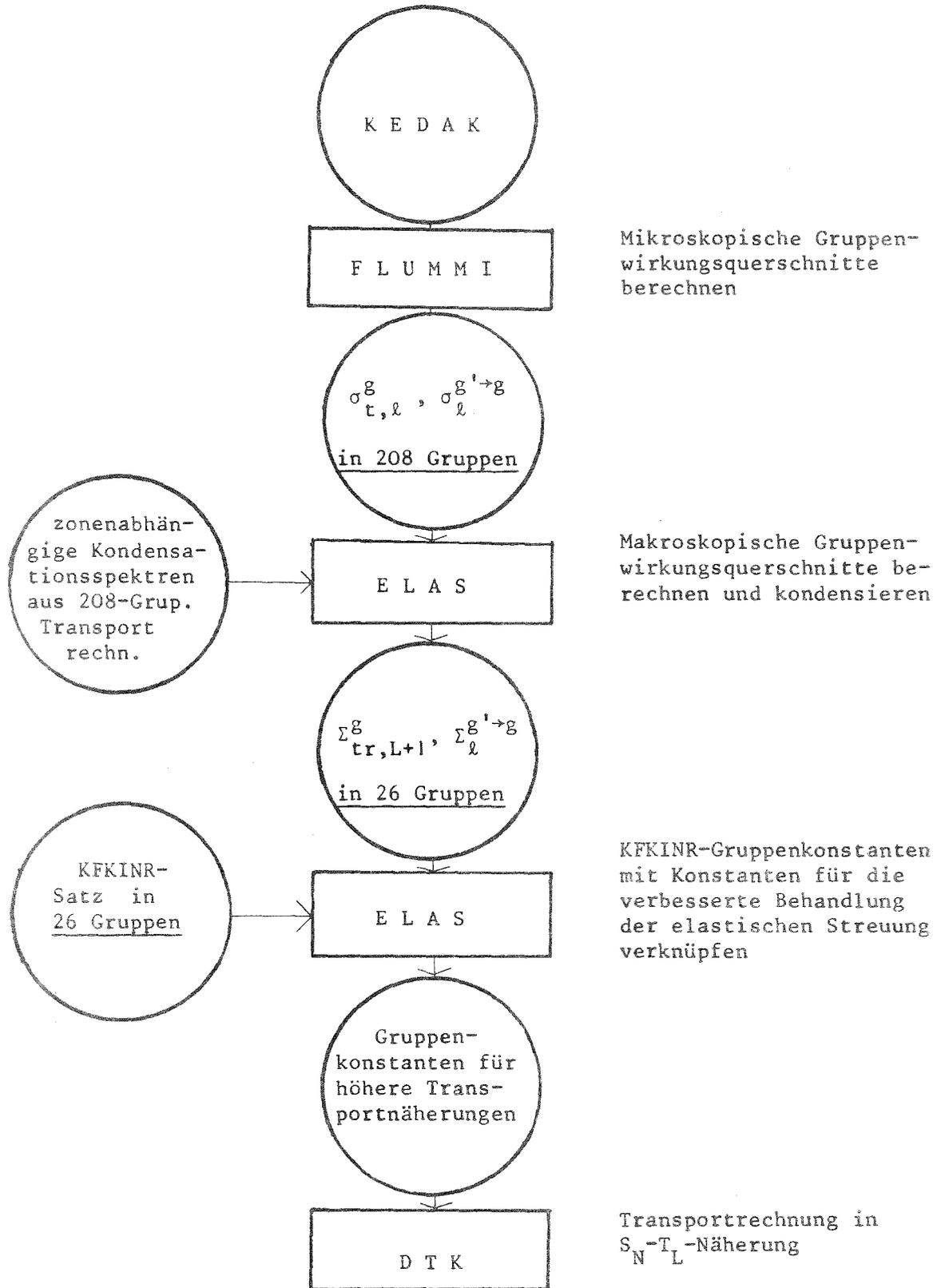


Abb. 7.15: Bereitstellung von Gruppenwirkungsquerschnitten für Transportrechnungen in  $S_N^{-T}_{L+1}$ -Näherung

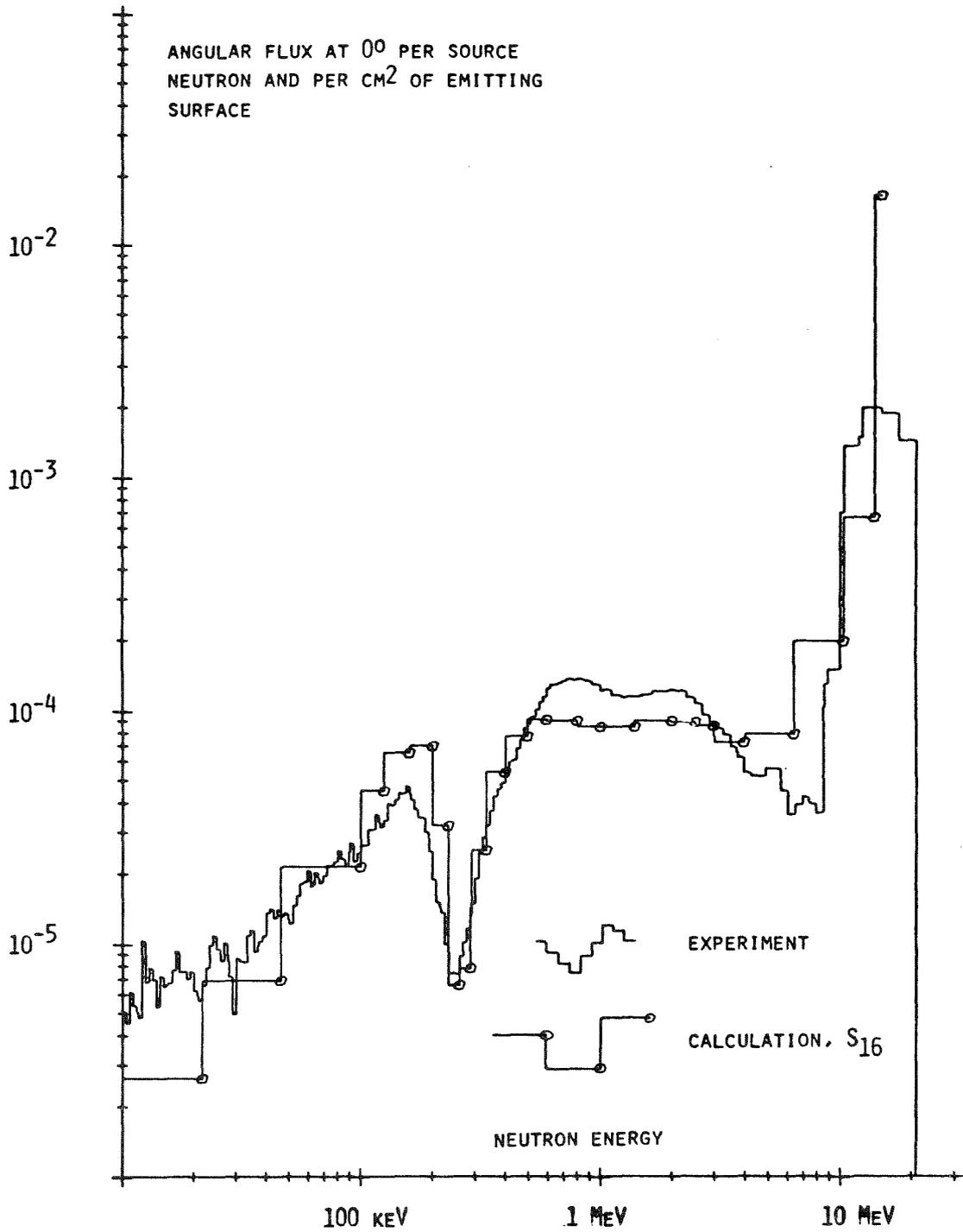


Abb. 8.1

NEUTRON SPECTRUM AT POSITION  $R = 32$  CM

COMPARISON BETWEEN TIME-OF-FLIGHT EXPERIMENT  
AND CALCULATION (S<sub>16</sub>)  
(entnommen aus /1/)

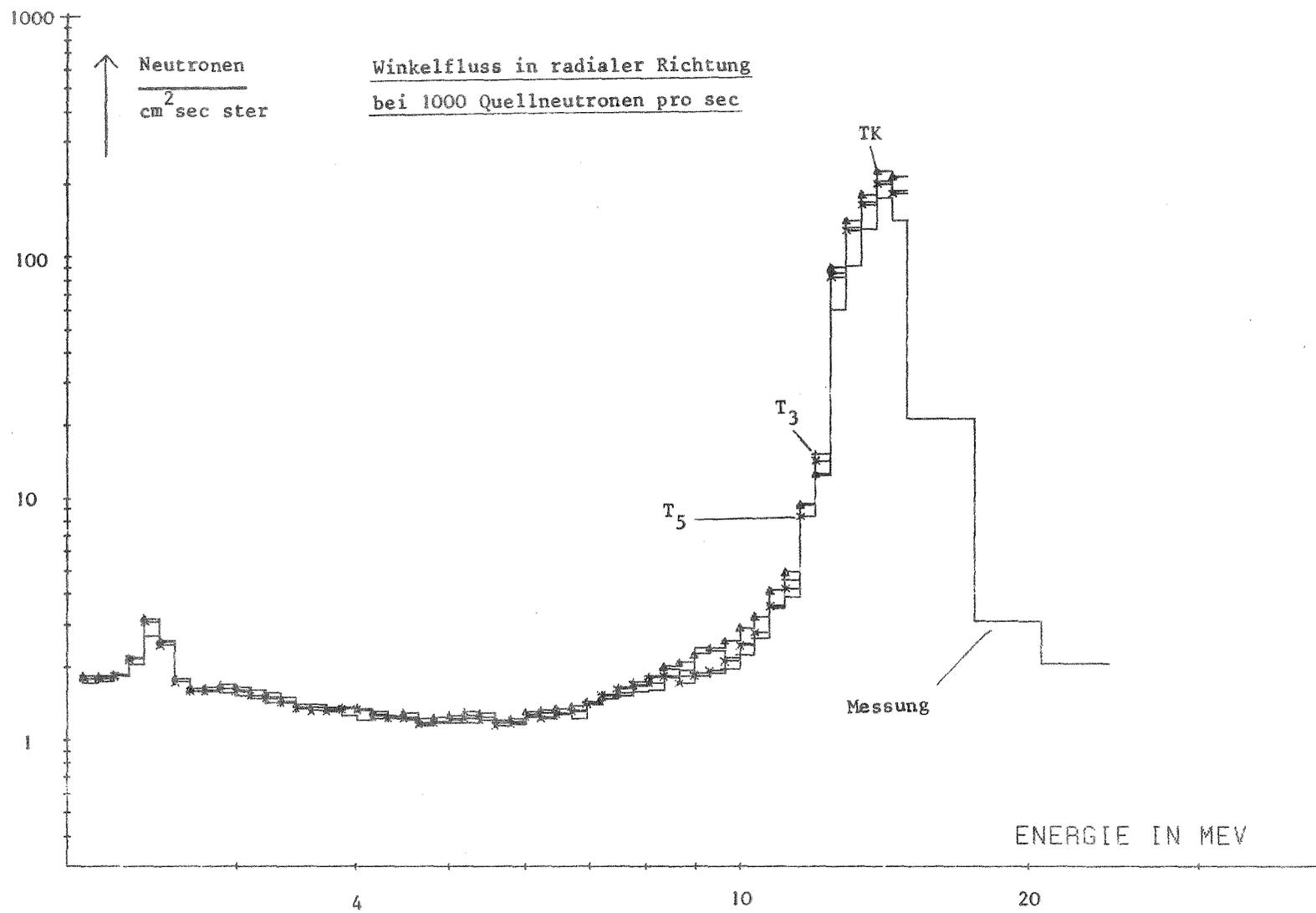


Abb. 8.2: LI-KUGEL WINKELFL. MESS. UND DTK-S19-TK, -T3, -T5-RECH. P0S.11

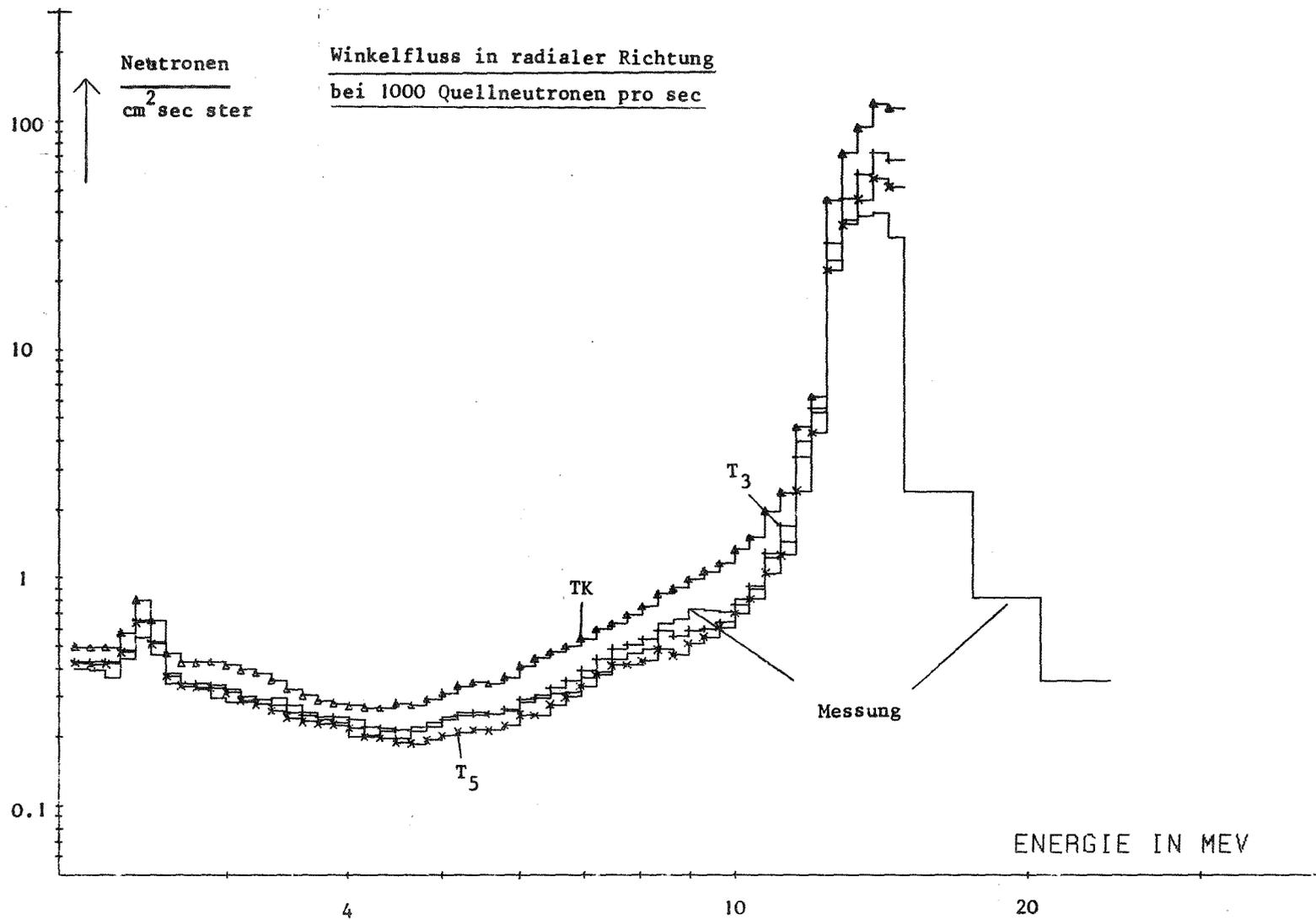


Abb. 8.3: LI-KUGEL WINKELFL. MESS. UND DTK-S19-TK, -T<sub>3</sub>, -T<sub>5</sub>-RECH. POS.33

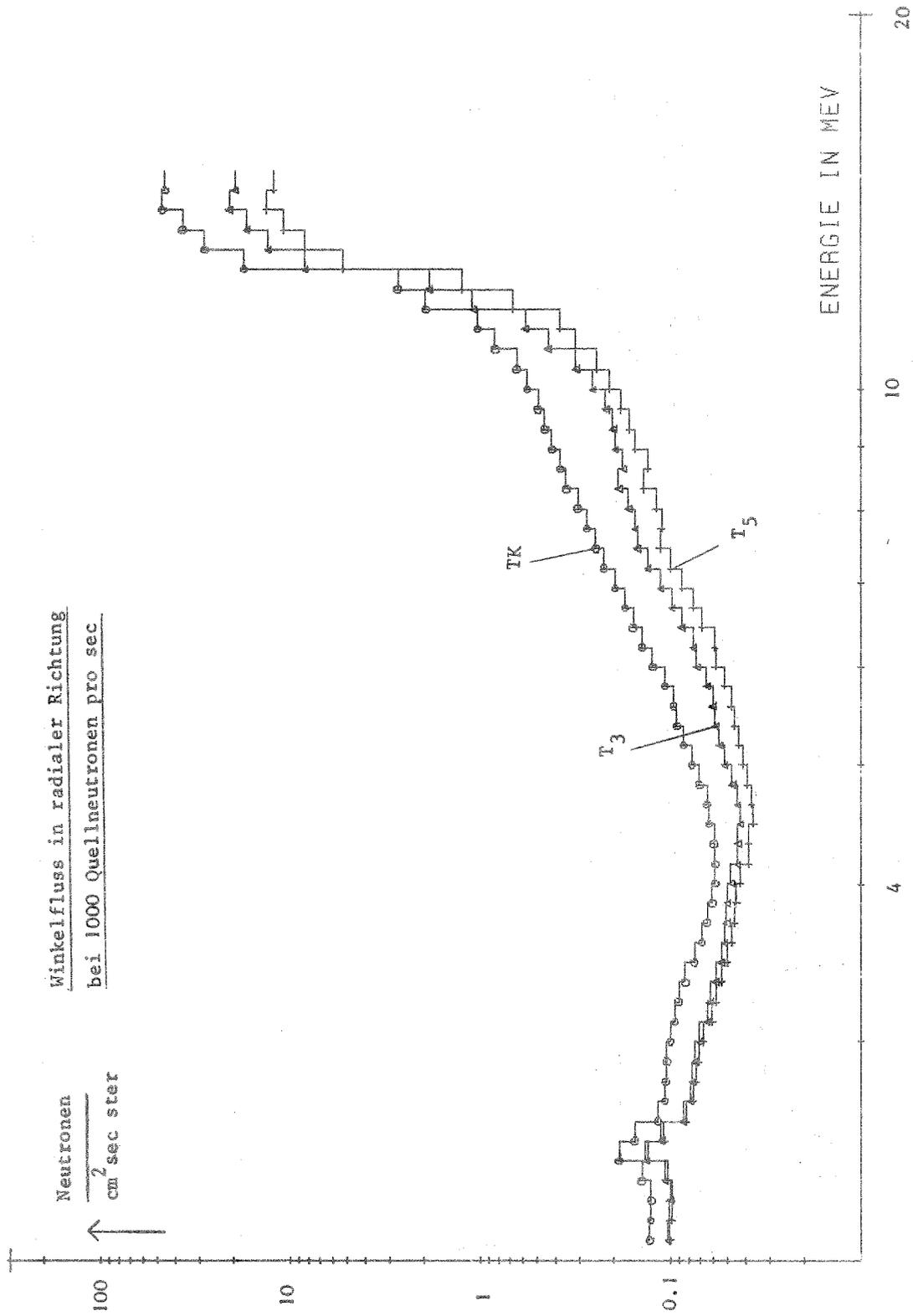


Abb. 8.4: LI-KUGEL WINKELFL. AUS DTK-S19-TK, -T3, -T5-RECH. POS.51

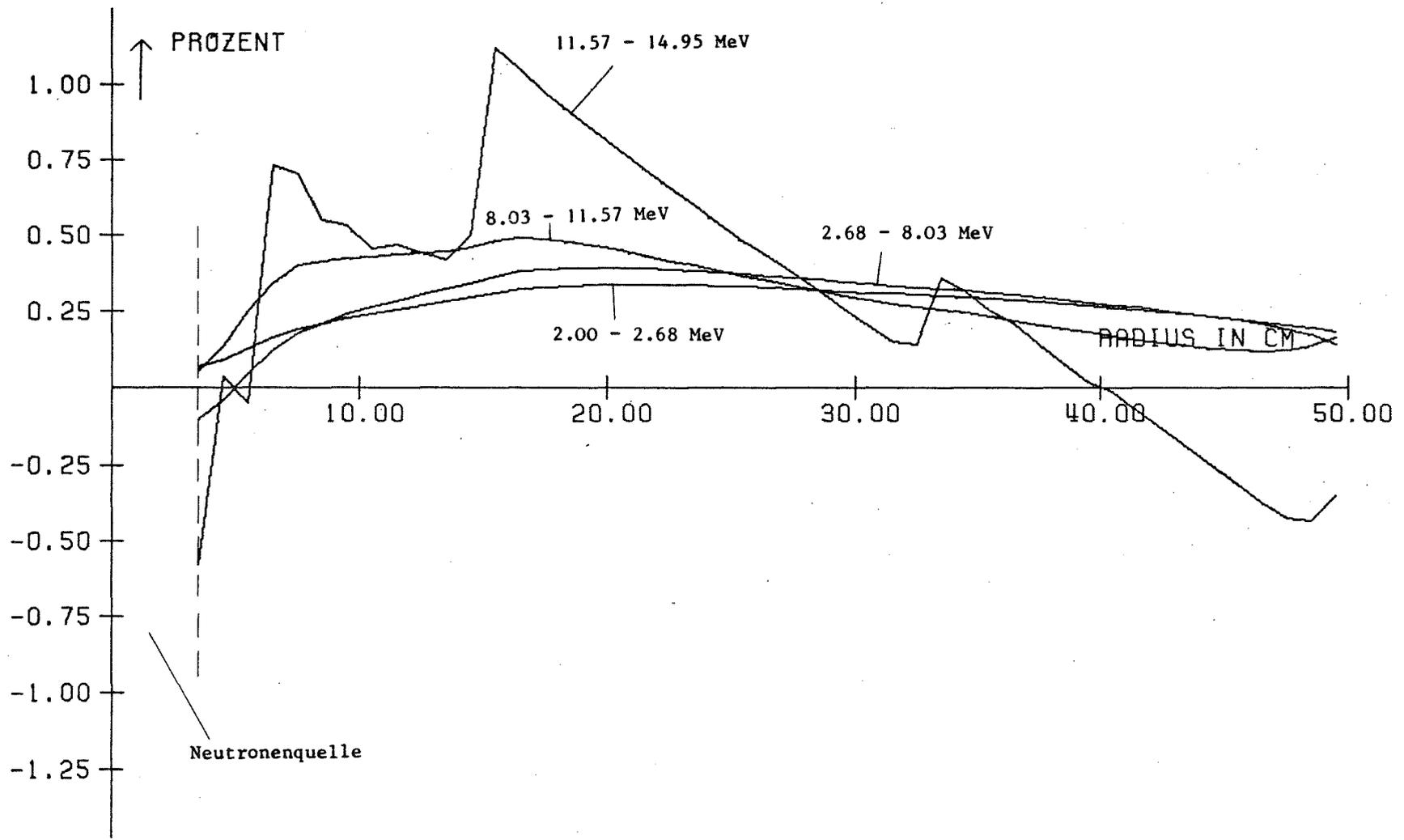


Abb. 8.5: LI-KUGEL AENDERUNG DER EINFANGRATE BEI T3-OPT.1 → T3-OPT.3

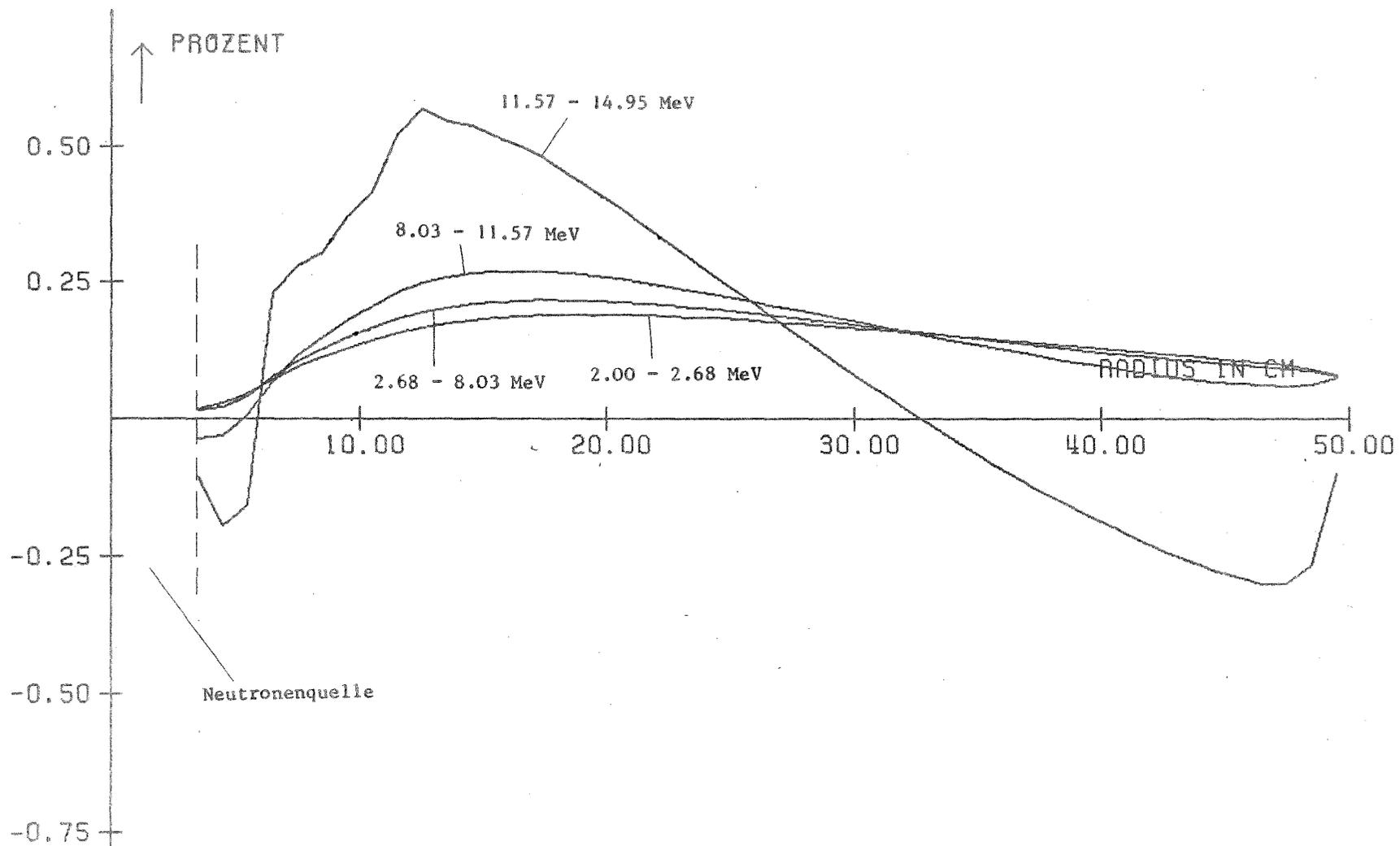


Abb. 8.6: LI-KUGEL AENDERUNG DER EINFANGRATE BEI T5-OPT.1 → T5-OPT.3

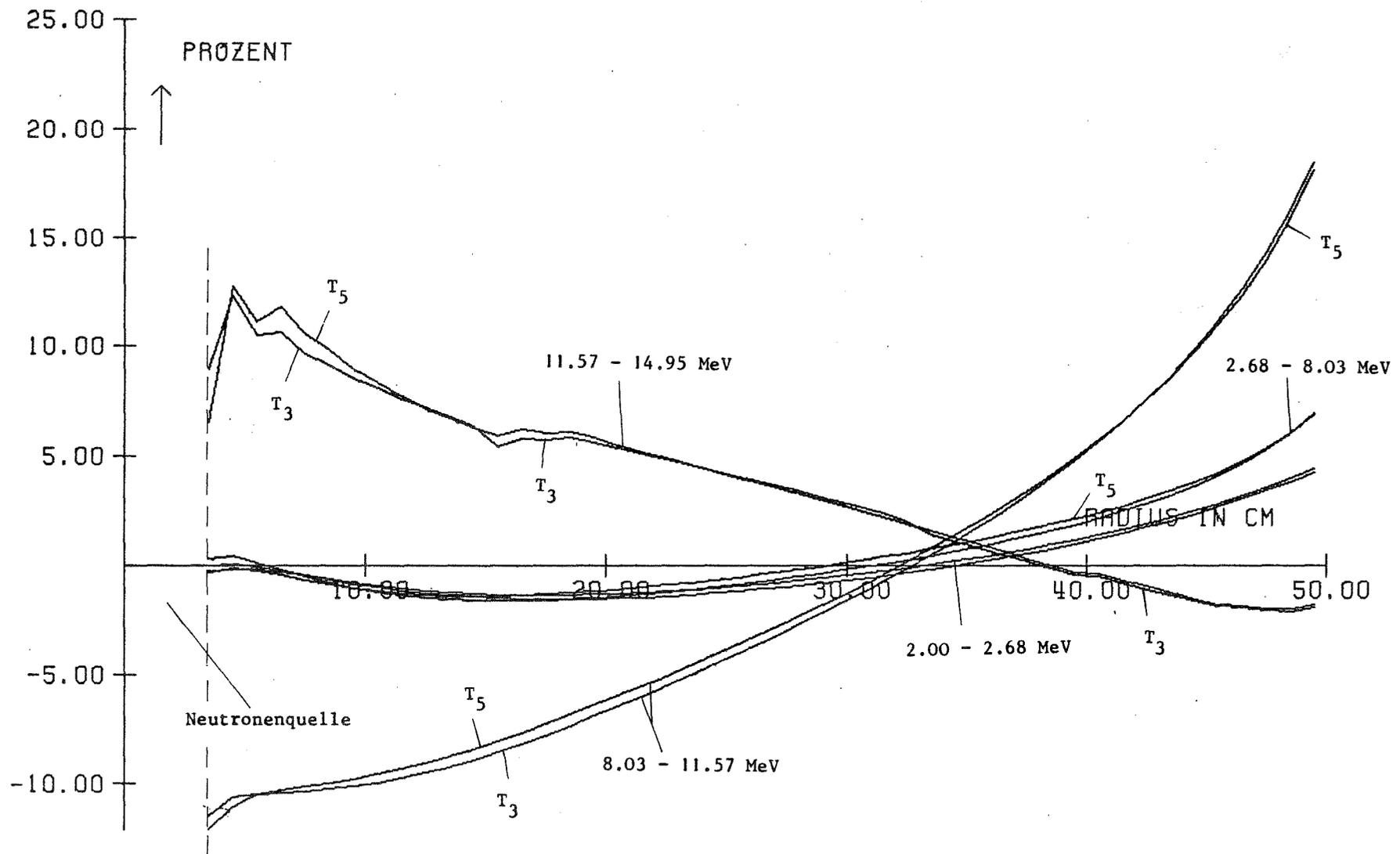


Abb. 8.7: LI-KUGEL AENDERUNG DER EINFANGRATE BEI TK → T3, T5-ØPT.1

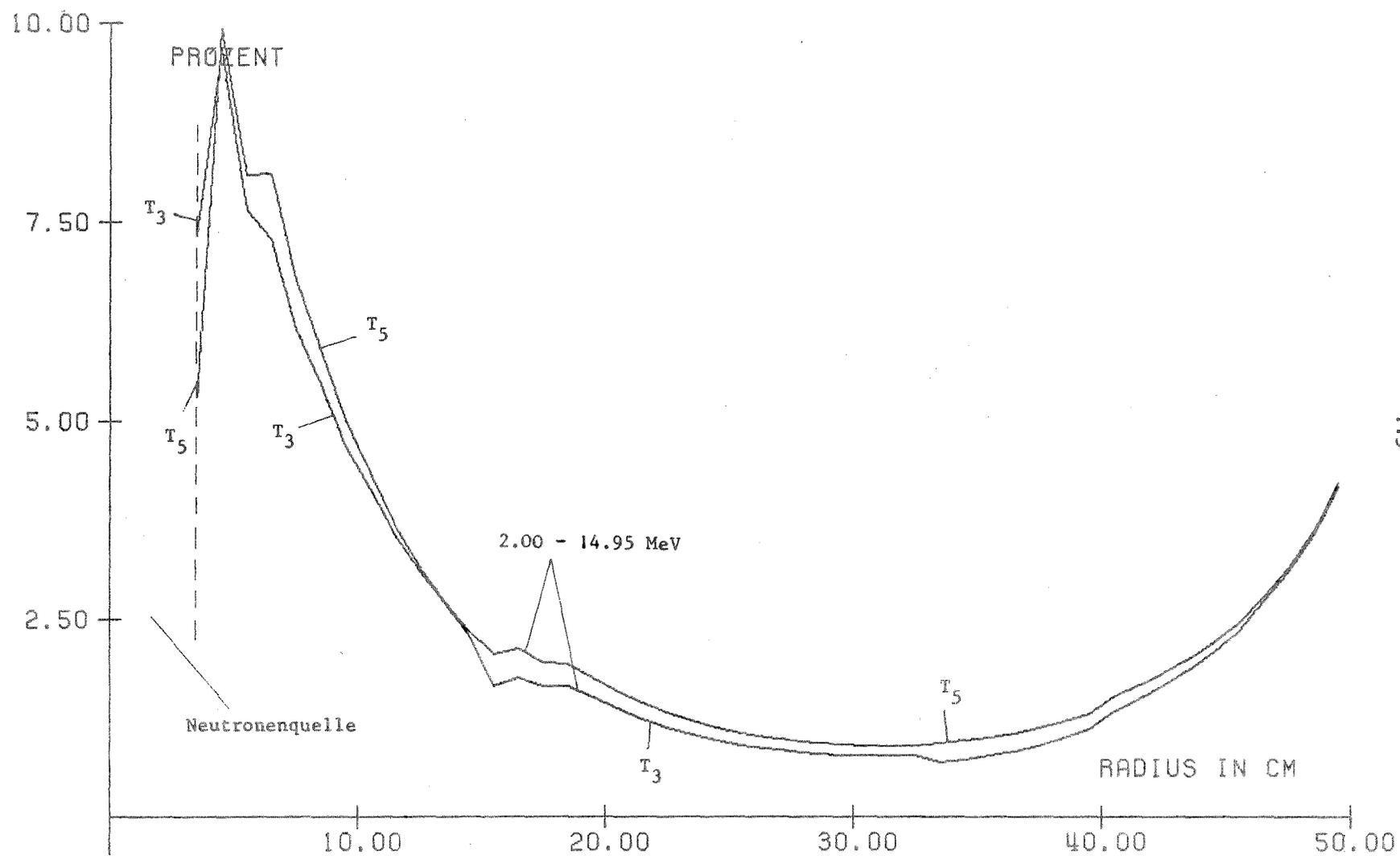


Abb. 8.8: LI-KÜGEL AENDERUNG DER EINFANGRATE BEI TK → T3, T5-OPT. 1

Anhang A: Darstellung differentieller elastischer Streuwirkungsquerschnitte durch abgebrochene Entwicklungen nach Legendre-Polynomen

Um eine für numerische Rechnungen geeignete Darstellung des differentiellen elastischen Neutronenstreuwirkungsquerschnitts im Laborsystem,  $\Sigma_{el}(\mu_0, E)$ , zu erhalten, wird in einem halbklassischen Modell für die Physik des elastischen Streuprozesses der Zusammenhang zwischen dem klassischen Stoßparameter und der Streuung von Partialwellen zu verschiedenen Bahndrehimpulsquantenzahlen betrachtet. Es wird gezeigt, daß aus theoretischen Gründen eine Darstellung der Abhängigkeit des Streuquerschnitts vom Kosinus des Streuwinkels im Schwerpunktsystem,  $\Theta_{SP}$ , durch eine Entwicklung nach Legendre-Polynomen  $P_\ell(\cos \Theta_{SP})$  naheliegt und daß diese Entwicklung für die hier betrachteten Anwendungszwecke mit wenigen Polynomen auskommt. Ferner wird die maximal benötigte Legendre-Ordnung in Abhängigkeit von der Neutronenenergie bestimmt.

Ein Neutron mit dem Impuls  $\vec{p}$  treffe auf einen ruhenden Atomkern (Laborsystem). Bei bekanntem Impuls  $\vec{p}$  ist nach der Unschärferelation der Quantenmechanik der Ort des Neutrons unbestimmt. Es lassen sich jedoch den Partialwellen zu den Bahndrehimpulsquantenzahlen  $\ell = 0, 1, 2, \dots$  von  $\ell$  abhängige räumliche Bereiche zuordnen, die sich durch verschiedene Stoßparameter unterscheiden.

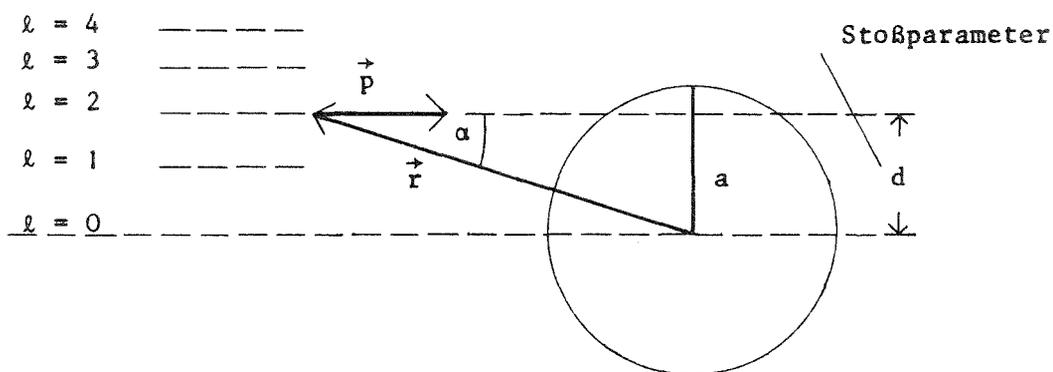


Fig. A.1: Streuung eines Neutrons (halbklassisch)

Im Ort  $\vec{r}$  mit dem zugehörigen Stoßparameter  $d$  - Fig. A.1 - ist nämlich der Bahndrehimpuls klassisch  $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$  mit dem Betrag  $|L| = r \cdot p \cdot \sin \alpha = p \cdot d$ . Nach der Quantenmechanik ist  $|L|$  zu quantisieren:  $|L| = \sqrt{\ell(\ell+1)} \cdot \hbar$ ,  $\ell = 0, 1, 2, \dots$ , also auch  $p \cdot d = \sqrt{\ell(\ell+1)} \cdot \hbar$ ,  $\ell = 0, 1, 2, \dots$ . Damit ist dem Stoßparameter  $d = 0$  die Bahndrehimpulsquantenzahl  $\ell = 0$ , also die S-Welle und, allgemein, dem Stoßparameter  $d = \sqrt{\ell(\ell+1)} \cdot \hbar/p$  die Partialwelle zur Bahndrehimpulsquantenzahl  $\ell$  zugeordnet.

Nun wird eine Partialwelle nur dann gestreut, wenn sie in den Bereich der Kernkräfte gelangt, d.h. wenn der zugehörige Stoßparameter  $d < a$  ist,  $a =$  Radius des Atomkerns. Ausgedrückt durch die Einfallsenergie des Neutrons,  $E = p^2/2M_n$ ,  $M_n =$  Neutronenmasse, gilt also: Die Partialwelle zur Bahndrehimpulsquantenzahl  $\ell$  wird nur dann gestreut, wenn

$$(A.1) \quad E > E_\ell \equiv \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2M_n \cdot a^2}, \quad a = 1.4 \cdot A^{1/3} \cdot 10^{-13} \text{ cm}$$

$A =$  Massenzahl

Aus Fig. A.2 ist ersichtlich, wie z.B. für Eisen mit der Massenzahl  $A = 56$  bei Streuung von 4 MeV-Neutronen Partialwellen mit  $\ell = 0, 1$ , bei Streuung von 8 MeV-Neutronen Partialwellen mit  $\ell = 0, 1, 2$  an der Streuung beteiligt sind. Die Legendre-Polynome sind die Eigenfunktionen des Drehimpulsoperators und der differentielle elastische Streuwirkungsquerschnitt pro Atomkern im Schwerpunktsystem gleich ist dem Absolutquadrat der Streuamplitude:

$$(A.2) \quad \sigma_{el}(\theta_{SP}, E_{SP}) = |f(\theta_{SP}, E_{SP})|^2$$

mit  $E_{SP} =$  kinetische Gesamtenergie im Schwerpunktsystem und  $\theta_{SP} =$  Streuwinkel im Schwerpunktsystem. Da die Streuamplitude  $f(\theta_{SP}, E_{SP})$  die Streuung aller Partialwellen enthält, ist klar, daß man die Streuamplitude vorteilhaft nach Legendre-Polynomen entwickelt. Gemäß Fig. A.2 enthält diese Entwicklung für Neutronenenergien bis 10 MeV in Reaktoren Legendre-Polynome bis zu einer Ordnung  $L = L(E) \leq 5$ .

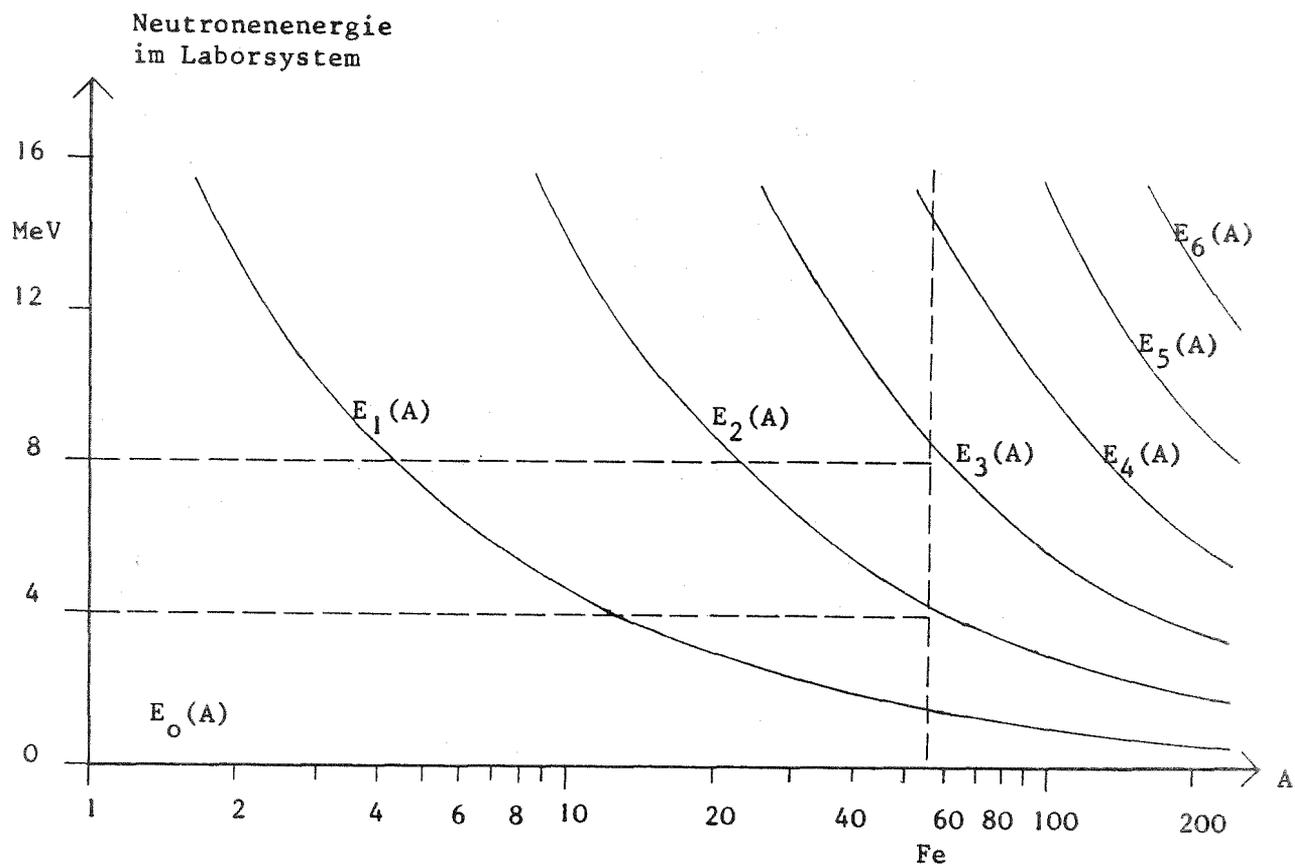


Fig. A.2: Untere Energiegrenze  $E_l(A)$  für Streuung von Partialwellen zur Bahndrehimpulsquantenzahl  $l$ .

Für den differentiellen elastischen Streuwirkungsquerschnitt, der nach (A.2) das Quadrat des Legendre-Polynoms  $P_L(E)$  enthält, gilt damit, daß seine Legendre-Entwicklung nach der Ordnung  $2 \cdot L(E) \leq 10$  abbricht. Für Eisen als Beispiel ergeben sich die folgenden Approximationsordnungen:

Tabelle A.1: Energieabhängige Approximationsordnungen  $L(E)$  für den diff. elast. Streuquerschnitt im Schwerpunktsystem für Eisen (halbklass. Modell)

$E(\text{MeV})^+$	<1.4	<4.3	<8.6	<14.4
$L$	0	2	4	6

<sup>+</sup> Neutronenenergie im Laborsystem

Die Boltzmann'sche Neutronentransportgleichung enthält den differentiellen Streuwirkungsquerschnitt im Laborsystem. Da für schwere und mittelschwere Atomkerne ( $A \geq 25$ ) Schwerpunkt- und Laborsystem für das System Neutron-Atomkern näherungsweise zusammenfallen, sind auch die differentiellen Streuwirkungsquerschnitte im Schwerpunkt- und im Laborsystem näherungsweise gleich und daher in beiden Bezugssystemen durch abgebrochene Legendre-Entwicklungen etwa der gleichen Ordnung darstellbar. Dies gilt jedoch nicht für leichte Atomkerne. Da es aber zweckmäßig ist, in Reaktor-rechnungen eine einheitliche Darstellung des differentiellen Streuwirkungsquerschnitts zu benutzen, wird i.a. auch für leichte Kerne die Legendre-Darstellung verwendet.

Zur Ermittlung der dazu erforderlichen, von der Neutronenenergie abhängigen Approximationsordnung wurden elastische differentielle Streuwirkungsquerschnitte des Karlsruher Kerndaten-Files KEDAK /11/ nach Transformation ins Laborsystem,  $\sigma_{el}(\mu_o, E)$ , durch abgebrochene Legendre-Entwicklungen

$$(A.3) \quad \sigma_{el}^{(L)}(\mu_o, E) \equiv \sum_{\ell=0}^L \frac{2\ell+1}{4\pi} \sigma_{\ell}(E) P_{\ell}(\mu_o)$$

dargestellt.  $E$  und  $\mu_o$  bezeichnen die Neutronenenergie und den Streukosinus im Laborsystem. Die sich aus der Orthogonalität der Legendre-Polynome ergebenden Entwicklungskoeffizienten

$$(A.4) \quad \sigma_{\ell}(E) = 2\pi \int_{-1}^{+1} d\mu_o \sigma_{el}(\mu_o, E) P_{\ell}(\mu_o)$$

wurden durch numerische Integration bestimmt. Aus Tabelle A.2 kann für verschiedene Atomkerne in KEDAK-Nomenklatur /11/ die Neutronenenergie  $E$  [MeV] als Funktion der Approximationsordnung  $L$  entnommen werden, bis zu welcher  $\sigma_{el}(\mu_o, L)$  durch  $\sigma_{el}^{(L)}(\mu_o, E)$  mit einem mittleren relativen Fehler von höchstens 10 % dargestellt wird. Der mittlere relative Fehler bei der Approximation von  $\sigma_{el}(\mu_o, E)$  durch  $\sigma_{el}^{(L)}(\mu_o, E)$  ist dabei

$$(A.5) \quad R_L(E) \equiv \frac{\int_{-1}^{+1} d\mu_o |\sigma_{el}^{(L)}(\mu_o, E) - \sigma_{el}(\mu_o, E)|}{\int_{-1}^{+1} d\mu_o \sigma_{el}(\mu_o, E)}$$

**Tabelle A.2**

OBERE ENERGIEGRENZEN (MEV) FUER DIE DARSTELLUNG  
DIFF. ELAST. STREUQUERSCHNITTE IM LABORSYSTEM  
DURCH LEGENDRE-ENTWICKLUNGEN BIS ZUR ORDNUNG L  
BEI EINEM MITTL. PFL. FEHLER VON 10. PROZENT

ATOMKERN	L=0	L=1	L=2	L=3	L=4	L=5	L=6	L=7
H 01	0.0	0.0	0.0	0.0	15.00			
HE 4	0.0	0.57	0.56	14.70				
LI 6EN3	0.0	0.17	0.26	3.64	5.89	11.72	17.28	20.00
LI 7EN3	0.0	0.08	3.35	4.22	6.56	15.00		
C 12	0.11	2.06	2.07	2.07	6.27	10.61	13.84	14.20
C 16	0.16	0.34	1.32	1.66	1.66	5.00	11.13	15.83
NA 23	0.23	0.23	2.18	3.75	4.87	6.04	7.82	9.70
AL 27	0.16	0.63	2.36	3.76	4.88	6.14	7.90	9.86
CR	0.17	0.42	1.23	2.02	2.28	2.89	6.16	6.34
FE	0.22	0.43	1.06	1.68	2.00	2.89	6.16	6.34
NI	0.19	0.37	0.85	1.83	2.82	5.12	6.16	6.34
MO	0.06	0.19	0.72	1.46	2.92	3.98	4.48	5.85
PR EN3	0.33	0.40	0.60	0.73	2.65	3.56	4.24	4.79
U 235	0.06	0.22	0.56	0.79	1.08	1.24	2.19	2.17
U 238	0.06	0.22	0.56	0.79	1.08	1.24	2.19	2.17
PU239	0.06	0.22	0.56	0.79	1.08	1.24	2.19	2.17
PU240	0.07	0.24	0.56	0.78	1.18	1.52	2.51	3.15
PU241	0.03	0.21	0.48	0.79	1.22	1.80	2.87	3.87
PU242	0.07	0.23	0.56	0.77	1.17	1.52	2.46	3.09

**Tabelle A.3**

OBERE ENERGIEGRENZEN (MEV) FUER DIE DARSTELLUNG  
DIFF. ELAST. STREUQUERSCHNITTE IM LABORSYSTEM  
DURCH LEGENDRE-ENTWICKLUNGEN BIS ZUR ORDNUNG L  
BEI EINEM MITTL. PFL. FEHLER VON 15. PROZENT

ATOMKERN	L=0	L=1	L=2	L=3	L=4	L=5	L=6	L=7
H 01	0.0	0.0	15.00					
HE 4	0.0	0.70	0.94	14.70				
LI 6EN3	0.0	0.21	3.24	4.20	8.25	14.25	20.00	
LI 7EN3	0.01	0.11	3.77	4.64	7.14	15.00		
C 12	0.38	2.06	2.07	2.07	9.67	12.59	14.20	
C 16	0.24	0.41	1.33	1.66	5.00	9.43	15.83	
NA 23	0.24	0.64	2.83	3.94	5.11	7.04	8.76	11.50
AL 27	0.22	0.81	2.84	3.96	5.17	7.12	8.87	11.74
CR	0.22	0.48	1.40	2.38	2.86	6.10	6.40	6.71
FE	0.30	0.50	1.26	1.98	2.86	6.10	6.40	6.72
NI	0.32	0.49	1.53	1.97	2.90	6.10	6.41	6.72
MO	0.13	0.32	1.35	1.71	3.19	5.02	6.15	6.41
PR EN3	0.50	0.58	0.77	0.97	2.87	3.81	4.61	5.53
U 235	0.07	0.35	0.60	1.00	1.23	2.43	2.86	4.04
U 238	0.07	0.35	0.60	1.00	1.23	2.43	2.86	4.04
PU239	0.07	0.35	0.60	1.00	1.23	2.43	2.86	4.04
PU240	0.10	0.35	0.65	0.98	1.32	1.83	3.22	4.70
PU241	0.05	0.27	0.57	0.91	1.38	2.06	3.33	4.38
PU242	0.10	0.34	0.66	0.87	1.30	1.80	3.16	4.69

Tabelle A.4

OBERE ENERGIEGRENZEN (MEV) FUER DIE DARSTELLUNG  
DIFF. ELAST. STREUQUERSCHNITTE IM LABORSYSTEM  
DURCH LEGENDRE-ENTWICKLUNGEN BIS ZUR ORDNUNG L  
BEI EINEM MITTL. REL. FEHLER VON 20. PROZENT

ATOMKERN	L=0	L=1	L=2	L=3	L=4	L=5	L=6	L=7
H 01	0.0	0.0	15.00					
HE 4	0.0	0.85	1.10	14.70				
LI 6EN3	0.23	0.23	3.50	4.73	10.25	16.40	20.00	
LI 7EN3	0.03	0.15	4.11	5.06	15.00			
C 12	2.07	2.07	2.08	4.82	10.81	14.20		
C 16	0.28	0.42	1.36	1.66	8.86	10.30	15.83	
NA 23	0.24	0.66	2.96	4.72	5.62	7.67	9.70	13.30
AL 27	0.37	1.17	2.97	4.75	5.65	7.76	9.83	13.62
CR	0.42	0.56	1.43	2.47	2.90	6.27	6.64	9.76
FE	0.42	0.56	1.53	2.00	2.90	6.28	6.65	9.79
NI	0.41	0.57	1.81	2.33	5.06	6.28	6.65	9.81
MO	0.18	0.37	1.57	1.97	3.46	5.30	6.30	6.86
PR EN3	0.67	0.76	0.95	1.21	3.07	4.05	4.99	5.76
U 235	0.13	0.39	0.78	1.05	1.24	2.60	3.23	4.10
U 238	0.13	0.39	0.78	1.05	1.24	2.60	3.23	4.10
PU239	0.13	0.39	0.78	1.05	1.24	2.60	3.23	4.10
PU240	0.13	0.46	0.73	0.96	1.43	2.16	4.25	5.20
PU241	0.07	0.34	0.66	1.01	1.51	2.30	3.74	4.80
PU242	0.13	0.45	0.74	0.96	1.42	2.11	4.23	5.20

Tabelle A.5

OBERE ENERGIEGRENZEN (MEV) FUER DIE DARSTELLUNG  
DIFF. ELAST. STREUQUERSCHNITTE IM LABORSYSTEM  
DURCH LEGENDRE-ENTWICKLUNGEN BIS ZUR ORDNUNG L  
BEI EINEM MITTL. REL. FEHLER VON 25. PROZENT

ATOMKERN	L=0	L=1	L=2	L=3	L=4	L=5	L=6	L=7
H 01	0.0	0.0	15.00					
HE 4	0.0	0.98	12.51	14.70				
LI 6EN3	0.28	2.50	3.85	5.28	11.79	18.39	20.00	
LI 7EN3	0.05	0.19	4.33	6.25	15.00			
C 12	2.07	2.07	4.40	6.26	11.94	14.20		
C 16	0.33	0.43	1.66	5.95	9.33	11.16	15.83	
NA 23	0.68	0.68	3.82	4.86	6.14	8.30	10.64	14.30
AL 27	0.48	1.85	3.83	4.87	6.22	8.39	10.75	14.30
CR	0.49	0.73	2.00	2.81	4.98	6.45	6.89	10.48
FE	0.46	0.76	1.96	2.81	4.99	6.45	6.89	10.51
NI	0.48	0.67	1.86	3.34	5.68	6.45	6.90	10.53
MO	0.22	0.43	1.82	3.04	3.72	5.58	6.46	7.58
PR EN3	0.83	0.94	1.12	1.46	3.27	4.29	5.58	6.00
U 235	0.15	0.44	0.79	1.09	2.11	2.72	4.03	5.31
U 238	0.15	0.44	0.79	1.10	2.11	2.72	4.03	5.31
PU239	0.15	0.44	0.79	1.10	2.11	2.72	4.03	5.31
PU240	0.17	0.58	0.80	1.04	1.54	2.55	4.77	5.72
PU241	0.10	0.40	0.74	1.09	1.63	2.54	4.12	5.19
PU242	0.16	0.56	0.81	1.03	1.52	2.47	4.75	5.74

Die Tabellen A.3 bis A.5 wurden für Fehlergrenzen von 15 %, 20 % und 25 % berechnet. Für elastische Neutronenstreuung an Eisen (FE) z.B. ist der differentielle Streuwirkungsquerschnitt im Laborsystem von KEDAK mit  $L = 5$  ( $P_5$ -Darstellung  $\sigma^{(5)}(\mu_0, E)$ ) bis 2.89 MeV auf 10 % und bis 6.28 MeV auf 20 % genau darstellbar.

Die numerische Legendre-Analyse der differentiellen elastischen Streuwirkungsquerschnitte von KEDAK zeigt in qualitativer Übereinstimmung mit dem halbklassischen Modell deren  $P_L$ -Darstellbarkeit im Laborsystem mit energieabhängiger Approximationsordnung  $L(E)$ . Insbesondere ergibt die numerische Analyse, daß auch für leichte Atomkerne eine Darstellung dieses Wirkungsquerschnitts durch abgebrochene  $P_L$ -Entwicklungen niedriger Ordnung möglich ist. Für Li-7 ist z.B. eine  $P_5$ -Darstellung bei 10 % Fehler ausreichend für Neutronenenergien bis 15 MeV - vgl. Tabelle A.2. Es stellt sich die Frage nach dem zulässigen mittleren relativen Fehler bei der Darstellung von  $\sigma_{el}(\mu_0, E)$  durch  $\sigma_{el}^{(L)}(\mu_0, E)$ . Da bei gemessenen differentiellen elastischen Streuwirkungsquerschnitten vielfach Unsicherheiten von etwa 10 % angegeben werden /15/, erscheint es nach diesem Gesichtspunkt sinnvoll, bei der Darstellung durch abgebrochene Legendre-Entwicklungen einen Fehler von 10 % zuzulassen. Dann ist für Neutronenenergien bis 10 MeV für leichte Atomkerne ( $A \leq 25$ )  $L \leq 7$  ausreichend, während für schwere und mittelschwere Kerne ( $A \geq 25$ ) näherungsweise  $L \approx 10$  erforderlich ist.

Anhang B: Elastische Streuquelle und totale Stoßdichte im Multigruppenbild;  
Bildung anisotroper Gruppenwirkungsquerschnitte; Wichtungsfunktionen

B.1 Streuquelle und Stoßdichte im Gruppenbild

Unter Verwendung der Darstellung (2.14), Kap. 2, für die energieabhängige elastische Streuquelle  $Q_{el}(\vec{r}, \vec{\Omega}, E)$  ergibt sich durch Integration über das Energieintervall  $(E_g, E_{g-1})$ , die Energiegruppe  $g$ , die elastische Streuquelle in der Gruppe  $g$

$$(B.1) \quad Q_{el}^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{4\pi} \sum_{g' \leq g} \int_{g'} dE' \Sigma_{\ell}(E' \rightarrow g) \int_{4\pi} d\Omega' P_{\ell}(\vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E')$$

mit

$$(B.2) \quad \begin{aligned} \Sigma_{\ell}(E' \rightarrow g) &\equiv \int_g dE \Sigma_{\ell}(E', E) \\ &= 2\pi \int_{\mu_0(E', E_g)}^{\mu_0(E', E_{g-1})} d\mu_0 \Sigma_{el}(\mu_0, E') P_{\ell}(\mu_0), \end{aligned}$$

$\ell = 0, 1, 2, \dots$

Die Größen  $\Sigma_{\ell}(E', E)$  und  $\mu_0(E', E)$  sind in (2.13) bzw. (2.2) definiert.

Zur Umformung von (3.1) mit dem Ziel einer Definition von Gruppenquerschnitten, die mit den Legendre-Momenten der Neutronenflußdichte als Wichtungsfunktionen zu bilden sind, wird der Richtungseinheitsvektor durch Kugelkoordinaten  $\epsilon$  und  $\phi$  ausgedrückt:

$$(B.3) \quad \vec{\Omega} = (\sin \epsilon \cos \phi, \sin \epsilon \sin \phi, \cos \epsilon)$$

In platten- oder kugelsymmetrischen Anordnungen wird  $\theta$  i.a. als Winkel zwischen der Neutronenflugrichtung  $\vec{\Omega}$  und der Plattennormalen bzw. der radialen Richtung gewählt, da dann die Neutronenflußdichte  $\psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E)$  nicht mehr von  $\phi$  abhängt.

Für den Kosinus des Winkels zwischen den Richtungen  $\vec{\Omega}$  und  $\vec{\Omega}'$ ,  $\cos \gamma (\vec{\Omega}, \vec{\Omega}') = \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}'$ , berechnet man - mit  $\vec{\Omega}' = (\sin\theta' \cos\phi', \sin\theta' \sin\phi', \cos\theta')$  -

$$(B.4) \quad \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}' = \mu\mu' - \sqrt{1-\mu^2} \sqrt{1-\mu'^2} \cos(\phi - \phi')$$

mit  $\mu = \cos\theta$ ,  $\mu' = \cos\theta'$ .

Mit Hilfe des Additionstheorems für Legendre-Polynome /28/

$$P_\ell(\vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') = P_\ell(\mu) \cdot P_\ell(\mu')$$

$$(B.5) \quad + 2 \sum_{k=1}^{\ell} \frac{(\ell-k)!}{(\ell+k)!} P_{\ell,k}(\mu) P_{\ell,k}(\mu') [\cos k\phi \cdot \cos k\phi' + \sin k\phi \sin k\phi']$$

$$\ell = 0, 1, 2, \dots$$

mit  $P_{\ell,k}(\mu)$  als zugeordneten Legendre-Polynomen wird die elastische Streuquelle

$$(B.6) \quad Q_{el}^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{2} \sum_{g'=1}^G \int_{g'} dE' \Sigma_{\ell}(E' \rightarrow g) \sum_{k=0}^{\ell} a_{\ell,k} P_{\ell,k}(\mu) \times$$

$$\times \left[ \cos k\phi \cdot \psi_{\ell,k}(\vec{r}, E') + \sin k\phi \cdot \tilde{\psi}_{\ell,k}(\vec{r}, E') \right]$$

mit  $P_{\ell,0}(\mu) = P_\ell(\mu)$ . Zur Abkürzung wurde gesetzt

$$(B.7) \quad a_{\ell,k} \equiv \begin{cases} 1 & \text{für } k = 0 \\ 2 \frac{(\ell-k)!}{(\ell+k)!} & \text{für } 0 < k \leq \ell \end{cases} \quad \ell = 0, 1, 2, \dots$$

und

$$(B.8) \quad \left\{ \begin{aligned} \psi_{\ell,k}(\vec{r}, E') &\equiv \frac{1}{2\pi} \int_{-1}^{+1} d\mu' \int_0^{2\pi} d\phi' \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E') \cos k\phi' \cdot P_{\ell,k}(\mu') \\ \tilde{\psi}_{\ell,k}(\vec{r}, E') &\equiv \frac{1}{2\pi} \int_{-1}^{+1} d\mu' \int_0^{2\pi} d\phi' \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E') \sin k\phi' \cdot P_{\ell,k}(\mu') \end{aligned} \right.$$

$$\ell = 0, 1, 2, \dots, \quad k = 0, 1, 2, \dots, \ell$$

In platten- oder kugelsymmetrischen Anordnungen mit  $\phi$  als Winkel in der Plattenebene bzw. in der Ebene senkrecht zum Radiusvektor (Symmetrieebene!) hängt, wie bereits erwähnt, die Flußdichte  $\psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E)$  nicht von  $\phi$  ab. Dann ist für  $k > 0$   $\psi_{\ell,k}(\vec{r}, E) = \tilde{\psi}_{\ell,k}(\vec{r}, E) = 0$  wegen  $\int_0^{2\pi} d\phi \sin k\phi = \int_0^{2\pi} d\phi \cos k\phi = 0$ , und (4.11) reduziert sich auf

$$(B.9) \quad Q_{el}^g(x, \mu) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{2} P_{\ell}(\mu) \sum_{g'=1}^G \int_{g'} dE' \Sigma_{\ell}(E' \rightarrow g) \int_{-1}^{+1} d\mu' \psi(x, \mu', E') P_{\ell}(\mu').$$

Zur letztlichen Überführung von (B.6) ins Gruppenbild definieren wir als Gruppenwirkungsquerschnitte

$$(B.10) \quad \left( \overset{\vee}{\Sigma} \right)_{\ell,k}^{g' \rightarrow g}(\vec{r}) \equiv \frac{\int_{g'} dE' \Sigma_{\ell}(E' \rightarrow g) \left( \overset{\vee}{\psi} \right)_{\ell,k}(\vec{r}, E')}{\int_{g'} dE' \left( \overset{\vee}{\psi} \right)_{\ell,k}(\vec{r}, E')} \quad \begin{aligned} \ell &= 0, 1, 2, \dots \\ k &= 0, 1, \dots, \ell \end{aligned}$$

wobei im Fall, daß  $\left( \overset{\vee}{\psi} \right)_{\ell,k}(\vec{r}, E') \neq 0$  in der Gruppe  $g'$  ist, durch eine Verfeinerung der Gruppeneinteilung stets erreichbar ist, daß der Nenner auf

der rechten Seite von (B.10) ungleich Null ist und so  $\sum_{\ell,k}^{(\nu)g' \rightarrow g} \psi_{\ell,k}(\vec{r})$  wohl definiert ist. Im Fall  $\sum_{\ell,k}^{(\nu)} \psi_{\ell,k}(\vec{r}, E') \equiv 0$  in  $g'$  definieren wir  $\sum_{\ell,k}^{\nu g' \rightarrow g} \psi_{\ell,k}(\vec{r}) \equiv 0$ .

Mit diesen Gruppenwirkungsquerschnitten und mit den Momenten der Neutronenflußdichte in der Gruppe  $g$

$$(B.11) \quad \begin{aligned} \psi_{\ell,0}^g(\vec{r}) &\equiv \int_g dE \psi_{\ell,0}(\vec{r}, E) \\ &= \int_g dE \frac{1}{2\pi} \int_{-1}^{+1} d\mu \int_0^{2\pi} d\phi \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) P_{\ell}(\mu), \quad \ell = 0, 1, 2, \dots \end{aligned}$$

sowie den "zugeordneten" Flußmomenten in der Gruppe  $g$

$$(B.12) \quad \sum_{\ell,k}^{(\nu)g} \psi_{\ell,k}(\vec{r}) \equiv \int_g dE \sum_{\ell,k}^{(\nu)} \psi_{\ell,k}(\vec{r}, E), \quad \ell = 0, 1, 2, \dots; \quad k = 1, 2, \dots, \ell$$

mit  $\sum_{\ell,k}^{(\nu)} \psi_{\ell,k}(\vec{r}, E)$  gemäß (B.8) erhalten wir als Multigruppenform der elastischen Streuquelle

$$(B.13) \quad \begin{aligned} Q_{el}^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) &= \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{2} \sum_{k=0}^{\ell} a_{\ell,k} P_{\ell,k}(\mu) \\ &\cdot \left[ \cos k\phi \cdot \sum_{g'=1}^G \sum_{\ell,k}^{\nu g' \rightarrow g} \psi_{\ell,k}^{g'}(\vec{r}) + \sin k\phi \cdot \sum_{g'=1}^G \sum_{\ell,k}^{\nu g' \rightarrow g} \psi_{\ell,k}^{g'}(\vec{r}) \right] \end{aligned}$$

Die Stoßdichte in der Gruppe  $g$  wird entsprechend behandelt. Sie ist nach (2.1)

$$\begin{aligned} F^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) &\equiv \int_g dE \Sigma_t(E) \cdot \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) \\ &= \int_g dE \Sigma_t(E) \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{4\pi} \int_{4\pi} d\Omega' P_{\ell}(\vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E) \end{aligned}$$

also

$$(B.14) \quad F^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{2} \sum_{k=0}^{\ell} a_{\ell,k} P_{\ell,k}(\mu) \cdot \left[ \cos k\phi \cdot \Sigma_{t,\ell,k}^g(\vec{r}) \cdot \psi_{\ell,k}^g(\vec{r}) + \sin k\phi \cdot \tilde{\Sigma}_{t,\ell,k}^g(\vec{r}) \cdot \tilde{\psi}_{\ell,k}^g(\vec{r}) \right]$$

mit den Gruppenwirkungsquerschnitten

$$(B.15) \quad \langle \Sigma_{t,\ell,k}^g(\vec{r}) \rangle = \int dE \Sigma_t(E) \langle \psi_{\ell,k}^g(\vec{r}, E) \rangle / \int dE \langle \psi_{\ell,k}^g(\vec{r}, E) \rangle$$

Im Fall, daß der Nenner auf der rechten Seite von (B.15) Null ist, wird wie bei der Definition von  $\langle \Sigma_{\ell,k}^{g' \rightarrow g}(\vec{r}) \rangle$  durch (B.10) vorgegangen.

In platten- oder kugelsymmetrischen Anordnungen vereinfachen sich (B.13) und (B.15) mit  $\psi_{\ell}^g(x) \equiv \psi_{\ell,0}^g(x)$  zu

$$(B.16) \quad Q_{el}^g(x, \mu) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{2} P_{\ell}(\mu) \sum_{g'=1}^G \Sigma_{\ell,0}^{g' \rightarrow g} \psi_{\ell}^{g'}(x)$$

und

$$(B.17) \quad F^g(x, \mu) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{2} P_{\ell}(\mu) \Sigma_{t,\ell,0}^g \psi_{\ell}^g(x)$$

## B.2 Eindimensionale Approximation der Wichtungsfunktionen zur Bildung von Multigruppenwirkungsquerschnitten

Die in (B.10) und (B.15) definierten Gruppenwirkungsquerschnitte enthalten als Wichtungsfunktionen für  $k = 0$  die Flußdichtemomente  $\psi_{\ell}(\vec{r}, E) \equiv \psi_{\ell,0}(\vec{r}, E)$  und für  $k > 0$  die "zugeordneten" Flußdichtemomente  $\psi_{\ell,k}(\vec{r}, E)$ ; sie weisen

also neben ihrer Energieabhängigkeit eine Abhängigkeit vom Ort und von den Legendre-Indices  $l, k$  auf. Die Wichtungsfunktionen sind als Amplituden der Neutronenflußdichte  $\psi(x, \mu, E)$ , die die Boltzmann-Gleichung (2.1) erfüllt, zu Anfang der Multigruppen-Reaktorrechnung naturgemäß unbekannt und müssen zur Bildung von Gruppenwirkungsquerschnitten physikalisch sinnvoll angenähert werden.

Die Ortsabhängigkeit wird üblicherweise - vgl. z.B. Küsters / 8/ - durch eine räumliche Zoneneinteilung berücksichtigt, die so gewählt wird, daß in jeder Zone die Energieabhängigkeit der Wichtungsfunktionen durch eine zonengemittelte Energieabhängigkeit ersetzt werden darf: Z.B.

$$(B.18) \quad \psi_l(\vec{r}, E) = \psi_l^Z(E) \equiv \frac{1}{V_Z} \int_{V_Z} d\vec{r} \psi_l(\vec{r}, E).$$

In der Nähe von Rändern ist dabei u.U. eine feinere Zoneneinteilung erforderlich als in randfernen Bereichen eines Reaktors. Durch dieses Vorgehen wird die Ortsabhängigkeit der Gruppenquerschnitte zonenweise eliminiert.

Im folgenden werden zonengemittelte Wichtungsfunktionen stets unter Weglassen des Zonenindex  $Z$  mit  $\psi_l(E)$  bezeichnet.

Die Abhängigkeit der Gruppenwirkungsquerschnitte vom Legendre-Index  $k$  für  $k > 0$  läßt sich durch eine naheliegende Näherung für die Wichtungsfunktionen  $\psi_{l,k}(\vec{r}, E)$ ,  $k > 0$ , eliminieren.

Definiert man nämlich

$$(B.19) \quad \Sigma_l^{g' \rightarrow g}(\vec{r}, \vec{\Omega}) \equiv \frac{\int_{g'} dE' \Sigma_l(E' \rightarrow g) \int d\Omega' P_l(\vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E')}{\int_{g'} dE' \int d\Omega' P_l(\vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E')},$$

so ergibt sich für die elastische Streuquelle nach (B.1)

$$(B.20) \quad Q_{e1}^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{4\pi} \sum_{g'=1}^G \Sigma_{\ell}^{g' \rightarrow g}(\vec{r}, \vec{\Omega}) \int_{g'} dE' \int d\Omega' P_{\ell}(\vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E')$$

oder, explizit unter Anwendung des Additionstheorems der Legendre-Polynome (B.5) und mit (B.11) und (B.12),

$$(B.21) \quad Q_{e1}^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{2} \sum_{g'=1}^G \Sigma_{\ell}^{g' \rightarrow g}(\vec{r}, \vec{\Omega}) \sum_{k=0}^{\ell} a_{\ell,k} P_{\ell,k}(\mu) \times$$

$$\times \left[ \cos k \varphi \cdot \psi_{\ell,k}^{g'}(\vec{r}) + \sin k \varphi \cdot \tilde{\psi}_{\ell,k}^{g'}(\vec{r}) \right]$$

Setzt man jetzt zur Bildung der  $\Sigma_{\ell}^{g' \rightarrow g}(\vec{r}, \vec{\Omega})$  nach (B.19)

$$(B.22) \quad \psi_{\ell,k}(\vec{r}, E) = \tilde{\psi}_{\ell,k}(\vec{r}, E) = 0 \quad \text{für } \ell = 1, 2, \dots, \quad k = 1, 2, \dots, \ell$$

so wird - vgl. (B.10) -

$$(B.23) \quad \Sigma_{\ell}^{g' \rightarrow g}(\vec{r}, \vec{\Omega}) \approx \int_g dE' \Sigma_{\ell}(E' \rightarrow g) \psi_{\ell,0}(\vec{r}, E') / \int_{g'} dE' \psi_{\ell,0}(\vec{r}, E')$$

$$= \Sigma_{\ell,0}^{g' \rightarrow g}(\vec{r})$$

Die Näherung (B.22) bedeutet nach (B.8 ff), daß bei der Bildung der Gruppenwirkungsquerschnitte die durch  $\mu = 1$ , als durch  $\vec{\Omega} = (0, 0, 1)$ , beschriebene Richtung als Symmetrieachse des Neutronenfeldes angenommen wird.

Einsetzen von (B.23) in (B.21) und Verwendung von (B.13) ergibt

$$(B.24) \quad \Sigma_{\ell,k}^{g' \rightarrow g} \approx \tilde{\Sigma}_{\ell,k}^{g' \rightarrow g} \approx \Sigma_{\ell,0}^{g' \rightarrow g} \quad \text{für } \ell = 1, 2, \dots; k = 1, 2, \dots, \ell$$

Das unmittelbare Einsetzen von (B.22) in (B.10) ermöglicht nicht die Ableitung von (B.24), da die  $\tilde{\Sigma}_{\ell,k}^{g' \rightarrow g}$  nach (B.10) in der Näherung (B.22) nicht bestimmt sind. Für die totalen Gruppenwirkungsquerschnitte  $\tilde{\Sigma}_{t,\ell,k}^{g' \rightarrow g}$  in der Stoßdichte - vgl. (B.14) - erhält man mit der Näherung (B.22) entsprechend

$$(B.25) \quad \Sigma_{t,\ell,k}^g \approx \tilde{\Sigma}_{t,\ell,k}^g \approx \Sigma_{t,\ell,0}^g \quad \text{für } \ell = 1, 2, \dots; k = 1, 2, \dots, \ell$$

Durch (B.24) und (B.25) sind die Gruppenquerschnitte mit Legendre-Indices  $\ell, k$  mit  $k > 0$  auf die Querschnitte mit den Indices  $\ell, 0$  zurückgeführt. Dies hat den praktischen Vorteil, daß anstelle von  $2\ell+1$  Gruppenquerschnitten bei Berücksichtigung der vollen Anisotropie der Neutronenflußdichte bei der Querschnittsbildung nur jeweils ein Querschnitt bereitgestellt zu werden braucht. Man muß sich aber vor Augen halten, daß dieser Vorteil in zwei- oder dreidimensionalen und bereits in zylindersymmetrischen Anordnungen, in denen (B.22) nicht erfüllt ist, durch eine Inkonsistenz zwischen der "wahren" und der zur Wichtung benutzten Amplitude der Neutronenflußdichte erkauft wird. Untersuchungen des dadurch verursachten Fehlers liegen bisher nicht vor.

### B.3 Approximatione Berechnung von Wichtungsfunktionen

Die durch die Wichtungsfunktion verursachte Abhängigkeit der Gruppenwirkungsquerschnitte vom Legendre-Index  $\ell$  wurde für plattensymmetrische Anordnungen von mehreren Autoren /7/, /8/, /9/ behandelt. Da die von diesen Autoren ermittelten Wichtungsfunktionen in dieser Arbeit teilweise verwendet werden, sollen sie kurz angegeben werden.

Ausgehend von den quellfreien  $P_\ell$ -Gleichungen

$$(B.26) \quad \frac{\ell+1}{2\ell+1} \frac{d}{dx} \psi_{\ell+1}(x, E) + \frac{\ell}{2\ell+1} \frac{d}{dx} \psi_{\ell-1}(x, E) + \Sigma_t(E) \psi_\ell(x, E) = \int dE' \Sigma_\ell(E' \rightarrow E) \psi_\ell(x, E'), \quad \ell = 0, 1, 2, \dots, \psi_{-1}(x, E) \equiv 0$$

mit  $\psi_\ell(x, E) = \int_{-1}^{+1} d\mu P_\ell(\mu) \psi(x, \mu, E)$  erhalten Ginsberg und Becker /7/ für die zonengemittelten Momente  $\psi_\ell(E)$  - vgl. (B.18) - die mit "sequential transport approximation" bezeichnete Rekursionsformel

$$(B.27) \quad \begin{cases} \psi_\ell(E) \sim \frac{\psi_{\ell-1}(E)}{\Sigma_t(E) - \Sigma_\ell(E)}, & \ell = 1, 2, \dots \\ \psi_0(E) \sim \frac{1}{\Sigma_t(E) + DB^2} \end{cases}$$

mit  $\Sigma_\ell(E) = \int dE' \Sigma_\ell(E \rightarrow E')$ . Der Term  $DB^2$  ist ein Korrekturterm für räumliche Neutronenleckage. Zu erwähnen ist, daß von Gibbs, Becker und Malaviya /9/ ein Iterationsverfahren zur Berechnung von Wichtungsfunktionen angegeben wird, die sog. "iterated sequential transport approximation", das beim Vorhandensein von Querschnittsresonanzen eine Verbesserung von (B.27) bedeutet (vgl. Kap. 6.3). Ebenfalls ausgehend von (B.26) erhält Küsters /8/

$$(B.28) \quad \psi_\ell(E) \sim \frac{F(E)}{[\Sigma_t(E)]^{\ell+1}}, \quad \ell = 0, 1, 2, \dots$$

$F(E)$  ist der Zonenmittelwert der Stoßdichte

$$(B.29) \quad F(x, E) \equiv \Sigma_t(E) \cdot \psi_0(x, E),$$

die schwächer von der Energie abhängt als die skalare Flußdichte  $\psi_0(x,E)$  und die bei fehlender Absorption einen Energieverlauf proportional zu  $1/E$  besitzt.

Anhang C: Überlegung zur Gültigkeit der "extended transport approximation"

In der "extended transport approximation" von Bell, Hansen und Sandmeier /2/ - s. Kap. 4, Gl. (4.38) - wird zur Bildung des Transportquerschnitts bei der Beschreibung der elastischen Neutronenstreuung an einem Atomkern mit der Massenzahl  $A$  für  $\ell > L+1$

$$(C.1) \quad D_{\ell}(E) \equiv \int_E^{E/\alpha} dE' \Sigma_{\ell}(E',E) \psi_{\ell}(E') - \int_{\alpha E}^E dE' \Sigma_{\ell}(E,E') \psi_{\ell}(E) = 0$$

gesetzt. Dabei ist  $\alpha = \left(\frac{A-1}{A+1}\right)^2$ . Mit  $\Sigma_{\ell}(E',E)$  gemäß (2.13) und mit dem Legendre-Moment  $\ell$ -ter Ordnung des differentiellen elastischen Streuwirkungsquerschnitts,  $\Sigma_{\ell}(E)$ , nach (2.8) ist

$$(C.2) \quad \Sigma_{\ell}(E',E) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{2k+1}{2} \Sigma_k(E') P_{\ell}[\mu_0(E',E)] P_k[\mu_0(E',E)] \frac{d\mu_0(E',E)}{dE}$$

mit  $\mu_0(E',E)$  gemäß (2.2). Die Größen  $\mu_0(E',E)$  und  $E \frac{d\mu_0(E',E)}{dE} = \frac{A+1}{4} \sqrt{\frac{E}{E'}} + \frac{A-1}{4} \sqrt{\frac{E'}{E}}$  hängen von  $E$  und  $E'$  nur über den Quotienten  $E'/E$  ab. Setzt man zur Abkürzung

$$(C.3) \quad g_{\ell,k}(E'/E) = P_{\ell}[\mu_0(E',E)] \cdot P_k[\mu_0(E',E)] \cdot E \frac{d\mu_0(E',E)}{dE} ,$$

so ist

$$(C.4) \quad D_{\ell}(E) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{2k+1}{2} \left[ \int_E^{E/\alpha} dE' \Sigma_k(E') g_{\ell,k}(E'/E) \psi_{\ell}(E')/E - \int_{\alpha E}^E dE' \Sigma_k(E) g_{\ell,k}(E/E') \psi_{\ell}(E)/E' \right]$$

Setzt man in (C.4) im ersten Integral  $s = E'/E$ , im zweiten Integral  $s = E/E'$ , so haben die entstehenden Integrale jeweils die Grenzen 1 und  $1/\alpha$  und lassen sich zusammenfassen:

$$(C.5) \quad D_{\ell}(E) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{2k+1}{2} \int_1^{1/\alpha} \frac{ds}{s} g_{\ell,k}(s) \left[ s \Sigma_k(s \cdot E) \psi_{\ell}(s \cdot E) - \Sigma_k(E) \psi_{\ell}(E) \right]$$

Ein einfacher Fall, für den  $D_{\ell}(E) = 0$ , liegt vor in plattensymmetrischen Anordnungen mit einer isotropen monoenergetischen Flächenquelle, wenn die Neutronenwirkungsquerschnitte energieunabhängig sind - dies ist z.B. in guter Näherung in einer Graphitplatte für Neutronenenergien unterhalb 1 keV erfüllt. Für eine solche Anordnung mit

$$(C.6) \quad \Sigma_t(E) = \Sigma_t = \text{const}, \quad \Sigma_{\ell}(E) = \Sigma_{\ell} = \text{const}$$

kann man zeigen, daß für  $E \leq \alpha E_0$ ,  $E_0 =$  Energie der Quellneutronen, die Neutronenflußdichte  $\psi(x, \mu, E)$  die Form

$$(C.7) \quad \psi(x, \mu, E) = \frac{1}{E} \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{2} g_{\ell}(x) P_{\ell}(\mu)$$

hat, wobei  $G(x, \mu) \equiv \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{2} g_{\ell}(x) P_{\ell}(\mu)$  der energieunabhängigen Boltzmann-Gleichung

$$(C.8) \quad \mu \frac{\partial}{\partial x} G(x, \mu) + \Sigma_t \cdot G(x, \mu) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{2} \Sigma_{\ell} \cdot g_{\ell}(x) \cdot P_{\ell}(\mu)$$

genügt. Die Legendre-Momente der Flußdichte,  $g_{\ell}(x)/E$ , sind proportional  $1/E$ ; also sind auch die entsprechenden Zonenmittelwerte  $\psi_{\ell}(E) \sim 1/E$ . Daher ist mit (C.6) für  $E \leq \alpha E_0$

$$(C.9) \quad s\Sigma_k(s \cdot E) \psi_\ell(s \cdot E) - \Sigma_k(E) \psi_\ell(E) \sim \frac{1}{E} \left[ \Sigma_k(s \cdot E) - \Sigma_k(E) \right] = 0$$

$$\ell, k = 0, 1, 2, \dots$$

also

$$(C.10) \quad D_\ell(E) = 0 \quad \text{für} \quad \ell = 0, 1, 2, \dots$$

Anhang D : Ein verbessertes Integrationsverfahren zur Berechnung von stoßdichte- und feinstrukturgewichteten Multigruppenkonstanten

In Programmen zur Erzeugung von Multigruppenkonstanten wird wegen der bei manchen Kernen großen Anzahl von Stützstellen der Wirkungsquerschnitt zur Vermeidung zu langer Rechenzeiten i.a. nach der Trapezregel integriert. Dabei wird der gesamte Integrand durch einen Polygonzug approximiert; das Integral ist dann die Summe der entstehenden Trapezflächen. Jedes Trapez ist bestimmt durch die Intervallbreite und die Werte des Integranden an den Intervallgrenzen.

Bei der stückweisen Approximation des Integranden durch Polynome zweiter und höherer Ordnung, die zu den Simpson'schen Ausdrücken und komplizierteren Formen führen, wird zur Integration über ein Teilintervall Information aus Nachbarintervallen benötigt. Diese Verfahren sind aufwendig, wenn viele Stützstellen vorhanden sind.

Bei dem hier beschriebenen Verfahren wird der aus drei Faktoren bestehende Integrand stückweise durch ein Produkt von drei Linearfaktoren, also durch ein Polynom dritter Ordnung, approximiert. Die Integrale über Teilintervalle sind dann

- in einfacher Weise abhängig von den Intervallbreiten und den Funktionswerten an den Intervallgrenzen und
- sind exakt, wenn die Faktoren des Integranden in den Teilintervallen linear sind.

Der Unterschied zur Trapezintegration liegt also darin, daß dort der gesamte Integrand, hier jedoch jeder einzelne Faktor durch einen Polygonzug angenähert wird.

Die stoßdichte- und feinstrukturgewichtete Gruppenkonstante  $\sigma^g$  des Wirkungsquerschnittes  $\sigma(E)$  ist definiert als

$$(D.1) \quad \sigma^g = \frac{\int_{E_g}^{E_{g-1}} dE \sigma(E) \cdot F(E) \cdot T(E)}{\int_{E_g}^{E_{g-1}} dE F(E) \cdot T(E)}$$

mit  $E_g < E_{g-1}$  als Gruppengrenzen.  $F(E)$  ist die Stoßdichte, und mit  $T(E)$  wird die Feinstruktur der Wichtung berücksichtigt.

Die numerische Bestimmung von  $\sigma^g$  nach (D.1) erfolgt aus punktweise vorliegenden Werten für  $\sigma(E)$ ,  $F(E)$  und  $T(E)$ , wobei die Stützstellennetze für jede dieser Funktionen als so fein vorausgesetzt werden, daß Zwischenwerte durch lineare Interpolation gewonnen werden können.

Mit  $E_g = x_1 < x_2 < x_3 < \dots < x_N = E_{g-1}$  als Vereinigung der Stützstellennetze und mit

$$(D.2) \quad Z_k = \int_{x_k}^{x_{k+1}} dx \sigma(x) \cdot F(x) \cdot T(x)$$

$$N_k = \int_{x_k}^{x_{k+1}} dx \cdot F(x) \cdot T(x)$$

geht (D.1) über auf

$$(D.9) \quad \sigma^g = \frac{\sum_{k=1}^{N-1} Z_k}{\sum_{k=1}^{N-1} N_k}$$

mit

$$(D.4) \quad \begin{aligned} & - \sigma(x), F(x), T(x) \text{ linear in } [x_k, x_{k+1}], \quad k = 1, 2, \dots, N-1 \\ & - \sigma(x_k), F(x_k), T(x_k) \text{ linear interpoliert, } k = 1, 2, \dots, N. \end{aligned}$$

Aus (D.3) und (D.4) ergibt sich unter Weglassen des Index  $k$

$$(D.5) \quad Z = \int_u^v dx (a_1 x + b_1) (a_2 x + b_2) (a_3 x + b_3)$$

$$N = \int_u^v dx (a_2 x + b_2) (a_3 x + b_3)$$

mit  $a_i, b_i, i = 1, 2, 3$ , aus

$$(D.6) \quad \begin{cases} a_1 u + b_1 = \sigma(u), & a_1 v + b_1 = \sigma(v) \\ a_2 u + b_2 = F(u), & a_2 v + b_2 = F(v) \\ a_3 u + b_3 = T(u), & a_3 v + b_3 = T(v). \end{cases}$$

Setzt man

$$(D.7) \quad \begin{aligned} \sigma^\pm &= \sigma(v) \pm \sigma(u) \\ F^\pm &= F(v) \pm F(u) \\ T^\pm &= T(v) \pm T(u) \end{aligned}$$

und

$$(D.8) \quad \delta = v - u, \quad \alpha = \frac{v+u}{v-u}$$

so lassen sich (D.5) und (D.6) zusammenfassen zu

$$(D.9) \quad Z = \frac{1}{8} \int_u^v dx \left[ 2 \frac{\sigma^-}{\delta} x + \sigma^+ - \alpha \sigma^- \right] \cdot \left[ 2 \frac{F^-}{\delta} x + F^+ - \alpha F^- \right] \cdot \left[ 2 \frac{T^-}{\delta} x + T^+ - \alpha T^- \right]$$

und N entsprechend. Mit  $s = \frac{2}{\delta} x - \alpha$  vereinfacht sich (D.9) zu

$$(D.10) \quad Z = \frac{\delta}{16} \int_{-1}^{+1} ds (\sigma^- \cdot x + \sigma^+) (F^- \cdot x + F^+) (T^- \cdot x + T^+)$$

und N entsprechend. Ausführen der Integration liefert

$$(D.11) \quad \begin{cases} Z = \frac{\delta}{8} \left[ \sigma^+ F^+ T^+ + \frac{1}{3} (\sigma^+ F^- T^- + \sigma^- F^+ T^- + \sigma^- F^- T^+) \right] \\ N = \frac{\delta}{4} \left[ F^+ T^+ + \frac{1}{3} F^- T^- \right] \end{cases}$$

Die Gruppenkonstante  $\sigma^g$  ist also

$$(D.12) \quad \sigma^g = \frac{1}{2} \frac{\sum_{k=1}^{N-1} \delta_k \left[ \sigma_k^+ F_k^+ T_k^+ + \frac{1}{3} (\sigma_k^+ F_k^- T_k^- + \sigma_k^- F_k^+ T_k^- + \sigma_k^- F_k^- T_k^+) \right]}{\sum_{k=1}^{N-1} \delta_k \left[ F_k^+ T_k^+ + \frac{1}{3} F_k^- T_k^- \right]}$$

mit

$$(D.13) \quad \left\{ \begin{array}{l} E_g = x_1 < x_2 < \dots < x_{N_g} = E_{g-1}, \quad \delta_k = x_{k+1} - x_k \\ \sigma_k^\pm = \sigma(x_{k+1}) \pm \sigma(x_k) \\ F_k^\pm = F(x_{k+1}) \pm F(x_k) \\ T_k^\pm = T(x_{k+1}) \pm T(x_k) \end{array} \right.$$

(D.12) und (D.13) sind numerisch leicht zu handhabende Vorschriften zur Bestimmung von  $\sigma^g$ . Einzige Voraussetzung ist, daß der Wirkungsquerschnitt  $\sigma(E)$  und die Wichtungsfunktionen  $F(E)$  und  $T(E)$  zwischen ihren Stützstellen linear interpoliert werden dürfen.

Anhang E : Kubisch-quadratisch-lineare Interpolation unter Vermeidung zusätzlicher Extremstellen

Das in FLUMMI zur Interpolation von Streuwinkelverteilungen angewendete Verfahren legt einen möglichst glatten Kurvenzug durch gegebene Punkte  $P_j(x_j, y_j)$ ,  $j = 1, 2, \dots, J$ . Charakteristisch für dieses Interpolationsverfahren ist die Vermeidung zusätzlicher Extremalstellen, ausgehend von der Annahme, daß unter den zu interpolierenden Meßwerten alle extremen Punkte bereits enthalten sind und aus der Interpolation stammende Extremwerte eine grobe Verfälschung der "physikalischen Kurve" bedeuten würden.

Das Interpolationspolynom  $F_j(x)$  im Intervall  $[x_j, x_{j+1}]$  wird durch die folgenden Bedingungen festgelegt:

$$(E.1) \quad F_j(x_j) = y_j, \quad j = 1, 2, \dots, J$$

$$(E.2) \quad F_j'(x_{j+1}) = F_{j+1}'(x_{j+1}), \quad j = 1, 2, \dots, J-2 \text{ (wenn möglich)}$$

$$(E.3) \quad F_j'(x) \gtrless 0 \text{ in } (x_j, x_{j+1}), \text{ wenn } y_{j+1} \gtrless y_j, \quad j = 1, \dots, J-1.$$

Bedingung (E.3) fixiert die Tangenten an relativen Extremalstellen:

$$(E.4) \quad F_j'(x_j) = 0, \text{ wenn } y_j \text{ ein relativer Extremwert ist.}$$

Ist  $y_j$  kein relativer Extremwert, so wird die Steigung des Interpolationspolynoms in  $x_j$  gleich der Steigung der Geraden durch die Nachbarpunkte  $P_{j-1}, P_{j+1}$  gesetzt:

$$(E.5) \quad \left\{ \begin{array}{l} F_j'(x_j) = m_j, \quad j = 1, 2, \dots, J \\ \\ m_j = \begin{cases} \frac{y_{j+1} - y_{j-1}}{x_{j+1} - x_{j-1}}, & 1 < j < J \\ \frac{y_J - y_{J-1}}{x_J - x_{J-1}}, & j = J \\ \frac{y_2 - y_1}{x_2 - x_1}, & j = 1 \end{cases} \end{array} \right.$$

Bei strenger Anwendung von (E.5) ist u.U. die Bedingung (E.3) verletzt, nämlich wenn  $F_j(x)$  in  $(x_j, x_{j+1})$  eine Extremalstelle hat. In diesem Fall wird quadratisch unter Beibehaltung eventueller Nulltangente interpoliert. Ist auch hierbei (E.3) verletzt, wird linear interpoliert.

Das Ausweichen auf quadratische oder lineare Interpolation hat i.a. einen Knick in der Interpolationskurve, also eine Verletzung von (E.3) zur Folge.

Sei

$$(E.6) \quad \begin{cases} u_j = x_{j+1} - x_j \\ v_j = y_{j+1} - y_j \end{cases} \quad j = 1, 2, \dots, J-1$$

Macht man für  $F_j(x)$  den Ansatz

$$(E.7) \quad F_j(x) = a_{j0} + a_{j1}(x-x_j) + a_{j2}(x-x_j)^2 + a_{j3}(x-x_j)^3,$$

so bekommt man aus (E.1), (E.2) und (E.5)

$$(E.8) \quad \begin{cases} a_{j0} = y_j, \quad a_{j1} = m_j, \\ a_{j2} = [3(v_j - m_j u_j) - u_j(m_{j+1} - m_j)] / u_j^2 \\ a_{j3} = -[2(v_j - m_j u_j) - u_j(m_{j+1} - m_j)] / u_j^3 \end{cases}$$

Die folgende Falldiskussion zeigt, wie (E.8) u.U. die Bedingung (E.3) verletzt.

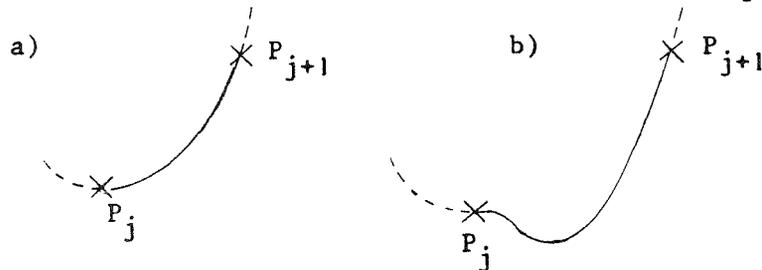
1. Fall:  $m_j = m_{j+1} = 0$  ( $x_j$  und  $x_{j+1}$  sind relative Extremalstellen)

In diesem Fall ist (E.3) erfüllt. Mit (E.8) ist dann nämlich in  $(x_j, x_{j+1})$

$$(E.9) \quad \begin{aligned} F_j'(x) &= 6(x-x_j)(x_{j+1}-x)v_j/u_j^3 \\ &\geq 0, \text{ wenn } y_{j+1} \geq y_j. \end{aligned}$$

2. Fall:  $m_j = 0, m_{j+1} \neq 0$

In diesem Fall gibt es zwei Möglichkeiten (Skizzen für  $m_{j+1} > 0$ ):



In der Situation (b), in der eine Extremstelle zwischen  $x_j$  und  $x_{j+1}$  liegt, ist (E.3) verletzt.

Ausweg: Durch  $P_j$  und  $P_{j+1}$  wird eine Parabel mit Nulltangente in  $P_j$  gelegt:

$$(E.10) \quad F_j(x) = a_{j0} + a_{j1}(x-x_j) + a_{j2}(x-x_j)^2$$

mit

$$a_{j0} = y_j, a_{j1} = 0, a_{j2} = v_j/u_j^2.$$

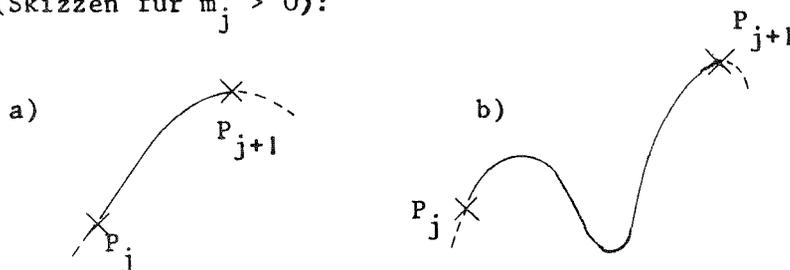
Jetzt ist in  $(x_j, x_{j+1})$

$$(E.12) \quad F'_j(x) = 2(x-x_j) v_j/u_j^2 \geq 0, \text{ wenn } y_{j+1} \geq y_j.$$

In  $P_{j+1}$  bekommt man eine Unstetigkeit der Tangente mit dem Sprung  $2v_j/u_j - m_{j+1}$ .

3. Fall:  $m_j \neq 0, m_{j+1} = 0$

Es gibt wiederum zwei Möglichkeiten, von denen eine im Widerspruch zu (E.3) steht (Skizzen für  $m_j > 0$ ):



In der Situation (b), in der eine Extremstelle zwischen  $x_j$  und  $x_{j+1}$  liegt, ist (E.3) verletzt.

Ausweg: Durch  $P_j$  und  $P_{j+1}$  wird eine Parabel mit Nulltangente in  $P_{j+1}$  gelegt:

$$(E.13) \quad F_j(x) = a_{j0} + a_{j1}(x-x_j) + a_{j2}(x-x_j)^2$$

mit

$$(E.14) \quad a_{j0} = y_j, \quad a_{j1} = 2v_j/u_j, \quad a_{j2} = -v_j/u_j^2.$$

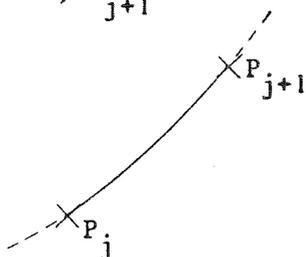
Jetzt ist in  $(x_j, x_{j+1})$

$$(E.15) \quad F'_j(x) = 2(x_{j+1}-x) v_j/u_j^2 \geq 0, \text{ wenn } y_{j+1} \geq y_j.$$

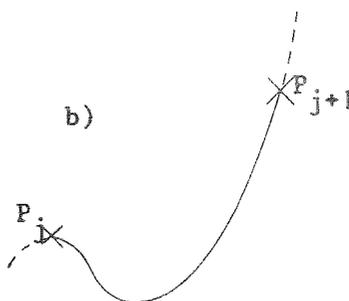
In  $P_j$  bekommt man eine Unstetigkeit der Tangente mit dem Sprung  $m_j - 2v_j/u_j$ .

4. Fall:  $m_j \geq 0, m_{j+1} \geq 0$

a)



b)



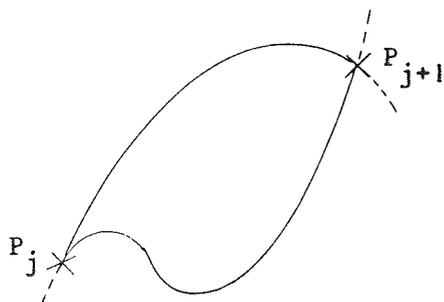
Um (E.3) nicht zu verletzen, wird im Fall (b) eine Parabel durch  $P_j$  und  $P_{j+1}$  mit der Steigung  $m_j$  in  $P_j$  gelegt:

$$(E.16) \quad F_j(x) = a_{j0} + a_{j1}(x-x_j) + a_{j2}(x-x_j)^2$$

mit

$$(E.17) \quad a_{j0} = y_j, \quad a_{j1} = m_j, \quad a_{j2} = (v_j - m_j u_j)/u_j^2$$

Möglicherweise hat auch diese Parabel zwischen  $x_j$  und  $x_{j+1}$  eine Extremalstelle:



In diesem Fall wird linear interpoliert:

$$(E.18) \quad F_j(x) = a_{j0} + a_{j1}(x-x_j)$$

mit

$$(E.19) \quad a_{j0} = y_j, \quad a_{j1} = v_j/u_j$$

In  $P_{j+1}$  wird ein glatter Übergang zum folgenden Intervall  $(x_{j+1}, x_{j+2})$  erzwungen, indem  $m_{j+1}$  aus (E.5) durch die Steigung des Interpolationspolynoms  $F_j(x)$  in  $P_{j+1}$  ersetzt wird:

$$(E.20) \quad m_{j+1} \rightarrow \begin{cases} 2v_j/u_f - m_j & \text{bei quadratischer Interpolation} \\ v_j/u_j & \text{bei linearer Interpolation} \end{cases}$$

Bei linearer Interpolation in  $(x_j, x_{j+1})$  ist die Tangente in  $P_j$  unstetig mit dem Sprung  $m_j - v_j/u_j$ .

Herrn Dr. H. Küsters danke ich sehr herzlich dafür, daß er diese Arbeit angeregt und sie durch stete konstruktive Kritik gefördert hat. Seine dauernde Bereitschaft zu Diskussionen hat wesentlich zum Fortgang der Untersuchungen beigetragen und zusammen mit der kritischen Durchsicht des Manuskripts einen erfolgreichen Abschluß ermöglicht.

Den Herren Dr. D. Rusch und Dr. F. Kappler danke ich für die Überlassung experimenteller Ergebnisse und für ihre freundschaftliche Diskussionsbereitschaft bei der Interpretation der Messungen.