

**KfK 4788**  
**September 1990**

**Verfahren zur  
numerischen Lösung der  
Neutronentransportgleichung mit  
strenger Behandlung der  
anisotropen Streuung**

**A. Schwenk-Ferrero**  
**Institut für Neutronenphysik und Reaktortechnik**  
**Projekt Kernfusion**

**Kernforschungszentrum Karlsruhe**



**KERNFORSCHUNGSZENTRUM KARLSRUHE**  
**Institut für Neutronenphysik und Reaktortechnik**  
**Projekt Kernfusion**

**KfK 4788**

**Verfahren zur numerischen Lösung der Neutronentransportgleichung  
mit strenger Behandlung der anisotropen Streuung**

**A. Schwenk-Ferrero**

**Von der Fakultät für Maschinenbau der Universität Karlsruhe (T.H)  
genehmigte Dissertation**

**Kernforschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe**

Als Manuskript gedruckt  
Für diesen Bericht behalten wir uns alle Rechte vor

Kernforschungszentrum Karlsruhe GmbH  
Postfach 3640, 7500 Karlsruhe 1

ISSN 0303-4003

## Kurzfassung

Die vielfach zur Behandlung der Neutronenstreuung bei den Transportrechnungen benutzte abgebrochene Legendre-Reihenentwicklung des Streukerns, die im Falle einer stark anisotropen vorwärtsgerichteten Streuung von hochenergetischen Neutronen an leichten Kernen bei kleinen Approximationsordnungen zu unphysikalisch oszillierenden Darstellungen führen kann, wurde durch eine neue, strenge Darstellung des Streuterns in der Boltzmann-Gleichung ersetzt. Dabei wurden die doppelt-differentiellen Wirkungsquerschnitte zur Beschreibung der korrelierten Energie-Winkelverteilungen der Sekundärneutronen verwendet. Auf der Grundlage dieser exakten Darstellung wurden numerische Verfahren zur Durchführung der Neutronentransportrechnungen sowohl in dem azimutunabhängigen Fall (ebene und sphärische Geometrie) als auch in dem azimutabhängigen Fall (eindimensionale Zylinder- und zweidimensionale  $(r,z)$ -Geometrie) entwickelt und in existierende  $S_N$ -Rechenprogramme (ONETRAN, TWOTRAN) eingebaut. Die modifizierten Rechenprogramme wurden als Referenzprogramme zur Verifizierung der Kerndaten in dem Europäischen Fusionsdaten-File (EFF-1) herangezogen. Drei Benchmark-Experimente: an der Universität in Dresden zur Bestimmung der Neutronenmultiplikation in einer Blei-Kugelschale, am Kurchatov-Institut in Moskau zur Ermittlung der Neutronenmultiplikation in drei Beryllium-Kugelschalen von verschiedener Dicke und bei JAERI in Japan zur Messung des gerichteten Neutronen-Leckagespektrums aus Beryllium-Schichten wurden nachgerechnet. Für die Blei-Anordnung wurde die Neutronenmultiplikation von 1,76 berechnet gegenüber einem Meßwert von  $1,86 \pm 4\%$ . Dies weist darauf hin, daß der  $\sigma_{2n}$ -Wirkungsquerschnitt für Blei bei der 14 MeV-Neutroneneinflussenergie in EFF-1 erhöht werden muß. Der Verlauf des gemessenen Neutronenausflußspektrums ist durch die Rechnung gut wiedergegeben. Die numerisch ermittelte Neutronenmultiplikation in den drei Beryllium-Kugeln stimmt mit den gemessenen Werten innerhalb der Meßgenauigkeit überein. Das berechnete Ausflußspektrum unterschätzt unterhalb von 600 keV und oberhalb von etwa 6 MeV die Messung. Diese Unterschiede deuten darauf hin, daß die in EFF-1 enthaltenen Kerndaten für Beryllium noch ungenau sind. Für das bei JAERI unter dem Polarwinkel  $41,8^\circ$  gemessene Neutronen-Leckagespektrum aus einer 5 cm-dicken Beryllium-Schicht, die mit 14 MeV-Neutronen bestrahlt wurde, wurde eine gute Übereinstimmung mit der Rechnung erzielt. Vergleichsrechnungen mit den herkömmlichen  $S_N$ -Programmen zeigen, daß die Darstellung der Winkelverteilung der Sekundärneutronen in  $P_5$  als eine ausreichend genaue Näherung betrachtet werden kann, wenn man die Neutronenspektren bzw. Neutronenmultiplikation bestimmen will.

# Numerical solution to the neutron transport equation with a rigorous treatment of anisotropic scattering

## Abstract

One of the most commonly used methods for handling the anisotropic neutron scattering in transport calculations is the truncated Legendre polynomial expansion of the scattering kernel. In case of scattering peaked in the forward direction like that of high energy neutrons on light nuclei this method may lead at lower approximation orders to spuriously oscillating kernel representations. This treatment of anisotropy has been improved in the present work by employing an exact method for representing the scattering term in the Boltzmann equation along with the double-differential cross-sections describing the correlated energy and angular distributions of the secondary neutrons. Two numerical methods basing upon the rigorous representation were developed that enable to solve the neutron transport equation in the azimuthally independent case (one-dimensional plane and spherical geometry) as well as in the azimuthally dependent case (one-dimensional ( $r$ ) and two-dimensional ( $r,z$ ) cylindrical geometry). Both procedures were incorporated into the existing  $S_N$  transport codes ONETRAN and TWOTRAN. These modified Programs treating rigorously the scattering anisotropy were used to assess the accuracy of the evaluated nuclear data stored in European Fusion File (EFF-1). Calculations of the following benchmark experiments were performed: Dresden integral experiment to determine the total neutron multiplication in spherical lead shell, Moscow Experiment designed to obtain the total multiplication and leakage spectrum in beryllium shells and Japanese Experiment set up in JAERI to measure directional neutron spectrum from beryllium slabs. The results are that the EFF-1 data reproduce the leakage spectrum in lead assembly quite well, although there is still discrepancy with respect to the absolute magnitude (the calculated leakage multiplication 1.76 underestimates the experimental one  $1.86 \pm 4\%$ ), indicating that the  $(n,2n)$  cross-section for lead in EFF-1 needs to be increased. The values calculated for the neutron multiplication in each of the beryllium spheres approximate closely (within experimental error) the experimental results. The calculated leakage spectrum for 5 cm thick sphere underestimates however the measured spectrum below 600 keV and above 6 MeV. These discrepancies can be attributed to inaccuracies in nuclear data for beryllium in EFF-1. Calculated directional leakage spectrum at the polar angle  $41,8^\circ$  for 5 cm thick beryllium slab irradiated with 14 MeV neutrons is in good agreement with measurement. Comparative studies performed using conventional  $S_N$  transport codes show that the  $P_s$  representation of the scattering kernel can be considered as sufficiently accurate approximation in all neutron calculations which aim at the determination of the leakage spectrum and neutron multiplication.

# Inhaltsverzeichnis

<b>1. Einleitung.</b> .....	<b>1</b>
<b>2. Methodische Behandlung der Boltzmann-Gleichung für den Neutronentransport bei exakter Berücksichtigung der anisotropen Streuung</b> .....	<b>7</b>
2.1 Analytische Form der Boltzmann-Gleichung für den Neutronentransport. ....	7
2.2 Darstellung des Streuterms: die $I^*$ -Methode. ....	8
2.3 Vereinfachungen der Neutronentransportgleichung für eindimensionale Geometrien und zweidimensionale (r, z)-Geometrie bei der $I^*$ -Darstellung des Streuterms	12
<b>3. Numerische Lösungsverfahren der Neutronentransportgleichung bei strenger Darstellung des Streuterms</b> .....	<b>17</b>
3.1 Die Multigruppennäherung .....	17
3.2 Numerische Berechnung des Streuintegrals über Winkelvariablen .....	20
3.2.1 Das Integrationsverfahren in zylindrischer Geometrie. ....	20
3.2.2 Das Integrationsverfahren in eindimensionaler sphärischer und ebener Geometrie .....	23
3.3 Die $S_N$ - Näherung der Multigruppen-Transportgleichung. Quadratursätze .....	24
<b>4. Einführung des neuen Rechenverfahrens in die <math>S_N</math>-Programme ONETRAN und TWOTRAN: Erstellung der Programme ANTRA1 und ANTRA2.</b> .....	<b>31</b>
<b>5. Verifikation des Programms ANTRA1 anhand des an der Technischen Universität in Dresden durchgeführten Experimentes zur Bestimmung der Neutronenmultiplikation im Blei</b> .....	<b>43</b>
5.1 Beschreibung der experimentellen Anlage. ....	43
5.2 Das Rechenmodell .....	47
5.3 Ergebnisse der Rechnungen. ....	52
5.4 Gegenüberstellung der mit den herkömmlichen $S_N$ - und $P_L$ -Verfahren erzielten Ergebnisse. ....	55
<b>6. Einsatz der Programme ANTRA1 und ONETRAN zur Überprüfung der Genauigkeit der Kerndaten für Beryllium im europäischen Fusionsdaten-File (EFF-1) anhand des am Kurchatov-Institut in Moskau durchgeführten Experimentes</b> .....	<b>57</b>
6.1 Beschreibung der Versuchsanlage. ....	58
6.2 Das Rechenmodell. ....	60
6.3 Diskussion der erzielten Ergebnisse. ....	62
<b>7. Verifikation des Programms ANTRA2 anhand des in der FNS-Anlage bei JAERI in Japan durchgeführten Experimentes.</b> .....	<b>65</b>
7.1 Der Aufbau der experimentellen Anlage. ....	66
7.2 Das Modell des Experimentes in der zweidimensionalen (r,z)-Geometrie. ....	69
7.3 Ergebnisse der Nachrechnungen. ....	72
7.4 Gegenüberstellung der mit dem TWOTRAN-Programm erzielten Ergebnisse. ....	74
7.5 Schlußfolgerungen. ....	75
<b>8. Zusammenfassung</b> .....	<b>79</b>
<b>Anhang A. Eigenschaften der <math>I^*</math>-Funktion.</b> .....	<b>83</b>

<b>Anhang B. Das im ONETRAN-Programm gelöste System von algebraischen Gleichungen</b> .....	<b>85</b>
<b>Literaturverzeichnis</b> .....	<b>87</b>

## Abbildungsverzeichnis

Abb. 1.1	Vertikaler Schnitt durch den NET-Reaktor	2
Abb. 2.1	Winkelkoordinaten zur Beschreibung des Streuprozesses	9
Abb. 2.2	Kartesisches Raum- und Winkelkoordinatensystem	15
Abb. 2.3	Sphärisches Raum- und Winkelkoordinatensystem	15
Abb. 2.4	Zylindrisches Raum- und Winkelkoordinatensystem	16
Abb. 3.1	Anordnung der diskreten Richtungen in zylindrischer Geometrie ( $S_6$ -Näherung)	26
Abb. 3.2	Gauß-Tschebyscheffsche Quadraturansätze: Anordnung der diskreten Richtungen für einen Oktant auf der Projektionsebene der Einheitskugel	27
Abb. 3.3	Gekrümmte Geometrien: Änderung der Winkelkoordinaten während des ungestörten Fluges des Neutrons durch das Medium	29
Abb. 4.1	(r,z)-Geometrie: Orts-Maschennetz	31
Abb. 4.2	Darstellung des Neutronenflusses in der Ortszelle i	33
Abb. 4.3	1-d sphärische Geometrie. Die Reihenfolge der diskreten Richtungen bei der $S_6$ -Rechnung	36
Abb. 4.4	(r,z)-Geometrie: Die Reihenfolge der diskreten Richtungen bei der $S_6$ -Rechnung	37
Abb. 4.5	Strukturdiagramm des gesamten Programmsystems	41
Abb. 4.6	Strukturdiagramm der Querschnittsberechnung	42
Abb. 5.1	Blei-Kugel mit der 14-MeV-Neutronenquelle: Aufbau der experimentellen Anlage, schematisch	44
Abb. 5.2	TUD-Experiment: Gemessene Neutronen-Leckagespektren	45
Abb. 5.3	TUD-Experiment: Das zum Vergleich mit der Rechnung ermittelte Spektrum	46
Abb. 5.4	TUD-Experiment: Geometrisches Modell der experimentellen Anlage in eindimensionaler sphärischer Geometrie	47
Abb. 5.5	Zusammenhang zwischen den Winkeln $\vartheta$ und $\alpha$ in eindimensionaler sphärischer Geometrie	49
Abb. 5.6	TUD-Experiment: Das berechnete Leakage-Spektrum	52
Abb. 5.7.	TUD-Experiment: Vergleich des berechneten Leakage-Spektrums mit dem gemessenen Spektrum	53
Abb. 5.8	TUD-Experiment: Vergleich des berechneten Leakage-Spektrums mit dem gemessenen Spektrum in einer logarithmischen Energieskala	54
Abb. 5.9	TUD-Experiment: Die mit dem ONETRAN-Programm berechneten Leakage-Spektren	55
Abb. 6.1	KIM-Experiment: Aufbau der experimentellen Anordnung, schematisch	58
Abb. 6.2	KIM-Experiment: Das gemessene Neutronen-Leckagespektrum aus der 5 cm-dicken Beryllium-Kugelschale	59
Abb. 6.3	KIM-Experiment: Geometrisches Modell der experimentellen Anordnung in der eindimensionalen sphärischen Geometrie	60

Abb. 6.4	KIM-Experiment: Vergleich zwischen berechnetem und gemessenem Leakage-Spektrum	62
Abb. 6.5	Beryllium: Verlauf der $\sigma_t$ und $\sigma_{el}$ -Wirkungsquerschnitte	64
Abb. 6.6	KIM-Experiment: Vergleich der mit dem ONETRAN-Programm berechneten Leakage-Spektren	64
Abb. 7.1	JAERI-Experiment: Aufbau der Beryllium-Schicht	65
Abb. 7.2	JAERI-Experiment: Aufbau der Versuchsanlage, schematisch	66
Abb. 7.3	JAERI-Experiment: Gemessene Energieverteilung der Quellneutronen	67
Abb. 7.4	JAERI-Experiment: Die gemessenen Leakage-Spektren an der Oberfläche der Beryllium-Schicht	68
Abb. 7.5	JAERI-Experiment: das Modell der experimentellen Anlage in der (r,z)-Geometrie	69
Abb. 7.6	JAERI-Experiment: Darstellung des Quellspektrums bei der Transportrechnung	70
Abb. 7.7	(r,z)-Geometrie: Zusammenhang zwischen den Meßwinkeln $\Theta$ und der bei der Transportrechnung benutzten Richtungskoordinaten	73
Abb. 7.8	JAERI-Experiment: Vergleich zwischen berechnetem und gemessenem Leakage-Spektrum	74
Abb. 7.9	JAERI-Experiment: Vergleich zwischen den mit TWOTRAN- sowie ANTRA2-Programm berechneten Leakagespektren und den Meßergebnissen	75
Abb. 7.10	JAERI-Experiment: Vergleich zwischen den mit dem MCNP-Programm berechneten Leakage-Spektren und den Meßwerten	77
Abb. 7.11	JAERI-Experiment: Das Verhältnis zwischen den MCNP-Ergebnissen und den Meßergebnissen in einzelnen Energiebereichen	78

## Tabellenverzeichnis

Tab. 3.1	Bestimmungsgrößen des Gauß-Legendreschen Quadraturesatzes: Komponenten $\xi_i$ .	26
Tab. 3.2	Bestimmungsgrößen des Gauß-Tschebysheffschen Quadraturesatzes: Komponenten $\phi_{l,n}$ .	27
Tab. 3.3	Bestimmungsgrößen des Gauß-Legendreschen Quadraturesatzes: Gewichte des Niveaus	27
Tab. 5.1	TUD-Experiment: Fehler der gemessenen Leckage-Spektren	45
Tab. 5.2	TUD-Experiment: Partielle und totale Neutronenmultiplikation in der Bleikugel	47
Tab. 5.3	Gruppenstruktur der GAM-II-Bibliothek	51
Tab. 5.4	TUD-Experiment: Vergleich der anhand verschiedener Programme und Kerndaten berechneten Neutronenmultiplikation mit den experimentell ermittelten Werten	53
Tab. 6.1	KIM-Experiment: Wichtigste Parameter der untersuchten Anordnungen	58
Tab. 6.2	KIM-Experiment: Die gesamten Fehler der Meßgröße $N(u)$	59
Tab. 6.3	KIM-Experiment: Totale Neutronenmultiplikation für drei untersuchte Anordnungen	60
Tab. 6.4	KIM-Experiment: Partielle Neutronenmultiplikation in der 5 cm-dicken Beryllium-Kugelschale	60
Tab. 6.5	KIM-Experiment: Vergleich der berechneten partiellen Neutronenmultiplikation für die 5 cm dicke Beryllium- Kugelschale mit dem experimentell erhaltenen Wert	61
Tab. 6.6	KIM-Experiment: Vergleich der berechneten totalen Neutronenmultiplikation für Beryllium-Kugelschalen von verschiedener Dicke mit den experimentell erhaltenen Werten	62
Tab. 7.1	JAERI-Experiment: Systematische Fehler der gemessenen Leckage-Spektren	69
Tab. 7.2	Gruppenstruktur der LANL-Bibliothek	71
Tab. B.1	ONETRAN: Definition der in den Gln.(B.1)-(B.3) auftretenden geometrischen Parameter	86

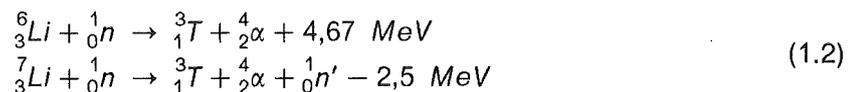
## 1. Einleitung.

Für die Umwandlung von Kernenergie in Wärmeenergie gibt es zwei Möglichkeiten: Kernspaltung und Kernfusion. Während man Bau und Betrieb von Spaltungsreaktoren weitgehend beherrscht, steht der Fusionsreaktor noch vor der Schwelle zum technologischen Durchbruch. Neben grundsätzlichen Problemen der Plasmaphysik sind beträchtliche reaktortechnische Aufgaben zu lösen. Zur Klärung dieser Fragen sind im internationalen Maßstab umfangreiche Forschungs- und Technologieprogramme im Gange.

In dem durch die Europäische Gemeinschaft koordinierten Programm "Kernfusion" wird das Ziel verfolgt, einen experimentellen Fusionsreaktor nach dem Tokamakprinzip zu bauen und alle hierfür wesentlichen Reaktorkomponenten zu erproben. Für den projektierten Testreaktor NET (Next European Torus [1]), dessen wesentliches Merkmal die Erzeugung und Aufrechterhaltung eines thermonuklear brennenden Plasmas sein wird, ist die Anwendung der (D-T)-Reaktion



wegen ihrer hohen Reaktionsrate bei vergleichsweise niedriger Plasmatemperatur angestrebt. Deuterium (D) ist reichlich im Wasser vorhanden. Tritium (T) ist radioaktiv (Halbwertszeit: 12,3 Jahre) und wird im Reaktor künstlich nacherzeugt. Dies kann durch Neutronenabsorption-Reaktionen in Lithium geschehen:

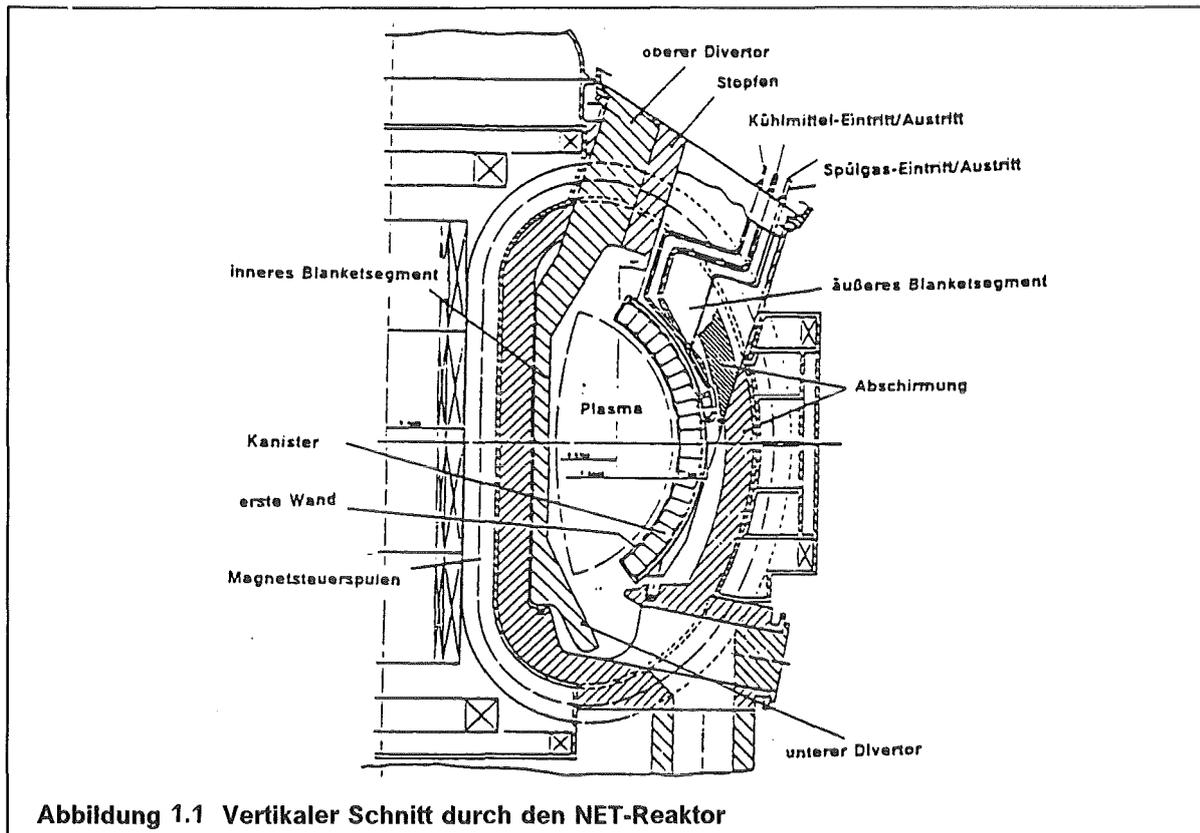


Hierzu wird das entstandene Fusionsneutron genutzt.

Die bei der (D-T)-Reaktion entstandene Energie wird im Plasma in Form der kinetischen Energie der Fusionsprodukte  $n$  und  $\alpha$  frei. Das  $\alpha$ -Teilchen wird aufgrund seiner Ladung und seiner Geschwindigkeit durch Magnetfelder im Plasma gehalten. Seine kinetische Energie gleicht dort die durch die Strahlung verursachten Energieverluste aus. Das ungeladene Neutron hingegen kann das Plasma ungehindert verlassen und trägt somit den größten Teil (ca. 80 %) der freigewordenen Energie fort. Diese kinetische Energie muß in Wärmeenergie umgewandelt werden. Gleichzeitig aber muß die energiereiche Neutronenstrahlung wirksam abgeschirmt werden.

Dazu umgibt man den Plasmabereich (z.B. Plasma-Torus) mit einem sogenannten Blanket. Das ist ein Mantel von ca. 60-80 cm Dicke je nach Auslegung des Reaktors (s. Abb.1.1). Das Blanket hat drei wichtige Aufgaben zu erfüllen, nämlich das Erbrüten von Tritium, welches gemäß den Reaktionen (1.2) erfolgt, die Abbremsung der Neutronen und die Weitergabe der dabei entstandenen Wärme. Daneben schirmt das Blanket durch die Absorption der Neutronen die es umschließenden Magnetspulen teilweise ab.

Da viele Funktionen, die das Blanket ausübt, auf kernphysikalischen Wechselwirkungen zwischen den Neutronen und den Atomkernen der Blanket-Materialien beruhen, sind die physikalischen Auslegungsparameter des Blankets durch neutronenphysikalische Analyse festzulegen. Diese Analyse führt zur Ermittlung der Neutronen- und Gammaflußdichten. Daraus können die wichtigen Reaktionsraten ( wie z.B. die Tritiumbrutrate und Strahlenschädigung) sowie die örtliche Verteilung der Wärmequellen berechnet werden. Dies gehört zu den wichtigsten Aufgaben der Neutronenphysik im Hinblick auf Anwendungen in der Fusionstechnologie.



Die energetische und räumliche Verteilung der Neutronen im Blanket wird durch die Boltzmannsche Gleichung für den Neutronentransport beschrieben. Bei der methodischen Behandlung der Boltzmann-Gleichung ist jedoch zu beachten, daß die in der (D-T)-Reaktion freigesetzten Neutronen eine höhere Energie als die Spaltneutronen besitzen, und zwar im Mittel 14,1 MeV gegenüber im Mittel rund 2 MeV bei der Kernspaltung. Den Bezugsrahmen bei der Neutronentransportrechnung stellt das Laborsystem dar. In diesem System ist die Streuung von schnellen Neutronen an Kernen aller Art anisotrop, bei leichten<sup>1</sup> Kernen bereits die Streuung von langsamen Neutronen. Im Blanket sind im Hinblick auf das Brüten von Tritium große Mengen von leichten Kernen (wie <sup>6</sup>Li, <sup>7</sup>Li) vorhanden. Sie tragen zur Anisotropie der Neutronenstreuung mit bevorzugter Vorwärtsrichtung wesentlich bei. Außerdem vergrößert sich die mittlere freie Weglänge der hochenergetischen Neutronen bis auf 10-15 cm. Somit können die im Plasma, also außerhalb des Blankets erzeugten Neutronen tief in das Blanket eindringen. Durch den über den inneren Blanketrand eintretenden 14,1-MeV-Neutronenstrom entsteht im Blanket eine stark anisotrope Neutronenflußdichte mit ausgeprägter Vorwärtskomponente.

Im Blanket eines Fusionsreaktors treten häufig (n,2n)-Prozesse auf, da hier Beryllium oder Blei als Neutronenvervielfacher benutzt wird ([2], [3]). Zur möglichst genauen Beschreibung der korrelierten Energie-Winkelverteilungen der Sekundärneutronen aus den (n,2n)-Reaktionen sind doppelt-differentielle, nämlich energie- und winkelabhängige Neutronenemissionsquerschnitte erforderlich.

Da sich die Boltzmann-Gleichung nur in wenigen einfachen Ausnahmefällen exakt lösen läßt, ist man auf numerische Lösungsmethoden angewiesen. Zu nennen sind die deterministischen Verfahren (z.B. mit diskreten Ordinaten) sowie die probabilistischen

<sup>1</sup> ein leichter Kern ist durch seine kleine Nukleonenzahl A ( $A \leq 25$ ) gekennzeichnet

Monte-Carlo-Verfahren. Diese Verfahren liegen einer Reihe von Rechenprogrammen zugrunde, die für die praktische Durchführung der Neutronentransportrechnungen zur Verfügung stehen. Dazu zählen Programme wie ANISN und ONETRAN, welche die Behandlung des eindimensionalen Problems, sei es in ebener, zylindrischer oder Kugel-Geometrie erlauben, sowie die speziell für zweidimensionale Rechnungen entwickelten Programme DOT und TWOTRAN. Dreidimensionale Rechnungen erfolgen meistens mit dem Monte-Carlo-Verfahren. Auf diesem Verfahren beruhen die Programme MORSE und MCNP. Die Benutzung aller o.g. Rechenprogramme erfordert die Verfügbarkeit von Datenbibliotheken, in welchen die Wirkungsquerschnitte der interessierenden Materialien in Abhängigkeit von der Neutronenenergie gespeichert sind. Für die neutronenphysikalische Analyse der herkömmlichen Spaltungsreaktoren wurde z.B. routinemäßig die Kerndaten-Bibliothek ENDF-B/IV [4] verwendet.

Eine direkte Übertragung der Rechenmethodik, d.h. der Rechenprogramme mit den zugehörigen Datensätzen, auf die Neutronentransportrechnungen in Fusionsreaktoren hat jedoch zu teilweise voneinander abweichenden Ergebnissen geführt. Es wurde daher notwendig, die bisher benutzten Lösungsmethoden sowie die zusammen mit den Programmen verwendeten Kerndaten an integralen, bei der Rechnung einfach darstellbaren Experimenten zu erproben ([5], [6]). Eine Gegenüberstellung der berechneten und der gemessenen integralen Werten hat bestätigt, daß die Berechnung des Neutronentransports im höheren Energiebereich (d.i. 10-15 MeV) mit Unsicherheiten behaftet war ([7], [8],[9]). Dies wurde einerseits auf Unzulänglichkeiten in den Kerndaten, andererseits auf die benutzten Rechenverfahren zurückgeführt mit der Begründung, daß beide - Kerndaten und Verfahren - die Anisotropie der Neutronenstreuung unzureichend berücksichtigten [10].

Es ist demnach zu klären, ob das zur Darstellung des Streukerns in der Neutronentransportgleichung bisher verwendete Verfahren, das darin besteht, den Streukern durch eine meist nach drei oder fünf Gliedern abgebrochene Reihe von Legendre-Polynomen als Funktion des Streuwinkels zu entwickeln ( sog.  $P_L$ -Darstellung), für die neutronenphysikalische Analyse von Fusionsreaktoren ausreicht. Die Energieabhängigkeit wird dabei in Multigruppen-Näherung behandelt. In vielen für die fusionsspezifischen Anwendungen wichtigen Fällen erfolgt die Neutronenstreuung, wie bereits erwähnt, stark anisotrop, vorzugsweise in Vorwärtsrichtung. Eine entsprechend gute Approximation der Winkelabhängigkeit des Streukerns im Rahmen der  $P_L$ -Darstellung würde die Verwendung vieler Reihenglieder (man schätzt mehr als acht [11]) bei der Rechnung notwendig machen, da die Konvergenz der Streukernentwicklung langsam ist. Ein zu früher Abbruch der Reihe würde zu einer Darstellung führen, die unphysikalische Oszillationen aufweist und die über große Streuwinkelbereiche negative Werte annimmt. Der Einsatz der Streukernentwicklung bis zur Ordnung  $L > 8$  bei der Transportrechnung würde eine aufwendige Vorbereitung der Streumatrizen höherer Ordnung, umfangreichen Speicherplatzbedarf und lange Rechenzeiten erfordern.

Eine wesentliche Verbesserung der Behandlung der anisotropen Streuung in Neutronentransportverfahren wurde von Takahashi et. al. [12] vorgeschlagen und für eindimensionale Kugelgeometrie überprüft. Kennzeichen dieses Verfahrens ist die strenge Berücksichtigung der anisotropen Streuung durch direkte Verwendung der doppelt-differentiellen Neutronenemissionsquerschnitte zur Beschreibung der Winkel- und Energieverteilungen der Sekundärneutronen und durch eine exakte Darstellung des Streutermes in der Neutronentransportgleichung, sog.  $I^*$ -Methode. Diese Methode gewährleistet eine näherungsfreie Behandlung des Streukerns in der Transportrechnung durch den direkten Einsatz der doppelt-differentiellen Wirkungsquerschnitte bei der numerischen Berechnung des Streuintegrals. Die numerische Lösung der Neutronentransportgleichung

chung wurde dabei mit dem für Reaktorrechnungen bewährten  $S_N$ -Verfahren vorgenommen.

Das auf diesem Verfahren basierende  $S_N$ - Multigruppen-Transportprogramm NITRAN (ein Akronym für "Non-Isotropic TRANsport") wurde für eindimensionale sphärische Geometrie entwickelt [13] und bei der Berechnung des Neutronentransports in Kugeln aus Lithium, Beryllium und Kohlenstoff mit einer zentralen 14 MeV-Neutronenquelle angewandt. Allen Rechnungen wurde der ENDF/B-IV Datensatz zugrunde gelegt. Für jede Kugel wurden zwei Berechnungen durchgeführt, wobei die Winkelverteilung der Neutronen nach der inelastischen Streuung (an Be-, Li- und C-Atomen) bzw. der beim  $(n,2n)$ -Prozeß in Be entstehenden Neutronen in einer Rechnung als isotrop im Laborsystem, in der anderen mit strenger Berücksichtigung der Anisotropie angesetzt wurde. Die Analyse der Ergebnisse hat bestätigt, daß die Anisotropie der Winkelverteilungen der Sekundärneutronen für kontinuierinelastische Streuung einen deutlichen Effekt auf die berechneten Neutronenspektren hat ([14], [15]). Der Einfluß der verbesserten Beschreibung der Energie-Winkelverteilungen der in der  $(n,2n)$ -Reaktion emittierten Neutronen auf die berechnete Neutronenmultiplikation in Beryllium-Kugeln verschiedener Dicke (von 2 bis 100 cm) wurde ebenfalls nachgewiesen. Im Anwendungsbereich der Spaltungsreaktoren wurden die Winkelverteilungen der Neutronen nach der kontinuierinelastischen Streuung üblicherweise als isotrop im Laborsystem behandelt.

#### **Zielsetzung für diese Arbeit**

Aufgrund der zu Tage getretenen Mängel sowohl des  $P_L$ -Verfahrens als auch der benutzten Kerndaten wurde speziell für die Bedürfnisse der Fusionsreaktorenentwicklung vorgeschlagen, die Kerndatenbibliotheken, die künftig für Fusionsreaktor-Blanket-Rechnungen benutzt werden sollen, mit gemessenen doppelt-differentiellen Wirkungsquerschnitten für alle Reaktionsarten auszustatten. Damit wird die experimentell gefundene Anisotropie der Streuung im Rahmen der Meßgenauigkeit direkt in die neutronenphysikalische Analyse eingebracht. Man vermeidet so die übliche abgebrochene Legendre-Reihenentwicklung des Streukerns. Die doppelt-differentiellen Neutronenemissionsquerschnitte, welche die korrelierte Energie-Winkelabhängigkeit exakt wiedergeben, sollen weiterhin bei der Transportrechnung auf konsistente Weise verwendet werden, um zu gewährleisten, daß die gewonnene Information bei der Rechnung nicht verloren geht. Dieses Ziel erfordert jedoch die Erstellung von geeigneten Transportprogrammen, die in allen wichtigen Geometrien (Plattengeometrie, Kugelgeometrie, Zylindergeometrie) eingesetzt werden können. Das NITRAN-Programm eignet sich für diesen Zweck nicht, weil es allein auf kugelsymmetrische Anordnungen beschränkt ist. Darüberhinaus ist die im NITRAN-Code benutzte Lösungsstrategie der gesamten Neutronentransportgleichung vereinfacht und dadurch auf andere Geometrien nicht übertragbar.

Bei allen Untersuchungen zur Bestimmung der Neutronenverteilung in den Blankets von Fusionsreaktoren hat sich daher das Interesse der strengen Berücksichtigung der Anisotropie der Neutronenstreuung zugewandt. Angesichts der Unzulänglichkeiten der verfügbaren Kerndaten in dem für die neutronenphysikalische Analyse der Fusionsreaktoren von 10 auf 15 MeV erweiterten Anwendungsbereich verstärkten sich die Bestrebungen, ein gut ausgestattetes Europäisches Fusionsdaten-File (EFF-1) zu erstellen, das die neuesten Auswertungen enthält [16]. Zur Qualifizierung der Daten ist eine Reihe von Experimenten durchgeführt worden; zu nennen sind dabei die FNS/JAERI-Plattenexperimente [17] sowie die Kugelschalenexperimente am Kurchatov-Institut in Moskau [18] und an der Universität Dresden [19]. Ergebnisse dieser Messungen eignen sich als Basis für eine detaillierte Überprüfung der Kerndaten, da hier die Energie-Winkelverteilungen der Sekundärneutronen empfindlich eingehen.

Ebenso wichtig für die Nachrechnung der Experimente und folglich für die Genauigkeit der daraus gewonnenen physikalischen Aussagen ist eine konsistente und zuverlässige Behandlung der Anisotropie der Neutronenstreuung bei der Transportrechnung.

Um dieses Ziel zu erreichen wird im Rahmen dieser Arbeit in erster Linie untersucht, ob sich die strenge  $I^*$ -Methode auf alle unter praktischen Gesichtspunkten wichtigen Geometrien erweitern läßt. Dies stellt den ersten notwendigen Schritt dar, der eine dem Problem angemessene methodische Behandlung der Transportgleichung, sei es in ein-, zwei- oder dreidimensionalen Geometrien sicherstellt. Der zweite Schritt ist die Entwicklung von geeigneten numerischen Verfahren auf der Grundlage der  $I^*$ -Methode. Nach Möglichkeit sollten diese Verfahren in existierende Rechenprogramme eingearbeitet werden. Ein Weg ist, das in diesen Programmen bereits benutzte  $P_L$ -Verfahren durch die neuen Verfahren zu ersetzen. Aus dieser Zielvorgabe leitet sich die Forderung ab, die neuen Verfahren von vornherein konsistent mit allen in dem Transportprogramm angewendeten numerischen Näherungsmethoden zu gestalten. Die neu erstellten Rechenprogramme sollen zunächst als Referenzprogramme zur Überprüfung der Daten herangezogen werden. Die Kugelschalenexperimente lassen sich in eindimensionaler sphärischer Geometrie einfach modellieren, die Plattenexperimente hingegen erfordern zu ihrer Abbildung ein Modell in zweidimensionaler  $(r,z)$ -Geometrie. Daher ist die Bereitstellung von Rechenprogrammen zur Durchführung der Transportrechnungen in ein- und zwei-dimensionalen Geometrien unerlässlich.

Solche neuen Programme, welche die Anisotropie streng behandeln, sind vor allem dazu geeignet, die Genauigkeit herkömmlicher Verfahren ( $S_N$ ,  $P_L$ ) im Hinblick auf die Ordnung  $L$  der  $P_L$ -Approximation zu bewerten.

Abschließend seien die mathematischen und physikalischen Aufgabenstellungen nochmals zusammengestellt:

1. Erstellung eines Programms (ANTRA1) für Neutronentransportrechnungen mit strenger Berücksichtigung der anisotropen Streuung in eindimensionaler sphärischer und ebener Geometrie durch den Einbau des  $I^*$ -Verfahrens in das Transportprogramm ONETRAN.
2. Anwendung des ANTRA1-Programms zur Verifizierung von Kerndaten, die in dem Europäischen Fusionsdaten-File (EFF-1) zusammengestellt wurden.
3. Erweiterung der  $I^*$ -Methode für die Anwendungen in eindimensionaler zylindrischer und zweidimensionaler  $(r,z)$ -Geometrie.
4. Entwicklung eines Verfahrens zur numerischen Berechnung des Streuintegrals in der strengen Darstellung für die unter 3. erwähnten Geometrien.
5. Einführung des neuen Verfahrens in das zweidimensionale  $S_N$ -Transportprogramm TWOTRAN.
6. Entwicklung eines neuen Berechnungsschemas für den Streuterm.
7. Erstellung des Programms ANTRA2 als Referenzprogramm für zweidimensionale Transportprobleme.
8. Verifizierung von ANTRA2 an Benchmark-Experimenten.
9. Überprüfung der Genauigkeit herkömmlicher  $P_L$ -Verfahren, wie sie in den Programmen ONETRAN und TWOTRAN implementiert sind, bezüglich der Darstellung der Anisotropie.

10. Untersuchung des Einflusses der Näherungen des Streukerns auf die Ergebnisse und Vergleich mit Experimenten.

Auf der Grundlage der neu ausgearbeiteten, in den folgenden Kapiteln vorgestellten Verbesserungen der Theorie wurde das strenge Rechenverfahren in allen erwähnten Geometrien entwickelt. Die dabei benutzte Diskretisierungstechnik für den Streuterm wird ausführlich beschrieben. Die neuen Transportprogramme ANTRA1 und ANTRA2 sind auf der Rechanlage des Kernforschungszentrums implementiert.

## 2. Methodische Behandlung der Boltzmann-Gleichung für den Neutronentransport bei exakter Berücksichtigung der anisotropen Streuung

Die Notwendigkeit einer strenger Behandlung der anisotropen Streuung bei der Bestimmung der Neutronenverteilung in einem physikalischen System ( wie z. B. das Blanket eines Fusionsreaktors) zieht den Einsatz der Transportgleichung bei der Berechnung nach sich. In diesem Kapitel wird die in der vorliegenden Untersuchung benutzte Darstellung des Streutermes in der Boltzmann- Gleichung (BG) für den Neutronentransport hergeleitet. Hierbei wird erstmals eine wesentliche Verbesserung der durch eine Arbeit von Takahashi [12] angeregten Methode ( sog. I\*-Methode ) in eindimensionaler zylindrischer Geometrie sowie in zwei- und dreidimensionalen Geometrien erzielt.

### 2.1 Analytische Form der Boltzmann-Gleichung für den Neutronentransport.

Die Orts-, Energie- und Winkelverteilung von Neutronen in einer Anordnung bestimmter Materialzusammensetzung und vorgegebener Geometrie ist durch die stationäre BG mit den zugehörigen Randbedingungen beschrieben. Um die Behandlung der Anisotropie der Neutronenstreuung darzustellen, genügt es, die BG für eine homogene Materialzone zu betrachten:

$$\vec{\Omega} \nabla \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) + \Sigma_t(E) \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d\vec{\Omega}' \Sigma_s(E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \psi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') + \frac{\chi(E)}{4\pi} \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d\vec{\Omega}' v(E') \Sigma_f(E') \psi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') + q_{ext}(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \quad (2.1)$$

E	Neutronenenergie
$\psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$	Neutronenfluß
$\vec{r}$	Ort der Neutronen
$\vec{\Omega}$	Flugrichtungseinheitsvektor
$\Sigma_t(E)$	totaler Neutronenwirkungsquerschnitt bei der Energie E
$\Sigma_s(E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega})$	Streukern im Laborsystem, d.i. der Übergangsquerschnitt mit $E', \vec{\Omega}'$ und $E, \vec{\Omega}$ als Energie und Flugrichtung der Neutronen vor bzw. nach der Reaktion (elastische und inelastische Streuung, (n,2n)-, (n,3n)-Prozesse usw.)
$\chi(E)$	Spaltspektrum der Neutronen
$v(E')$	mittlere Anzahl der pro Spaltung erzeugten Spaltneutronen
$\Sigma_f(E')$	Spaltwirkungsquerschnitt
$q_{ext}(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$	externe Neutronenquelle

Die Transportgleichung stellt die Neutronenbilanz (d.h. die Differenz zwischen Neutronengewinnen und Verlusten) für ein infinitesimales Phasenelement  $dE d\Omega dV$  auf. Die Verluste der Neutronen erfolgen durch Diffusion aus dem Phasenraumelement, durch Streuung aus dem Energieintervall und dem Raumwinkelelement oder durch Absorption. Gewinne entstehen durch Einstreuung der Neutronen aus anderen Richtungen und Energieintervallen aber auch durch Beiträge der Spalt- sowie der externen Quelle.

Ist das betrachtete Reaktorsystem frei von äußeren Quellen ( $q_{ext} = 0$ ), so wird Gl.(2.1) mit einem formal multiplikativ am Spaltterm eingebrachten Faktor  $1/k$  zu einer Eigenwertgleichung. Es läßt sich zeigen, daß der größte Eigenwert mit zugehörigen nichtnegativen Lösungen für die Eigenfunktionen (Flüsse) der homogenen Gleichung mit dem effektiven Multiplikationsfaktor des Systems identisch ist.

Da in den Reaktorrechnungen die Anordnungen mit heterogener Materialzusammensetzung häufig auftreten, ist hierfür die Neutronenflußdichte  $\psi(\vec{r}, E, \Omega)$  in jeweils homogenen Bereichen zu berechnen und über Randbedingungen mit der Neutronenflußdichte der benachbarten Bereiche zu verknüpfen.

Für die Bestimmung der Neutronenflußdichte  $\psi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}')$  aus der BG wird eine Darstellung des Streukerns  $\Sigma_s(E' \rightarrow E, \Omega' \rightarrow \Omega)$  gesucht, die die anisotrope Streuung von Neutronen aller Energien streng behandelt, d.h. die frei von Näherungen wie z.B. abgebrochenen Legendre-Reihenentwicklungen ist. Hierbei ist zu beachten, daß im Rahmen dieser Darstellung sowohl die Anisotropie der elastisch und inelastisch gestreuten Neutronen als auch die anisotrope Winkelverteilung der Sekundärneutronen aus den  $(n,2n)$ ,  $(n,3n)$ -Prozesse usw. berücksichtigt werden muß. Das Interesse gilt also allen neutronemittierenden Reaktionen.

## 2.2 Darstellung des Streutermes: die I\*-Methode.

In einem homogenen und isotropen Medium hängt der Übergangsquerschnitt nicht explizit von der Flugrichtung des Neutrons vor dem Stoß  $\Omega'$  und der Flugrichtung nach dem Stoß  $\Omega$  ab, sondern lediglich vom Kosinus  $\mu_L$  des Winkels  $\vartheta_L$  zwischen den Richtungen  $\Omega'$  und  $\Omega$  ( $\mu_L = \cos \vartheta_L = \Omega \cdot \Omega'$ ). Es gilt

$$\Sigma_s(E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) = \frac{1}{2\pi} \Sigma_s(E' \rightarrow E, \mu_L) \quad (2.2)$$

Der Zusammenhang zwischen  $\mu_L$  und den Winkeln, die  $\vec{\Omega}$  und  $\vec{\Omega}'$  festlegen, ist aus Abb.2.1 zu entnehmen.

Bei der I\*-Methode verzichtet man auf die Entwicklung der Winkelabhängigkeit des Streukerns nach Legendre-Polynomen. Dies führt zu einer speziellen Darstellung des Streutermes in der Gl. (2.1), der durch

$$q_s(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d\vec{\Omega}' \Sigma_s(E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \psi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') \quad (2.3)$$

gegeben ist.

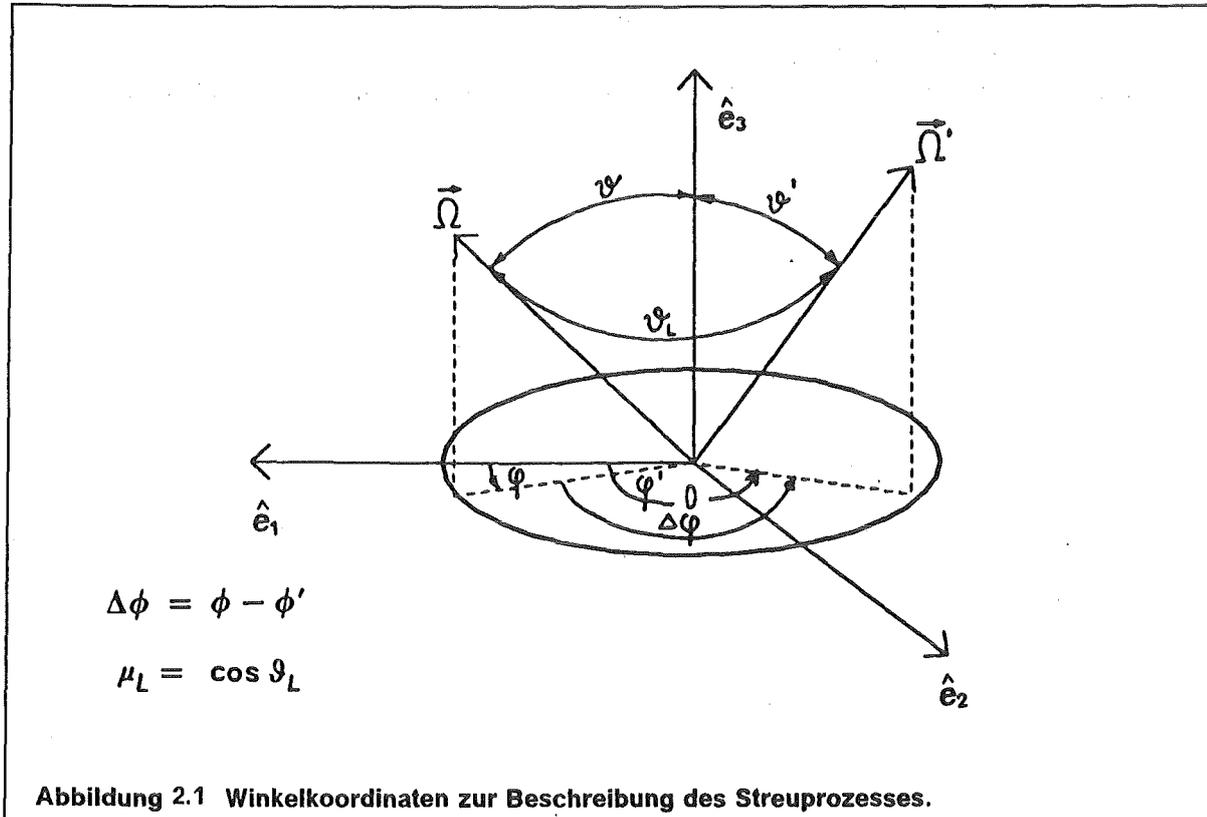
Der differentielle Raumwinkelbereich  $d\vec{\Omega}'$  ist als Flächenelement der Einheitskugel zu verstehen, d.h. es ist

$$d\vec{\Omega}' = d\mu' d\phi'$$

und

$$\int_{4\pi} d\vec{\Omega}' = \int_{-1}^1 d\mu' \int_0^{2\pi} d\phi'$$

dabei steht  $\mu'$  für den Kosinus des Polarwinkels  $\vartheta'$  und  $\phi'$  für den Azimutwinkel des Einheitsvektors  $\vec{\Omega}'$  ( $\vartheta'$  und  $\phi'$  sind die Kugelkoordinaten des Vektors  $\vec{\Omega}'$ ).



Setzen wir Gl. (2.2) in Gl. (2.3) ein, so folgt

$$q_s(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty \int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} \Sigma_s(E' \rightarrow E, \mu_L) \psi(\vec{r}, E', \mu', \phi') d\phi' d\mu' dE' \quad (2.4)$$

Die Winkelabhängigkeit des Übergangsquerschnitts  $\Sigma_s(E' \rightarrow E, \mu_L)$  kann bei der Integration über  $\vec{\Omega}'$  streng berücksichtigt werden, indem man den Kosinus des Streuwinkels im Laborsystem  $\mu_L$  als Integrationsvariable in der Formel (2.4) direkt verwendet. Zur Umformung von Gl. (2.4) wird zunächst der Richtungseinheitsvektor  $\vec{\Omega}$  durch seine Komponenten in sphärischer Geometrie ausgedrückt:

$$\vec{\Omega} = (\sqrt{1-\mu^2} \cos \phi, \sqrt{1-\mu^2} \sin \phi, \mu) \quad \text{mit } \mu = \cos \vartheta \quad (2.5)$$

Für den Kosinus des Winkels zwischen den Richtungen  $\vec{\Omega}$  und  $\vec{\Omega}'$ ,  $\cos \vartheta(\vec{\Omega}, \vec{\Omega}') = \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}'$ , berechnet man mit  $\vec{\Omega}' = (\sqrt{1-\mu'^2} \cos \phi', \sqrt{1-\mu'^2} \sin \phi', \mu')$

$$\mu_L = \mu\mu' + \sqrt{1-\mu^2} \sqrt{1-\mu'^2} \cos(\phi - \phi') \quad (2.6)$$

Mit Hilfe des räumlichen Kosinussatzes Gl. (2.6) läßt sich  $\phi'$  aus der funktionalen Abhängigkeit  $\mu_L = f(\phi')$  durch die Umkehrung der Funktion  $f$  definieren. Dabei muß beachtet werden, daß die inverse Funktion

$$\phi' = \phi - \arccos \frac{\mu_L - \mu' \mu}{\sqrt{1 - \mu^2} \sqrt{1 - \mu'^2}}$$

eine mehrdeutige Funktion der Variable  $\mu_L$  wird, weil die inverse trigonometrische Funktion  $\arccos$  in dem Bereich  $[-1, 1]$  mehrdeutig ist. Genauer, einem gegebenen Wert von  $\mu_L$  werden zwei Werte für den Winkel  $\phi'$ ,  $\phi'_1 \in [\phi, \phi + \pi]$  und  $\phi'_2 \in [\phi + \pi, \phi + 2\pi]$  entsprechen. Nehmen wir nur die Hauptwerte  $\omega$  der Funktion  $\arccos$  in Betracht so können wir schreiben

$$\phi'_1 = \phi + \omega \quad (2.7)$$

$$\phi'_2 = \phi - \omega \quad (2.8)$$

wobei  $\omega$  durch

$$\omega = \arccos \frac{\mu_L - \mu' \mu}{\sqrt{1 - \mu^2} \sqrt{1 - \mu'^2}} \quad (2.9)$$

definiert ist und als Hauptwert dem Intervall  $[0, \pi]$  gehört. Daraus folgt:  $\phi'_1(\mu_L)$  und  $\phi'_2(\mu_L)$  sind wohldefinierte Funktionen von  $[\beta_1, \beta_2]$  auf  $[\phi, \phi + \pi]$  bzw.  $[\phi + \pi, \phi + 2\pi]$ , wobei

$$\beta_1 = \mu \mu' - \sqrt{1 - \mu^2} \sqrt{1 - \mu'^2} \quad (2.10)$$

und

$$\beta_2 = \mu \mu' + \sqrt{1 - \mu^2} \sqrt{1 - \mu'^2} \quad (2.11)$$

Für das innere Integral über  $\phi'$  in der Gl. (2.4) gilt aufgrund der Periodizität des Integranden

$$q_s(\vec{r}, E, \mu, \phi) = \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty \int_{-1}^1 \int_\phi^{\phi+2\pi} \Sigma_s(E' \rightarrow E, \mu_L) \psi(\vec{r}, E', \mu', \phi') d\phi' d\mu' dE' \quad (2.12)$$

für jeden Azimutwinkel  $\phi$ .

Das Integral über  $\phi'$  läßt sich dabei zweckmäßig in zwei Teile aufspalten:

$$\begin{aligned} \int_\phi^{\phi+2\pi} \Sigma_s(E' \rightarrow E, \mu_L) \psi(\vec{r}, E', \mu', \phi') d\phi' &= \int_\phi^{\phi+\pi} \Sigma_s(E' \rightarrow E, \mu_L) \psi(\vec{r}, E', \mu', \phi') d\phi' \\ &+ \int_{\phi+\pi}^{\phi+2\pi} \Sigma_s(E' \rightarrow E, \mu_L) \psi(\vec{r}, E', \mu', \phi') d\phi' \end{aligned} \quad (2.13)$$

In das erste Integral auf der rechten Seite der Gl. (2.13) setzen wir anstelle von  $\phi'$  die neue Veränderliche  $\mu_L$  ein. Nach den Formeln (2.7) und (2.9) gilt sicherlich

$$\frac{d\phi'}{d\mu_L} = \frac{d\omega}{d\mu_L}$$

$$\frac{d\omega}{d\mu_L} = - \frac{1}{\sqrt{1 - \mu^2 - \mu'^2 - \mu_L^2 + 2\mu\mu'\mu_L}} \quad (2.14)$$

Läuft  $\phi'$  von  $\phi$  bis  $\phi + \pi$ , so läuft  $\mu_L$  von  $\beta_2$  bis  $\beta_1$ .

Damit erhalten wir ein Integral der Form:

$$\int_{\phi}^{\phi+\pi} \Sigma_s(E' \rightarrow E, \mu_L) \psi(\vec{r}, E', \mu', \phi') d\phi' = \int_{\beta_2}^{\beta_1} \left( \frac{d\omega}{d\mu_L} \right) \Sigma_s(E' \rightarrow E, \mu_L) \psi(\vec{r}, E', \mu', \phi + \omega) d\mu_L \quad (2.15)$$

Auf analoge Weise kann das zweite Integral auf der rechten Seite der Gl. (2.13) gemäß den Formeln (2.8) und (2.9) umgewandelt werden. In diesem Fall erhalten wir:

$$\int_{\phi+\pi}^{\phi+2\pi} \Sigma_s(E' \rightarrow E, \mu_L) \psi(\vec{r}, E', \mu', \phi') d\phi' = - \int_{\beta_1}^{\beta_2} \left( \frac{d\omega}{d\mu_L} \right) \Sigma_s(E' \rightarrow E, \mu_L) \psi(\vec{r}, E', \mu', \phi - \omega) d\mu_L \quad (2.16)$$

Schließlich ergibt sich mit der Gl. (2.15) und der Gl. (2.16) folgende Darstellung für den Streuterm

$$q_s(\vec{r}, E, \mu, \phi) = \frac{1}{2} \int_0^\infty \int_{-1}^1 \int_{\beta_1}^{\beta_2} \Sigma_s(E' \rightarrow E, \mu_L) I^*(\mu, \mu', \mu_L) [\psi(\vec{r}, E', \mu', \phi + \omega) + \psi(\vec{r}, E', \mu', \phi - \omega)] d\mu_L d\mu' dE' \quad (2.17)$$

Dabei ist die  $I^*$ -Funktion für  $|\mu| \neq 1$ ,  $|\mu'| \neq 1$  und  $|\mu_L| \neq 1$  durch:

$$I^*(\mu, \mu', \mu_L) = \begin{cases} -\frac{1}{\pi} \frac{d\omega}{d\mu_L} & \beta_1 \leq \mu_L \leq \beta_2 \\ 0 & \mu_L < \beta_1 \text{ oder } \mu_L > \beta_2 \end{cases} \quad (2.18)$$

gegeben.

Falls  $|\mu| = 1$ ,  $|\mu'| = 1$  oder  $|\mu_L| = 1$  ist definiert man die  $I^*$ -Funktion durch:

$$I^*(\mu, \mu', \mu_L) = \begin{cases} \delta(\mu\mu' - \mu_L) & \text{wenn } |\mu| = 1, |\mu'| = 1 \\ \delta(\mu - \mu'\mu_L) & \text{wenn } |\mu_L| = 1 \end{cases} \quad (2.19)$$

wobei  $\delta(\dots)$  die Dirac'sche Deltafunktion bezeichnet.

Für  $\omega$  ergibt sich aus der Gl. (2.9) folgende Bestimmungsmöglichkeit

$$\omega = \begin{cases} \pi & \text{wenn } |\mu'| = 1 \text{ oder } \mu_L = -1 \\ 0 & \text{wenn } \mu_L = 1 \text{ oder } |\mu| = 1 \end{cases} \quad (2.20)$$

Die  $I^*$ -Funktion hat folgende Eigenschaften (s. Anhang A)

$$\int_{-1}^1 I^*(\mu, \mu', \mu_L) d\mu = 1$$

$$\int_{-1}^1 I^*(\mu, \mu', \mu_L) d\mu' = 1 \quad (2.21)$$

$$\int_{-1}^1 I^*(\mu, \mu', \mu_L) d\mu_L = 1$$

Gl. (2.17) stellt die exakte Form des Streuterm in beliebiger Geometrie dar. Der Streuterm in der Richtung  $\Omega$  setzt sich demnach zusammen aus den Beiträgen der Neutronen von den Einfallsrichtungen  $\Omega'$ , die nach einem Stoß eine Azimutwinkelverschiebung der Flugrichtungen unterhalb  $\pi$  bzw. oberhalb  $\pi$  aufweisen.

Beim Vergleich der Gl. (2.17) mit der von Takahashi eingeführten Gleichung [13], stellt man fest, daß die Takahashische Darstellung des Streuterm nicht korrekt formuliert ist. Im einzelnen wurden die Streubeiträge von solchen Neutronen, die infolge eines Stoßes aus ihrer ursprünglichen Flugrichtung abgelenkt wurden mit einer Azimut-Drehung von weniger als  $\pi$ , fehlerhaft berücksichtigt. Dies hat eine falsche Auswertung des berechneten Streuterm zur Folge. Es sei hervorgehoben, daß dieser Fehler in der vorliegenden Arbeit erstmals erkannt wurde und durch die korrekte Berechnung des Integrals ( Gl. (2.13) ) verbessert wurde.

### 2.3 Vereinfachungen der Neutronentransportgleichung für eindimensionale Geometrien und zweidimensionale $(r, z)$ -Geometrie bei der $I^*$ -Darstellung des Streuterm

Der Übergang von der Transportgleichung für beliebige Geometrie zu den eindimensionalen Geometrien kann relativ einfach vollzogen werden. Die Neutronenflußdichte hängt in eindimensionalen Geometrien nur von einer Ortskoordinate ab, wie z.B. der Schichtdicke bei einer unendlich ausgedehnten Platte (ebene Geometrie), dem Radius bei der Kugel (sphärische Geometrie) oder dem Radius bei einem unendlich langen Zylinder (zylindrische Geometrie). Gibt man irgendeine Richtung  $\Omega$  vor, so bezieht sich diese in ebener Geometrie auf die plattennormale Richtung (d.h. auf die räumliche x-Achse) und kann durch den Winkel  $\vartheta$  ( $\cos \vartheta = \mu$ ) gekennzeichnet werden (s. Abb.2.2). In sphärischer Geometrie beschreibt man die Richtungsabhängigkeit der Neutronenflußdichte durch den Kosinus des Winkels  $\vartheta$  zwischen  $\Omega$  und dem Ortsvektor  $\vec{r}$

$$\cos \vartheta = \mu = \frac{\vec{\Omega} \cdot \vec{r}}{r} \quad (2.22)$$

Die Bezugsachse ist also nicht raumfest (s. Abb.2.3.). In diesen beiden Geometrien treten, aus Symmetriegründen, alle Neutronenflugrichtungen auf einem Kegel um die Bezugsachse mit dem Öffnungswinkel  $\vartheta$  (Polarwinkel) gleich häufig auf. Die Neutronenflußdichte  $\psi(\vec{r}, E, \Omega)$  hängt in diesen Fällen nicht mehr vom Azimutwinkel ab. An der Stelle von  $\psi(\vec{r}, E, \Omega)$  kann daher die Flußdichte  $\psi(r, E, \mu)$  bzw.  $\psi(x, E, \mu)$  treten, wobei die Beziehung

$$\psi(r, E, \mu) = 2\pi \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$$

gilt. Analog wird

$$q_s(r, E, \mu) = 2\pi q_s(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$$

Unter diesen Voraussetzungen läßt sich die Transportgleichung konsequent vereinfachen [22]. Wir erhalten

$$\begin{aligned} \vec{\Omega} \cdot \nabla \psi(r, E, \mu) + \Sigma_t(E) \psi(r, E, \mu) &= q_s(r, E, \mu) \\ + \frac{\chi(E)}{2} \int_0^\infty dE' \int_{-1}^1 d\mu' v(E') \Sigma_t(E') \psi(r, E', \mu') &+ q_{\text{ext}}(r, E, \mu) \end{aligned} \quad (2.23)$$

In ebener Geometrie ist in der Gl. (2.23) die Ortsvariable  $r$  durch die Ortsvariable  $x$  zu ersetzen.

Für die Richtungsableitung ergibt sich

a) in sphärischer Geometrie

$$\begin{aligned} \vec{\Omega} \cdot \nabla \psi &= \mu \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{1 - \mu^2}{r} \frac{\partial \psi}{\partial \mu} = \\ \frac{\mu}{r^2} \frac{\partial(r^2 \psi)}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial[(1 - \mu^2) \psi]}{\partial \mu} \end{aligned} \quad (2.24)$$

b) in ebener Geometrie

$$\vec{\Omega} \cdot \nabla \psi = \mu \frac{\partial \psi}{\partial x} \quad (2.25)$$

Im folgenden werden wir uns der Kürze halber auf die sphärische Geometrie beschränken. Alle hergeleiteten Formeln gelten auch in ebener Geometrie.

Der Streuterm läßt sich hier wie folgt schreiben

$$\begin{aligned} q_s(r, E, \mu) &= \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty \int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} \Sigma_s(E' \rightarrow E, \mu_L) \psi(r, E', \mu') d\phi' d\mu' dE' \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty \int_{-1}^1 \psi(r, E', \mu') \int_0^{2\pi} \Sigma_s(E' \rightarrow E, \mu_L) d\phi' d\mu' dE' \end{aligned} \quad (2.26)$$

Um das in der Gl. (2.26) auftretende Integral über  $\phi'$  in ein Integral über  $\mu_L$  umzuwandeln wird ähnlich wie mit dem in der Gl. (2.4) enthaltenen Integral über  $\phi'$  verfahren. Nach der Substitution der Integrationsvariable geht Gl. (2.26) über in

$$q_s(r, E, \mu) = \int_0^\infty \int_{-1}^1 \left[ \int_{\beta_1}^{\beta_2} \Sigma_s(E' \rightarrow E, \mu_L) I^*(\mu, \mu', \mu_L) d\mu_L \right] \psi(r, E', \mu') d\mu' dE' \quad (2.27)$$

wobei die  $I^*$ -Funktion gemäß den Formeln (2.18) und (2.19) definiert ist.

Beim zylindersymmetrischen Problem muß  $\vec{\Omega}$  durch zwei Winkel  $\vartheta$  und  $\phi$  beschrieben werden. Den Polarwinkel  $\vartheta$  bezieht man auf die  $z$ -Achse, den Azimutwinkel  $\phi$  auf den Fahrstrahl  $r$  in der  $(x,y)$ -Ebene: ( $\phi = \Theta_\Omega - \Theta$ ) (s. Abb. 2.4). Dabei ist  $\Theta$  der Azimutwinkel

des Fahrstrahls  $r$  bezogen auf die (raumfeste)  $x$ -Achse. Für die Richtungsableitung  $\vec{\Omega} \cdot \nabla \psi$  ergibt sich in diesem Fall [22]

a) in eindimensionaler Geometrie

$$\vec{\Omega} \cdot \nabla \psi(r, v, \phi(\Theta)) = \sin \vartheta \left( \cos \phi \frac{\partial \psi}{\partial r} - \frac{\sin \phi}{r} \frac{\partial \psi}{\partial \phi} \right) \quad (2.28)$$

b) in zweidimensionaler  $(r, z)$ -Geometrie

$$\vec{\Omega} \cdot \nabla \psi(r, v, \phi(\Theta)) = \sin \vartheta \left( \cos \phi \frac{\partial \psi}{\partial r} - \frac{\sin \phi}{r} \frac{\partial \psi}{\partial \phi} \right) + \cos \vartheta \frac{\partial \psi}{\partial z} \quad (2.29)$$

Führt man statt  $\vartheta, \phi$  die Komponenten des Einheitsvektors  $\vec{\Omega}$

$$\xi = \cos \vartheta$$

$$\mu = \sqrt{1 - \xi^2} \cos \phi \quad (2.30)$$

$$\eta = \sqrt{1 - \xi^2} \sin \phi$$

in die Gleichungen (2.28) und (2.29) ein, so folgt

a) in eindimensionaler Geometrie

$$\vec{\Omega} \cdot \nabla \psi = \mu \frac{\partial \psi}{\partial r} - \frac{\eta}{r} \frac{\partial \psi}{\partial \phi} \quad (2.31)$$

b) in zweidimensionaler Geometrie

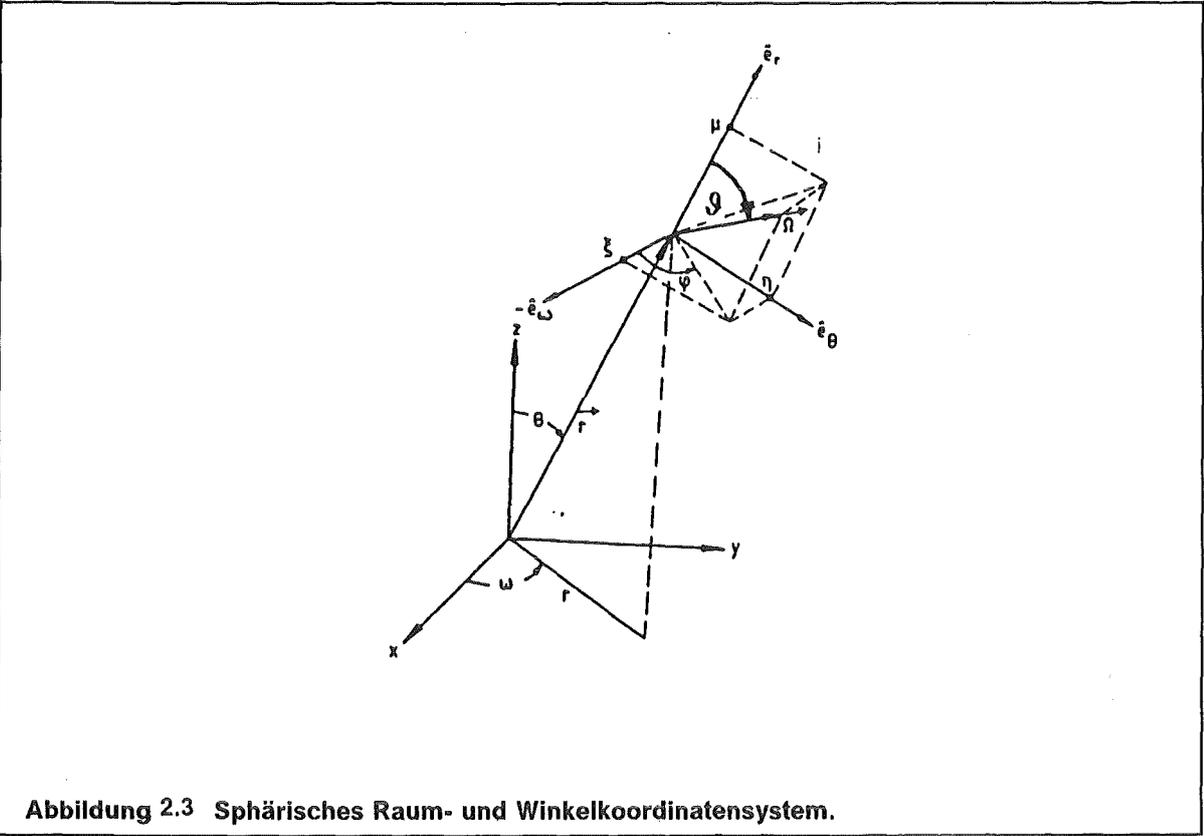
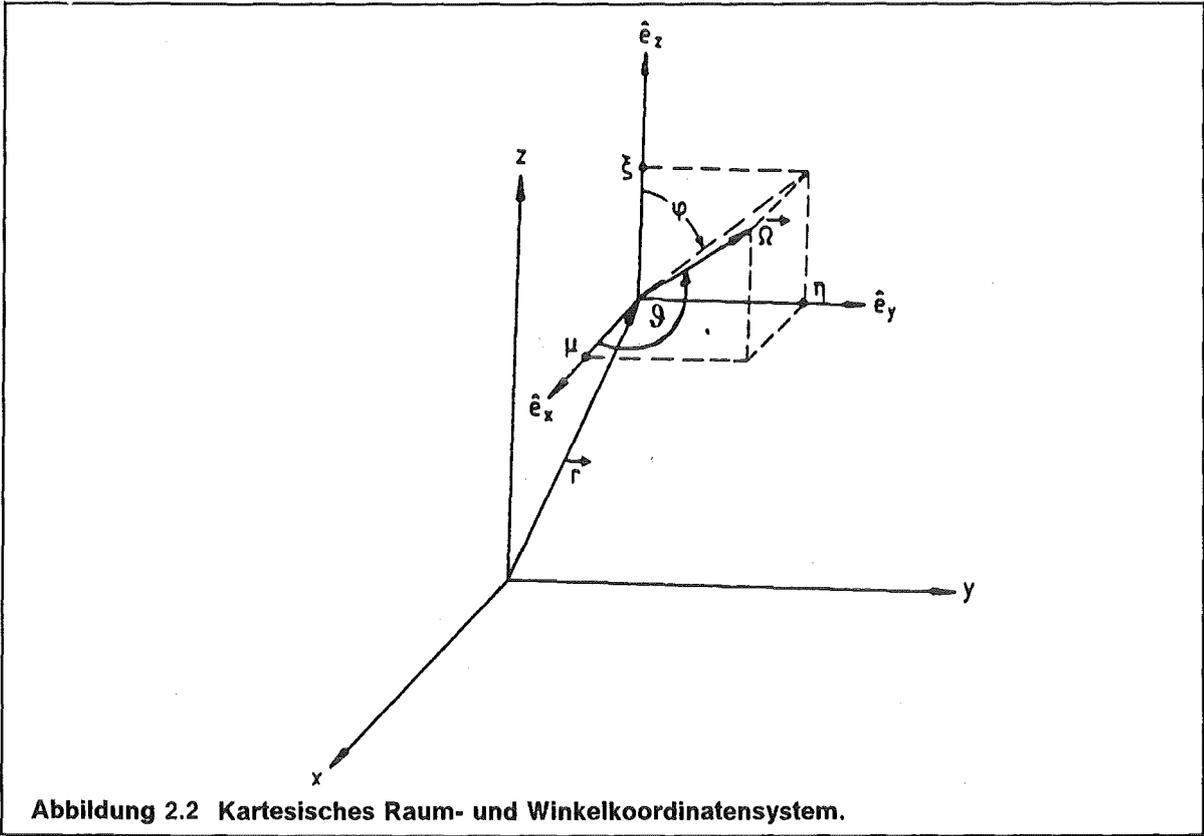
$$\vec{\Omega} \cdot \nabla \psi = \mu \frac{\partial \psi}{\partial r} + \xi \frac{\partial \psi}{\partial z} - \frac{\eta}{r} \frac{\partial \psi}{\partial \phi} \quad (2.32)$$

In der Divergenzform ( sog. Erhaltungsform) [23] lassen sich die Gl. (2.31) und Gl. (2.32) als

$$\vec{\Omega} \cdot \nabla \psi = \frac{\mu}{r} \frac{\partial(r\psi)}{\partial r} - \frac{1}{r} \frac{\partial(\eta\psi)}{\partial \phi} \quad (2.33)$$

$$\vec{\Omega} \cdot \nabla \psi = \frac{\mu}{r} \frac{\partial(r\psi)}{\partial r} + \xi \frac{\partial \psi}{\partial z} - \frac{1}{r} \frac{\partial(\eta\psi)}{\partial \phi} \quad (2.34)$$

schreiben. Gln.(2.33) und (2.34) sind vor allem für numerische Rechnungen gut geeignet [23] und dienen als Ausgangsgleichungen zur Aufstellung der Differenzgleichungen für innere Punkte und Randpunkte des physikalischen Systems (z.B. eines Reaktors). Der Streuterm geht über (2.17) in die Rechnung ein, wobei die Variablen  $\mu, \mu'$  durch die Variablen  $\xi, \xi'$  ersetzt werden müssen.



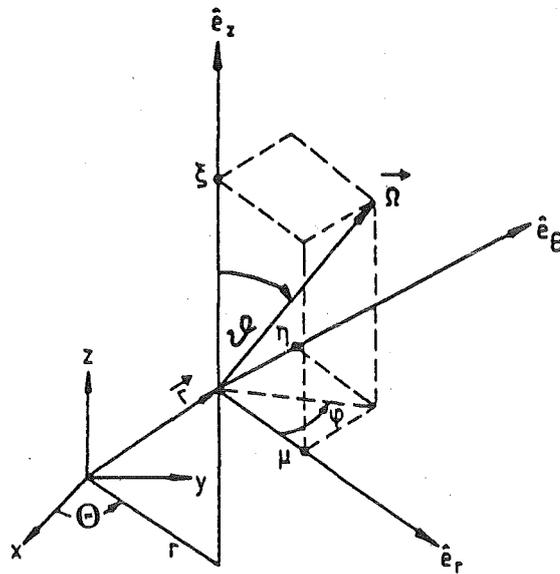


Abbildung 2.4 Zylindrisches Raum- und Winkelkoordinatensystem.

### 3. Numerische Lösungsverfahren der Neutronentransportgleichung bei strenger Darstellung des Streuterm

Die analytische Lösung der Transportgleichung (2.1) ist in den meisten für die Anwendungen wichtigen Fällen unmöglich, deshalb wird man in der Regel zur Lösung dieser Gleichung numerische Verfahren verwenden. Eines der meist benutzten Verfahren ist die Multigruppennäherung zur Behandlung der Energieabhängigkeit und das  $S_N$ -Verfahren zur Diskretisierung der Winkelvariable.

#### 3.1 Die Multigruppennäherung

Die numerische Bestimmung der Neutronenflußdichte aus der Neutronentransportgleichung in dem für Reaktorrechnungen interessanten Energiebereich ( von 0,001 eV bis etwa 15 MeV ) erfordert bei der punkweisen Berücksichtigung der Energievariablen wegen der starken Fluktuation der Wirkungsquerschnitte mehr als  $10^5$  Stützstellen zur Integration. Dies führt allerdings zu einem prohibitiv großen Rechenaufwand. Daher geht man meist dazu über den zu berücksichtigenden Energiebereich in G Energieintervalle  $( E_g, E_{g-1} )$  - Energiegruppen genannt - zu unterteilen und die Neutronenbilanzgleichung anstatt für jedes infinitesimal kleine Energiedifferential  $dE$ , für endlich breite Energieintervalle  $( E_g, E_{g-1} )$ ,  $g = 1, 2, \dots, G$ , aufzustellen.

Um die Gesamtbilanz nicht zu verletzen, integriert man die BG über jedes der G Energieintervalle  $\Delta E_g$ , wodurch man jeweils eine Bilanzgleichung für ein Intervall erhält. Diese Prozedur führt zu einem System von G gekoppelten Integro- Differentialgleichungen, in denen als Lösungsfunktionen, entsprechend den energieabhängigen Neutronenflußdichten  $\psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$  in der BG, die Gruppenflußdichten

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

auftreten.

Bei gruppenweiser Erhaltung der Reaktionsraten ergeben sich als Koeffizienten des Multigruppen-Gleichungssystems die sog. Gruppenwirkungsquerschnitte, die als Energiegruppenmittelwerte der energieabhängigen Neutronenwirkungsquerschnitte mit der Neutronenflußdichte als Wichtungsfunktion zu bilden sind. Bei der Einführung der Gruppenwirkungsquerschnitte kann man sich auf die Diskussion dreier Terme der BG, des Streuterm, der totalen Stoßdichte und der Spaltquelle beschränken. Wir behandeln zunächst den Streuterm. Beim Übergang in das Multigruppenbild erhält man nach der Integration des energieabhängigen Streuterm ( s. Gl.(2.17) und Gl.(2.26)) über eine Energiegruppe g den Streuterm in der Gruppe g

a) in sphärischer und ebener Geometrie

$$q_s^g(r, \mu) = \sum_{g'=1}^G \int_{E_g}^{E_{g'-1}} dE' \int_{E_g}^{E_{g'-1}} dE'' \int_{-1}^1 d\mu' \int_{\beta_1}^{\beta_2} d\mu_L \Sigma_s(E' \rightarrow E, \mu_L) |\mu, \mu', \mu_L| \psi(r, E', \mu') \quad (3.2)$$

b) in zylindrischer Geometrie

$$q_s^g(\vec{r}, \xi, \phi) = \frac{1}{2} \sum_{g'=1}^G \int_{E_g}^{E_{g-1}} dE \int_{E_{g'}}^{E_{g'-1}} dE' \int_{-1}^1 d\xi' \int_{\beta_1}^{\beta_2} d\xi_L \Sigma_s(E' \rightarrow E, \xi_L) I^*(\xi, \xi', \xi_L) \times \quad (3.3)$$

$$\times [\psi(\vec{r}, E', \xi', \phi + \omega) + \psi(\vec{r}, E', \xi', \phi - \omega)]$$

Hierbei wurde das Integral über die Energievariable  $E'$  in eine Summe von Teilintegralen über  $\Delta E_{g'} = E_{g'-1} - E_{g'}$  aufgespalten.

Zur Umformung von (3.2) bzw. (3.3) mit dem Ziel einer Definition von Gruppenquerschnitten wird in jeder Gruppe  $g$  folgende Approximation des Neutronenflusses angenommen [23]

$$\psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = f(E) \psi^g(\vec{r}, \vec{\Omega}), \quad E_g \leq E \leq E_{g-1} \quad (3.4)$$

wobei unter  $f(E)$  eine bekannte Funktion der Energievariable zu verstehen ist. Aus der Definition der Neutronenflußdichte  $\psi^g(\vec{r}, \vec{\Omega})$  gewinnt man für die Funktion  $f(E)$  die Normierung

$$\int_{E_g}^{E_{g-1}} f(E) dE = 1$$

Setzen wir Gl.(3.4) in die Gl.(3.2) bzw. (3.3) ein, so erhalten wir

a) in sphärischer und ebener Geometrie

$$q_s^g(r, \mu) = \sum_{g'=1}^G \int_{E_g}^{E_{g-1}} dE \int_{E_{g'}}^{E_{g'-1}} dE' \int_{-1}^1 d\mu' \int_{\beta_1}^{\beta_2} d\mu_L \Sigma_s(E' \rightarrow E, \mu_L) I^*(\mu, \mu', \mu_L) f(E') \psi^{g'}(r, \mu') \quad (3.5)$$

b) in zylindrischer Geometrie

$$q_s^g(\vec{r}, \xi, \phi) = \frac{1}{2} \sum_{g'=1}^G \int_{E_g}^{E_{g-1}} dE \int_{E_{g'}}^{E_{g'-1}} dE' \int_{-1}^1 d\xi' \int_{\beta_1}^{\beta_2} d\xi_L \Sigma_s(E' \rightarrow E, \xi_L) I^*(\xi, \xi', \xi_L) \times \quad (3.6)$$

$$\times f(E') [\psi^{g'}(\vec{r}, \xi', \phi + \omega) + \psi^{g'}(\vec{r}, \xi', \phi - \omega)]$$

Definieren wir die Gruppenwirkungsquerschnitte als

$$\Sigma_s^{g' \rightarrow g}(\mu_L) = \int_{E_g}^{E_{g-1}} dE \int_{E_{g'}}^{E_{g'-1}} \Sigma_s(E' \rightarrow E, \mu_L) f(E') dE' \quad (3.7)$$

so ergibt sich aus der Gl (3.5) bzw. der Gl.(3.6) folgende Multigruppenform des Streutterms

a) in sphärischer und ebener Geometrie

$$q_s^g(r, \mu) = \sum_{g'=1}^G \int_{-1}^1 d\mu' \int_{\beta_1}^{\beta_2} d\mu_L \Sigma_s^{g' \rightarrow g}(\mu_L) I^*(\mu, \mu', \mu_L) \psi^{g'}(r, \mu') \quad (3.8)$$

b) in zylindrischer Geometrie

$$q_s^g(\vec{r}, \xi, \phi) = \frac{1}{2} \sum_{g'=1}^G \int_{-1}^1 d\xi' \int_{\beta_1}^{\beta_2} d\xi_L \Sigma_s^{g' \rightarrow g}(\xi_L) I^*(\xi, \xi', \xi_L) [\psi^{g'}(\vec{r}, \xi', \phi + \omega) + \psi^{g'}(\vec{r}, \xi', \phi - \omega)] \quad (3.9)$$

Die Stoßdichte und der Spaltterm werden entsprechend behandelt. Die Stoßdichte ist nach (2.1)

$$f^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \int_{E_g}^{E_{g-1}} \Sigma_t(E) \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) dE$$

Daraus folgt

$$f^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \Sigma_t^g \psi^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) \quad (3.10)$$

mit den Gruppenwirkungsquerschnitten

$$\Sigma_t^g = \int_{E_g}^{E_{g-1}} \Sigma_t(E) f(E) dE \quad (3.11)$$

Die Spaltquelle in der Gruppe g ist nach (2.1)

$$q_f^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \frac{1}{4\pi} \sum_{g'=1}^G \int_{E_g}^{E_{g-1}} \chi(E) dE \int_{E_{g'}}^{E_{g'-1}} dE' \int_{4\pi} d\vec{\Omega}' v(E') \Sigma_s(E') \psi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}')$$

Mit den Gruppenquerschnitten

$$v \Sigma_f^g = \int_{E_g}^{E_{g-1}} v(E) \Sigma_s(E) f(E) dE \quad (3.12)$$

und dem Spaltspektrum in der Gruppe g

$$\chi^g = \int_{E_g}^{E_{g-1}} \chi(E) dE \quad (3.13)$$

erhalten wir als Multigruppenform des Spaltterms

$$q_f^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \frac{1}{4\pi} \chi^g \sum_{g'=1}^G v \Sigma_f^{g'} \int_{4\pi} \psi^{g'}(\vec{r}, \vec{\Omega}') d\vec{\Omega}' \quad (3.14)$$

Unter Verwendung von (3.1), und (3.8) bis (3.14) erhalten wir die Transportgleichung im Multigruppenbild:

a) in ebener Geometrie

$$\vec{\Omega} \nabla \psi^g(x, \mu) + \Sigma_t^g \psi^g(x, \mu) = \sum_{g'=1}^G \int_{-1}^1 d\mu' \int_{\beta_1}^{\beta_2} d\mu_L \Sigma_s^{g' \rightarrow g}(\mu_L) I^*(\mu, \mu', \mu_L) \psi^{g'}(x, \mu') + \frac{\chi^g}{2} \sum_{g'=1}^G v \Sigma_f^{g'} \int_{-1}^1 \psi^{g'}(x, \mu') d\mu' + q_{ext}^g(x, \mu) \quad (3.15)$$

b) in sphärischer Geometrie

$$\begin{aligned} \bar{\Omega} \nabla \psi^g(r, \mu) + \Sigma_t^g \psi^g(r, \mu) = \\ \sum_{g'=1}^G \int_{-1}^1 d\mu' \int_{\beta_1}^{\beta_2} d\mu_L \Sigma_s^{g' \rightarrow g}(\mu_L) I^*(\mu, \mu', \mu_L) \psi^{g'}(r, \mu') + \frac{\chi^g}{2} \sum_{g'=1}^G v \Sigma_f^{g'} \int_{-1}^1 \psi^{g'}(r, \mu') d\mu' + q_{\text{ext}}^g(r, \mu) \end{aligned} \quad (3.16)$$

c) in eindimensionaler zylindrischer Geometrie

$$\begin{aligned} \bar{\Omega} \nabla \psi^g(r, \xi, \phi) + \Sigma_t^g \psi^g(r, \xi, \phi) = \\ \frac{1}{2} \sum_{g'=1}^G \int_{-1}^1 d\xi' \int_{\beta_1}^{\beta_2} d\xi_L \Sigma_s^{g' \rightarrow g}(\xi_L) I^*(\xi, \xi', \xi_L) [\psi^{g'}(r, \xi', \phi + \omega) + \psi^{g'}(r, \xi', \phi - \omega)] + \\ \frac{\chi^g}{4\pi} \sum_{g'=1}^G v \Sigma_f^{g'} \int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} \psi^{g'}(r, \xi', \phi') d\phi' d\xi' + q_{\text{ext}}^g(r, \xi, \phi) \end{aligned} \quad (3.17)$$

d) in zweidimensionaler (r, z)- Geometrie

$$\begin{aligned} \bar{\Omega} \nabla \psi^g(r, z, \xi, \phi) + \Sigma_t^g \psi^g(r, z, \xi, \phi) = \\ \frac{1}{2} \sum_{g'=1}^G \int_{-1}^1 d\xi' \int_{\beta_1}^{\beta_2} d\xi_L \Sigma_s^{g' \rightarrow g}(\xi_L) I^*(\xi, \xi', \xi_L) [\psi^{g'}(r, z, \xi', \phi + \omega) + \psi^{g'}(r, z, \xi', \phi - \omega)] + \\ \frac{\chi^g}{4\pi} \sum_{g'=1}^G v \Sigma_f^{g'} \int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} \psi^{g'}(r, z, \xi', \phi') d\phi' d\xi' + q_{\text{ext}}^g(r, z, \xi, \phi) \end{aligned} \quad (3.18)$$

### 3.2 Numerische Berechnung des Streuintegrals über Winkelvariablen

In diesem Abschnitt befassen wir uns mit der numerischen Berechnung des im Gruppenstreuterm enthaltenen Integrals über die Richtungsvariable. Besondere Aufmerksamkeit wird einem in dieser Arbeit entwickelten Integrationsverfahren in eindimensionaler zylindrischer und zweidimensionaler (r,z)-Geometrie gewidmet. Dieses Verfahren bildet die Grundlage der in dem nachfolgenden Abschnitt zu besprechenden  $S_N$ - Näherung der Multigruppenstrahlungstransportgleichung.

Zur Ergänzung wird auch ein Verfahren zur numerischen Ausführung des Streuintegrals in eindimensionaler ebener und sphärischer Geometrie dargestellt.

#### 3.2.1 Das Integrationsverfahren in zylindrischer Geometrie.

Im folgenden werden die wesentlichen Punkte bei der Entwicklung des Verfahrens zur numerischen Berechnung des Streuintegrals in eindimensionaler zylindrischer und zweidimensionaler Geometrie erläutert.

Das Streuintegral stellt nach (3.9) ein doppeltes Integral über den Kosinus ( $\xi'$ ) des Polarwinkels und den Kosinus ( $\xi_L$ ) des Winkels  $\vartheta_L$  dar. Der Integrand enthält den Gruppenübergangsquerschnitt, die  $I^*$ -Funktion und die winkelabhängige Gruppenflußdichte als Faktoren. Zunächst wollen wir das innere Integral über  $\xi_L$  durch eine endliche Summe zweckmäßig approximieren. Bei der numerischen Behandlung dieses über das Intervall  $[\beta_1, \beta_2]$  erstreckten Integrals ist zu bedenken, daß

1. die  $I^*$ -Funktion an den Rändern des Integrationsbereichs, d.h. bei  $\beta_1$  und  $\beta_2$  Singularitäten aufweist.
2. die untere ( $\beta_1$ ) und die obere ( $\beta_2$ ) Integrationsgrenze, nach der Gl. (2.10) und der Gl. (2.11) bestimmt, von den Variablen  $\xi'$ ,  $\xi$  abhängig sind.

Es muß daher eine Integrationsregel gefunden werden, die eine - trotz Singularitäten des Integranden - möglichst genaue Durchführung der numerischen Integration gewährleistet. Eine für diesen Fall geeignete Integrationsformel liefert die Gauß-Tschebyscheffsche Regel, bei der ein Integral der Gestalt

$$\int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{1-z^2}} f(z) dz, \quad (3.19)$$

wobei  $f$  für eine im Intervall  $[-1, 1]$  stetige Funktion steht, durch eine endliche Summe

$$\frac{\pi}{N} \sum_{n=1}^N f(a_n) \quad (3.20)$$

approximiert wird [26].

Hierbei sind die Stützstellen  $a_n$  nach dem Gauß-Tschebyscheffschen Satz durch

$$a_n = \cos \frac{(2n-1)\pi}{2N} \quad n = 1, \dots, N \quad (3.21)$$

gegeben. Die Integrationsgewichte sind untereinander gleich und betragen  $\frac{\pi}{N}$ .

Die Zahl der Stützpunkte  $N$  wird als Approximationsordnung bezeichnet. Die Gauß-Tschebyscheffsche Regel ist ein Spezialfall der Gauß-Jacobi Regel, wobei die Gewichtsfunktion durch

$$w(z) = (1-z)^\alpha (1+z)^\beta \quad \alpha = \beta = -\frac{1}{2} \quad (3.22)$$

gegeben ist.

Mit dem Ziel der Anwendung der Gauß-Tschebyscheffschen Regel auf die Berechnung des Integrals

$$\int_{\beta_1}^{\beta_2} \sum_s^{g' \rightarrow g} (\xi_L)^s (\xi, \xi', \xi_L) [\psi^g(\vec{r}, \xi', \phi + \omega) + \psi^g(\vec{r}, \xi', \phi - \omega)] d\xi_L \quad (3.23)$$

wird das Integral über  $[\beta_1, \beta_2]$  durch eine lineare Transformation

$$\xi_L = \frac{\beta_1 + \beta_2}{2} + \frac{\beta_2 - \beta_1}{2} z \quad (3.24)$$

auf ein Integral über  $[-1, 1]$  übergeführt.

Aus (3.24) ergibt sich direkt

$$d\xi_L = \frac{\beta_2 - \beta_1}{2} dz \quad (3.25)$$

Da  $\beta_1$  und  $\beta_2$  die Wurzeln der quadratischen Gleichung  $1 - \xi^2 - \xi'^2 - \xi_L^2 + 2\xi\xi'\xi_L = 0$  sind und demgemäß die Nullstellen des Nenners in (2.14) bilden, läßt sich die  $I^*$ -Funktion folgendermaßen ausdrücken:

$$I^*(\xi, \xi', \xi_L) = \frac{1}{\pi} \frac{1}{\sqrt{(\beta_2 - \xi_L)(\xi_L - \beta_1)}} \quad (3.26)$$

Ferner ist mit (3.24)

$$(\beta_2 - \xi_L)(\xi_L - \beta_1) = \left[ \frac{\beta_2 - \beta_1}{2} \right]^2 (1 - z^2)$$

Somit geht (3.26) über in

$$I^*(\xi, \xi', z) = \frac{1}{\pi} \frac{1}{\frac{\beta_2 - \beta_1}{2} \sqrt{1 - z^2}} \quad (3.27)$$

Aus der Definition der  $\omega$  - Funktion (2.9) gewinnt man den Ausdruck

$$\omega(\xi, \xi', \xi_L) = \arccos \left[ \frac{\xi_L - \frac{\beta_1 + \beta_2}{2}}{\frac{\beta_2 - \beta_1}{2}} \right] \quad (3.28)$$

Durch Einsetzen von (3.24) in (3.28) ergibt sich somit

$$\omega(\xi, \xi', z) = \arccos(z) \quad (3.29)$$

Unter Verwendung von (3.25), (3.27) und (3.29) können wir das Integral (3.23) auf das Integral (3.19) zurückführen, wobei

$$f(z) = \frac{1}{\pi} \sum_s^{g' \rightarrow g} \left( \frac{\beta_1 + \beta_2}{2} + \frac{\beta_2 - \beta_1}{2} z \right) [\psi^{g'}(\vec{r}, \xi', \phi + \arccos(z)) + \psi^{g'}(\vec{r}, \xi', \phi - \arccos(z))] \quad (3.30)$$

Das äußere Integral über  $\xi'$  wird mit Hilfe der Gauß- Legendreschen Integrationsregel durch eine endliche gewichtete Summe approximiert. Die bei der Summation zugrunde gelegten Stützstellen und die Integrationsgewichte werden durch den Gauß-Legendreschen Quadraturatz bestimmt.

Auf der Grundlage der vorangegangenen Überlegungen und der abgeleiteten Formeln läßt sich folgendes Verfahren zur Ermittlung von Näherungswerten des doppelten Integrals über  $\xi'$  und  $\xi_L$  angeben

$$\int_{-1}^1 \int_{\beta_1}^{\beta_2} \sum_s^{g' \rightarrow g}(\xi_L) I^*(\xi, \xi', \xi_L) [\psi^{g'}(\vec{r}, \xi', \phi + \omega) + \psi^{g'}(\vec{r}, \xi', \phi - \omega)] d\xi_L d\xi' \approx$$

$$\frac{1}{\pi} \sum_{l=1}^L w_l \int_{\beta_1(\xi, \xi')}^{\beta_2(\xi, \xi')} \frac{1}{\sqrt{(\beta_2 - \xi_L)(\xi_L - \beta_1)}} \Sigma_s^{g' \rightarrow g}(\xi_L) \times \quad (3.31)$$

$$\times [\psi^{g'}(\vec{r}, \xi'_l, \phi + \omega_l(\xi_L)) + \psi^{g'}(\vec{r}, \xi'_l, \phi - \omega_l(\xi_L))] d\xi_L \approx$$

$$\frac{1}{N} \sum_{l=1}^L w_l \sum_{n=1}^N \Sigma_s^{g' \rightarrow g}(a_{ln}) \left[ \psi^{g'}(\vec{r}, \xi'_l, \phi + \frac{(2n-1)}{2N} \pi) + \psi^{g'}(\vec{r}, \xi'_l, \phi - \frac{(2n-1)}{2N} \pi) \right]$$

wobei

$$a_{ln} = \frac{\beta_1 + \beta_2}{2} + \frac{\beta_2 - \beta_1}{2} \frac{(2n-1)}{2N} \pi, \quad l = 1, 2, 3, \dots, L, \quad n = 1, 2, 3, \dots, N \quad (3.32)$$

$\xi'_l$ , die Stützstellen und  $w_l$  die zugehörigen Integrationsgewichte aus dem Gauß-Legendreschen Quadraturatz bezeichnen.

### 3.2.2 Das Integrationsverfahren in eindimensionaler sphärischer und ebener Geometrie

In diesem Abschnitt wird das von A. Takahashi vorgeschlagene [12] und in [24] verbesserte numerische Integrationsverfahren zur Berechnung des Streuterm in eindimensionaler ebener und sphärischer Geometrie in groben Zügen dargestellt. In diesen Geometrien hängt die winkelabhängige Neutronenflußdichte, wie bereits erwähnt, infolge der gegebenen azimuthalen Symmetriebedingungen nur von einer Orts- und einer Winkelkoordinate ab. Daher weist die in der Gl.(3.8) enthaltene Gruppenflußdichte keine Abhängigkeit vom Winkel  $\mu_L$  auf und läßt sich aus dem Integral über  $\mu_L$  herausziehen. Die Integration der  $I^*$ -Funktion mit ihren Singularitäten kann in diesem Fall analytisch durchgeführt werden. Dies führt zu einem wesentlich vereinfachten Berechnungsschema für den Streuterm, der durch folgende gewichtete Summe

$$q_s^g(r, \mu_k) \approx \sum_{g'=1}^G \sum_{l=1}^L w_l \sum_{n=1}^N w_n \Sigma_s^{g' \rightarrow g}(n) I^*(k, l, n) \psi^{g'}(r, \mu_l) \quad (3.33)$$

approximiert wird mit

$$I^*(k, l, n) = \frac{1}{\Delta\mu_k \Delta\mu'_l \Delta\mu_{Ln}} \int_{\Delta\mu_k} \int_{\Delta\mu'_l} \int_{\Delta\mu_{Ln}} I^*(\mu, \mu', \mu_L) d\mu d\mu' d\mu_L \quad (3.34)$$

Die Integrationsgewichte sind dabei durch

$$w_l = \Delta\mu'_l \quad (3.35)$$

$$w_n = \Delta\mu_{Ln}$$

definiert mit

$$\Delta\mu_k = \mu_{k+\frac{1}{2}} - \mu_{k-\frac{1}{2}} \quad k = 1, 2, 3, \dots, L, \quad \mu_{\frac{1}{2}} = -1$$

$$\Delta\mu'_l = \mu'_{l+\frac{1}{2}} - \mu'_{l-\frac{1}{2}} \quad l = 1, 2, 3, \dots, L, \quad \mu'_{\frac{1}{2}} = -1 \quad (3.36)$$

$$\Delta\mu_{Ln} = \mu_{Ln+\frac{1}{2}} - \mu_{Ln-\frac{1}{2}} \quad n = 1, 2, 3, \dots, N, \quad \mu_{L\frac{1}{2}} = -1$$

$\Sigma_g^{g' \rightarrow g}(n)$  stellt einen über das Streuwinkelsegment  $n$  gemittelten Gruppenübergangsquerschnitt dar.

In [24] wurde gezeigt, daß das Integral auf der rechten Seite von (3.34) analytisch berechnet werden kann. Es wurde dabei folgende Stammfunktion  $G(\mu, \mu', \mu_L)$  ermittelt. Sei  $D = 1 - \mu^2 - \mu'^2 - \mu_L^2 + 2\mu\mu'\mu_L$ , so gilt

1. Falls  $D > 0$

$$\begin{aligned} G(\mu, \mu', \mu_L) = & (\mu - \mu_L\mu') \arctan\left(\frac{\mu - \mu_L\mu'}{\sqrt{D}}\right) \\ & + (\mu' - \mu_L\mu) \arctan\left(\frac{\mu' - \mu_L\mu}{\sqrt{D}}\right) \\ & + (\mu_L - \mu\mu') \arctan\left(\frac{\mu_L - \mu\mu'}{\sqrt{D}}\right) + \sqrt{D} \end{aligned} \quad (3.37)$$

2. Falls  $D \leq 0$

$$\begin{aligned} G(\mu, \mu', \mu_L) = & (\mu - \mu_L\mu') \operatorname{sign}(\mu - \mu_L\mu') \\ & + (\mu' - \mu_L\mu) \operatorname{sign}(\mu' - \mu_L\mu) \\ & + (\mu_L - \mu\mu') \operatorname{sign}(\mu_L - \mu\mu') \end{aligned} \quad (3.38)$$

### 3.3 Die $S_N$ - Näherung der Multigruppen-Transportgleichung. Quadraturätze

Das für Reaktorrechnungen bewährte  $S_N$ -Verfahren -realisiert z.B. in den Transportprogrammen ONETRAN und TWOTRAN- wurde auch dem neu entwickelten Verfahren zur numerischen Lösung der Multigruppen-Transportgleichung mit strenger Behandlung der anisotropen Streuung zugrunde gelegt. Das  $S_N$ -Verfahren ist ein Spezialfall der diskreten Ordinatenmethode. In dieser Methode wird anstelle des Kontinuums für die Richtungsvariable  $\Omega$  eine Menge  $\{\Omega_m; m = 1, 2, \dots, M\}$  von  $M$  diskreten Werten benutzt. Die Richtungen  $\Omega_m$  sind dabei so zu wählen, daß die Differentiale und Integrale in der Transportgleichung durch Differenzen und Summen hinreichend gut approximiert werden können. Jede Richtung  $\Omega_m$  läßt sich als Punkt ( $\mu_m^2 + \eta_m^2 + \xi_m^2 = 1$ ) auf der Oberfläche der Einheitskugel auffassen [30]. Jedem  $\Omega_m$  wird nun ein Raumwinkelbereich  $\Delta\Omega_m$  der Oberfläche der Kugel zugewiesen. Der Oberflächeninhalt  $w_m$  von  $\Delta\Omega_m$  ergibt sich aus

$$w_m = \frac{1}{4\pi} \int_{\Delta\Omega_m} d\vec{\Omega} \quad (3.39)$$

wobei der Oberflächeninhalt der Kugel auf eins normiert wurde.

Bei dem  $S_N$ -Verfahren wird jede der  $G$  Gleichungen (3.15) - (3.18) über  $\Delta\Omega_m$  integriert und zerfällt dadurch jeweils in ein System von  $M$  Gleichungen, die nur durch den Streuterm  $q_{g,m}^g(\vec{r}) = q_g^g(\vec{r}, \Omega_m)$  gekoppelt sind. Die Lösung dieses Gleichungssystems  $\psi_m^g(\vec{r})$  wird als Näherung für die gesuchte Neutronenflußdichte verwendet [23]:

$$\psi_m^g(\vec{r}) = \frac{1}{w_m} \int_{\Delta\Omega_m} \psi^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) d\vec{\Omega} \quad (3.40)$$

In einer Energiegruppe  $g$  und bzgl. jeder Richtung  $\vec{\Omega}_m$  liefern Gl.(3.31) und Gl.(3.32) folgende Approximation des Gruppenstreuterm

$$q_{s,m}^g(\vec{r}) = \frac{1}{2} \sum_{g'=1}^G \frac{1}{N} \sum_{l=1}^L w_l \sum_{n=1}^N \sum_{s \rightarrow g'}^g(a_{lnm}) \left[ \psi^{g'}(\vec{r}, \xi'_l, \phi_m + \frac{(2n-1)}{2N} \pi) + \psi^{g'}(\vec{r}, \xi'_l, \phi_m - \frac{(2n-1)}{2N} \pi) \right] \quad (3.41)$$

wobei

$$a_{lnm} = \xi'_l \xi_m + \sqrt{1 - \xi_l'^2} \sqrt{1 - \xi_m^2} \frac{(2n-1)}{2N} \pi$$

Die Integration über die Winkelvariablen in dem Gruppenstreuterm  $q_{s,m}^g(\vec{r})$  wird in zylindrischer Geometrie nach dem im Abschn. 3.2.1. diskutierten Integrationsverfahren ausgeführt. Die Menge von diskreten Richtungen  $\vec{\Omega}_m$  und die zugehörigen Gewichten  $w_m$  werden nach den Gauß-Legendreschen und Gauß-Tschebyscheffschen Quadraturansätzen bestimmt und nach folgender Vorschrift gebildet.

1. Die zu berücksichtigenden Richtungen werden symmetrisch auf zwei Oktanten der Einheitskugel in eindimensionaler zylindrischer Geometrie bzw. auf den vier Oktanten der Einheitshalbkugel in zweidimensionaler (r,z)-Geometrie verteilt.
2. Bezeichnet  $L$  die Approximationsordnung der Gauß-Legendreschen Regel so werden die diskreten Richtungen auf  $K=L/2$  Niveaus<sup>2</sup> in eindimensionaler Geometrie bzw.  $K=L$  Niveaus in zweidimensionaler Geometrie angeordnet.
3. Auf jedem Niveau  $l$  wählt man  $N$  Punkte.
4. Die Azimutwinkel der auf dem Niveau  $l$  befindlichen Richtungen  $\vec{\Omega}_m$  werden gemäß dem Gauß-Tschebyscheffschen Quadraturansatz bestimmt

$$\phi_m = \phi_{l,n} = \frac{(2n-1)}{2N} \pi \quad l = 1, 2, \dots, K, \quad n = 1, 2, \dots, N, \quad m = (l-1)K + n$$

wobei

$l$  die Nummer des Niveaus und

$n$  die Nummer des Punktes auf dem Niveau  $l$

bezeichnet.

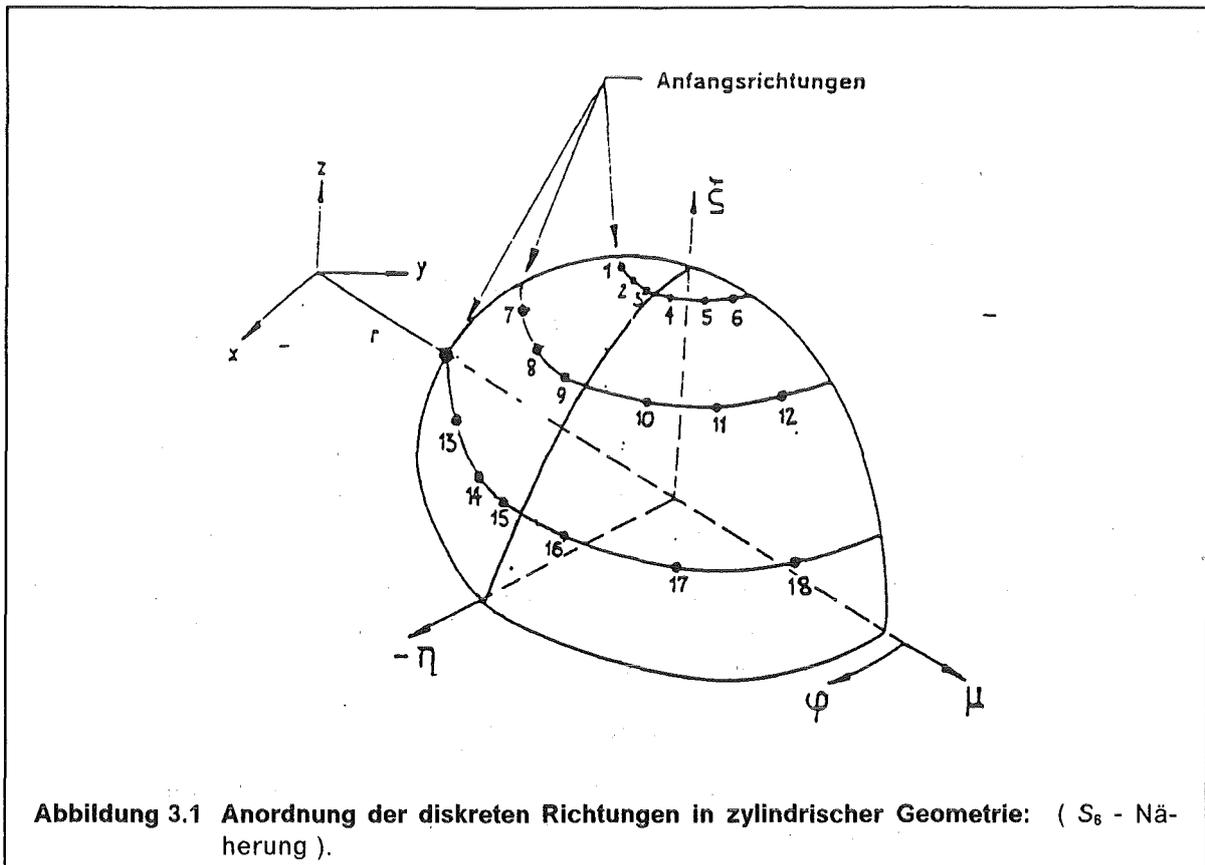
5. Jedem Niveau  $l$  wird ein Gewicht  $w_l$  zugewiesen, das gleichmäßig unter den auf diesem Niveau liegenden  $N$  Richtungen verteilt wird. Dementsprechend erhält jede Richtung ihr zugehöriges Gewicht  $w_l/N$ , das auch den Oberflächeninhalt des Raumwinkelbereiches  $\Delta\Omega_m$  mittels (3.39) definiert. Die Gewichte sind so festgelegt, daß die Normierungsbedingung

<sup>2</sup> Breitenkreise auf der Einheitskugel mit Winkel  $\frac{\pi}{2} - \theta_l$  und den Radien  $\rho_l = \sqrt{(1 - \xi_l^2)}$

$$\sum_{i=1}^M w_m = 1 ; \quad M = K \times N$$

erfüllt ist.

Der auf diese Weise entstandene Quadraturatz ist auf der Abb.3.1. schematisch dargestellt. Die verwendeten Konstanten befinden sich in den Tabellen 3.1 und 3.2 sowie in der Abb.3.2.

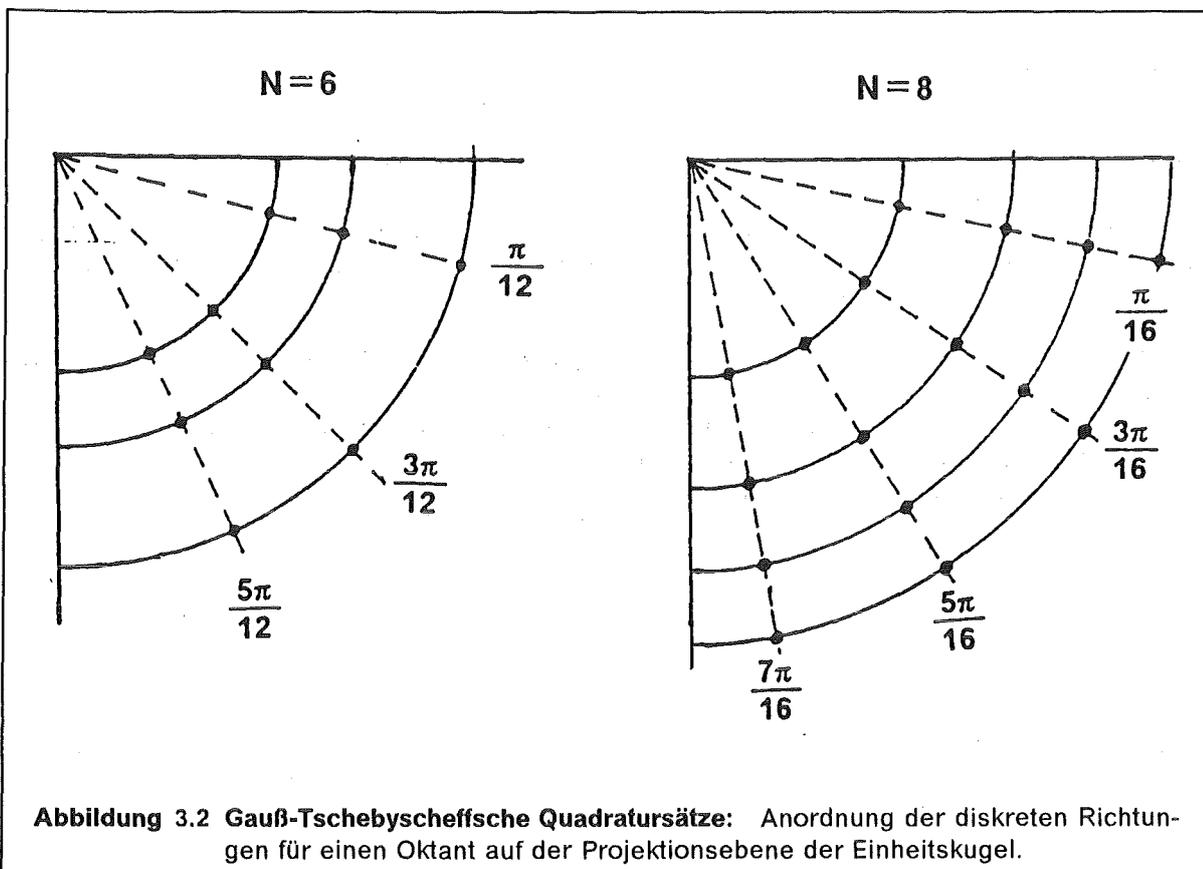


K	Niveau 1	Niveau 2	Niveau 3	Niveau 4
6	0,2386192	0,6612094	0,9324695	-
8	0,1834346	0,5255324	0,7966665	0,9602899

Tabelle 3.1 Bestimmungsgrößen des Gauß-Legendreschen Quadraturatzes: Komponenten  $\xi_i$

N	$\phi_{l,n}$
6	$\frac{\pi}{12}, \frac{3\pi}{12}, \frac{5\pi}{12}, \frac{7\pi}{12}, \frac{9\pi}{12}, \frac{11\pi}{12}$
8	$\frac{\pi}{16}, \frac{3\pi}{16}, \frac{5\pi}{16}, \frac{7\pi}{16}, \frac{9\pi}{16}, \frac{11\pi}{16}, \frac{13\pi}{16}, \frac{15\pi}{16}$

**Tabelle 3.2 Bestimmungsgrößen des Gauß-Tschebyscheffschen Quadratursatzes:** Komponenten  $\phi_{l,n}$  ( $0 \leq \phi_{l,n} \leq \pi$ )



**Abbildung 3.2 Gauß-Tschebyscheffsche Quadratursätze:** Anordnung der diskreten Richtungen für einen Oktant auf der Projektionsebene der Einheitskugel.

K	Niveau 1	Niveau 2	Niveau 3	Niveau 4
6	0,4679139	0,3607616	0,1713245	-
8	0,3626838	0,3137067	0,222381	0,1012285

**Tabelle 3.3 Bestimmungsgrößen des Gauß-Legendreschen Quadratursatzes:** Gewichte der Niveaus.

Basierend auf dem oben eingeführten Quadratursatz können die Maschennetze für beide Kugelkoordinaten des Richtungsvektors  $\vec{\Omega}$  d.i.  $\xi$  und  $\phi$  eindeutig festgelegt werden.

Es ist:

$$\begin{aligned} \xi_{\frac{1}{2}} &= -1 \\ \xi_{l+\frac{1}{2}} &= \xi_{l-\frac{1}{2}} + 2w_l, & l = 1, 2, \dots, K, \\ \phi_{\frac{1}{2}} &= 0 \\ \phi_{n+\frac{1}{2}} &= \phi_n + \frac{\pi}{N} & n = 1, 2, \dots, N \end{aligned} \quad (3.42)$$

Die zur numerischen Ausführung des Integrals (3.41) benötigten Gruppenflußwerte  $\psi^g(\bar{r}, \xi'_l, \phi_{k,n} + \frac{(2n-1)}{2N} \pi)$  und  $\psi^g(\bar{r}, \xi'_l, \phi_{k,n} - \frac{(2n-1)}{2N} \pi)$  werden in einem iterativen Lösungsprozeß des nach der Diskretisierung der Ortsvariable  $\bar{r}$  erhaltenen Gleichungssystems ermittelt. Gemäß (3.41) werden bei der Berechnung auch die mikroskopischen winkelabhängigen Gruppenübergangsquerschnitte  ${}^{IS} \sigma_{g' \rightarrow g}^{(a_{lm})}$  erforderlich. Die Indices IS kennzeichnen die einzelnen Isotope, aus denen sich makroskopische Gruppenwirkungsquerschnitte für eine gegebene Reaktorzone durch Multiplikation mit den zugehörigen Teilchendichten und Summation über die beteiligten Isotope ergeben.

Die mikroskopischen Gruppenübergangsquerschnitte werden von dem Programm DOUBLE [25] auf dem Datensatz EFF-1 bereitgestellt und mit dem von der Autorin entwickelten Programm CROMIX zur Erstellung von makroskopischen Streumatrizen verarbeitet. Die makroskopischen winkelabhängigen Streumatrizen werden durch die Eingabedatei an das Transportprogramm übergeben.

In sphärischer und ebener Geometrie reduziert sich der Definitionsbereich der Richtungsvariable  $\mu$  auf das Intervall  $[-1, 1]$ . Die Menge der M diskreten Werte  $\{\mu_m; m = 1, 2, \dots, M\}$  erhält man in diesem Fall durch Anwendung des Gauß-Legendreschen Quadraturatzes: Die zugehörigen Gewichte  $w_m$  definieren die Einteilung des Intervalls  $[-1, 1]$  in M Teilintervalle  $[\mu_{m-\frac{1}{2}}, \mu_{m+\frac{1}{2}}]$ , wobei

$$\mu_{m+\frac{1}{2}} = \mu_{m-\frac{1}{2}} + 2w_m \quad (3.43)$$

$$\mu_{\frac{1}{2}} = -1$$

Der Gruppenstreuterm  $q_m^g(r, \mu)$  wird in jeder Richtung nach (3.33) berechnet. Die dazu erforderlichen Gruppenflußwerte  $\psi^g(r, \mu_m)$  werden bei dem iterativen Lösungsprozeß des durch die Diskretisierung der Ortsvariable aufgestellten Gleichungssystems ermittelt [41]. Die gemäß (3.33) benötigten dreidimensionalen Streumatrizen  $\Sigma_{g' \rightarrow g}^g(n)$  werden vor der Transportrechnung in dem Programm DOUBLE [25] aufbereitet und als Eingabedaten an das Transportprogramm übergeben.

In einer Energiegruppe g ist der Neutronenfluß in jeder durch den Quadraturatz bestimmten Richtung  $\Omega_m$  aus folgenden Gleichungssystemen zu berechnen

(a) in der eindimensionalen ebener Geometrie

$$\mu_m \frac{\partial \psi_m^g(x)}{\partial x} + \Sigma_t^g \psi_m^g(x) = q_m^g(x) \quad (3.44)$$

(b) in der eindimensionalen sphärischer Geometrie

$$\mu_m \frac{\partial r^2 \psi_m^g(r)}{\partial r} + \left[ \frac{\beta_{m+\frac{1}{2}}}{w_m} \psi_{m+\frac{1}{2}}^g(r) - \frac{\beta_{m-\frac{1}{2}}}{w_m} \psi_{m-\frac{1}{2}}^g(r) \right] r + r^2 \Sigma_t^g \psi_m^g(r) = r^2 q_m^g(r) \quad (3.45)$$

(c) in der eindimensionalen zylindrischer Geometrie

$$\mu_m \frac{\partial r \psi_m^g(r)}{\partial r} + \frac{\alpha_{m+\frac{1}{2}}}{W_m} \psi_{m+\frac{1}{2}}^g(r) - \frac{\alpha_{m-\frac{1}{2}}}{W_m} \psi_{m-\frac{1}{2}}^g(r) + r \Sigma_t^g \psi_m^g(r) = r q_m^g(r) \quad (3.46)$$

(d) in der ( r, z ) - Geometrie

$$\frac{\mu_m}{r} \frac{\partial r \psi_m^g(r, z)}{\partial r} + \frac{\alpha_{m+\frac{1}{2}}}{r W_m} \psi_{m+\frac{1}{2}}^g(r, z) - \frac{\alpha_{m-\frac{1}{2}}}{r W_m} \psi_{m-\frac{1}{2}}^g(r, z) + \xi_m \frac{\partial \psi_m^g(r, z)}{\partial z} + \Sigma_t^g \psi_m^g(r, z) = q_m^g(r, z) \quad (3.47)$$

$$g = 1, 2, \dots, G, \quad m = 1, 2, \dots, M$$

wobei

$\beta, \alpha$  die sog. Winkelkopplungskoeffizienten bezeichnen,  $q_m^g$  schließt die Spalt-, Streu- und äußere Quelle ein.

Die Winkelkopplungskoeffizienten müssen bei der Ersetzung der Differentiale über die Winkelvariable durch Differenzenformeln eingeführt werden. Sie berücksichtigen den Transport des Neutrons von einem Winkel zum anderen während seines ungestörten Fluges durch das Medium (s. Abb.3.3). Wenn man den gleichförmigen isotropen Neutronenfluß in einem unendlichen Medium betrachtet, lassen sich die Winkelkopplungskoeffizienten aus folgenden Rekursivbeziehungen bestimmen [23]

$$\alpha_{l, \frac{1}{2}} = \alpha_{l, N+\frac{1}{2}} = 0 \quad l = 1, 2, \dots, K \quad (3.48)$$

$$\alpha_{l, n+\frac{1}{2}} - \alpha_{l, n-\frac{1}{2}} = -w_m \xi_m \quad n = 1, 2, \dots, N$$

oder

$$\beta_{\frac{1}{2}} = \beta_{M+\frac{1}{2}} = 0 \quad (3.49)$$

$$\beta_{m+\frac{1}{2}} - \beta_{m-\frac{1}{2}} = -2w_m \mu_m \quad m = 1, 2, \dots, M$$

(3.48) und (3.49) gelten für alle auf einem Niveau befindlichen Richtungen.

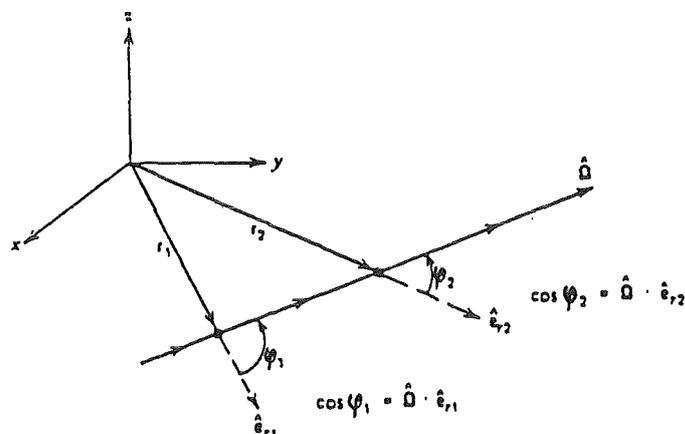
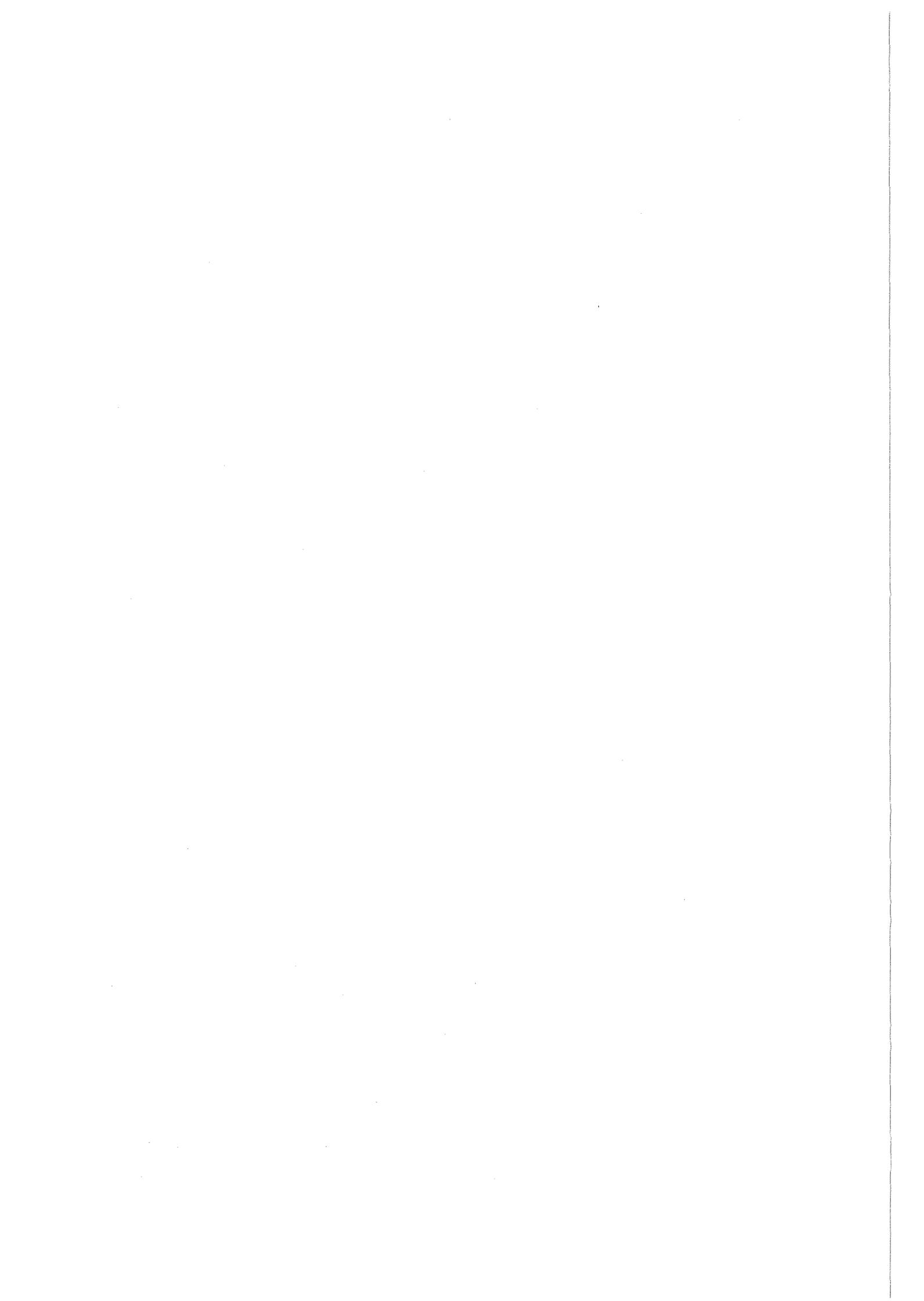


Abbildung 3.3 Gekrümmte Geometrien: Änderung der Winkelkoordinaten während des ungestörten Fluges des Neutrons durch das Medium.



#### 4. Einführung des neuen Rechenverfahrens in die $S_N$ -Programme ONETRAN und TWOTRAN: Erstellung der Programme ANTRA1 und ANTRA2.

Die Programme ONETRAN und TWOTRAN sind entwickelt worden, um das durch die Diskretisierung der Multigruppen-Transportgleichung nach der diskreten Ordinatenmethode entstandene Gleichungssystem numerisch zu lösen. Die Berücksichtigung der Richtungsabhängigkeit des Streuterm erfolgt in diesen Programmen im Rahmen der  $P_L$ -Näherung, d.h. der Streukern ist durch eine abgebrochene Reihenentwicklung nach Legendre-Polynomen dargestellt. Während ONETRAN lediglich die Berechnung des Neutronenflusses in einer Dimension ( $x$  bzw.  $r$ ) gestattet, können in TWOTRAN zwei Dimensionen ( $(x,y)$ ,  $(r,z)$ ,  $(r, \Theta)$ ) behandelt werden.

Wir beschränken uns im folgenden auf die 1-d zylindrische und die 2-d  $(r,z)$ -Geometrie. Um die Gln.(3.46)-(3.47) numerisch lösen zu können, müssen diese räumlich diskretisiert werden. Dazu wird der Bereich der Ortskoordinate  $0 \leq r \leq R$  in der eindimensionalen Geometrie bzw. der Koordinaten  $0 \leq r \leq R$  und  $0 \leq z \leq Z$  in der zweidimensionalen Geometrie durch eine Unterteilung in  $K$  Intervalle der Länge  $\Delta r_k$  bzw. in  $N$  Intervalle der Länge  $\Delta z_n$  mit einem Maschennetz wie im Abb.4.1 überzogen, das so konstruiert ist, daß die Materialgrenzen mit den Maschenlinien zusammenfallen. Die Wirkungsquerschnitte dürfen sich an den Maschengrenzen selbst sprunghaft ändern. Ferner wird jede Masche  $k$  bzw.  $(k,n)$  in  $I_k$  bzw.  $I_k \times J_n$  Zellen eingeteilt.

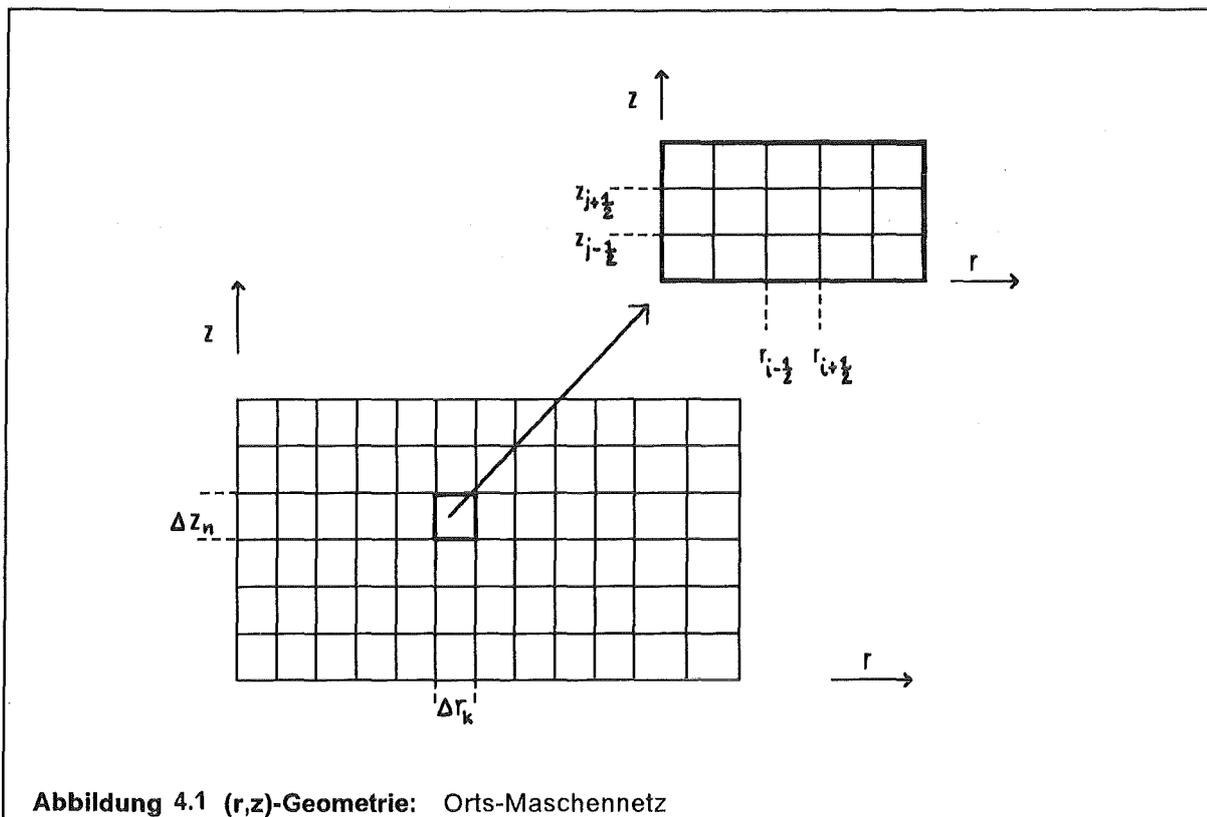


Abbildung 4.1  $(r,z)$ -Geometrie: Orts-Maschennetz

Die  $I_k$  Zellen der Masche  $k$  haben die Breite  $\Delta r_k / I_k$ , die der Masche  $k+1$  die Breite  $\Delta r_{k+1} / I_{k+1}$  usw.. Die  $I_k \times J_n$  Zellen der Masche  $(k,n)$  haben die Breite  $\Delta r_k / I_k$  und die Höhe  $\Delta z_n / J_n$ , die der Masche  $(k+1,n+1)$  die Breite  $\Delta r_{k+1} / I_{k+1}$  und die Höhe  $\Delta z_{n+1} / J_{n+1}$ . Da-

durch entsteht ein feines Maschennetz mit  $I = I_1 + I_2 + \dots + I_K$  Zellen in der eindimensionalen zylindrischen Geometrie bzw.  $I \times J = (I_1 + I_2 + \dots + I_K) \times (J_1 + J_2 + \dots + J_N)$  Zellen in der  $(r,z)$ -Geometrie (s. Abb.4.1). Zur Aufstellung des in dem ONETRAN-Programm zu lösenden Systems von Differenzgleichungen wird die gesuchte Lösungsfunktion  $\psi_m(r)$  innerhalb der Zelle  $i$  durch eine lineare Funktion der Ortsvariable  $r$  wie folgt approximiert

$$\psi_i(r) = \frac{1}{\Delta r_i} \left[ (r_{i+\frac{1}{2}} - r) \psi_{i-\frac{1}{2}} + (r - r_{i-\frac{1}{2}}) \psi_{i+\frac{1}{2}} \right] \quad (4.1)$$

wobei  $\Delta r_i = r_{i+\frac{1}{2}} - r_{i-\frac{1}{2}}$ ,  $\psi_{i-\frac{1}{2}}$ ,  $\psi_{i+\frac{1}{2}}$  die unbekanntes Flußwerte am linken bzw. rechten Rand der Zelle  $i$  sind:

Somit wird die Gruppenflußdichte in dem Intervall  $[0, R]$  durch eine stückweise lineare und an Rändern der Subintervalle unstetige Funktion dargestellt. An den Randpunkten  $r_{i-\frac{1}{2}}$  nimmt die Gruppenflußdichte nur einen Wert an und zwar den aus der benachbarten Maschenzelle, die sich stromabwärts des betrachteten Randpunktes befindet (s. Abb.4.2). Weiterhin wird die gesamte Quelle  $q_m$  auf analoge Weise wie der Fluß approximiert. Nach (4.1) müssen in der  $(i,m)$ -ten Orts-Winkel-Masche zwei Flußwerte  $\psi_{m,i-\frac{1}{2}}$  und  $\psi_{m,i+\frac{1}{2}}$  bestimmt werden. Dies kann gemäß der Gl.(3.46) erfolgen, indem man den dritten unbekanntes Fluß  $\psi_{m+\frac{1}{2},i}$  mittels der "diamond difference"-Methode eliminiert, d.h. durch

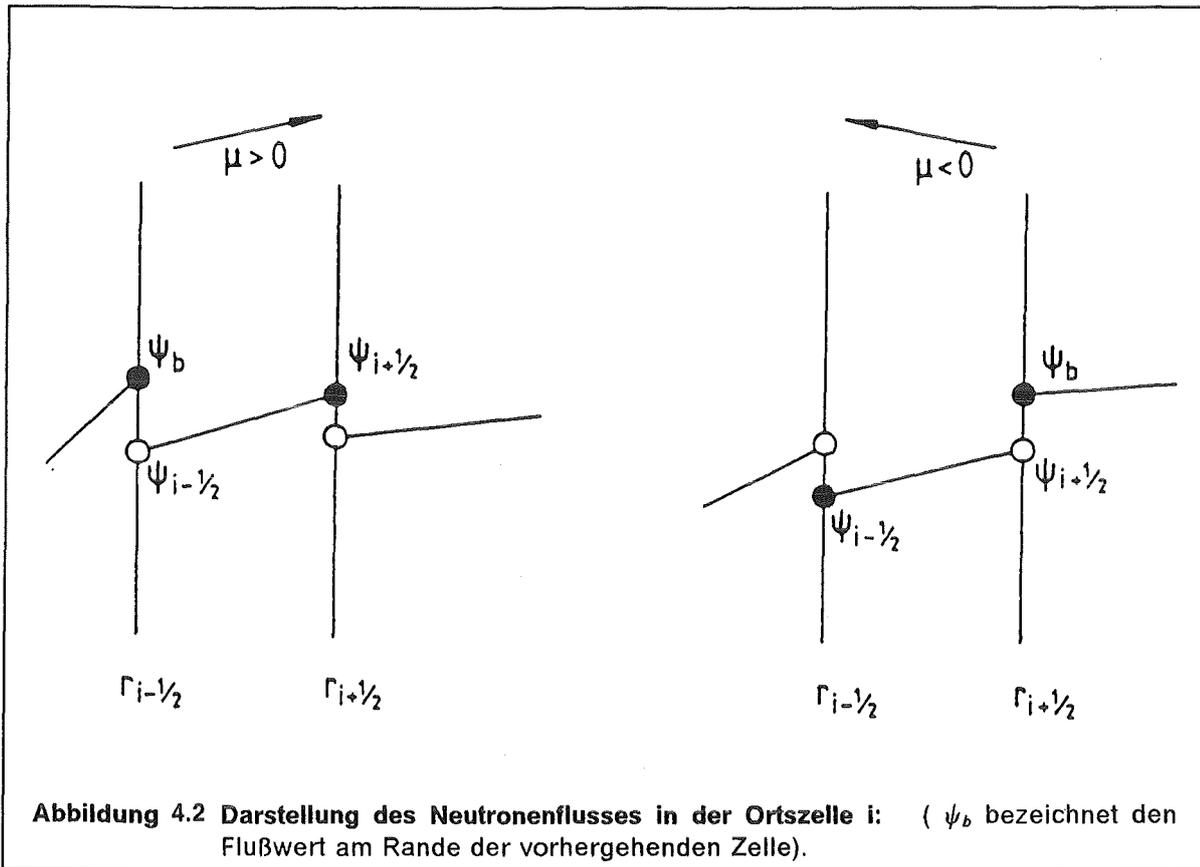
$$\psi_{m+\frac{1}{2},i} = 2 \left[ \frac{1}{2} (\psi_{m,i+\frac{1}{2}} + \psi_{m,i-\frac{1}{2}}) \right] - \psi_{m-\frac{1}{2},i} \quad (4.2)$$

ersetzt. Der Flußwert  $\psi_{m-\frac{1}{2},i}$  ist aus den vorhergehenden Rechenschritten (bzw. Randbedingungen) bekannt. Setzt man die Gl. (4.2) in die Gl.(3.46) ein und integriert die erhaltenen Gleichungen über die Intervallbreite  $\Delta r_i$  nach der Einführung von

$$(a) \quad 1 \quad \text{bzw.} \quad (r - r_{i-\frac{1}{2}}) \quad \text{für} \quad \mu < 0$$

$$(b) \quad 1 \quad \text{bzw.} \quad (r_{i+\frac{1}{2}} - r) \quad \text{für} \quad \mu > 0$$

als Gewichtsfunktionen bei der Integration, so zerfällt jede der  $G \times M$  Gleichungen in ein System von 2l Gleichungen, die dem Anhang B entnommen werden können.



Zur Aufstellung des in TWOTRAN zu lösenden Gleichungssystems werden nach der Art eines Gitters den Maschenrandpunkten  $r_{i\pm\frac{1}{2}}$ ,  $z_{j\pm\frac{1}{2}}$  diskrete Werte des Flußes  $\psi_{m,i\pm\frac{1}{2},j\pm\frac{1}{2}}$  zugeordnet. Die in der Gl.(3.47) auftretenden Differentiale werden im Sinne finiter Differenzen anhand der Werte  $\psi_{m,i\pm\frac{1}{2},j\pm\frac{1}{2}}$  approximiert. Dazu integriert man jede der Gln.(3.47) über das Volumen der (i,j)-ten Orts-Masche, deren Grenzen durch  $r_{i\pm\frac{1}{2}}$  und  $z_{j\pm\frac{1}{2}}$  gegeben sind. Für die Zelle ( i, j ) mit dem Volumen<sup>3</sup>

$$V_{ij} = 2\pi \int_i dz \int_j r dr = \Delta z_j \pi (r_{i+\frac{1}{2}}^2 - r_{i-\frac{1}{2}}^2), \quad \Delta z_j = z_{j+\frac{1}{2}} - z_{j-\frac{1}{2}} \quad (4.3)$$

kommt man nach der Integration von (3.47) über  $V_{ij}$  zu einer Bilanzgleichung der Form

$$\begin{aligned} & \mu_m 2\pi r_{i+\frac{1}{2}} \int_j dz \psi_m(r_{i+\frac{1}{2}}, z) - \mu_m 2\pi r_{i-\frac{1}{2}} \int_j dz \psi_m(r_{i-\frac{1}{2}}, z) + \frac{\alpha_{m+\frac{1}{2}}}{w_m} 2\pi \int_i dr \int_j dz \psi_{m+\frac{1}{2}}(r, z) - \\ & \frac{\alpha_{m-\frac{1}{2}}}{w_m} 2\pi \int_i dr \int_j dz \psi_{m-\frac{1}{2}}(r, z) + \xi_m 2\pi \left[ \int_i dr r \psi_m(r, z_{j+\frac{1}{2}}) - \int_i dr r \psi_m(r, z_{j-\frac{1}{2}}) \right] \\ & + \Sigma_t^g 2\pi \int_i dr r \int_j dz \psi_m(r, z) = 2\pi \int_i dr r \int_j dz q_m(r, z) \end{aligned} \quad (4.4)$$

<sup>3</sup> Zur Vereinfachung bezeichne  $\int_i$  die Integration über das Intervall  $[r_{i-\frac{1}{2}}, r_{i+\frac{1}{2}}]$  bzw.  $\int_j$  die Integration über das Intervall  $[z_{j-\frac{1}{2}}, z_{j+\frac{1}{2}}]$ .

Diese Gleichung läßt sich beträchtlich vereinfachen durch eine geeignete Definition der einzelnen Größen. Sei

1.  $\psi_{m,i,j}$  der mittlere Fluß im Volumen  $V_{ij}$

$$\psi_{m,i,j} = \frac{1}{V_{ij}} 2\pi \int_i \int_j \psi_m(r, z) dz dr \quad (4.5)$$

2.  $q_{m,i,j}$  der über dem Volumen  $V_{ij}$  gemittelte Quellterm

$$q_{m,i,j} = \frac{1}{V_{ij}} 2\pi \int_i \int_j q_m(r, z) dz dr \quad (4.6)$$

3.  $\psi_{m,i+\frac{1}{2},j}$  der mittlere Fluß auf der Oberfläche mit dem Inhalt  $A_{i+\frac{1}{2},j} = 2\pi r_{i+\frac{1}{2}} \Delta z_j$

$$\psi_{m,i+\frac{1}{2},j} = \frac{2\pi r_{i+\frac{1}{2}}}{A_{i+\frac{1}{2},j}} \int_j \psi_m(r_{i+\frac{1}{2}}, z) dz \quad (4.7)$$

4.  $\psi_{m,i,j+\frac{1}{2}}$  der mittlere Fluß auf der Oberfläche mit dem Inhalt  $B_i = \pi(r_{i+\frac{1}{2}}^2 - r_{i-\frac{1}{2}}^2)$

$$\psi_{m,i,j+\frac{1}{2}} = \frac{2\pi}{B_i} \int_i r \psi_m(r, z_{j+\frac{1}{2}}) dr \quad (4.8)$$

so geht (4.4) über in

$$\begin{aligned} & \mu_m A_{i+\frac{1}{2},j} \psi_{m,i+\frac{1}{2},j} - \mu_m A_{i-\frac{1}{2},j} \psi_{m,i-\frac{1}{2},j} + \frac{\alpha_{m+\frac{1}{2}}}{W_m} (A_{i+\frac{1}{2},j} - A_{i-\frac{1}{2},j}) \psi_{m+\frac{1}{2},i,j} - \\ & \frac{\alpha_{m-\frac{1}{2}}}{W_m} (A_{i+\frac{1}{2},j} - A_{i-\frac{1}{2},j}) \psi_{m-\frac{1}{2},i,j} + \xi_m B_i \psi_{m,i,j+\frac{1}{2}} - \xi_m B_i \psi_{m,i,j-\frac{1}{2}} + V_{ij} \Sigma_i \psi_{m,i,j} = V_{ij} q_{m,i,j} \end{aligned} \quad (4.9)$$

wobei der Term  $2\pi \int_i \int_j \psi_{m+\frac{1}{2}}(r, z) dz dr$  durch  $\frac{A_{i+\frac{1}{2},j} - A_{i-\frac{1}{2},j}}{V_{ij}} \psi_{m+\frac{1}{2},i,j}$  approximiert wurde.

Für jede Masche sind nach (4.9) sieben Flußwerte zu berechnen. Die Lösung beginnt mit einer Flußvorgabe an Stellen mit bekannten Randbedingungen, zum Beispiel wird für  $\mu_m < 0$  und  $\xi_m < 0$  der in die obere Eckzelle strömende Fluß gleich Null angenommen (Vakuum-Randbedingung). Die anderen Flüsse können dann mittels der "diamond difference"-Methode berechnet werden. Dabei gilt, daß der arithmetische Mittelwert der Neutronenflüsse von gegenüberliegenden Zellwänden gleich dem Mittelwert der Flußdichte in der Zelle ist.

$$\begin{aligned} \psi_{m,i,j} &= \frac{1}{2} (\psi_{m+\frac{1}{2},i,j} - \psi_{m-\frac{1}{2},i,j}) \\ \psi_{m,i,j} &= \frac{1}{2} (\psi_{m,i+\frac{1}{2},j} - \psi_{m,i-\frac{1}{2},j}) \\ \psi_{m,i,j} &= \frac{1}{2} (\psi_{m,i,j+\frac{1}{2}} - \psi_{m,i,j-\frac{1}{2}}) \end{aligned} \quad (4.10)$$

Nehmen wir an, daß im Falle  $\mu < 0$ ,  $\xi < 0$  die drei Flüsse  $\psi_{m,i+\frac{1}{2},j}$ ,  $\psi_{m,i,j+\frac{1}{2}}$ ,  $\psi_{m-\frac{1}{2},i,j}$  bekannt sind. Die Flüsse  $\psi_{m,i-\frac{1}{2},j}$ ,  $\psi_{m,i,j-\frac{1}{2}}$  sowie  $\psi_{m+\frac{1}{2},i,j}$  lassen sich aus der Gl.(4.9) mit Hilfe von (4.10) eliminieren und es ergibt sich

$$\psi_{m,i,j} = \frac{|\mu_m|(A_{i+\frac{1}{2}} + A_{i-\frac{1}{2}})\psi_{i+\frac{1}{2}} + 2|\xi_m|B_i\psi_{i+\frac{1}{2}} + (A_{i+\frac{1}{2}} - A_{i-\frac{1}{2}})(\alpha_{m+\frac{1}{2}} - \alpha_{m-\frac{1}{2}})\psi_{m-\frac{1}{2}}/w + qV}{|\mu_m|(A_{i+\frac{1}{2}} + A_{i-\frac{1}{2}}) + 2|\xi_m|B_i + (A_{i+\frac{1}{2}} - A_{i-\frac{1}{2}})(\alpha_{m+\frac{1}{2}} - \alpha_{m-\frac{1}{2}})/w + \Sigma_t V} \quad (4.11)$$

$\psi_{m,i,j}$  sind die den Maschenmittelpunkten  $(r_i, z_i)$  zugeordneten diskreten Werte der Neutronenflußdichte  $\psi$ . Der in der obigen Gleichung enthaltene unbekannte Fluß  $\psi_{m-\frac{1}{2}}$  kann unter der Annahme, daß für die erste Eingangsrichtung  $\mu_m$  auf jedem Niveau  $\xi_m$   $\psi_{m+\frac{1}{2}} = \psi_m$  ist, aus der Gl. (4.11) berechnet werden, da für diese Richtung gilt [23]

$$\frac{\alpha_{m+\frac{1}{2}} - \alpha_{m-\frac{1}{2}}}{w_m} = 0$$

Bei der räumlichen Diskretisierung der Gln.(3.44)-(3.46) entstehen für jede betrachtete Masche zwei lineare Gleichungen. Für die Gl.(3.47) bekommt man jeweils eine lineare Gleichung. Die Gesamtheit der Multigruppengleichungen bildet somit ein großes lineares Gleichungssystem. Wir beschränken uns hier darauf, dieses System symbolisch mittels der Operatoren darzustellen. Unter Zusammenfassung von (B.1)-(B.3) sowie (4.2) und (4.9)-(4.10) erhalten wir ein Gleichungssystem der Gestalt [20]:

$$L\vec{\psi} = H\vec{\psi} + Q_{ext} \quad (4.12)$$

wobei der Operator L für die Verluste steht und durch die Diagonalmatrix

$$L_{g,g} = \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} + \Sigma_t^g(\vec{r})$$

definiert ist. Der Operator H beschreibt die Streuung und Spaltung. Er ist durch

$$H_{g,g'}\psi^{g'} = \int_{4\pi} \Sigma^{g' \rightarrow g}(\vec{r}, \vec{\Omega} \rightarrow \vec{\Omega}')\psi^{g'}(\vec{r}, \vec{\Omega}')d\vec{\Omega}'$$

mit

$$\Sigma^{g' \rightarrow g}(\vec{r}, \vec{\Omega} \rightarrow \vec{\Omega}') = \Sigma_s^{g' \rightarrow g}(\vec{r}, \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') + \frac{1}{4\pi} \chi^g(v\Sigma_f(\vec{r}))^{g'}$$

gegeben. Der Vektor  $Q_{ext}$  bezeichnet die externe Quelle und  $\vec{\psi}$  den Fluß in der Vektorform  $\psi(\vec{r}, \vec{\Omega}) = [\psi^1(\vec{r}, \vec{\Omega}), \dots, \psi^6(\vec{r}, \vec{\Omega})]$ .

Bei der numerischen Lösung nach der diskreten Ordinatenmethode wird jede der Komponenten  $\psi^g(\vec{r}, \vec{\Omega})$  durch die diskreten Flußwerte an den Knoten der Orts-Winkel-Masche zweckmäßigerweise ersetzt. Die Operatoren L und H werden dabei durch die zugehörigen Matrizen dargestellt. Gl. (4.12) ist iterativ zu lösen. Die Iterationsvorschrift lautet (sog. äußere Iterationen)

$$(L - H^d - H^s)\vec{\psi}^n = (H^u + H^f)\vec{\psi}^{n-1} + Q_{ext} \quad (4.13)$$

wobei  $\vec{\psi}^0$  gegeben ist.

Dabei wird die Matrix H in eine Summe von vier Teilmatrizen zerlegt. Die einzelnen Terme beschreiben die Abwärtsstreuung ( $H^d$ ), die Streuung innerhalb einer Gruppe ( $H^s$ ), die Aufwärtsstreuung ( $H^u$ ) und die Spaltquelle ( $H^f$ ).

Gl.(4.13) läßt sich wegen der Blockdreieckstruktur der Matrix ( $H^d$ ) für jede Energiegruppe getrennt lösen. Auch in diesem Fall wird die Lösung mit Hilfe eines Iterationsverfahrens erzielt. Die sog. inneren Iterationen verlaufen nach folgendem Schema:

$$L_{gg}(\psi)^{n,k} = H_{gg}(\psi)^{n,k-1} + (Q_g)^n \quad (4.14)$$

wobei  $(Q_g)^n$  gemäß

$$(Q_g)^n = [H^d \vec{\psi}^n + (H^u + H^f) \vec{\psi}^{n-1} + Q_{ext}]_g \quad (4.15)$$

berechnet wird. Die Spaltquelle und die Streuquelle zu den höheren Energien hin ( sog. Aufwärtsstreuung ) wurden in jeder äußeren Iteration neu berechnet, während die Streuquelle innerhalb einer Gruppe nach der Berechnung des neuen Gruppenflusses verbessert wird.

Bei der Bestimmung des Multiplikationsfaktors  $k_{eff}$  ist die äußere Quelle gleich Null ( Eigenwertproblem ) . Gl.(4.12) nimmt die Form

$$L \vec{\psi} = (H^u + H^s + H^d) \vec{\psi} + \frac{1}{k} H^f \vec{\psi} \quad (4.16)$$

an. Gl.(4.16) wird durch die konventionelle Potenzmethode ( " power"- oder "fission source"-Iteration ) gelöst

$$k^n = k^{n-1} \frac{\int_D f(\vec{r})^T \int \vec{\psi}^n(\vec{r}, \vec{\Omega}) d\vec{\Omega} d\vec{r}}{\int_D f(\vec{r})^T \int \vec{\psi}^{n-1}(\vec{r}, \vec{\Omega}) d\vec{\Omega} d\vec{r}} \quad (4.17)$$

mit

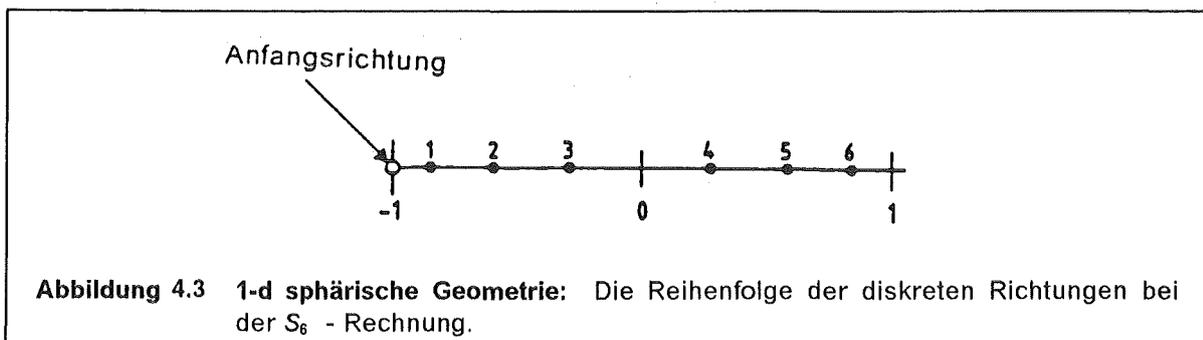
$$f(\vec{r})^T = [(v\Sigma_f(\vec{r}))^1, \dots, (v\Sigma_f(\vec{r}))^G]$$

und

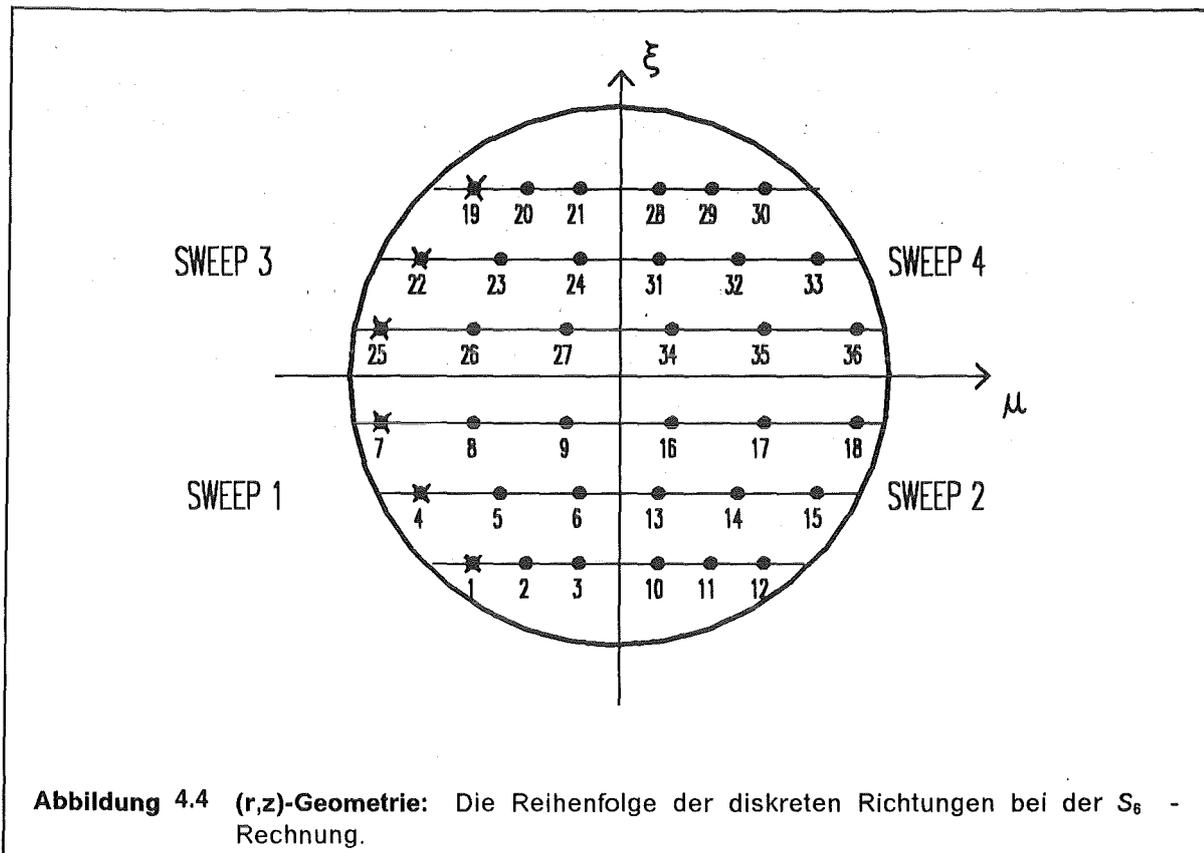
$$k^0 = 1,$$

$k^n$  konvergiert mit wachsender Anzahl von Iterationen gegen  $k_{eff}$  .

Der innere Iterationsprozeß erfolgt nach der durch (4.14) bestimmten Iterationsvorschrift. Bei jeder inneren Iteration werden alle durch die Diskretisierung entstandenen Gitterpunkte durchgelaufen. Die dabei verwendete Reihenfolge der Richtungen ist beispielsweise in der  $S_6$ -Näherung aus der Abb.4.3 für die eindimensionale sphärische und ebene Geometrie und aus der Abb.4.4 für die (r,z)-Geometrie zu entnehmen.



**Abbildung 4.3 1-d sphärische Geometrie:** Die Reihenfolge der diskreten Richtungen bei der  $S_6$  - Rechnung.



**Abbildung 4.4 (r,z)-Geometrie:** Die Reihenfolge der diskreten Richtungen bei der  $S_6$  - Rechnung.

In den eindimensionalen Fällen sind in jeder Orts-Winkel-Masche vier Flußwerte  $\psi_{i-\frac{1}{2}}, \psi_{i+\frac{1}{2}}, \psi_{m+\frac{1}{2}}, \psi_{m-\frac{1}{2}}$  zu ermitteln. In gekrümmten Geometrien folgt der Durchlaufsinne zunächst den Anfangsrichtungen  $\{\Omega_{l, \frac{1}{2}} = (\xi_l, \pi): l = 1, \dots, L\}$  aller Niveaus (insgesamt L-Richtungen). Für jede der L Richtungen sind die Flußwerte  $\psi_{i-\frac{1}{2}}, \psi_{i+\frac{1}{2}}$  nach der Gl. (B.3) zu berechnen. Man beginnt mit einer Masche, für die die Randbedingungen bekannt sind, zum Beispiel wird der in eine Randmasche einströmende Fluß  $\psi_b$  gleich Null angenommen (Vakuum-Randbedingung), und schreitet durch das Ortsgitter voran. Hat man  $\psi_{m-\frac{1}{2}}$  ( $m = 1, \dots, L$ ) berechnet, so geht man zu den Eingangsrichtungen über. Für jede Eingangsrichtung wird das Ortsgitter von rechts nach links durchlaufen. Die Flußwerte  $\psi_{m+\frac{1}{2}}, \psi_b$  sind von vorhergehenden Rechenschritten (bzw. Randbedingungen) bekannt, während  $\psi_{i-\frac{1}{2}}, \psi_{i+\frac{1}{2}}$  aus der Gl. (B.2) berechnet werden. Zusätzlich werden die Flußwerte  $\psi_{m+\frac{1}{2}}$  nach dem "diamond difference"-Schema (s. Gl. (4.2)) berechnet. Anschließend folgen alle Ausgangsrichtungen (Gl.(B.1)). Dabei wird über die Ortsgitterpunkte von links nach rechts vorangeschritten. Diese Organisation der Durchgänge durch das Ortsgitter entspricht dem Durchfluß der Neutronen. Der Neutronenfluß wird auf diese Weise für jede Energiegruppe, beginnend mit der obersten, berechnet.

Auch in dem zweidimensionalen Fall basiert die Organisation des Durchgangs durch das Orts-Winkel-Gitter auf der Einteilung der diskreten Richtungen in Oktanten. In dem TWO-TRAN-Programm werden zunächst alle Eingangsrichtungen (Oktanten I und II) behandelt, danach folgen alle Ausgangsrichtungen (Oktanten III und IV). Im einzelnen werden jeweils drei Laufschleifen durchgeführt. Der Lösungsweg hängt, wie schon erwähnt von dem Oktanten ab, welcher gerade betrachtet wird: z. B. für alle in dem ersten Oktant ( $\mu < 0, \xi < 0$ ) befindlichen Richtungen wird mit der Berechnung des Flußes am oberen Rand des räumlichen Bereiches begonnen und nach unten verfahren (äußere Schleife über  $j$ ;  $j = JT, JT-1, \dots, 1$ ). Dabei wird mit der rechten oberen Eckzelle, für die die Fluß-

werte aus den Randbedingungen bekannt sind, angefangen und dann entlang des oberen Randes von rechts nach links vorangeschritten ( nächste Schleife über  $i$ ;  $i = IT, IT-1, \dots, 1$  ). Für jede Ortszelle  $(i,j)$  werden alle dem ersten Oktant gehörenden Richtungen bearbeitet ( letzte Schleife über  $m$  ). Für jede Richtung wird die winkelabhängige Streuquelle in der  $P_L$ -Darstellung  $q_{\xi,m,i,j}^g$  und der Fluß  $\psi_{m,i,j}^g$  nach (4.11) berechnet. Die Flußwerte  $\psi_{m+\frac{1}{2},i,j}^g$ ,  $\psi_{m,i-\frac{1}{2},j}^g$ ,  $\psi_{m,i,j-\frac{1}{2}}^g$  werden mittels der "diamond difference"-Methode ermittelt. Nach der Vollendung der zweiten Schleife folgt der Lösungsweg allen Richtungen des zweiten Oktanten ( $\mu > 0, \xi < 0$ ). Diesmal werden die Ortszellen von links nach rechts durchlaufen ( $i = 1, 2, \dots, IT$ ). Wenn der rechte Rand des Bereichs erreicht ist, geht man weiter zu den Richtungen des ersten Oktanten über. Auf diese Weise geht man bis zum unteren Rand des Bereichs weiter ( $j = JT-1, JT-2, \dots, 1$ ). Für alle Ausgangsrichtungen wird von unten nach oben vorangeschritten ( $j$  läuft von 1 bis JT). Für jeden Wert von  $j$  werden die Maschenzellen  $(i,j)$  von rechts nach links (Oktant III;  $\mu < 0, \xi > 0$ ) bzw. von links nach rechts (Oktant IV;  $\mu > 0, \xi > 0$ ) bearbeitet. Dabei gelten für die einzelnen Oktanten folgende "diamond"-Beziehungen:

$$\begin{aligned}
 \psi_{m,i+\frac{1}{2},j}^g &= 2\psi_{m,i,j}^g - \psi_{m,i-\frac{1}{2},j}^g & \mu_m > 0 \\
 \psi_{m,i-\frac{1}{2},j}^g &= 2\psi_{m,i,j}^g - \psi_{m,i+\frac{1}{2},j}^g & \mu_m < 0 \\
 \psi_{m,i,j+\frac{1}{2}}^g &= 2\psi_{m,i,j}^g - \psi_{m,i,j-\frac{1}{2}}^g & \xi_m > 0 \\
 \psi_{m,i,j-\frac{1}{2}}^g &= 2\psi_{m,i,j}^g - \psi_{m,i,j+\frac{1}{2}}^g & \xi_m < 0
 \end{aligned} \tag{4.18}$$

Dieses Verfahren ermöglicht die Berechnung des Flußes für jede Energiegruppe  $g$ , beginnend mit der obersten. Für alle Anfangsrichtungen, die auf der Abb.4.4 mit dem Kreuz bezeichnet sind, wird der unbekannte Fluß  $\psi_{m-\frac{1}{2},i,j}^g$  mittels der schon vorher diskutierten vereinfachten Form der Gl.(4.11) berechnet.

Falls während der Berechnung negative Flußwerte erzeugt sind, führt sowohl das ONE-TRAN als auch das TWOTRAN Programm die Korrektur-Aktion, sog. "negative flux fix up" [20] durch.

In den beiden Programmen stehen als Randbedingungen zur Verfügung :

1. Vakuum ( einwärtsgerichteter Winkelfluß = Null).
2. Reflexion ( einwärtsgerichteter Winkelfluß = auswärtsgerichteter Winkelfluß der reflektierenden Richtung).
3. Albedo ( einwärtsgerichteter Winkelfluß = auswärtsgerichteter Winkelfluß der reflektierenden Richtung multipliziert mit dem Reflexionsfaktor).
4. Periodizität ( einwärtsgerichteter Winkelfluß am Rand = auswärtsgerichteter Winkelfluß am Gegenrand).
5. Weiß ( einwärtsgerichteter Winkelfluß ist konstant )
6. Inhomogene Quelle (einwärtsgerichteter Winkelfluß = vorgegebene inhomogene Randquelle)

Die Konvergenz der Iterationen wird auf der Basis geeigneter Abbruchskriterien kontrolliert. Sobald diese Kriterien erfüllt sind, werden die Iterationen beendet. Darüberhinaus werden zur Konvergenzbeschleunigung der Iterationsprozesse die sog. Rebalancing-

Methoden benutzt ([20], [21]). Dies gewährleistet, daß die globale Neutronenbilanz aufrechterhalten wird.

Um die Multigruppen-Neutronentransport-Gleichung unter strenger Behandlung der anisotropen Neutronenstreuung lösen zu können, wurde das in den Abschnitten (3.2.1) und (3.2.2) beschriebene numerische Verfahren in die Transportprogramme ONETRAN und TWOTRAN eingebaut. Hierfür waren umfangreiche Programmänderungen und Entwicklungen erforderlich. Die danach entstandenen Transportprogramme ANTRA1 und ANTRA2 verwenden zwei alternative Verfahren zur Berechnung des Multigruppen-Streuterm. Das eine beruht auf der üblichen  $P_L$ -Approximation des Streukerns, das zweite auf der neuen strengen Darstellung des Streuintegrals. Dabei stützt sich das strenge Rechenverfahren auf die Anwendung von makroskopischen winkelabhängigen Multigruppen-Streumatrizen, die wie schon erwähnt mit dem Programm CROMIX aus mikroskopischen Daten berechnet werden. Die Streumatrizen werden dem Transportmodul als Eingabedaten übergeben (s. Abb.4.5). Die Berechnung der Querschnitte erfolgt gruppenweise, d.h. für jeweils eine Gruppe werden alle benötigten mikroskopischen Daten eingelesen; die gewünschten makroskopischen Daten werden berechnet und in einer Schnittstellendatei abgespeichert (vgl. Strukturdiagramm der Querschnittsberechnung Abb.4.6). Die mikroskopischen Streumatrizen werden in dem Programm DOUBLE [25] aus den Kerndaten von EFF-1 berechnet.

Die Einführung des neuen Berechnungsschemas für den Gruppenstreuterm hat zahlreiche Modifikationen in den Programmmodulen, die die Gl.(4.12) nach (4.13) und (4.14) iterativ lösen, zur Folge. Die bei jeder Iteration zur Ermittlung des Flußes aus den Gln.(B.1-B.3) bzw. der Gl.(4.11) benötigten diskreten Werte des Streuterm sind nach folgenden Formeln zu berechnen:

a) in dem Programm ONETRAN

- sphärische und ebene Geometrie

$$q_{s,m,l\pm\frac{1}{2}}^g = \sum_{g'=1}^G \sum_{l=1}^L w_l \sum_{n=1}^N w_n \sum_s^{g' \rightarrow g} (n) l^*(k,l,n) \psi_{l,l\pm\frac{1}{2}}^{g'} \quad (4.19)$$

- zylindrische Geometrie

$$q_{s,m,l\pm\frac{1}{2}}^g = \frac{1}{2} \sum_{g'=1}^G \frac{1}{N} \sum_{l=1}^L w_l \sum_{n=1}^N \sum_s^{g' \rightarrow g} (a_{lnm}) [\psi_{m_1(m,l,n),l\pm\frac{1}{2}}^{g'} + \psi_{m_2(m,l,n),l\pm\frac{1}{2}}^{g'}] \quad (4.20)$$

b) in dem Programm TWOTRAN

(r,z)-Geometrie

$$q_{s,m,i,j}^g = \frac{1}{2} \sum_{g'=1}^G \frac{1}{N} \sum_{l=1}^L w_l \sum_{n=1}^N \sum_s^{g' \rightarrow g} (a_{lnm}) [\psi_{m_1(m,l,n),i,j}^{g'} + \psi_{m_2(m,l,n),i,j}^{g'}] \quad (4.21)$$

Die zur Berechnung des Streuterm notwendigen Übergangsquerschnitte und diskreten Werte des winkelabhängigen Flußes müssen in einem erweiterten Speicherfeld gehalten werden. In den beiden Programmen ONETRAN und TWOTRAN werden nur die Legendreschen Momente sowohl des Übergangsquerschnitts als auch des Flußes gespeichert. Die Programme, die den Datentransfer durchführen, sind im Rahmen dieser Arbeit neu entwickelt worden.

Die Diskretisierung der  $I^*$ -Funktion die nach (3.34) mit (3.37) und (3.38) durchgeführt wird, erfolgt in einem getrennten Programm. Die in der Formel (3.33) enthaltenen Integrationsgewichte  $w_i$  entsprechen den in ONETRAN benutzten Gauß-Legendreschen Gewichten  $w_i^{eg}$  ( $w_i = 2w_i^{eg}$ ).

In zylindrischer Geometrie basiert das neue Verfahren auf dem Legendre-Tschebyscheffschen Quadraturatz ( s. Abschn.3.21), der in die Programme ONETRAN und TWO-TRAN neu eingeführt wird.

Erstellung der makroskopischen winkelabhängigen Streumatrix für ANTRA1 und ANTRA2

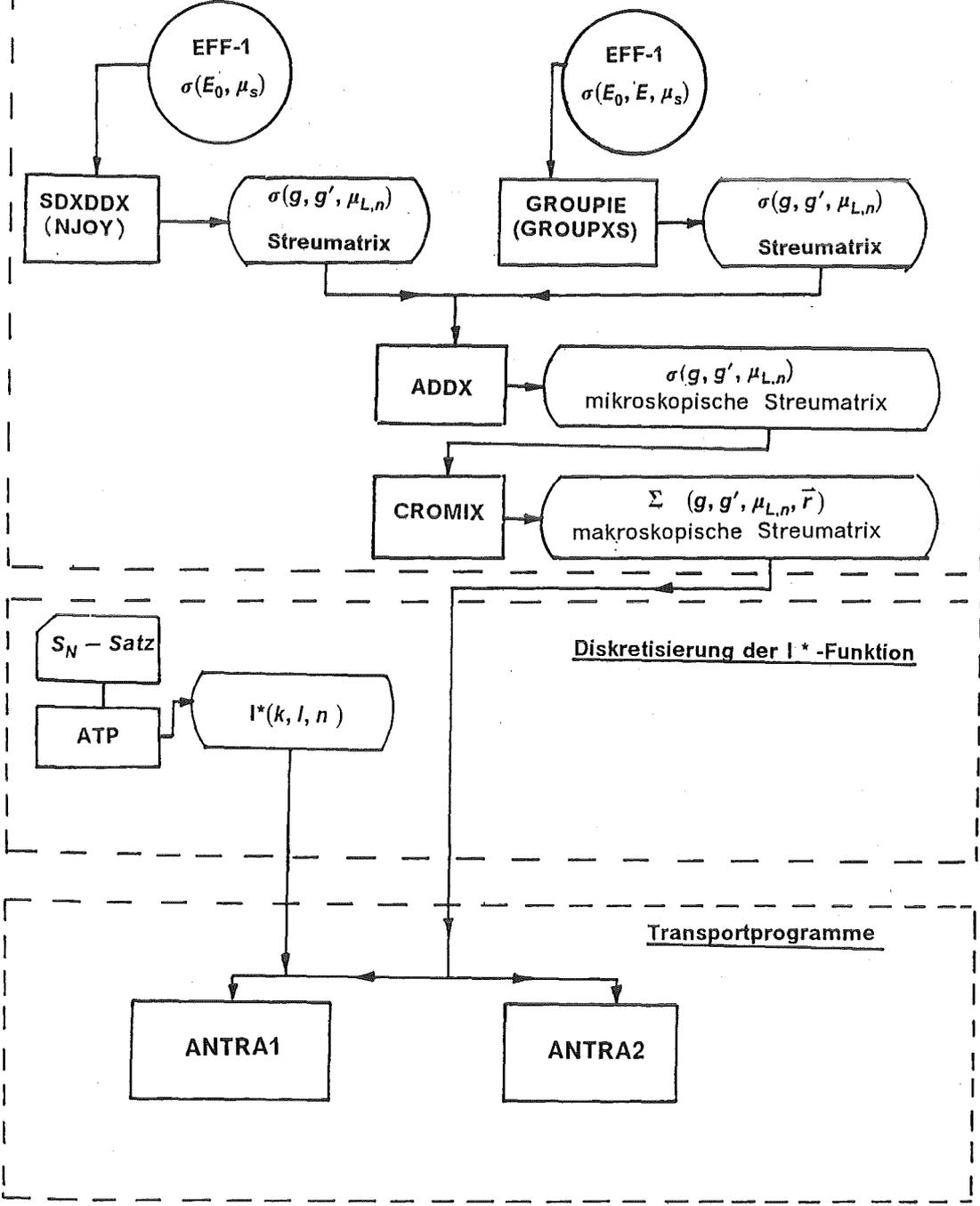
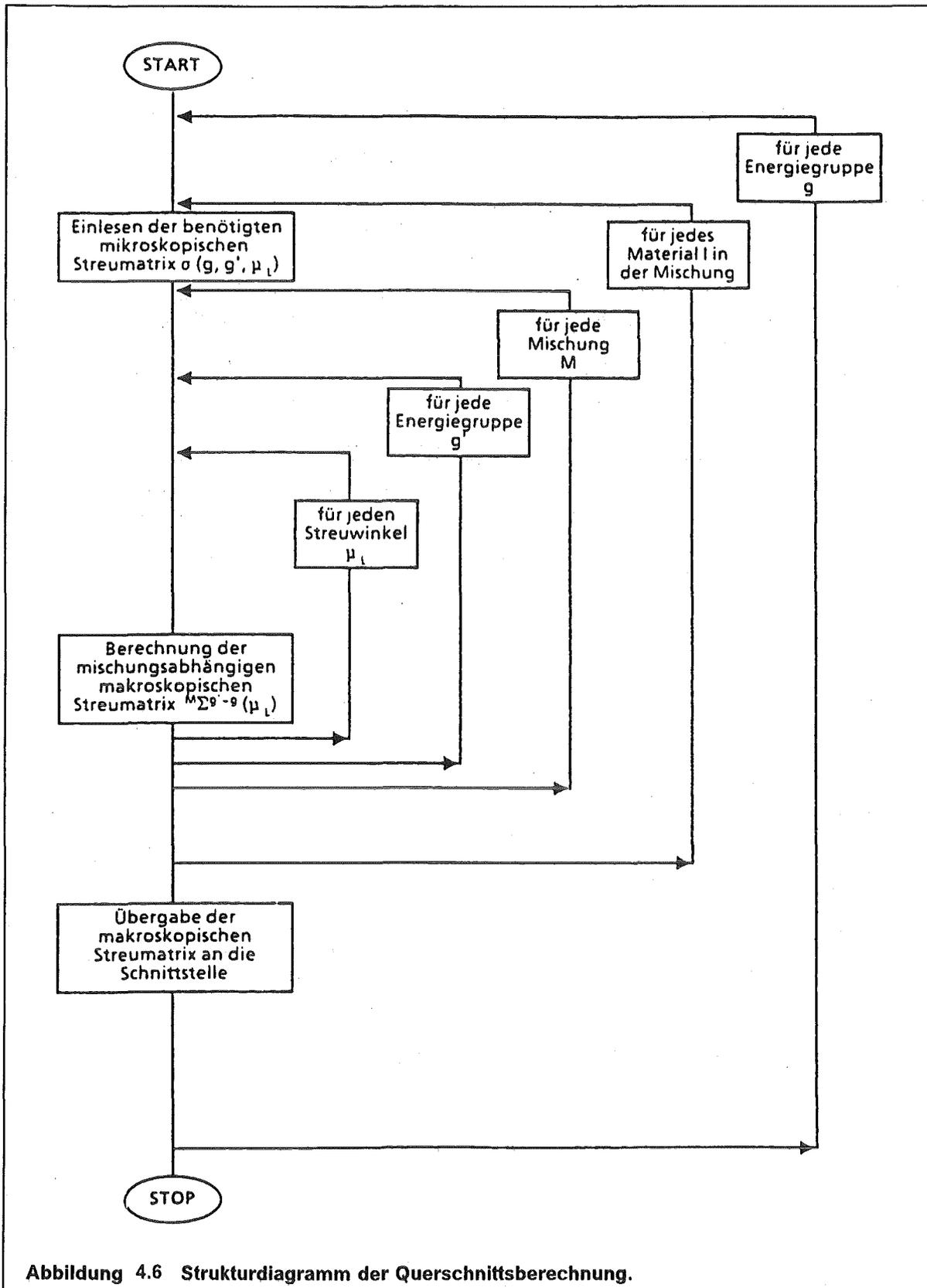


Abbildung 4.5 Strukturdiagramm des gesamten Programmsystems.



## **5. Verifikation des Programms ANTRA1 anhand des an der Technischen Universität in Dresden durchgeführten Experimentes zur Bestimmung der Neutronenmultiplikation im Blei**

Die physikalische Überprüfung des in den Programmen ANTRA1 und ANTRA2 implementierten strengen Rechenverfahrens kann nur durch die Nachrechnung geeigneter Experimente durchgeführt werden. Um aus den Rechnungen möglichst weitgehende Schlüsse auf die Qualität der aus den experimentellen Daten ausgewerteten Wirkungsquerschnitte und auf die Effektivität des neuen Verfahrens ziehen zu können, wurde bei der Auswahl der Experimente folgendes beachtet:

1. Die Anordnung sollte nur aus einem einzigen zu untersuchenden Element bestehen.
2. Die Geometrie der Anordnung sollte zur Vermeidung methodischer Schwierigkeiten in den Rechnungen möglichst einfach sein ( z.B. Kugel, Platte ).
3. Der gemessene Fluß sollte sich in dem Energiebereich konzentrieren, der für die neutronenphysikalische Analyse der Fusionsreaktoren untersucht werden soll ( d.h. bis zu 15 MeV ).
4. Die Spektren sollen empfindlich von dem zu untersuchenden Querschnitt abhängen.
5. Die Spektren sollen absolut gemessen werden. Die Diskrepanz zwischen der Rechnung und der Messung läßt sich dann viel klarer interpretieren.

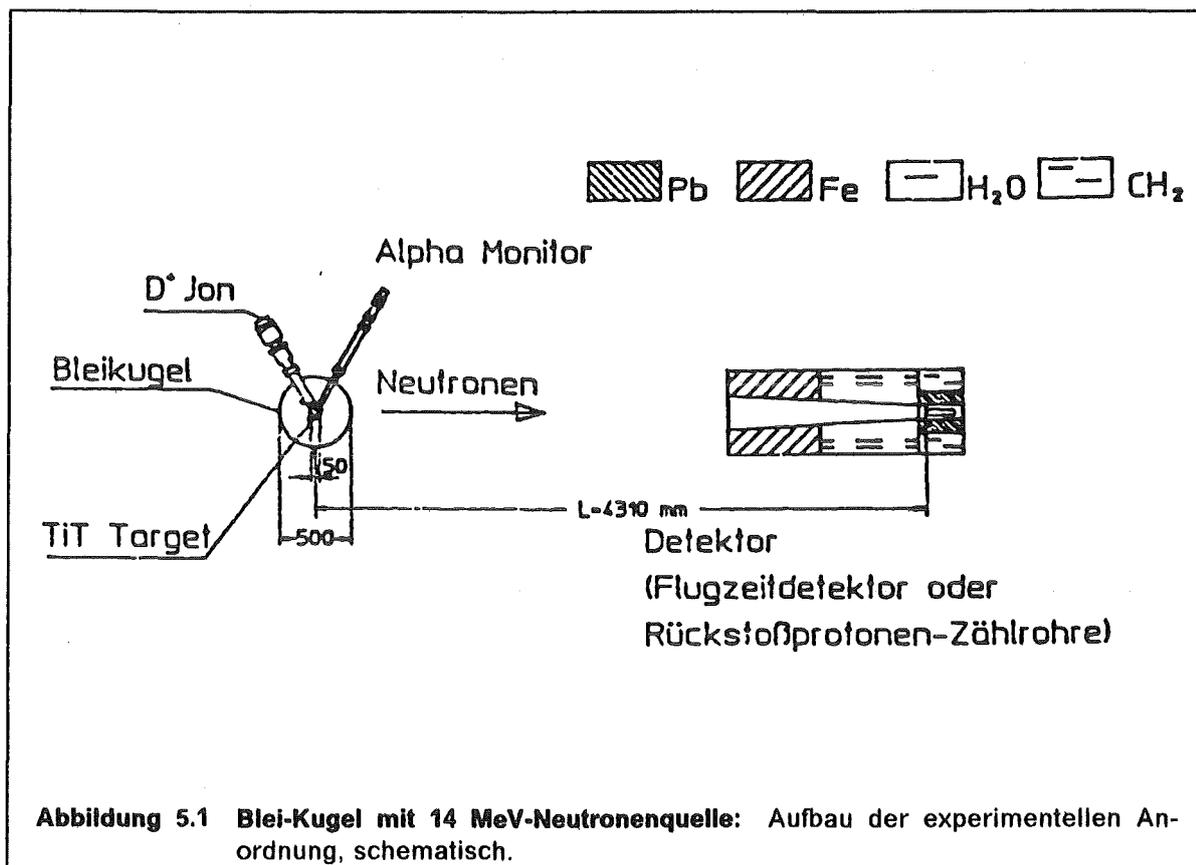
Zur wechselseitigen Überprüfung der in den verschiedenen Kerndatenbibliotheken (ENDF/B-V, ENDL-85, JENDL) enthaltenen Wirkungsquerschnitte und der in den Rechnungen für Spaltungsreaktoren bewährten Transportprogramme (ONETRAN, TWOTRAN, MCNP [31], ANISN [32], DOT [33]) ist eine Reihe von Experimenten vorgenommen worden.

Zur Verifizierung sowohl des Transportprogramms ANTRA1 als auch der doppelt differentiellen Neutronenemissionsquerschnitte von Blei aus der Kerndatenbibliothek EFF-1 - insbesondere für den (n, 2n)-Prozeß- wurde das an der Technischen Universität in Dresden (TUD) zur Bestimmung der Neutronenmultiplikation von Blei bei 14 MeV Neutroneneinschubenergie durchgeführte Experiment [19] ausgewählt. Dieses Experiment wurde unter Berücksichtigung aller vorher angegebenen Gesichtspunkte durchgeführt.

### **5.1 Beschreibung der experimentellen Anlage.**

Bei dem TUD-Experiment wurden die Neutronenausflußspektren an einer Blei-Kugelschale, die in ihrem Mittelpunkt mit 14 MeV Neutronen gespeist wurde, ermittelt. Abb.5.1 zeigt schematisch den Aufbau der experimentellen Anlage.

Zur Erzeugung der 14 MeV-Neutronen gemäß der (D-T)-Reaktion wurde der an der TUD fertiggestellte 14 MeV-Neutronengenerator benutzt. Es wurde ein Ti-T Target verwendet. Die Bleikugel hatte einen offenen Targetkanal bis ins Kugelzentrum. Die Quellstärke wurde mittels der assoziierten  $\alpha$  -Teilchen bestimmt, die mit dem Si-Oberflächensperrschichtzähler gemessen wurden. Der Detektor wurde unter einem Winkel von  $165^\circ$  zu der durch den Deuteronenstrahl bestimmten Achse ausgerichtet.



Mit der Flugzeit<sup>4</sup> - und Rückstoßprotonen-Spektrometrie<sup>5</sup> wurde das aus der Oberfläche der Blei-Kugel austretende Neutronenspektrum gemessen. Der bei der TOF-Methode benutzte Neutronendetektor war entweder ein kleiner Stilbene-Scintillator ( mit dem Durchmesser von 29 mm und der Länge von 20 mm ) oder ein großer Flüssig-Scintillator NE-213 (Durchmesser von 36 mm , Länge von 103 mm). Bei PRS wurde der Neutronenbereich von 0,7 MeV bis 14 MeV mit der wasserstoffgefüllten, kugelförmigen Kammer (Durchmesser: 3 bis 4 cm, Druck: 0,1 bis 1 MPa) bzw. mit Stilbene-Scintillatoren ( 10 mm/10 mm und 30 mm/25 mm ) überdeckt. Der Abstand L vom Kugelmittelpunkt der sich in dem Kollimator befindlichen Detektoren betrug bei jeder Messung 4,31 m. Insgesamt decken die Messungen den Energiebereich von 50 keV bis 15 MeV ab. Die Dicke der Blei-Kugelschale (22,5 cm) entspricht etwa 4,1 mittleren freien Weglängen der 14 MeV Neutronen.

## Experimentelle Ergebnisse

### Neutronenspektren

Die am Detektor gemessenen Leakage-Spektren  $N(u)$  ( pro Quellneutron und Lethargieeinheit ) sind aus der Abb.5.2 zu entnehmen. Auf der Abbildung sind die mit den PR-Detektoren und die mit den Flugzeitdetektoren ermittelten Spektren zusammen darge-

<sup>4</sup> Zur Vereinfachung wird im folgenden das Wort Flugzeitspektrometrie durch TOF (Time of Flight) abgekürzt

<sup>5</sup> Anstatt des Wortes Rückstoßprotonen-Spektrometrie wird die Abkürzung PRS (Proton Recoil Spectrometry) benutzt

stellt. In der Tab.5.1 sind die entsprechenden Meßungenauigkeiten zusammengefaßt. Jeder angegebene Fehler setzt sich aus den gesamten statistischen Fehlern der Meßgrößen und den systematischen Fehlern der zur Normierung der Daten benutzten Größen wie z.B. Quellstärke, Detektionsempfindlichkeit usw. zusammen. Der Raumuntergrund wurde anhand der Rechnungen mit dem Monte-Carlo-Programm MORSE auf dem Datensatz ENDF/B-IV ermittelt. Der Beitrag des Untergrundspektrums zum Leckagespektrum hat 6 % nicht überschritten. Das Untergrundspektrum ist in der Abb.5.2 miteingetragen.

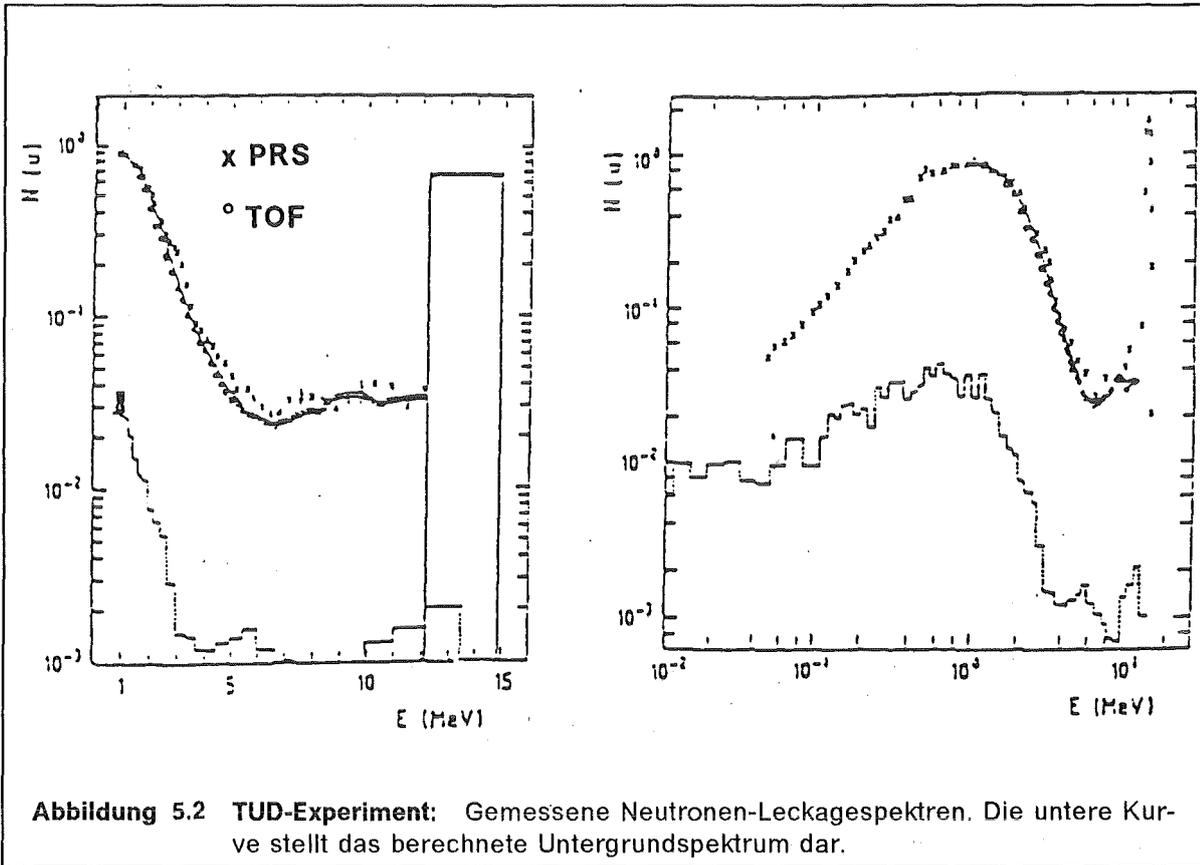


Abbildung 5.2 TUD-Experiment: Gemessene Neutronen-Leckagespektren. Die untere Kurve stellt das berechnete Untergrundspektrum dar.

Meßmethode	Energiebereich $E_i - E_{i-1}$ [MeV]					
	$\leq 0,5$	0,5-1	1-2	2-5	5-10	10-14
TOF	-	25	13	11	14	12
PRS	10	13	13	15	25	2

Tabelle 5.1 TUD-Experiment: Fehler der gemessenen Leckage-Spektren [%]

Wie aus der Abb.5.2 zu ersehen ist, ist die Leckage der Sekundärneutronen überwiegend durch die Neutronen mit Energien von ca. 1 MeV bestimmt (stark ausgeprägtes Maximum). Im Energiebereich von 1-2 MeV stimmen die beiden gemessenen Spektren miteinander sehr gut überein. Für höhere Energien d.h. Energien zwischen 2,5 MeV und 12 MeV ergeben sich kleine Diskrepanzen, die jedoch im Rahmen der Meßungenauigkeiten liegen. Im Energiebereich von 12,2 MeV bis 14,8 MeV sind die Meßergebnisse sehr ungenau, dies liegt an der schlechten Energieauflösung der Spektrometer und Unsicherheiten in der Entfaltung der Impulshöhenspektren. Daher wurde das Spektrum in diesem

Energieintervall durch einen Mittelwert von einzelnen punktwise ermittelten Meßwerten dargestellt. Für den Vergleich zur Rechnung wurde das Leckagespektrum erstellt, das sich für  $E < 1 \text{ MeV}$  aus dem PRS-Spektrum, für  $1 \text{ MeV} \leq E \leq 5 \text{ MeV}$  aus den gemittelten PRS- und TOF-Spektren und für  $E > 5 \text{ MeV}$  nur aus dem TOF-Spektrum zusammensetzt ( s. die durchgezogene Kurve auf den Abb. 5.2 ). Dieses Spektrum ist außerdem in der Abb.5.3 abgebildet.

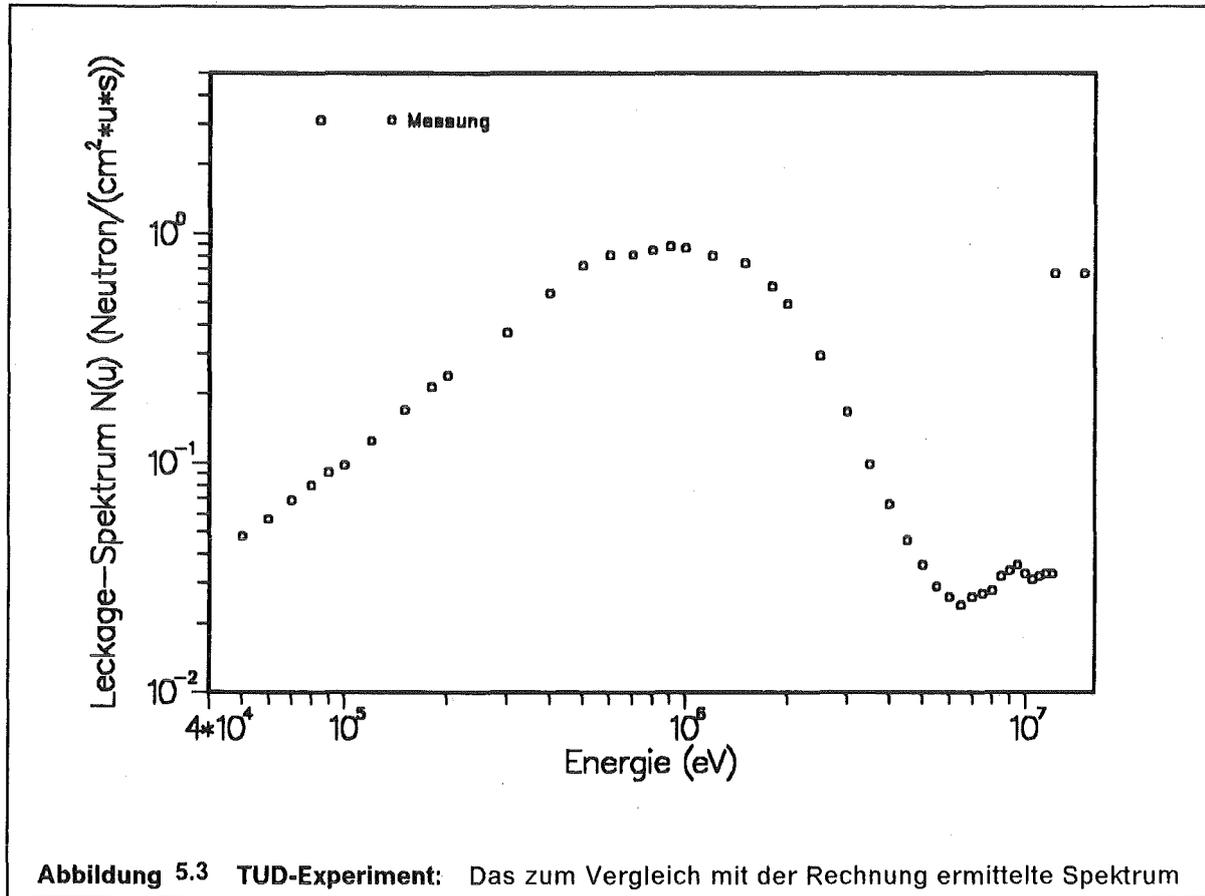


Abbildung 5.3 TUD-Experiment: Das zum Vergleich mit der Rechnung ermittelte Spektrum

### Neutronenmultiplikation

Wegen der in der Bleikugel praktisch vernachlässigbaren Absorption der Neutronen kann durch die Integration des Leckagespektrums über ausgewählte Energiebereiche ( $E_1 \dots E_2$ ) die partielle und über den ganzen Energiebereich die totale Neutronenmultiplikation  $M$  in der Bleikugel ermittelt werden. In der Tab.5.2 sind die berechneten Werte zusammengestellt.

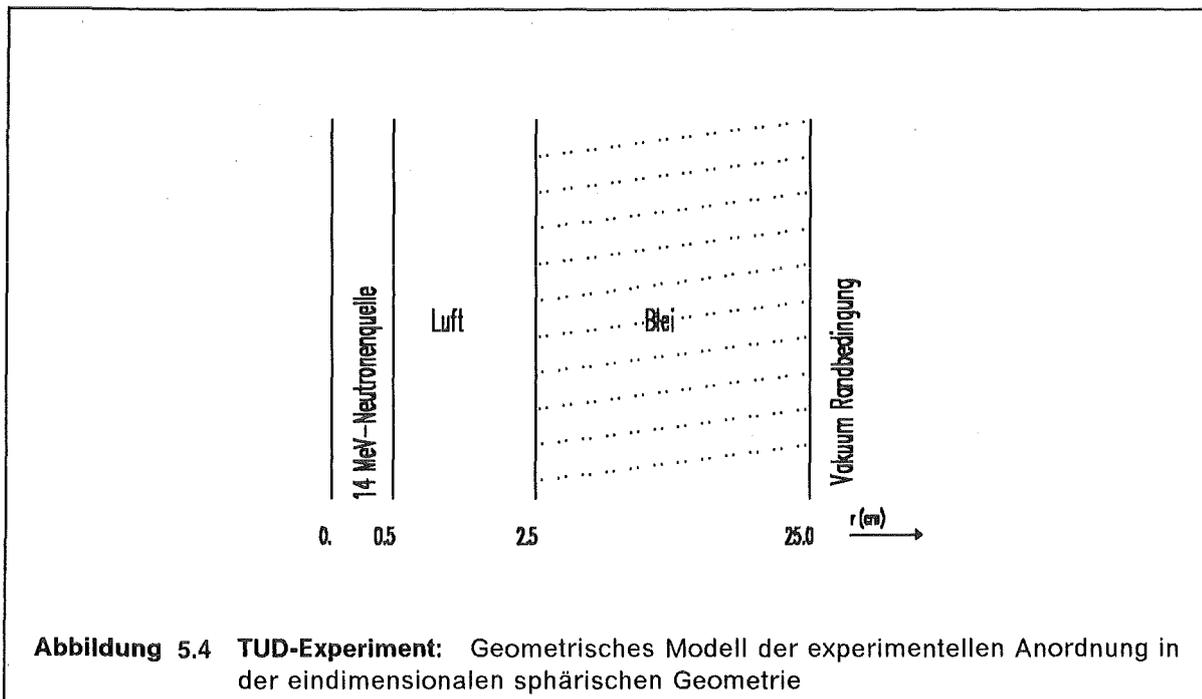
Meßmethode	Neutronenmultiplikation $M ( E_i - E_{i-1} )$			
	1-5	5-10	10-15	0-15
TOF	0,653	0,0190	0,144	-
PRS	0,701	0,0234	0,143	2,031
TOF und PRS (N(u) aus der Abb.5.4)	0,676	0,0190	0,144	1,944

**Tabelle 5.2 TUD-Experiment:** Partielle und totale Neutronenmultiplikation in der Bleikugel

Diese Werte geben Aufschluß über das Verhalten des doppelt-differentiellen  $(n,2n)$ -Wirkungsquerschnitts für Blei und dienen zu dessen Überprüfung.

## 5.2 Das Rechenmodell

Das TUD-Experiment wurde mit dem Transportprogramm ANTRA1 nachgerechnet. Die kugelsymmetrische Anordnung läßt sich in der eindimensionalen sphärischen Geometrie einfach darstellen (s. Abb.5.4).



Das Modell besteht aus einer inneren kugelförmigen Luft-Zone von 2,5 cm Radius, die in ihrem Zentrum die Neutronenquelle enthält. Daran schließt sich eine 22,5 cm dicke Kugelschale aus Blei mit 100% der theoretischen Dichte, d.i.  $11,34 \text{ g/cm}^3$  ( Atomzahldichte  $0,0335 \times 10^{24} \times 1/\text{cm}^3$  ), an. Das räumliche Maschennetz besteht aus 25 diskreten Intervallen, wobei sich 5 in der Luft-Zone und 20 in der Blei-Kugelschale befinden. Die Rechnungen wurden in einer 100-Gruppeneinteilung ( GAM II-Gruppenstruktur; vgl. Tab.5.3 ) durchgeführt. In der ersten Gruppe, die sich über Energien von 13,5 bis 14,9 MeV er-

streckt, befinden sich alle Quellneutronen. Für die Diskretisierung der Richtungsvariable wurde die  $S_{20}$ -Näherung angewendet. Die benutzten Multigruppen-Streumatrizen wurden aus der EFF-1 Kerndatenbibliothek in der GAM II-Gruppenstruktur mit den Programmen NJOY und DOUBLE berechnet. Die winkelabhängigen Streumatrizen wurden für 20 diskrete Streuwinkelsegmente entsprechend gemittelt. Die Winkelverteilung der Quellneutronen wurde als isotrop im Laborsystem angenommen.

Obwohl das Spektrum in großer Entfernung von der Kugel gemessen wurde, wurden die neutronephysikalischen Rechnungen auf das Kugelvolumen beschränkt mit der folgenden Begründung:

Bei dem Experiment wird das Impulshöhenspektrum gemessen. Aus diesem Spektrum läßt sich die Energieverteilung des skalaren Flußes  $k \cdot \Phi(L, E)$  berechnen [27]. Dabei ist  $k$  ein konstanter Faktor,  $L$  ist der Abstand zwischen dem Meßpunkt und dem Kugelmittelpunkt. Für die Quellneutronennormierung wird auch die Energieverteilung der Quelle  $q_{ext}(E)$  gemessen. Aus diesen beiden Messungen läßt sich die Größe

$$N^M(L, E) = \frac{\Phi(L, E)}{\int_0^\infty \Phi_q(L, E) dE} \quad (5.1)$$

berechnen, die als Meßergebnis (Leckage pro Quellneutron im Abstand  $L$ ) ermittelt worden war. Dabei ist  $\Phi_q(L, E)$  der von der Quelle verursachte skalare Fluß im Abstand  $L$  vom Kugelmittelpunkt. Der skalare Fluß läßt sich ausdrücken durch

$$\Phi(L, E) = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \psi(L, E, \cos \vartheta) 2\pi \sin \vartheta d\vartheta \quad (5.2)$$

wobei  $\vartheta$  der Winkel zwischen der betrachteten Richtung und der Verbindungslinie Kugelmittelpunkt-Detektionspunkt und  $\psi(L, E, \cos \vartheta)$  die Neutronenflußdichte (Neutronen pro Zeit-, Energie-, Raumwinkel-, und Flächeneinheit senkrecht zu  $\vartheta$ ) ist. Der von der 14 MeV-Neutronenquelle verursachte skalare Fluß im Abstand  $L$  vom Kugelzentrum ist

$$\Phi_q(L, E) = \frac{q_{ext}(E)}{4\pi L^2} \quad (5.3)$$

Einsetzen der Gln.(5.2) und (5.3) in (5.1) liefert

$$N^M(L, E) = \frac{4\pi L^2 \int_0^{\frac{\pi}{2}} \psi(L, E, \cos \vartheta) 2\pi \sin \vartheta d\vartheta}{\int_0^\infty q_{ext}(E) dE} \quad (5.4)$$

Diese Meßgröße soll mit den Ergebnissen von Transportrechnungen, die sich auf das Kugelvolumen beschränken, verglichen werden. Dazu eignet sich das Leckage-Spektrum pro Quellneutron. Es wird gemäß

$$N^c(R, E) = \frac{4\pi R^2 \int_0^{\frac{\pi}{2}} \psi(R, E, \cos \vartheta) 2\pi \cos \vartheta \sin \vartheta d\vartheta}{\int_0^\infty q_{ext}(E) dE} \quad (5.5)$$

aus der Neutronenflußdichte auf der Oberfläche einer Kugel mit Radius  $R$  berechnet. Da aber außerhalb der Kugel keine Wechselwirkungen mehr stattfinden, muß  $N^c$  außerhalb der Kugel konstant sein und kann analog zu (5.5) aus der Neutronenflußdichte auf einer

beliebigen die Kugel umschließenden Fläche berechnet werden. Betrachtet man speziell eine Kugeloberfläche ( von Radius  $L$  ) so gilt

$$N^c(E) = N^c(R, E) = N^c(L, E) = \frac{4\pi L^2 \int_0^{\frac{\pi}{2}} \psi(L, E, \cos \vartheta) 2\pi \cos \vartheta \sin \vartheta d\vartheta}{\int_0^\infty q_{ext}(E) dE} \quad (5.6)$$

Aus (5.4) und (5.6) folgt

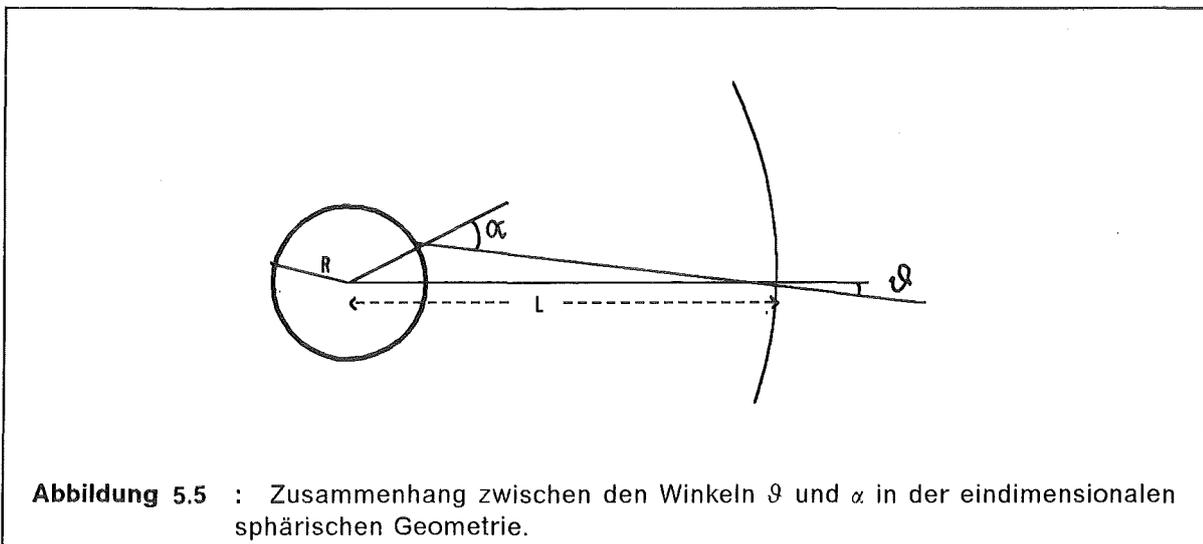
$$\frac{N^M(L, E)}{N^c(E)} = \frac{\int_0^{\frac{\pi}{2}} \psi(L, E, \cos \vartheta) \sin \vartheta d\vartheta}{\int_0^{\frac{\pi}{2}} \psi(L, E, \cos \vartheta) \cos \vartheta \sin \vartheta d\vartheta} \quad (5.7)$$

Wegen Gl.(5.7) unterscheidet sich der skalare Fluß ( normiert pro Quellneutron) von dem Leckgestrom durch das Fehlen von  $\cos \vartheta$  im Integral.

In der eindimensionalen sphärischen Geometrie ist die zur Beschreibung der Richtungen benutzte Bezugsachse (Radiusvektor = Kugelmittelpunkt-Ortspunkt) nicht raumfest. Nehmen wir an, daß ein Neutron aus der Oberfläche der Bleikugel in der Richtung  $\alpha$  bezüglich des Radiusvektors  $R$  emittiert wurde. Es folgt aus einfachen geometrischen Überlegungen ( s. Abb.5.5), daß es beim ungestörten Flug (d.h. ohne Stöße) in der Entfernung  $L$  vom Kugelzentrum die Richtungskoordinate  $\vartheta$  hat, die sich aus

$$\sin(\vartheta) = \frac{R}{L} \sin(\alpha) \quad (5.8)$$

berechnen läßt [37].



Wenn der Abstand  $L$  ausreichend groß gegenüber dem Radius  $R$  gehalten wird, ist  $\sin \vartheta \approx 0$  , d.h.  $\vartheta \approx 0$  und die Komponente  $\mu$  der Neutronenflugrichtung, unabhängig von ihrem ursprünglichen Wert wird sich von 1 kaum unterscheiden ( $\mu = \cos \vartheta \approx 1$  ).

Bei der Messung war  $L = 431$  cm und  $R = 22,5$  cm, woraus sich wegen (5.8)

$$\sin(\vartheta) = 0,05 \sin(\alpha)$$

ergibt. Dabei beträgt der größte Winkel  $\vartheta_{\max}$ , der sich mittels

$$\sin(\vartheta_{\max}) = 0,05 \sin \frac{\pi}{2}$$

bestimmen läßt,  $2,87^\circ$  ( $\cos(\vartheta_{\max}) = 0,9987$ ). Praktisch heißt dies, daß die Flugrichtungen aller im Abstand  $L$  vom Kugelzentrum befindlichen Neutronen, innerhalb eines Kegels mit dem Öffnungswinkel  $2,87^\circ$  um die Bezugsachse liegen. Dieser Winkelbereich entspricht dem Intervall  $0,9987 \leq \cos(\vartheta) \leq 1$  der Richtungskordinate  $\mu$ .

Danach unterscheiden sich die beiden auf der rechten Seite der Gl.(5.7) auftretenden Größen um weniger als 0,2 % . Es kann daher angenommen werden, daß

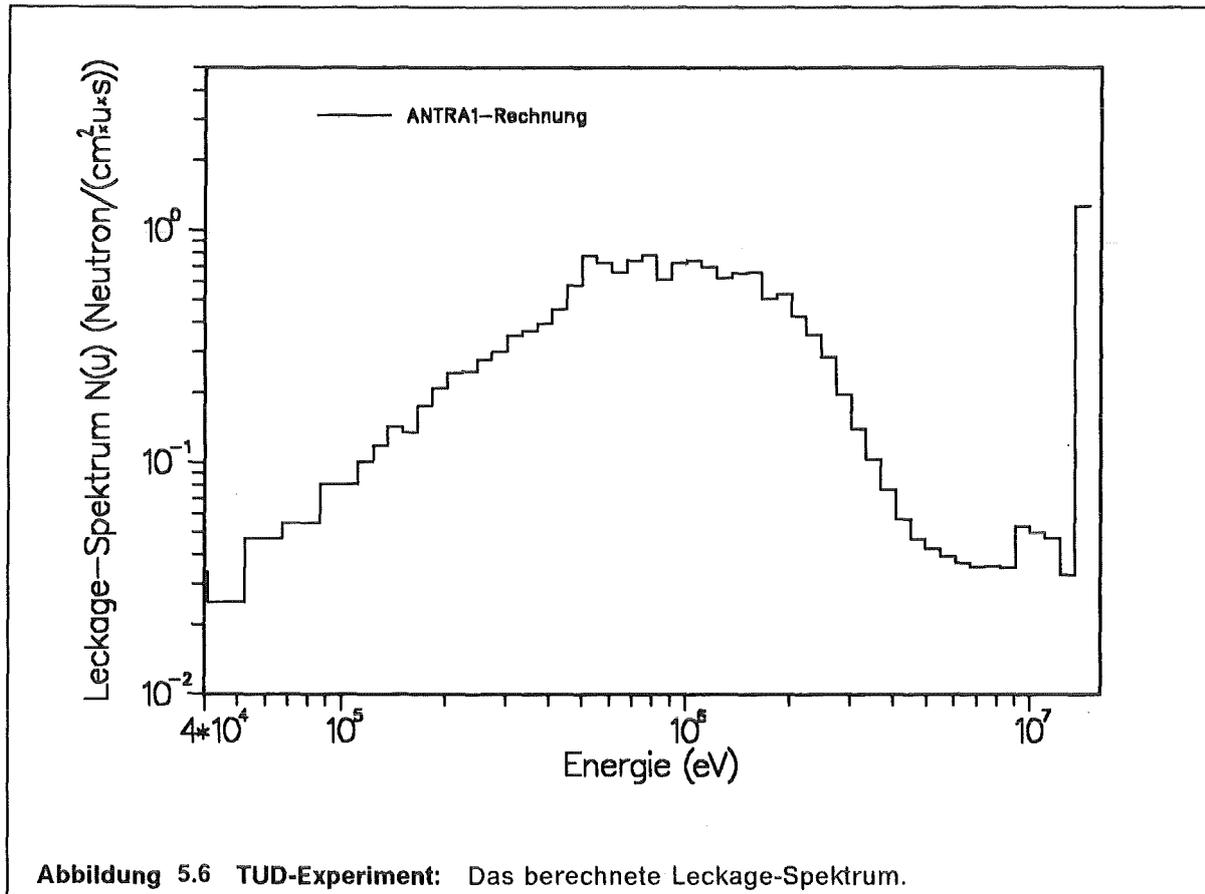
$$\frac{N^M(L, E)}{N^C(E)} \approx 1 \quad \text{ist.}$$

Nr.	Energiebereich [eV]		Nr.	Energiebereich [eV]	
1	0.13498588E + 08	0.14918247E + 08	51	0.67379437E + 05	0.86516937E + 05
2	0.12214027E + 08	0.13498588E + 08	52	0.52475187E + 05	0.67379437E + 05
3	0.11051708E + 08	0.12214027E + 08	53	0.40867711E + 05	0.52475187E + 05
4	0.10000000E + 08	0.11051708E + 08	54	0.31827805E + 05	0.40867711E + 05
5	0.90483710E + 07	0.10000000E + 08	55	0.24787523E + 05	0.31827805E + 05
6	0.81873050E + 07	0.90483710E + 07	56	0.19304543E + 05	0.24787523E + 05
7	0.74081850E + 07	0.81873050E + 07	57	0.15034391E + 05	0.19304543E + 05
8	0.67031980E + 07	0.74081850E + 07	58	0.11708793E + 05	0.15034391E + 05
9	0.60653050E + 07	0.67031980E + 07	59	0.91188203E + 04	0.11708793E + 05
10	0.54881160E + 07	0.60653050E + 07	60	0.71017422E + 04	0.91188203E + 04
11	0.49658520E + 07	0.54881160E + 07	61	0.55308398E + 04	0.71017422E + 04
12	0.44932890E + 07	0.49658520E + 07	62	0.43074219E + 04	0.55308398E + 04
13	0.40656960E + 07	0.44932890E + 07	63	0.33546262E + 04	0.43074219E + 04
14	0.36787940E + 07	0.40656960E + 07	64	0.26125854E + 04	0.33546262E + 04
15	0.33287130E + 07	0.36787940E + 07	65	0.20346833E + 04	0.26125854E + 04
16	0.30119420E + 07	0.33287130E + 07	66	0.15846133E + 04	0.20346833E + 04
17	0.27253200E + 07	0.30119420E + 07	67	0.12340981E + 04	0.15846133E + 04
18	0.24659700E + 07	0.27253200E + 07	68	0.96111646E + 03	0.12340981E + 04
19	0.22313010E + 07	0.24659700E + 07	69	0.74851831E + 03	0.96111646E + 03
20	0.20189660E + 07	0.22313010E + 07	70	0.58294653E + 03	0.74851831E + 03
21	0.18268350E + 07	0.20189660E + 07	71	0.45399927E + 03	0.58294653E + 03
22	0.16529900E + 07	0.18268350E + 07	72	0.35357495E + 03	0.45399927E + 03
23	0.14956860E + 07	0.16529900E + 07	73	0.27536426E + 03	0.35357495E + 03
24	0.13533520E + 07	0.14956860E + 07	74	0.21445406E + 03	0.27536426E + 03
25	0.12245640E + 07	0.13533520E + 07	75	0.16701700E + 03	0.21445406E + 03
26	0.11080310E + 07	0.12245640E + 07	76	0.13007294E + 03	0.16701700E + 03
27	0.10025892E + 07	0.11080310E + 07	77	0.10130095E + 03	0.13007294E + 03
28	0.90717994E + 06	0.10025892E + 07	78	0.78893234E + 02	0.10130095E + 03
29	0.82084994E + 06	0.90717994E + 06	79	0.61442108E + 02	0.78893234E + 02
30	0.74273619E + 06	0.82084994E + 06	80	0.47851166E + 02	0.61442108E + 02
31	0.67205519E + 06	0.74273619E + 06	81	0.37266525E + 02	0.47851166E + 02
32	0.60810081E + 06	0.67205519E + 06	82	0.29023193E + 02	0.37266525E + 02
33	0.55023256E + 06	0.60810081E + 06	83	0.22603287E + 02	0.29023193E + 02
34	0.49787056E + 06	0.55023256E + 06	84	0.17603455E + 02	0.22603287E + 02
35	0.45049231E + 06	0.49787056E + 06	85	0.13709590E + 02	0.17603455E + 02
36	0.40762200E + 06	0.45049231E + 06	86	0.10677039E + 02	0.13709590E + 02
37	0.36883181E + 06	0.40762200E + 06	87	0.83152885E + 01	0.10677039E + 02
38	0.33373269E + 06	0.36883181E + 06	88	0.64759493E + 01	0.83152885E + 01
39	0.30197381E + 06	0.33373269E + 06	89	0.50434771E + 01	0.64759493E + 01
40	0.27323744E + 06	0.30197381E + 06	90	0.39278631E + 01	0.50434771E + 01
41	0.24723531E + 06	0.27323744E + 06	91	0.30590229E + 01	0.39278631E + 01
42	0.22370781E + 06	0.24723531E + 06	92	0.23823690E + 01	0.30590229E + 01
43	0.20241912E + 06	0.22370781E + 06	93	0.18553915E + 01	0.23823690E + 01
44	0.18315637E + 06	0.20241912E + 06	94	0.14449797E + 01	0.18553915E + 01
45	0.16572681E + 06	0.18315637E + 06	95	0.11253510E + 01	0.14449797E + 01
46	0.14995581E + 06	0.16572681E + 06	96	0.87642479E + 00	0.11253510E + 01
47	0.13568569E + 06	0.14995581E + 06	97	0.68256032E + 00	0.87642479E + 00
48	0.12277344E + 06	0.13568569E + 06	98	0.53157872E + 00	0.68256032E + 00
49	0.11108994E + 06	0.12277344E + 06	99	0.41399360E + 00	0.53157872E + 00
50	0.86516937E + 05	0.11108994E + 06	100	0.32241869E + 00	0.41399360E + 00

Tabelle 5.3 Gruppenstruktur der GAM-II-Bibliothek

### 5.3 Ergebnisse der Rechnungen.

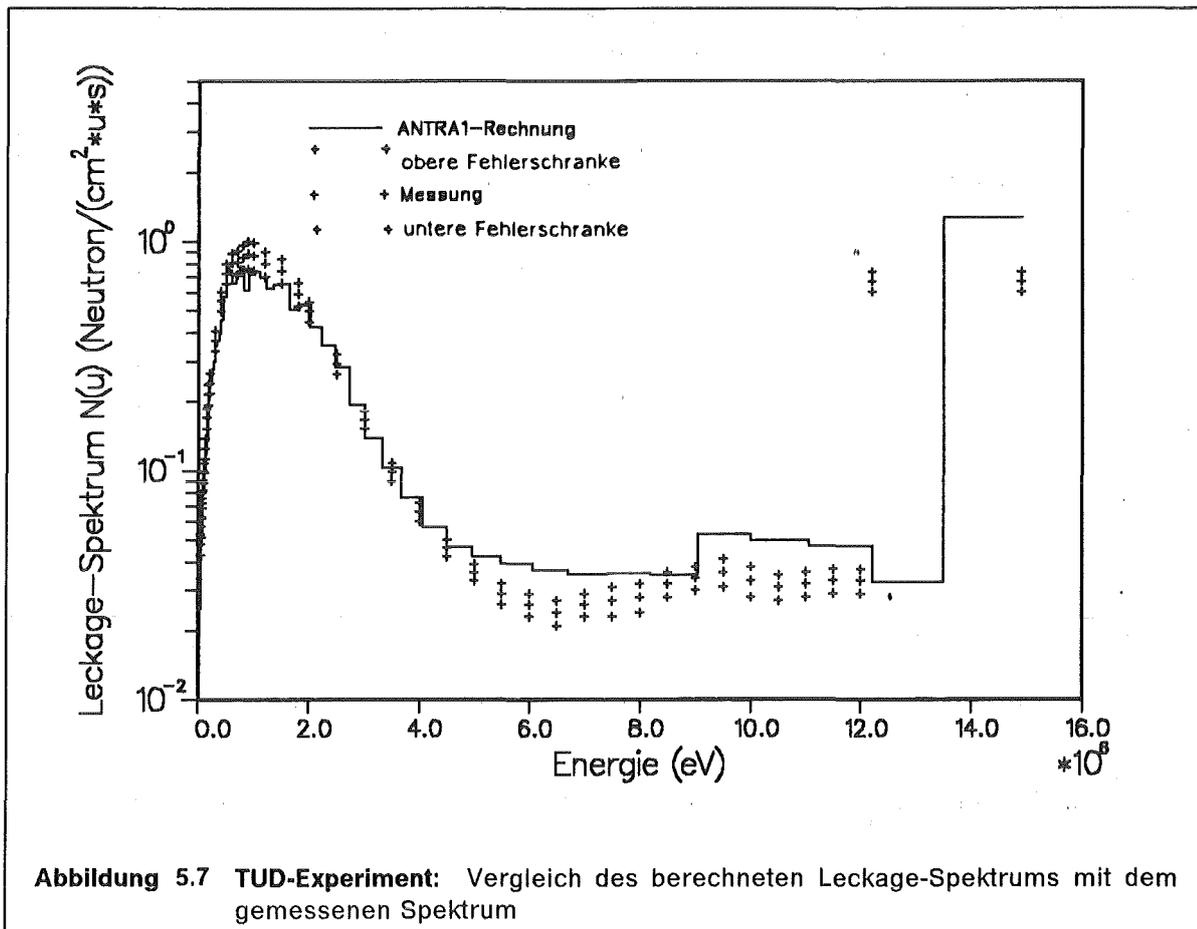
In der Abb.5.6 ist das mit dem ANTRA1-Programm an der Oberfläche der Blei-Kugelschale berechnete Leckage-Spektrum dargestellt. Abbildungen 5.7 und 5.8 zeigen den Vergleich der experimentellen Ergebnisse mit der Rechnung. Aufgetragen sind die Leckage-Spektren in absoluten Einheiten (d.h. pro Quellneutron und Lethargieeinheit). Die experimentelle Kurve ist mit den zugehörigen Meßfehlern versehen. Bei dem Vergleich wurde das von den Experimentatoren empfohlene Ausflußspektrum (vgl. Abb.5.3) benutzt.



Der Vergleich zeigt zunächst eine sehr gute Übereinstimmung von Messung und Rechnung. Nur im Bereich von etwa 4 MeV bis etwa 15 MeV liegt das berechnete Leckage-Spektrum etwas höher. Die Abweichung zwischen dem berechneten und dem gemessenen Spektrum beträgt in diesem Bereich höchstens etwa 30% bei einer Meßgenauigkeit von etwa 25% (vgl. Tab.5.1). Diese Diskrepanz könnte daher rühren, daß das in den Rechnungen benutzte normierte Quellspektrum auf vereinfachte Weise, d.h. durch eine Funktion der Art

$$q(E) = \begin{cases} 1 & \text{für } 13,5 < E \leq 14,9 \\ 0 & \text{für } E \leq 13,5 \end{cases} \quad \text{ein "Rechteck" in der höchsten Energiegruppe}$$

approximiert wurde. Die Energieverteilung der Neutronen aus dem Tritiumtarget wurde bei der Beschreibung des Experimentes nicht angegeben.

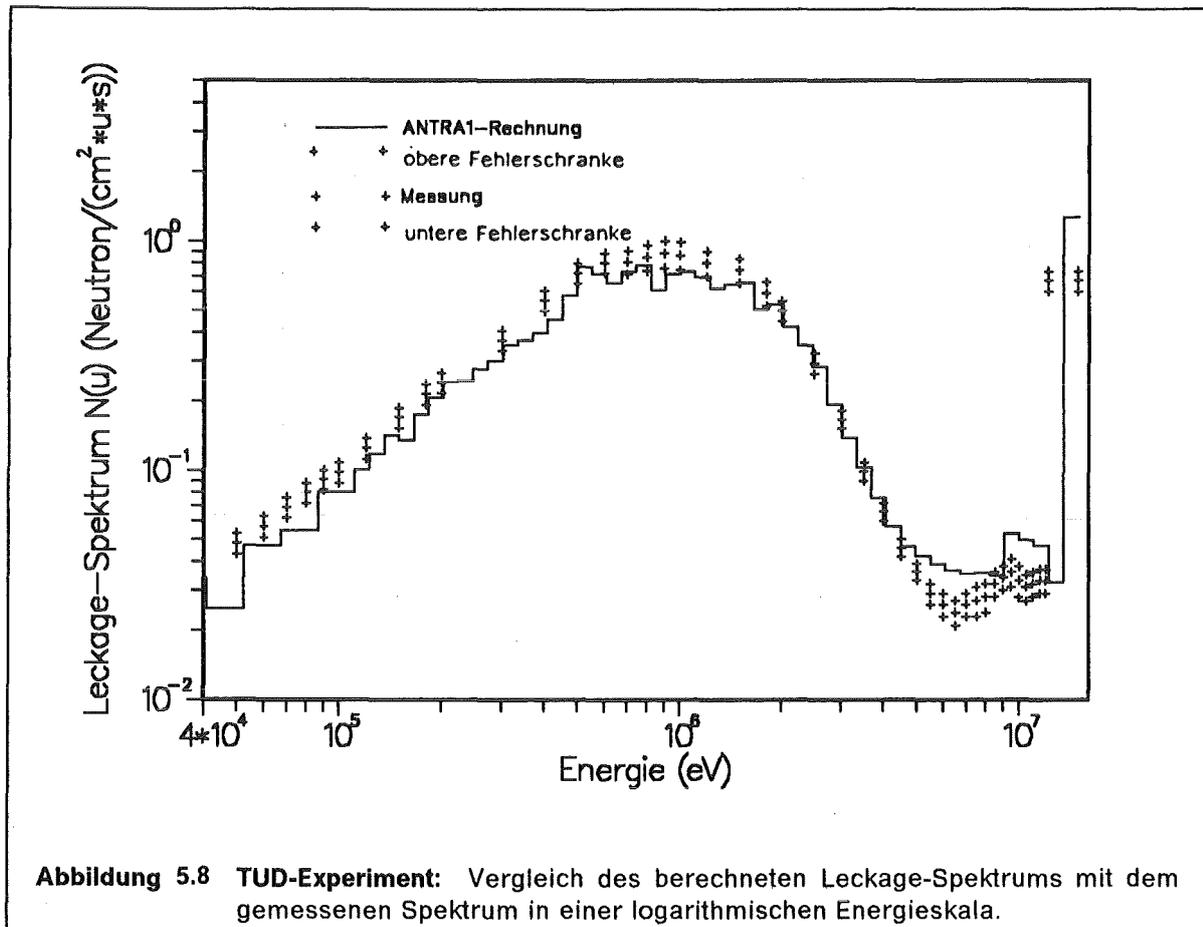


Kerndatensatz	Transportprogramm	$M_{tot}$	Partielle Neutronenmultiplikation $M(E_i - E_{i-1})$		
			1-5	5-10	10-15
ENDF/B-IV	ANISN	1,78	0,52	0,02	0,12
ENDF/B-IV	MCNP	1,78	0,54	0,02	0,14
ENDF/B-V	TART	1,75	0,51	0,02	0,12
ENDL-85	MCNP	1,79	0,53	0,02	0,014
EFF-1	ANTRA1	1,76	0,61	0,03	0,14
Experiment		1,94	0,68	0,02	0,14
TOF		-	0,653	0,019	0,144
PRS		2,031	0,701	0,023	0,143

**Tabelle 5.4 TUD-Experiment:** Vergleich der anhand verschiedener Programme und Kerndaten berechneten Neutronenmultiplikation mit den experimentell ermittelten Werten.

In der Tab.5.4, die zum Teil [19] und [34] entnommen wurde, wird die mit den Programmen ANISN, MCNP und TART sowie den Kerndatenbibliotheken ENDF/B-IV, ENDF/B-V, ENDL-85 berechnete partielle und totale Neutronenmultiplikation dargestellt. Diese Wer-

te werden mit der in dieser Arbeit (anhand des ANTRA1 Programms mit der EFF-1 Datei) ermittelten Neutronenmultiplikation verglichen.



Wie aus der Tab.5.4 zu ersehen ist, ergaben alle Datenauswertungen (EFF, ENDF/B und ENDL-85) für die totale Neutronenmultiplikation nahezu den gleichen Wert, der zwar um ca. 10 % niedriger ist als der gemessene Wert, aber noch innerhalb der relativ hohen Meßgenauigkeit ( $\pm 10\%$ ) liegt.

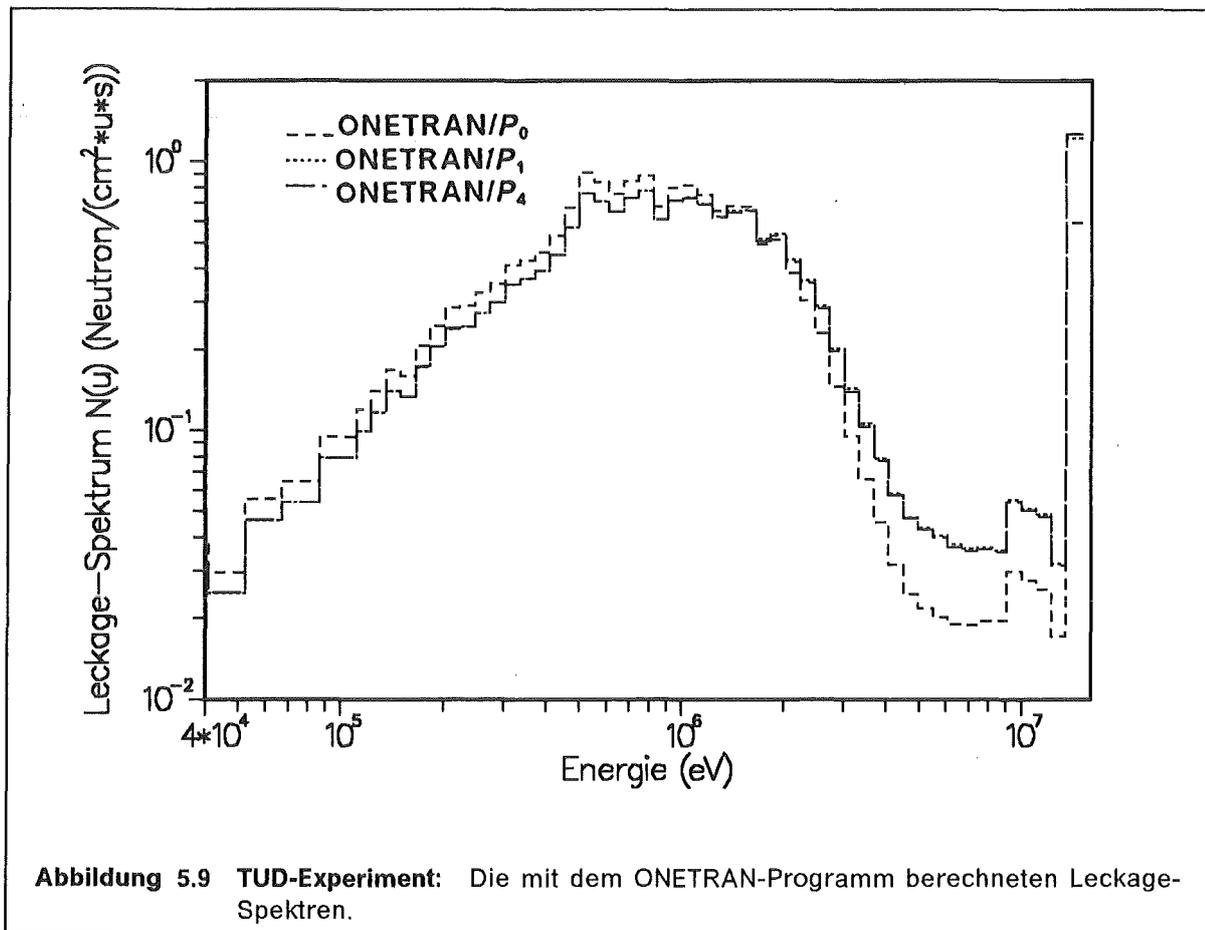
Eine Wiederholungsmessung, die am Kurchatov-Institut durchgeführt wurde, ergab - in Übereinstimmung mit den Rechnungen - niedrigere Werte für die Neutronenmultiplikation, nämlich  $1,857 \pm 4\%$  [28]. Die bisher bestehende Diskrepanz ist somit weniger auf Daten und Rechenmethoden als auf Meßgenauigkeiten zurückzuführen. Die Erhöhung des Wirkungsquerschnitts für die (n, 2n)-Reaktion von 2,10 in EFF-1 auf 2,193 in EFF-2 würde zu einer um 1-1,5 % höheren Neutronenmultiplikation führen [28]. Dies wird in einer noch besseren Übereinstimmung zwischen der Rechnung und der Messung resultieren.

Wie aus der Tab.5.4 zu ersehen ist, konnte mit ANTRA1 die spektrale Verteilung der Leckageneutronen auf der Basis der Kerndatenbibliothek EFF-1 gut reproduziert werden, nicht jedoch mit Daten anderer Kerndatenbibliotheken (vgl. die partielle Multiplikation in dem Energiebereich 1-5 MeV).

#### 5.4 Gegenüberstellung der mit den herkömmlichen $S_N$ - und $P_L$ -Verfahren erzielten Ergebnisse.

Zum Vergleich des herkömmlichen  $P_L$ -Verfahrens gegenüber dem neuen strengen Verfahren wurden zweckgemäß die Nachrechnungen des Dresdener Experimentes mit dem  $S_N$ -Transportprogramm ONETRAN vorgenommen. Bei diesen Rechnungen wurde das im Abschn.5.2 beschriebene Rechenmodell benutzt. Die Rechnungen wurden in der GAM-II-Gruppenstruktur durchgeführt. Die Multigruppen-Streumatrizen, die das ONETRAN-Programm zur Berechnung des Streutermes benötigt, wurden für die Legendre-Ordnungen 0 bis 4 mit dem Programm NJOY aus den in EFF-1 enthaltenen Kerndaten vorbereitet.

Abb.5.9 zeigt die mit der  $P_0$ -,  $P_1$ - und  $P_4$ -Approximation des Streutermes berechneten Leakage-Spektren.



Es läßt sich feststellen (vgl. Abb.5.6), daß die Ergebnisse der Rechnung mit  $P_1$ -Darstellung der Anisotropie stimmen mit denen von ANTRA1 gut überein. Eine totale Vernachlässigung der Anisotropie der Neutronenstreuung durch die Annahme einer isotropen Winkelverteilung der gestreuten Neutronen (mit anderen Worten die  $P_0$ -Darstellung des Streukerns) verursacht die Erhöhung der Neutronenmultiplikation um nur 3 %. Dabei wird, wie aus der Abb.5.9 zu ersehen ist, die Leakage der Neutronen mit Energien oberhalb 2 MeV verringert, was mehr (n,2n)-Reaktionen zur Folge hat, dadurch verstärkt sich wiederum die Leakage der Sekundärneutronen aus dem (n,2n)-Prozeß im Energiebereich unterhalb 2 MeV. Die Tatsache, daß die Anisotropie der Neutronenstreuung an dem

schweren Kern Blei relativ gering ist, ermöglicht eine ausreichend geneue Berechnung der Leckagespektren mit der  $P_1$ -Approximation des Streukerns in einer üblichen  $S_N$ -Rechnung.

## 6. Einsatz der Programme ANTRA1 und ONETRAN zur Überprüfung der Genauigkeit der Kerndaten für Beryllium im europäischen Fusionsdaten-File (EFF-1) anhand des am Kurchatov-Institut in Moskau durchgeführten Experimentes

Nach der auf der Basis des Dresdener Experimentes durchgeführten Verifizierung des ANTRA1-Programmes wurde ANTRA1 zwecks Überprüfung der Genauigkeit der Datenauswertung für Beryllium in den Fusionsdaten-File EFF-1 eingesetzt.

Dieser Test hat eine große Bedeutung, da Beryllium einerseits wegen

- seines relativ hohen  $(n,2n)$ -Wirkungsquerschnitts ( ca. 0,5 b)
- seines niedrigen Einfangsquerschnitts ( 0,1 b)
- seiner vergleichsweise kleinen Schwellenenergie für die  $(n,2n)$ -Reaktion (1,7 MeV) und
- seiner guten Eigenschaften als Neutronenmoderator

der wichtigste Neutronenvervielfacher ist, andererseits aber große Unsicherheiten in den Energie-Winkelverteilungen der Sekundärneutronen bestehen [29] . Deshalb sollen die Neutronenflußverteilungen an einem integralen Experiment, dem eine einfache Geometrie zugrunde liegt, mit den Programmen ANTRA1 und ONETRAN berechnet werden.

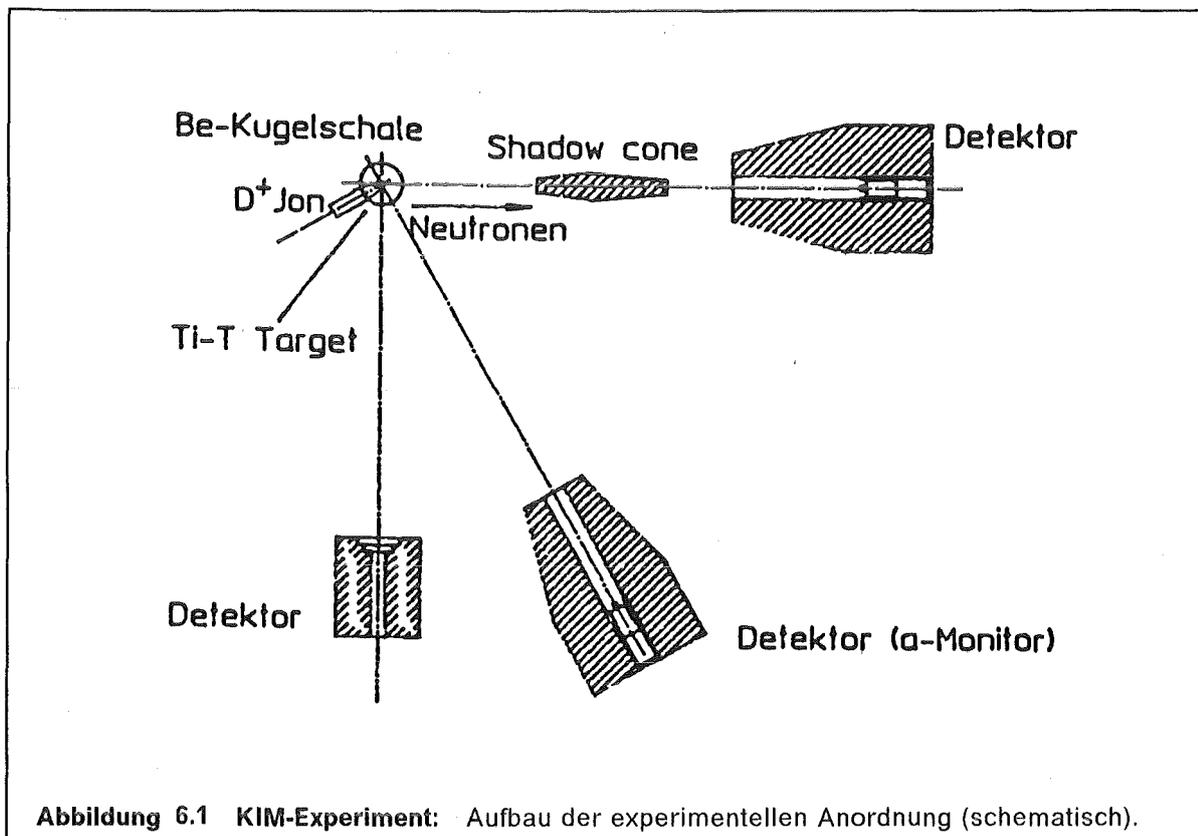
Zur Zeit stehen leider keine vollständig dokumentierte Versuche zur Verfügung, die als Benchmark-Experimente zur Überprüfung der Neutronen-Transport-Rechnung in eindimensionaler Geometrie in Beryllium von 60 keV bis 15 MeV betrachtet werden können. In Frage kommen nur die am Kurchatov-Institut im Moskau (KIM) durchgeführten Versuche, die sich gegenüber den anderen Experimenten, durch die einfache Geometrie der Anordnung (Kugel) und relativ kleine Meßgenauigkeiten auszeichnen. Sie haben jedoch, neben der schlechten graphischen Darstellung der Ergebnisse, den Nachteil einer mangelnden Beschreibung der Energieverteilung der Neutronen aus dem benutzten Ti-T Target.

Der grobe Verlauf des Spektrums der aus einem solchen Target emittierten Neutronen ist jedoch bekannt. Das Quellspektrum hat einen ausgeprägten schmalen Peak der mit den abnehmenden Energien rasch abfällt. Der Verlauf des Spektrums kann daher unter Voraussetzung, daß die Energiegruppe das unter dem Peak liegende Energieintervall vollständig enthält, auf vereinfachte Weise, durch eine "Rechteck"-Funktion approximiert werden.

Demgemäß wurde die Neutronenquelle bei jeder Rechnung, energetisch einheitlich eingesetzt, d.h. alle verwendeten Modelle gehen von einer Quelle aus, die die Neutronen gleichmäßig in einer Energiegruppe verteilt. Mit diesem Ansatz werden die Neutronenflüsse berechnet. Die Ergebnisse werden mit den Meßwerten verglichen und diskutiert.

## 6.1 Beschreibung der Versuchsanlage.

Die untersuchten Anordnungen waren Beryllium-Kugelschalen, in deren Zentrum sich eine 14-MeV-Neutronenquelle befand. Der Aufbau der experimentellen Anlage ist in der Abb.6.1 schematisch dargestellt.



Insgesamt wurden drei Kugelschalen der Dicken 1,5, 5 und 8 cm (s. Tab.6.1) untersucht. Für Anordnung 2. wurde mit der TOF-Spektrometrie das aus der Kugel austretende Neutronenspektrum mit einem Stilbene-Scintillator ( Durchmesser 63 mm, Höhe 50 mm ) und mit einem FEU-30 Multiplier gemessen.

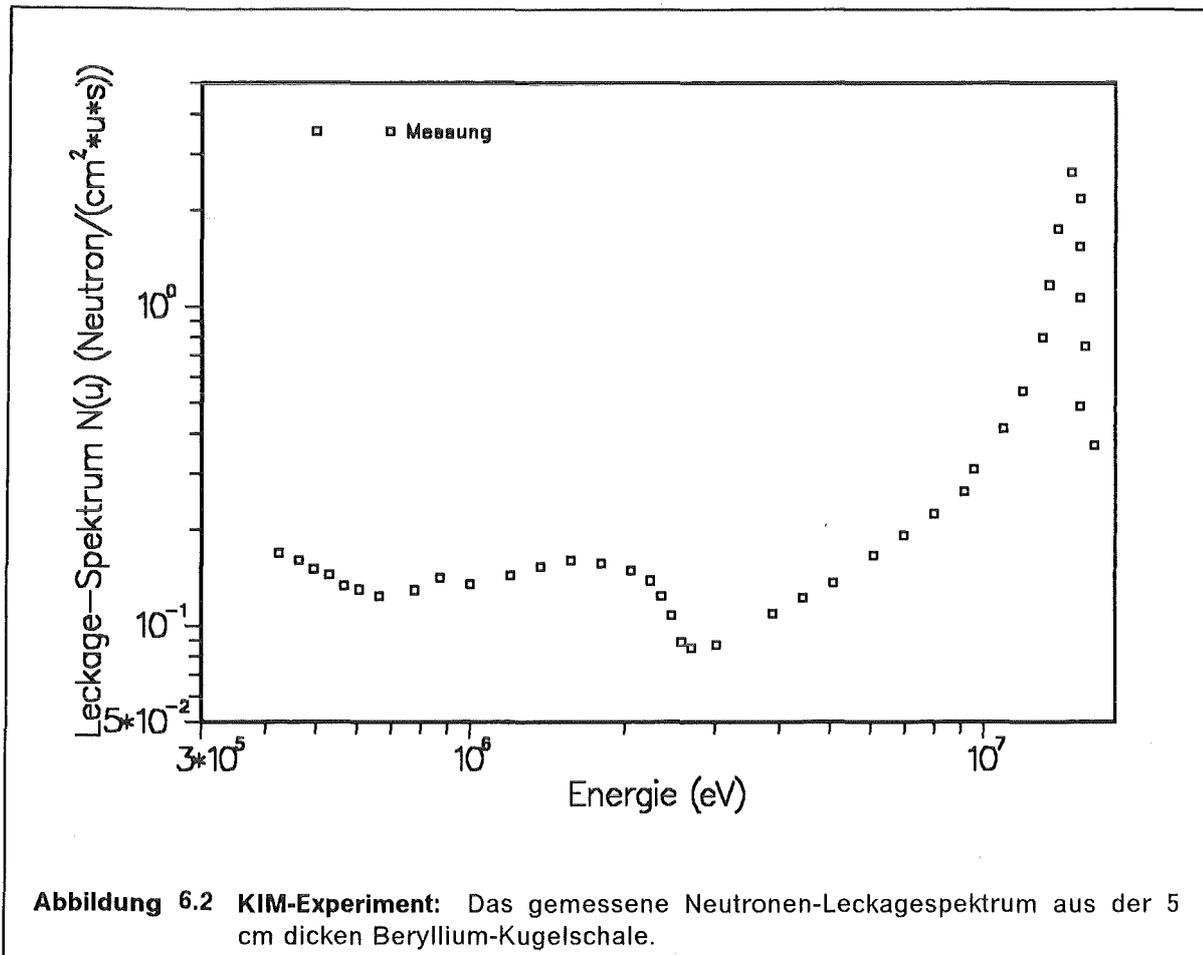
Nummer der Anordnung	Innerer Radius $R_i$ [cm]	Äußerer Radius $R_a$ [cm]	Dicke [cm]
1	3	4,5	1,5
2	6	11	5
3	3	11	8

**Tabelle 6.1 KIM-Experiment:** Wichtigste Parameter der untersuchten Anordnungen

Die Meßmethode ist in [18] näher beschrieben. Der TiT-Target des KG-03-Neutronengenerators befand sich jeweils im Zentrum der Kugeln. Das Target wurde auf einer Kupfer-Scheibe der Dicke von 0,7 mm angebracht. Der Neutronengenerator hatte im Pulse-Mode-Betrieb die Pulsbreite 2.5 ns, Frequenz 1.25 MHz und Beschleunigungsspannung von 250 kV. Die absolute Quellstärke wurde ähnlich wie beim TUD-Experiment mit dem

Si- Oberflächensperrschichtzähler bestimmt, der in einem Abstand von 200 cm vom Target installiert wurde.

Das Neutronenspektrum wurde in einer Entfernung von 335 cm vom Kugelmittelpunkt gemessen und pro Quellneutron und Lethargieeinheit normiert. Zwei Messungen wurden durchgeführt, eine ohne und eine mit "shadow-cone". Die Messung ohne "shadow-cone" lieferte das Summenspektrum der direkt von der Kugel emittierten und der von der Umgebung gestreuten Neutronen. Das mit "shadow-cone" registrierte Spektrum rührt im wesentlichen von gestreuten Neutronen her. Das Leckage-Spektrum wurde als Differenz zwischen dem Spektrum ohne "shadow cone" und dem Spektrum mit "shadow cone" berechnet. Abb.6.2. zeigt das erhaltene Leckage-Spektrum.



In der Tab.(6.2) sind die gesamten Fehler der einzelnen Meßpunkte angegeben.

Energiebereich	Fehler [%]
0,35-0,7 MeV	0,5
0,7-3	1
3-10	1
10-15	3

**Tabelle 6.2 KIM-Experiment:** Die gesamten Fehler der Meßgröße  $N(u)$

Für Anordnungen 1 und 3 (s. Tab.6.1) wurde nur die totale Neutronenmultiplikation ermittelt. Zur Bestimmung der Neutronenmultiplikation wurde die sehr genaue "borontank"-Methode benutzt [18]. In der Tab.6.3 wird die für jede Beryllium-Kugelschale bestimmte totale Neutronenmultiplikation angegeben. Zusätzlich wird in der Tab.6.4 die partielle Neutronenmultiplikation für die Kugelschale Nr. 2 eingetragen.

Nummer der Anordnung	Totale Neutronenmultiplikation $M_{tot}$
1	$1,14 \pm 0,036$
2	$1,365 \pm 0,04$
3	$1,525 \pm 0,043$

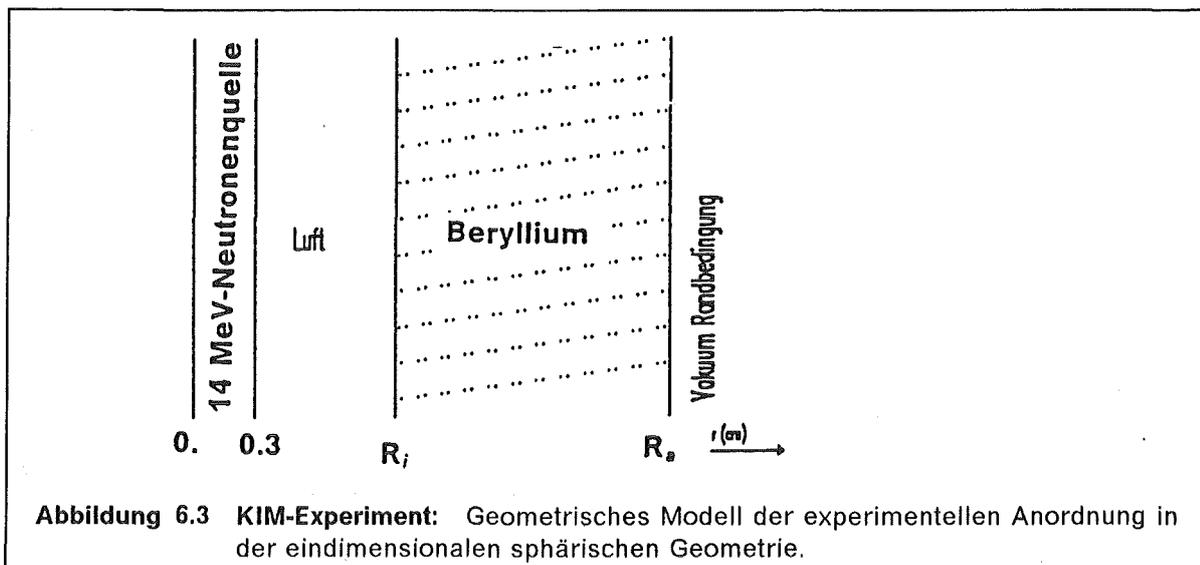
**Tabelle 6.3 KIM-Experiment:** Totale Neutronenmultiplikation für drei untersuchte Anordnungen

Energiebereich	Partielle Neutronenmultiplikation
0,35-0,7 MeV	$0,096 \pm 0,005$
0,7-3	$0,20 \pm 0,01$
3-10	$0,19 \pm 0,01$
10-15	$0,69 \pm 0,03$

**Tabelle 6.4 KIM-Experiment:** Partielle Neutronenmultiplikation in der 5 cm dicken Beryllium-Kugelschale.

## 6.2 Das Rechenmodell.

Die Nachrechnungen des KIM-Experimentes wurden mit den Transportprogrammen ANTRA1 und ONETRAN durchgeführt. Gerechnet wurde in der Kugelgeometrie. Das dabei benutzte Modell der experimentellen Anordnung ist auf der Abb.6.3 schematisch dargestellt.



**Abbildung 6.3 KIM-Experiment:** Geometrisches Modell der experimentellen Anordnung in der eindimensionalen sphärischen Geometrie.

Die kugelförmige 14-MeV-Neutronenquelle mit einem Radius von 0,3 cm ist umgeben von einer Luft-Zone. Daran schließt sich eine Kugelschale aus reinem Beryllium ( Atomzahldichte  $0,1236 \times 10^{24} \times 1/cm^3$  ). Der innere Radius ( $R_i$ ) und der äußere Radius ( $R_o$ ) der beim Experiment benutzten Kugelschalen kann der Tab.6.1 entnommen werden.

Die Rechnungen wurden in der 100-Gruppeneinteilung, die auf der Gruppenstruktur der GAM-II-Bibliothek beruht, durchgeführt. Wegen mangelnder Angaben über die Energieverteilung der aus dem TiT-Target ausgestrahlten Neutronen wurde allen Quellneutronen die Energie der ersten Gruppe (13,5-14,9 MeV) zugewiesen. Eine Variation der  $S_N$ -Ordnung zeigte, daß  $S_{20}$  eine genügend gute Näherung ist.

Die nuklearen Daten für Beryllium, d.h. die mikroskopischen Wirkungsquerschnitte sowie die Energie- und Winkelverteilungen der Sekundärneutronen, wurden dem EFF-1 Datensatz entnommen. Die den Rechnungen zugrundeliegenden makroskopischen Streumatrizen wurden mit den Programmen NJOY, DOUBLE und CROMIX in 100 Energiegruppen ermittelt. Die Legendre-Streumatrizen wurden bis zur Ordnung 5 vorbereitet. Die winkelabhängigen Streumatrizen wurden in jedem der 20 Winkelsegmente gemittelt. Die Winkelverteilung der Quellneutronen wurde als isotrop im Laborsystem angenommen.

Die neutronenphysikalischen Rechnungen konnten sich, gemäß der im Abschn.5.2 dargelegten Überlegungen, auf das Volumen der Beryllium-Kugel beschränken. Damit wurde die Transportrechnung von der Oberfläche der Kugelschale bis zum Detektor durch einen mit Luft ausgefüllten Raum nicht durchgeführt. Dadurch hat sich der Rechenaufwand erheblich reduziert.

Das für die 5 cm dicke Beryllium-Kugelschale berechnete Leakage-Spektrum wurde mit dem experimentell erhaltenen Leakage-Spektrum verglichen (s. Abb.6.4). Die nach der Integration des Spektrums über einzelne Energiebereiche erhaltenen Leckagewerte, die der Neutronenmultiplikation in der Beryllium-Kugelschale entsprechen, sind in der Tab.6.5 zusammengestellt.

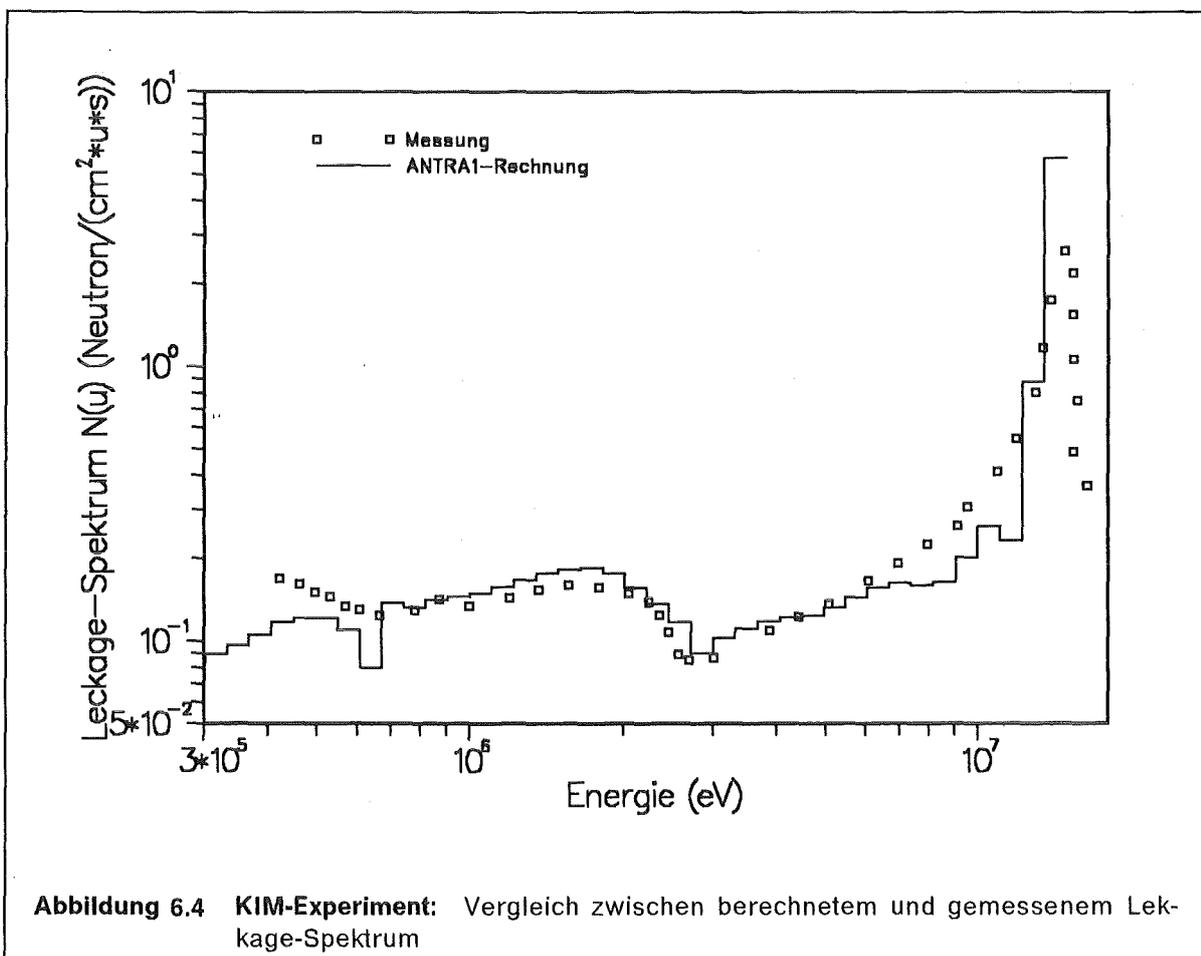
Energiebereich $E_i - E_{i-1}$ [MeV]	Partielle Neutronenmultiplikation M	
	Experiment	ANTRA1 (EFF-1 Datensatz)
0,35-0,7	$0,096 \pm 0,005$	0,075
0,7-3	$0,20 \pm 0,01$	0,216
3-10	$0,19 \pm 0,01$	0,179
10-15	$0,69 \pm 0,03$	0,729

**Tabelle 6.5 KIM-Experiment:** Vergleich der berechneten partiellen Neutronenmultiplikation für die 5 cm dicke Beryllium-Kugelschale mit den experimentell erhaltenen Werten.

Die totale Neutronenmultiplikation in der drei untersuchten Kugelschalen ist in der Tab.6.6 dargestellt.

Dicke der Kugelschale [cm]	Totale Neutronenmultiplikation $M_{tot}$	
	Experiment	ANTRA1 (EFF-1 Datensatz)
1,5	$1,14 \pm 0,036$	1,10
5,0	$1,365 \pm 0,04$	1,359
8,0	$1,525 \pm 0,043$	1,547

**Tabelle 6.6 KIM-Experiment:** Vergleich der berechneten totalen Neutronenmultiplikation für Beryllium-Kugelschalen von verschiedener Dicke mit den experimentell erhaltenen Werten.



**Abbildung 6.4 KIM-Experiment:** Vergleich zwischen berechnetem und gemessenem Leakage-Spektrum

### 6.3 Diskussion der erzielten Ergebnisse.

Aus der Abb.6.4 ist zu ersehen, daß der Verlauf des gemessenen Leakage-Spektrums durch die Rechnung gut wiedergegeben ist. Die beiden dargestellten Spektren zeigen ein ausgeprägtes Maximum im Bereich des Quellpeaks (14-15 MeV). Bei Neutronenenergien von etwa 6 bis etwa 12 MeV nimmt das berechnete Spektrum im Vergleich zur Messung allerdings schneller ab. Unterhalb 6 MeV (bis zu etwa 0,6 MeV) treten nur kleine Diskrepanzen auf, die innerhalb der Meßungenauigkeiten liegen. Bei etwa 3 MeV fallen die

beiden Spektren ab. Danach folgt ein breiter Peak mit einem Maximum bei 1,5 MeV. Im Energiebereich unterhalb 0,6 MeV erkennt man, daß die Messung von der Rechnung wesentlich abweicht.

Da 14-MeV-Quellneutronen benutzt wurden, geben die Messungen im wesentlichen nur Aufschluß über die Wirkungsquerschnitte bei 14 MeV. Deutlich erkennbar ist eine gute Übereinstimmung zwischen den Rechen- und den Meßergebnissen im Energiebereich 0,6 bis 6 MeV. Das bei 1,5 MeV vorliegende Maximum im Spektrum ist durch die Sekundärneutronen aus den (n,2n)-Reaktionen hervorgerufen. Die Analyse der Tab.6.5 deutet jedoch darauf hin, daß noch einige Unzulänglichkeiten in der Energie- und Winkelverteilungen der Sekundärneutronen aus den (n,2n)-Reaktion in EFF-1 bestehen. Die totale Neutronenmultiplikation in den drei untersuchten Kugelschalen ist durch die Rechnung gut wiedergegeben. Die berechneten Werte liegen innerhalb der angegebenen Fehlerschranken für die Meßergebnisse (s. Tab.6.6).

Die Ursache für die bei hohen Energien festgestellten Abweichungen zwischen der Rechnung und der Messung kann sowohl den Unzulänglichkeiten in den Wirkungsquerschnitten als auch der vereinfachten Darstellung der Energieverteilung der Quellneutronen zugeschrieben werden. Falls die Annahme einer isotropen Energieverteilung der Neutronenquelle ( nur in der ersten Energiegruppe) nicht gerechtfertigt wäre, könnte man sich die bestehenden Diskrepanzen folgendermaßen erklären:

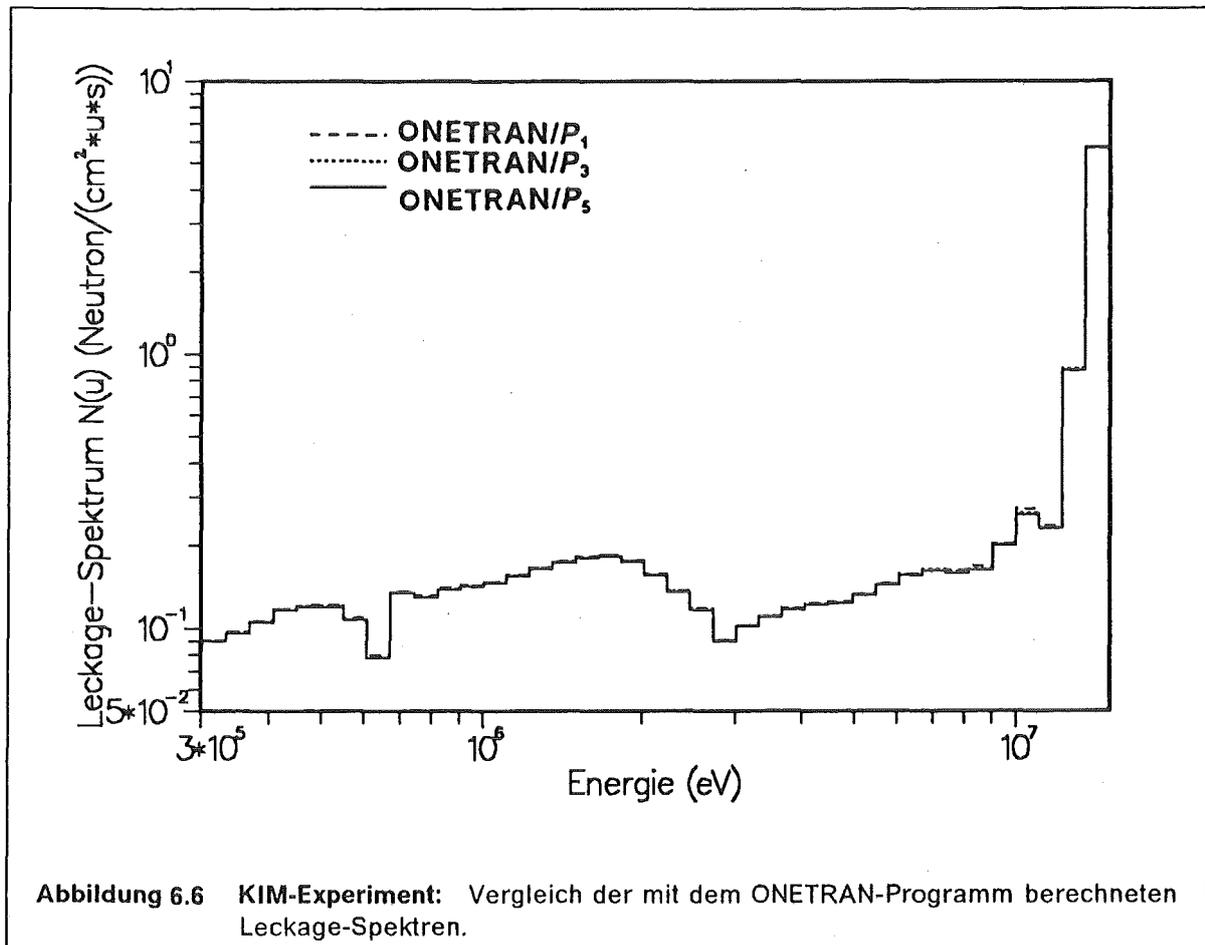
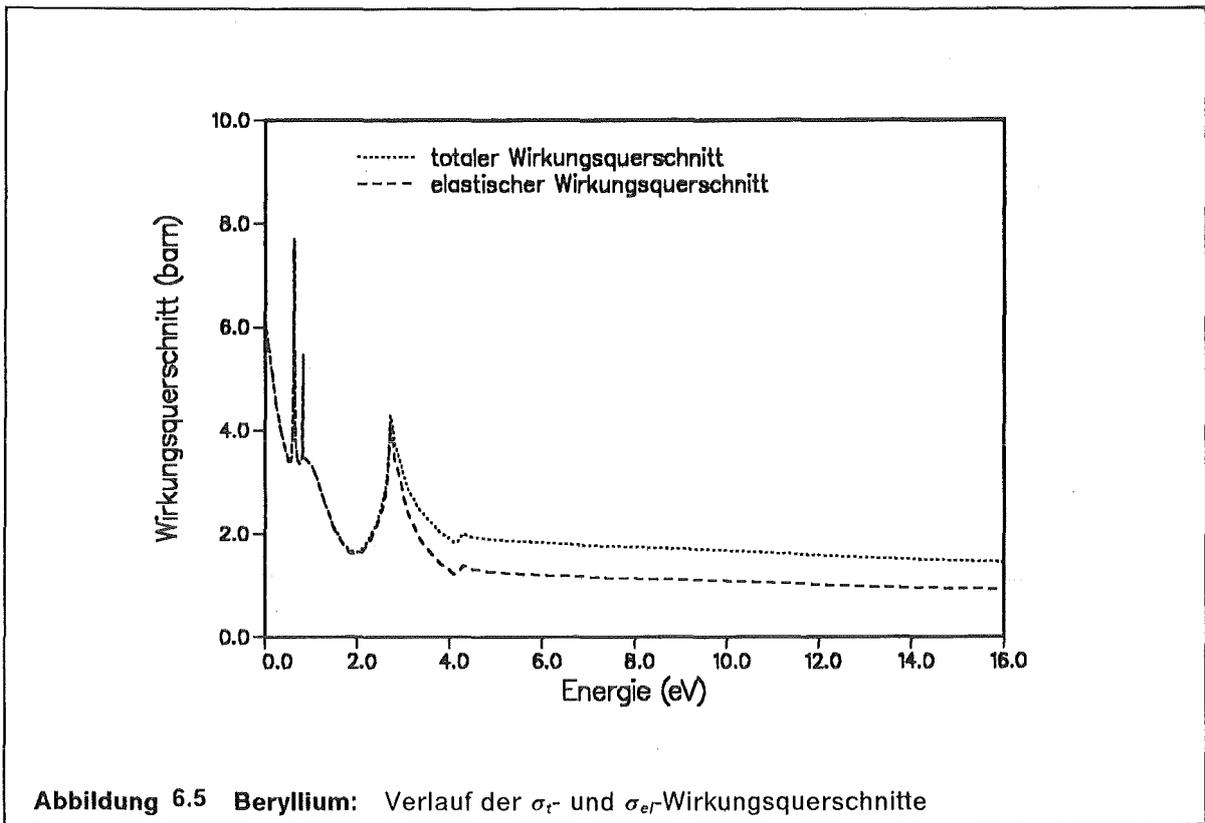
Im Energiebereich 10-15 MeV enthält das Neutronenspektrum neben den unter kleinen Winkeln elastisch gestreuten Neutronen auch die ungestreuten 14-MeV-Neutronen, die bei einer mittleren freien Weglänge von im Mittel 5,2 cm die 5 cm dünne Beryllium-Kugelschale direkt verlassen. Da bei der Rechnung allen Quellneutronen die Energien der ersten Gruppe zugewiesen wurden, zeigt auch die berechnete Neutronen-Leckage in dieser Energiegruppe erhöhte Werte. In der benachbarten Gruppen führt diese Darstellung dagegen zu einer verringerten Neutronen-Leckage, weil dort das Quellspektrum und dementsprechend der Anteil der ungestreuten Quellneutronen gleich Null ist.

Darüberhinaus wird das Leckage-Spektrum oberhalb 6 MeV im wesentlichen durch den elastischen Streuquerschnitt ( $\sigma_{el} \sim 1,6 b$ ) bestimmt (vgl. Abb.6.5). Daneben spielen auch noch die (n,2n)-Prozesse eine Rolle ( $\sigma_{2n} \sim 0,5 b$ ). Beim zentralen elastischen Stoß, verliert das Neutron ca. 36% seiner kinetischen Energie. Für ein 14,1-MeV-Neutron reicht damit das elastische Degradationsintervall von 14 bis etwa 9 MeV. Die bei diesen Energien gefundenen Diskrepanzen zwischen den beiden Leckage-Spektren können daher auch auf die Fehler in dem differentiellen elastischen Streuquerschnitt zurückgeführt werden.

Um eindeutige Rückschlüsse bezüglich der Genauigkeit des elastischen bzw. des (n,2n)-Wirkungsquerschnitts ziehen zu können muß man von einem Experiment mit bekannter Energieverteilung der Quellneutronen ausgehen. Nur dann lassen sich die Differenzen eindeutig erklären.

Zur Ergänzung der Diskussion über die Leckage-Berechnung und die Neutronenmultiplikation wurde anhand des KIM-Experimentes untersucht, bei welcher Approximationsordnung L der  $P_L$ -Entwicklung des Streukerns die spektrale Verteilung der Leckageneutronen hinreichend genau beschrieben würde.

Hierfür sind die ONETRAN-Rechnungen für  $P_1$ - bis  $P_5$ -Näherungen bei sonst gleichen Bedingungen durchgeführt worden. Auf der Abb.6.6 wurden die berechneten Leckage-Spektren gegenübergestellt.



## 7. Verifikation des Programms ANTRA2 anhand des in der FNS-Anlage bei JAERI in Japan durchgeführten Experimentes.

In den letzten Jahren ist eine weitere experimentelle Anlage zur Messung der winkelabhängigen Neutronenleckage-Spektren von Beryllium-Schichten in Japan aufgebaut worden [17]. Oyama et al. setzten kleine Berylliumquader zusammen, so daß hierdurch ein Beryllium-Zylinder von ca. 31,5 cm Radius und 5,8 bzw. 10,16 cm Höhe approximiert wurde (s.Abb.7.1).

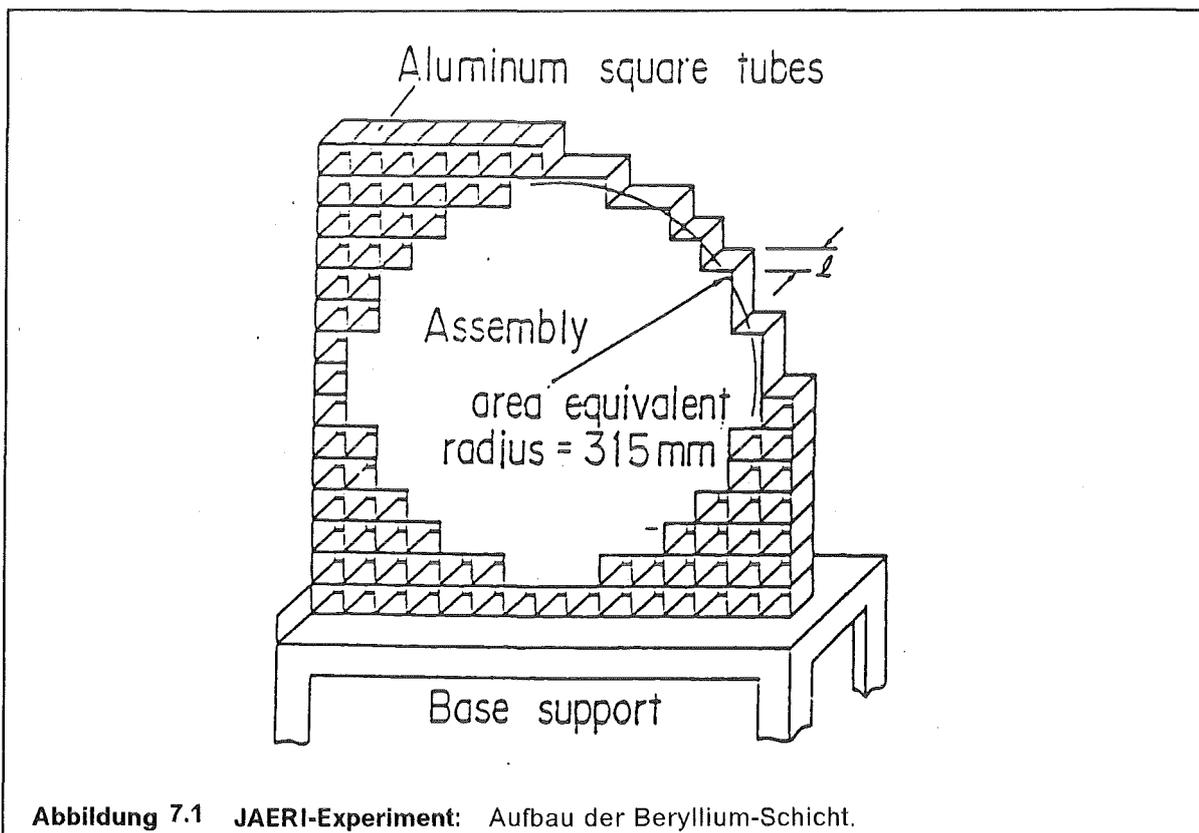


Abbildung 7.1 JAERI-Experiment: Aufbau der Beryllium-Schicht.

Dabei wurden die winkelabhängige Leckage-Spektren aus der oberen Grundfläche des Zylinders mittels der TOF-Spektrometrie mit dem Flüssig-Scintillator (NE-213) von 50,8 mm Durchmesser und 50,8 mm Höhe der auf einem R329 Hamamatsu Multiplier angebracht war, gemessen. Zum Vergleich sind die Leckage-Spektren mit den Monte-Carlo-Programmen MORSE-DD und MCNP berechnet worden. Diese Programme führen, mit Hilfe stochastischer Verfahren, die Berechnung des Neutronentransports in der dreidimensionalen Geometrie durch. Diese Studie, deren Zweck die Überprüfung der Genauigkeit der Wirkungsquerschnitte für Beryllium war, hat gleichzeitig gezeigt, daß das Experiment allen Anforderungen für einen Benchmark-Versuch zum Test von Transportprogrammen genügt.

Die Geometrie der experimentellen Anordnung kann auch detaillgenau in der zweidimensionalen  $(r,z)$ -Geometrie wiedergegeben werden. Zur Nachrechnung des Experimentes mit einem deterministischen Verfahren ist daher der Einsatz eines Rechenprogramms, das die Transportrechnung in der  $(r,z)$ -Geometrie durchführt, ausreichend. In dieser Arbeit wurden dazu die Programme TWOTRAN und ANTRA2 angewendet. Die vorgenommene Untersuchung hatte hauptsächlich die Verifizierung des ANTRA2-Pro-

gramms zum Ziel. Die Berechnung der Neutronen-Spektren ist aber sowohl den Approximationsfehlern der einzelnen Rechenmethoden als auch den Fehlern in den nuklearen Daten ausgesetzt, deshalb können anhand dieser Untersuchung auch Folgerungen über die Zuverlässigkeit des Wirkungsquerschnittsatzes EFF-1 für Be gezogen werden.

### 7.1 Der Aufbau der experimentellen Anlage.

Die Messungen wurden an der FNS-Anlage bei JAERI durchgeführt. Die Versuchsanlage ist schematisch auf der Abb.7.2 dargestellt.

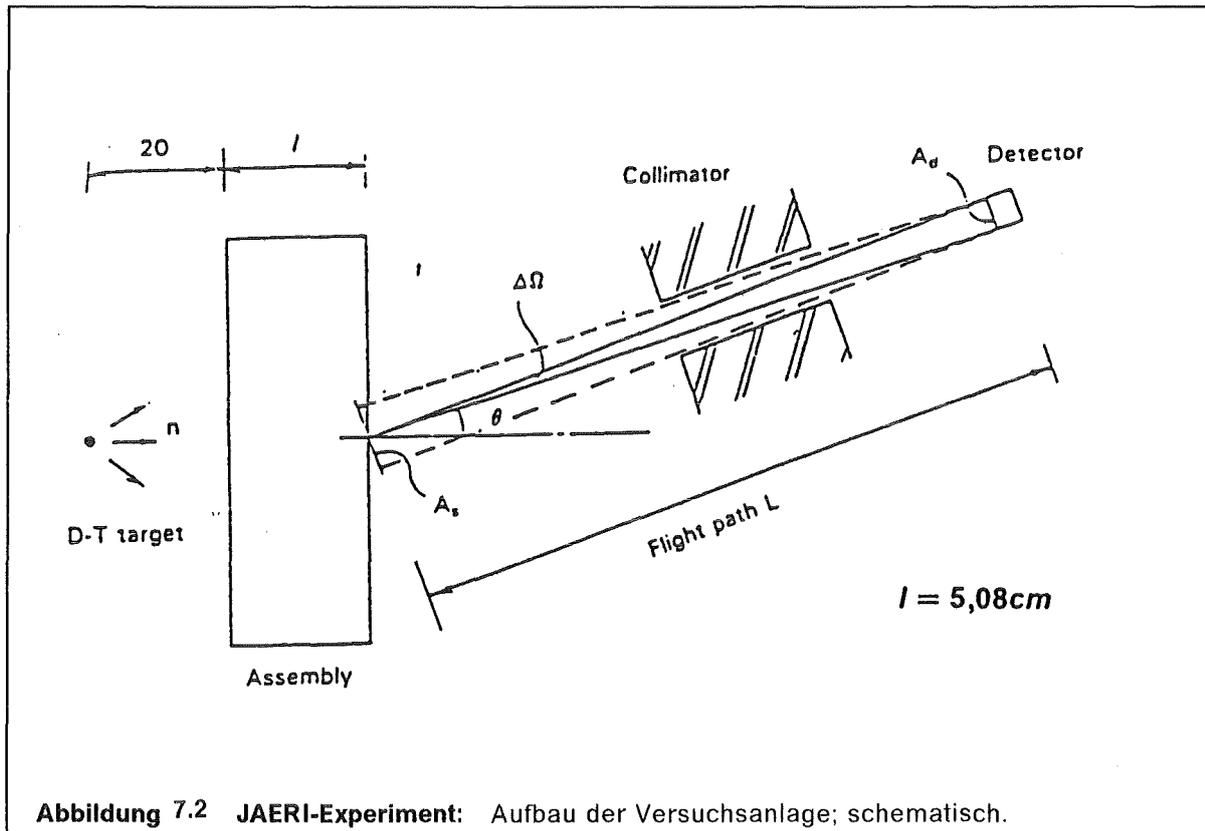


Abbildung 7.2 JAERI-Experiment: Aufbau der Versuchsanlage; schematisch.

Bei der Durchführung des Experimentes kam ein Neutronengenerator zum Einsatz. Ein Titantarget, in dem Tritiumatome gebunden waren, wurde mit beschleunigten Deuteronen ( mit Energien von 350 keV) beschossen. Aus der (D-T)-Reaktion wurden die hochenergetischen Neutronen freigesetzt. Die gemessene Energieverteilung dieser Neutronen zeigt Abb.7.3. Das Meßprogramm umfaßte die direkte Messung mit der TOF-Methode der winkelabhängigen Leakage-Spektren. Der Detektor wurde in der Entfernung von 7 m, unter dem Winkel  $\Theta = 0^\circ, 12,2^\circ, 24,9^\circ, 41,8^\circ$  und  $66,8^\circ$  bezüglich der Außennormalen der oberen Grundfläche des Zylinders, gestellt. Das Untergrund-Spektrum wurde beim gestopften Kollimator bestimmt und von den gemessenen Spektren subtrahiert. Die Meßdaten  $C(E_n)$  entsprechen der Anzahl der Neutronen der Energie  $E_n$  am Detektionspunkt, die aus einer kreisförmigen durch den Kollimator und den Detektor bestimmten Teil der Oberfläche der Beryllium-Schicht in die durch  $\Theta$  bestimmte Richtung austreten. Sie wurden durch folgende Normierung auf die winkelabhängigen Leakage-Spektren  $\phi(\Theta, E_n)$  auf der Oberfläche der Beryllium-Schicht umgerechnet

$$\phi(\Theta, E_n) = \frac{C(E_n)}{\varepsilon(E_n)\Delta\Omega A_s S_n T(E_n)} \quad \left[ \frac{\text{Neutron}}{\text{sr m}^2 \text{ u Quellneutron}} \right]$$

wobei

$\varepsilon(E_n)$  die Detektorempfindlichkeit bei der Energie  $E_n$  bezeichnet,

$\Delta\Omega = \frac{A_d}{L^2}$  den Raumwinkelbereich, den der Detektor erfaßt angibt,

$A_s$  die durch den Detektor bestimmte Oberfläche auf der Ebene senkrecht zu der Verbindungslinie Detektor-Kreismittelpunkt ist,

$S_n$  für die Quellstärke, die durch die Messung der assoziierten Alpha-Teilchen erhalten wurde, steht und

$T(E_n)$  die Abschwächung des Neutronenflusses in der Luftzone ( $\sim \exp - \Sigma^{\text{Luft}}(E_n) \cdot L$ ) abschätzt.

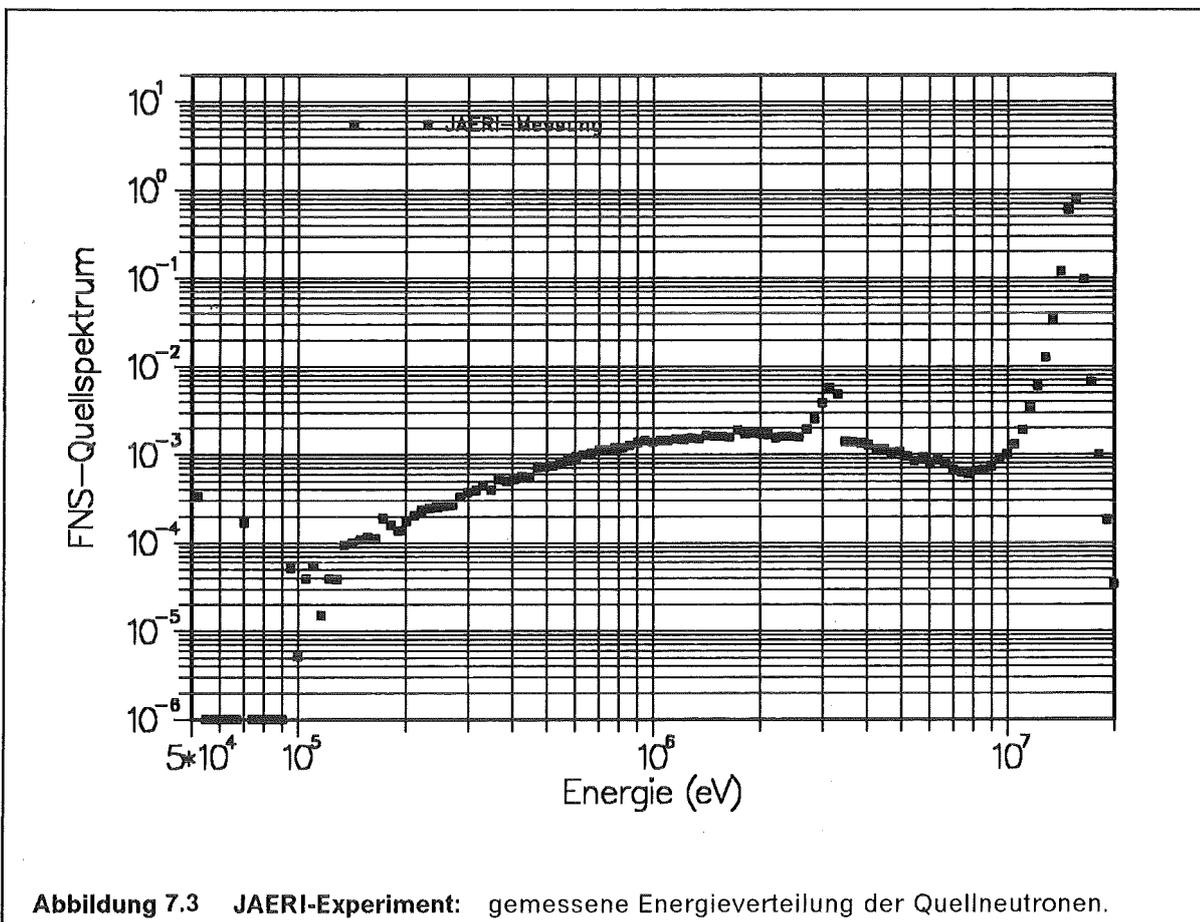


Abbildung 7.3 JAERI-Experiment: gemessene Energieverteilung der Quellneutronen.

Die gemessenen Leckage-Spektren sind auf der Abb.7.4 dargestellt. In der Tab.7.1, die [35] entnommen wurde, sind die einzelnen Beiträge und der gesamte systematische Fehler der Größe  $\phi(\Theta, E_n)$  angegeben.

Wie aus der Abb.7.4 zu ersehen ist, tritt in den eingezeichneten Spektren der Quellpeak besonders deutlich hervor. In den nächsttieferen Energien ist deutlich eine Neutronenabsenkung zu erkennen, die durch die elastische Streuung hervorgerufen wird. Im

Energiebereich von 2 bis 10 MeV setzt sich das Spektrum aus den elastisch und inelastisch gestreuten Neutronen zusammen. Dann folgen bei den Energien zwischen 0,5 und 2 MeV die Sekundärneutronen aus den (n,2n)-Reaktionen und aus der kontinuierinelastischen Streuung. Im Energiebereich von 0,1 bis 0,5 MeV besitzen die Spektren einen hohen Anteil von mehrmals gestreuten Neutronen. Die bei 2,8 MeV sowie 620 keV erkennbaren Neutronenflußdepressionen sind auf die Resonanz im elastischen Wirkungsquerschnitt zurückzuführen. Bei der Analyse der Winkelabhängigkeit der Spektren zeigt sich deutlich die Bevorzugung der Vorwärtsstreuungen im hohen Energiebereich, da der Quellpeak nur bei kleinen Winkeln stark ausgeprägt ist.

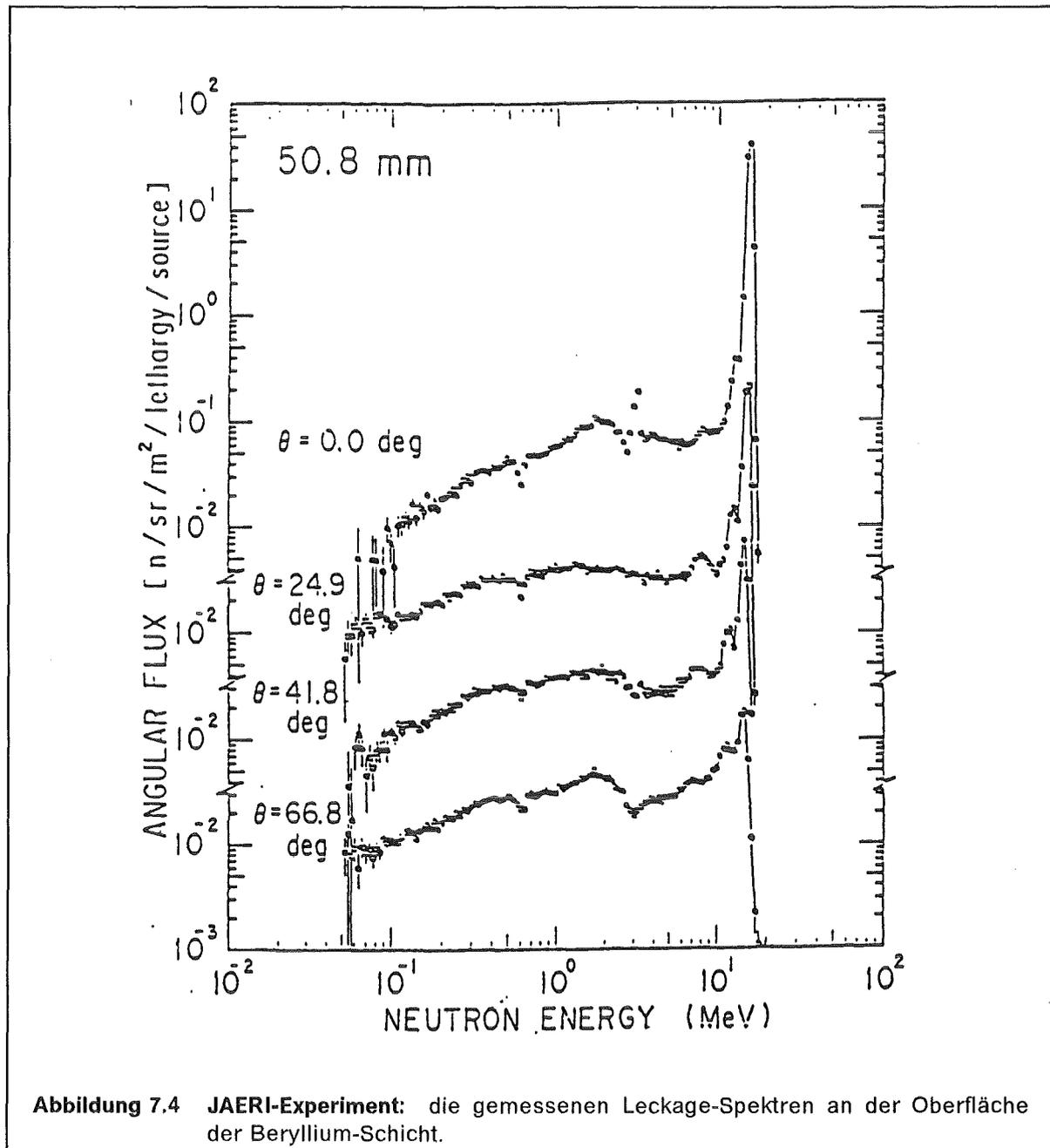


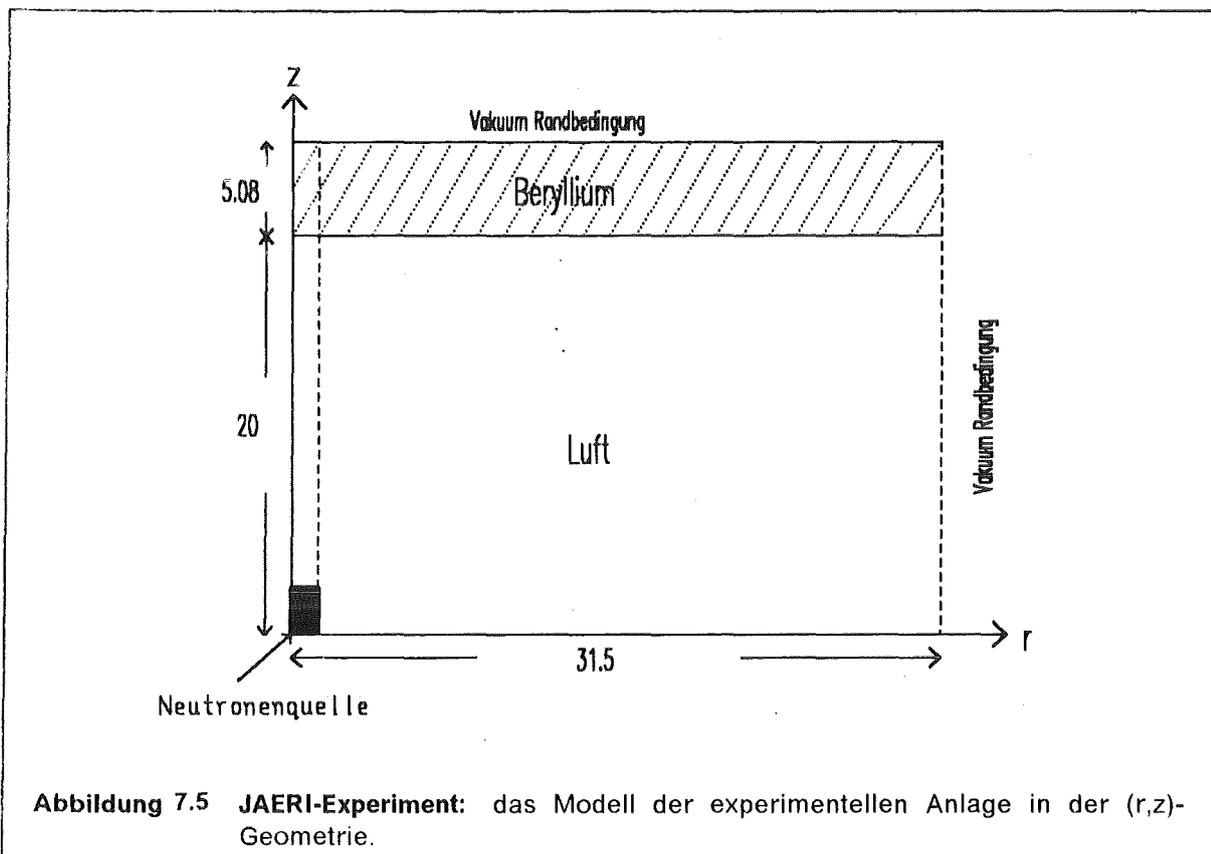
Abbildung 7.4 JAERI-Experiment: die gemessenen Leakage-Spektren an der Oberfläche der Beryllium-Schicht.

Quellstärke	$\pm 2\%$
Detektionsempfindlichkeit $E_n > 200 \text{ keV}$ $80 < E_n < 200 \text{ keV}$ $50 < E_n < 80 \text{ keV}$	$< 2\%$ 5 – 10% 10 – 20%
$\Delta\Omega$	1%
$A_s$	$< \pm 2\%$
$T(E_n)$	1%
gesamter Fehler	$\sim 5\%$

Tabelle 7.1 JAERI-Experiment: Systematische Fehler der gemessenen Leckage-Spektren

## 7.2 Das Modell des Experimentes in der zweidimensionalen (r,z)-Geometrie.

Für die Berechnung der Leckage-Spektren wurden die  $S_N$ -Programme TWOTRAN und ANTRA2 herangezogen, da nur in diesen Programmen die endlichen Abmessungen der Beryllium-Schicht (Höhe und Radius) berücksichtigt werden können. Das bei der Rechnung eingesetzte geometrische Modell des Experimentes ist der Abb.7.5 zu entnehmen.

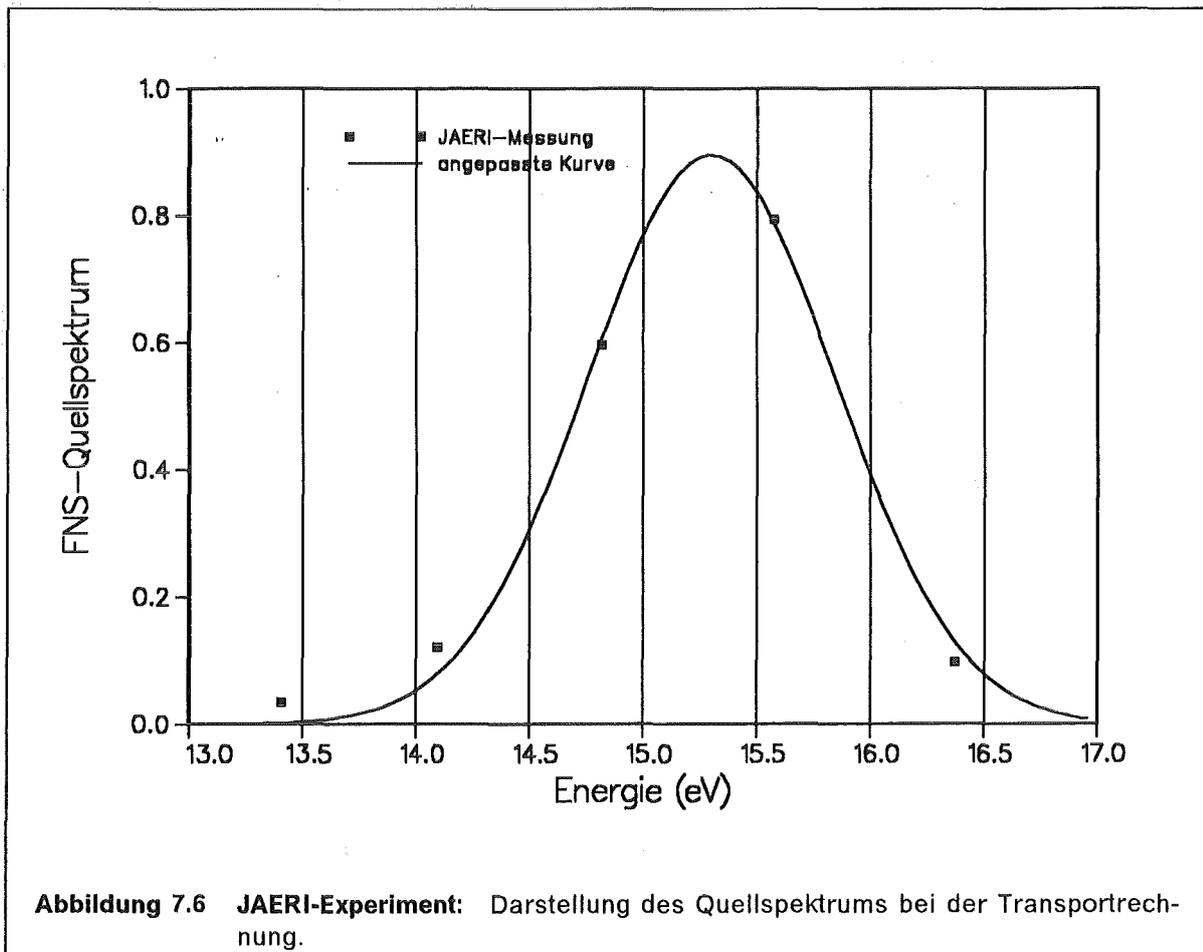


Die Transportrechnungen mußten wegen der begrenzten Speicherkapazität der Rechenmaschine auf 30 Energiegruppen (anstatt wie bisher 100) beschränkt werden. Allen Rechnungen lag die LANL-Gruppenstruktur ( s. Tab.7.2) zugrunde.

Eine befriedigende Berechnung der Neutronen-Spektren ist besonders im Energiebereich oberhalb von 6 MeV bedeutend, weil dort die größten Diskrepanzen zwischen gemessenen und berechneten Werten bei der Nachrechnung des KIM-Experimentes festgestellt wurden. Um eindeutigen Aufschluß über den Verlauf des schnellen Neutronenflusses in der untersuchten ca. 5 cm dicken Beryllium-Schicht zu erhalten, wurde daher großen Wert auf die möglichst genaue Darstellung des Quellspektrums gelegt.

Das experimentell bestimmte Spektrum wurde direkt in die Transportrechnung eingesetzt. Dazu wurde das Spektrum im Peakbereich durch eine glatte Gauß'sche Kurve angenähert und über die den einzelnen Gruppen entsprechende Energiebereiche integriert ( s. Abb.7.6).

Berechnet wurden die radialen und axialen Neutronenflußverläufe in einem Orts-Gitter das in der Beryllium-Zone aus 32 radialen und 5 axialen Teilintervallen bestand. Da bei der Anwendung der  $S_N$ -Programme auch der Winkelbereich diskretisiert wird, ist es notwendig die  $S_N$ -Näherung zu benutzen, die die gewünschte Genauigkeit besitzt. Das JAERI-Experiment wurde so konzipiert, daß die  $S_{16}$ -Approximation für die Winkelvariablen dem zu behandelnden Problem angemessen ist. Der bei der  $S_{16}$ -Näherung in dem DOT-Programm eingesetzte Quadraturatz entspricht genau den Meßwinkeln  $\Theta$ . Der sowohl in TWOTRAN als auch in ANTRA2 benutzte Quadraturatz unterscheidet sich jedoch von diesem Quadraturatz. Daher können nur die unter dem Winkel  $\Theta = 41,8^\circ$  gemessenen Leckage-Spektren mit den Rechenergebnissen direkt verglichen werden.



Gruppe	Energiebereich [eV]
1	1.500E + 07*) - 1.700E + 07
2	1.350E + 07 - 1.500E + 07
3	1.200E + 07 - 1.350E + 07
4	1.000E + 07 - 1.200E + 07
5	7.790E + 06 - 1.000E + 07
6	6.070E + 06 - 7.790E + 06
7	3.680E + 06 - 6.070E + 06
8	2.865E + 06 - 3.680E + 06
9	2.232E + 06 - 2.865E + 06
10	1.738E + 06 - 2.232E + 06
11	1.353E + 06 - 1.738E + 06
12	8.230E + 05 - 1.353E + 06
13	5.000E + 05 - 8.230E + 05
14	3.030E + 05 - 5.000E + 05
15	1.840E + 05 - 3.030E + 05
16	6.760E + 04 - 1.840E + 05
17	2.480E + 04 - 6.760E + 04
18	9.120E + 03 - 2.480E + 04
19	3.350E + 03 - 9.120E + 03
20	1.235E + 03 - 3.350E + 03
21	4.540E + 02 - 1.235E + 03
22	1.670E + 02 - 4.540E + 02
23	6.140E + 01 - 1.670E + 02
24	2.260E + 01 - 6.140E + 01
25	8.320E + 00 - 2.260E + 01
26	3.060E + 00 - 8.320E + 00
27	1.130E + 00 - 3.060E + 00
28	4.1400E-01 - 1.1300E + 00
29	1.5200E-01 - 4.1400E-01
30	1.3900E-04 - 1.5200E-01

**Tabelle 7.2 Gruppenstruktur der LANL-Bibliothek.**

\*)  $1.500E + 07 = 1.500 \times 10^7$

Mit den Programmen NJOY, DOUBLE und CROMIX ist eine Wirkungsquerschnittsbibliothek in der LANL-Gruppenstruktur erstellt worden, die die winkelabhängigen Streumatri-

zen enthält. Wegen der starken Anisotropie der Streuung bei hohen Energien wurden die Legendre-Streumatrizen bis zu einer  $P_6$ - Approximation berechnet und bei der TWO-TRAN-Rechnung verwendet. Den nuklearen Daten für Beryllium lag der EFF-1 Datensatz zugrunde.

### 7.3 Ergebnisse der Nachrechnungen.

Mit dem Programm ANTRA2 ist die Nachrechnung des JAERI-Experimentes durchgeführt worden. Aus der Rechnung ist der winkelabhängige Gruppenfluß an den Knoten des Orts-Winkel-Netzes ermittelt worden. Bei dem Versuch wurde jedoch die Zahl der an der oberen Grundfläche des Beryllium-Zylinders in die durch  $\Theta$  bestimmte Richtung ausströmenden Neutronen  $C(E_n)$  gemessen und entsprechend normiert. Der Detektor befand sich im Abstand  $L = 7$  m von dieser Grundfläche. An dieser Stelle konnten von dem Detektor nur diejenigen Neutronen registriert werden, die aus einem Kreis um die z-Achse mit einem Radius von ca. 5,3 cm emittiert wurden. Für den Vergleich mit den Meßwerten muß daher ein geeigneter Flußmittelwert berechnet werden. Dieser Wert bezieht sich auf den axialen Ausfluß der Neutronen aus dem Teil B ( ca.  $88,26 \text{ cm}^2$  ) der oberen Grundfläche des Zylinders. Er kann mittels des radialen Winkelflußes an der axialen Position  $z = 25,08$  cm berechnet werden. Auf dieser Höhe befindet sich die obere Grundfläche des Zylinders.

Die Gesamtzahl der Neutronen mit Energien in der Gruppe  $g$ , die eine Grenzfläche  $B_{i,j+\frac{1}{2}}$  des Volumens  $V_{i,j}$  von unten nach oben, in der Richtung  $\Omega$ , je  $s$  durchsetzen, läßt sich definitionsgemäß durch

$$\psi_{m,i,j+\frac{1}{2}}^g B_{i,j+\frac{1}{2}} \vec{\Omega} \cdot \vec{n}$$

berechnen.  $\vec{n}$  ist die Außennormale zu der Fläche  $B_{i,j+\frac{1}{2}}$ . Somit ergibt sich für die Anzahl der Neutronen, die den Kreis B in der durch  $\Theta$  bestimmten Richtung durchqueren:

$$C(E_n) = \frac{\sum_{i=1}^7 \psi_{m,i,j+\frac{1}{2}}^g B_{i,j+\frac{1}{2}} \cos(\Theta)}{\Delta E_g}$$

wobei

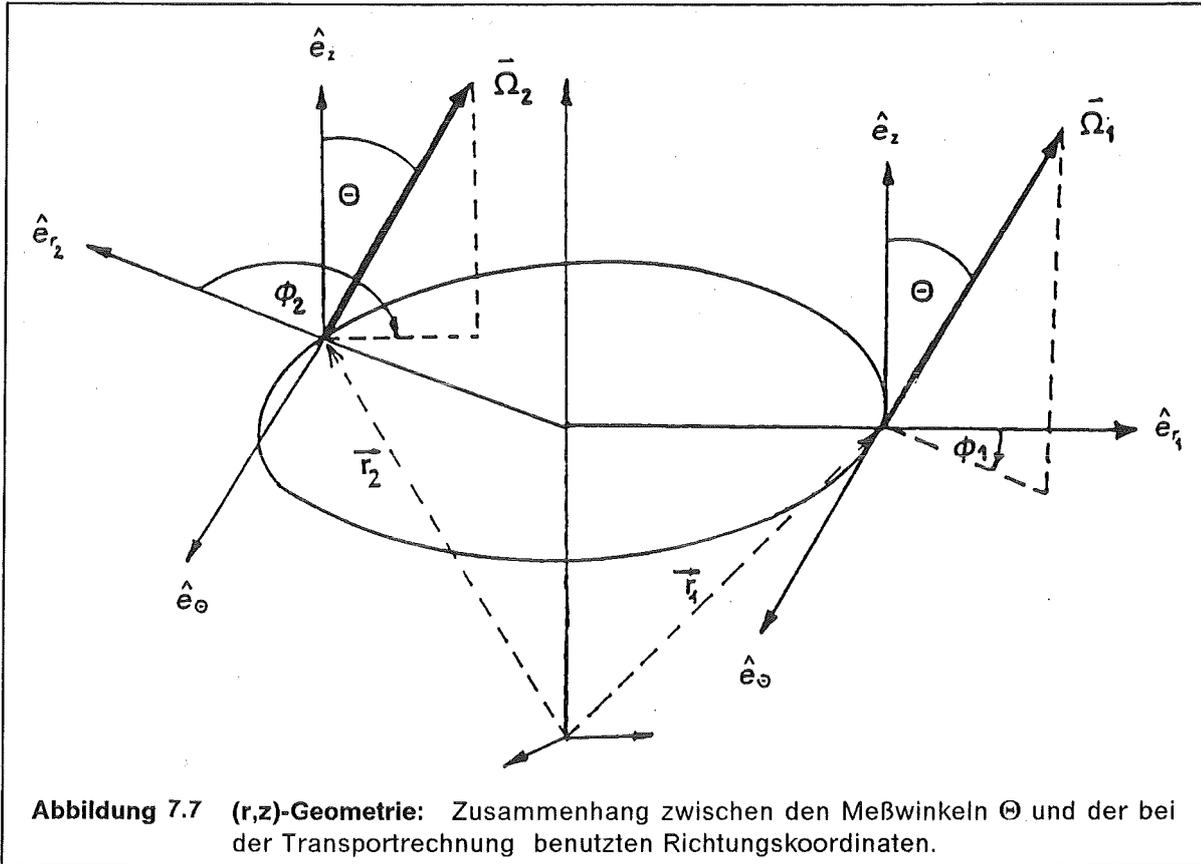
$$B_{i,j+\frac{1}{2}} = \pi(r_{i+\frac{1}{2}}^2 - r_{i-\frac{1}{2}}^2) = 2\pi r_i \Delta r_i$$

$$r_i = \frac{r_{i+\frac{1}{2}} + r_{i-\frac{1}{2}}}{2}$$

$$E_n \in \Delta E_g$$

Die Größe  $C(E_n)$  ist pro Energieeinheit ausgedrückt.

Weiterhin muß man berücksichtigen, daß der Winkel  $\Theta$  bezüglich der Flächennormale  $\vec{n}$  bestimmt wurde. Es stellt sich die Frage, welche Neutronenflugrichtung  $\Omega_m$  dem Meßwinkel entspricht, vorausgesetzt, daß das Neutron im Ortspunkt  $\vec{r} = (r_i, 25,08)$  emittiert wurde. Bei der Rechnung sind die Richtungen in einem nicht raumfesten Koordinatensystem beschrieben (vgl. Abb.2.4).



Aus der Abb.7.7 ist abzulesen, daß der Richtungsvektor  $\vec{\Omega}_{m(l,n)}$  durch die Komponenten  $(\cos \Theta \cos \phi, \sin \Theta \sin \phi, \cos \Theta)$  definiert ist. Der Polarwinkel des Vektors  $\Omega_m$  muß dem Meßwinkel  $\Theta$  gleich sein. Der Azimutwinkel  $\phi$  ändert sich zwischen  $0$  und  $2\pi$  in Abhängigkeit von der Position des Neutrons (vgl.  $\vec{r}_1$  und  $\vec{r}_2$  auf der Abb.7.7).

Die Meßgröße  $\phi^M(\Theta, E_n)$  ist daher aus den radialen Winkelströmen wie folgt zu berechnen

$$\phi^M(\Theta, E_n) = \frac{\sum_{i=1}^7 \sum_{n=1}^N \psi_{i, j+\frac{1}{2}, m(l,n)}^g B_{i, j+\frac{1}{2}} \cos(\Theta) w_{l,n}}{\Delta E_g B w_l} \quad (7.1)$$

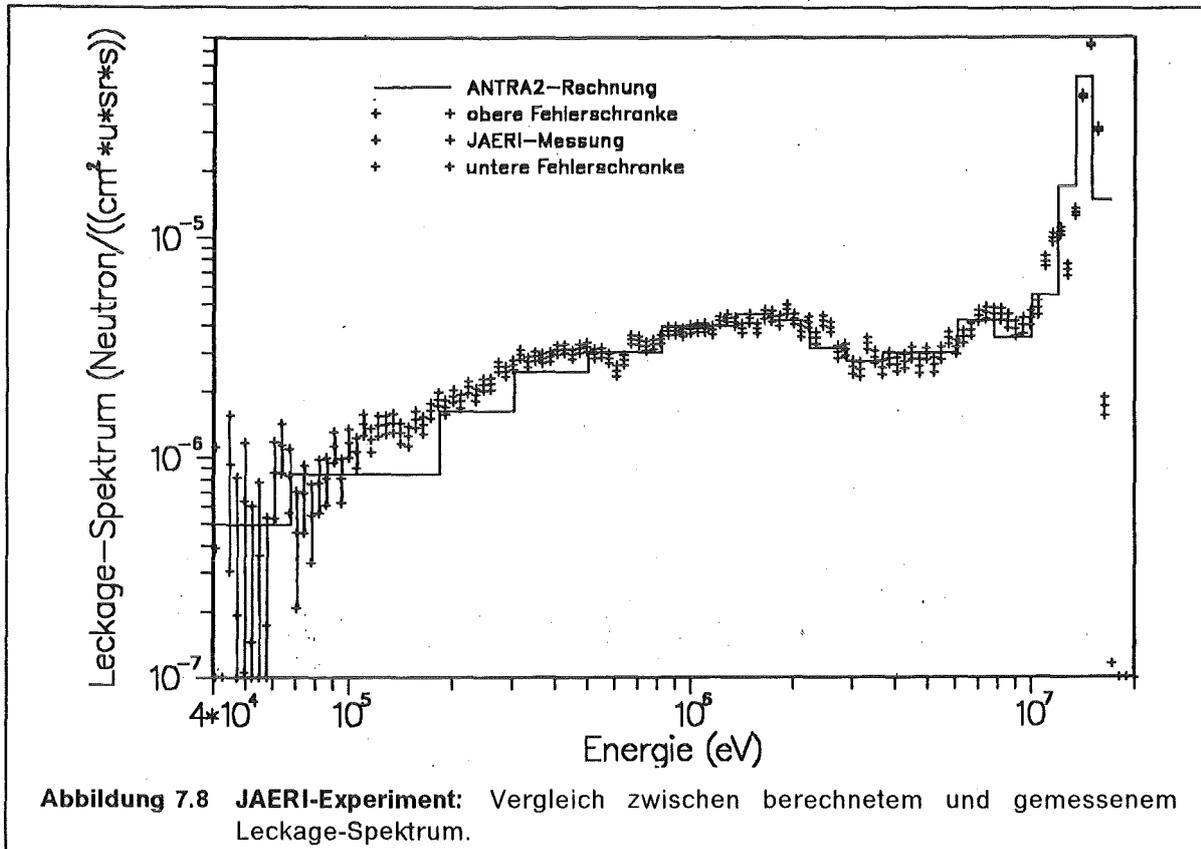
wobei

$$B = \sum_{i=1}^7 B_{i, j+\frac{1}{2}} \text{ entspricht der Fläche } A_s \text{ mit dem Inhalt } 88,26 \text{ cm}^2$$

$$w_l = \sum_{i=1}^N w_{l,n}$$

Das unter Verwendung des detaillierten Modells des JAERI-Versuchs, nach der Gl.(7.1) berechnete Leckage-Spektrum in der Richtung  $\Theta = 41,8^\circ$  ist auf der Abb.7.8 dargestellt. Zum Vergleich sind die Meßwerte mit ihren Meßfehlern miteingetragen. Es läßt sich insgesamt eine sehr zufriedenstellende Übereinstimmung zwischen den berechneten Leckagewerten und den experimentellen Ergebnissen feststellen. Dies zeigt erstens, daß das strenge Rechenverfahren, das in dem ANTRA2 Programm eingesetzt wurde, korrekt

funktioniert, und zweitens, daß die bei der Nachrechnung des KIM-Experimentes zwischen der Rechnung und der Messung bestehenden Unterschiede im hohen Energiebereich in erster Linie auf die Darstellung der Quelle zurückzuführen sind. Der Quellpeak ist sehr gut durch die Rechnung wiedergegeben, wenn man beachtet, daß der berechnete Wert mit dem Integral über die Meßwerte innerhalb einer Gruppe dividiert durch die Breite der Energiegruppe zu vergleichen ist.

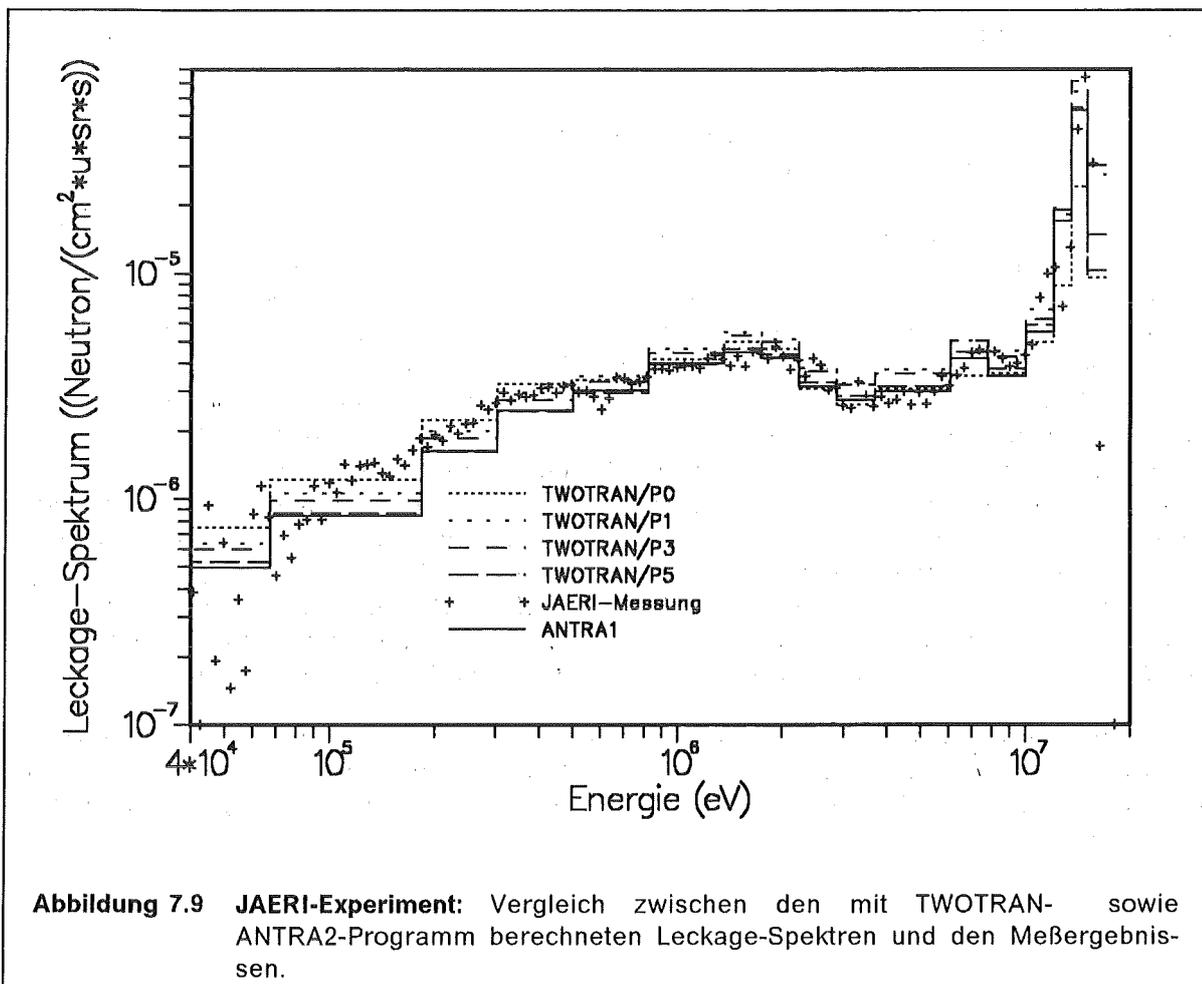


#### 7.4 Gegenüberstellung der mit dem TWOTRAN-Programm erzielten Ergebnisse.

Die Ergebnisse der ANTRA2-Rechnung wurden mit den Ergebnissen der TWOTRAN Rechnung verglichen. Um die Anisotropie der Neutronenstreuung zu berücksichtigen wird in TWOTRAN der Übergangsquerschnitt nach Legendre-Polynomen entwickelt. Wegen der hohen Neutronenenergien macht sich die Anisotropie der Streuung stark bemerkbar (vgl. Abb.7.4). Dabei ist die Vorwärtsstreuung dominant. Da die Neutronen außerhalb der Beryllium-Schicht erzeugt wurden, entsteht in der Schicht, durch den über die untere Grundfläche eintretenden Neutronenstrom, eine stark anisotrope Neutronenflußdichte mit ausgeprägter Vorwärtskomponente. Die Gegenüberstellung der TWOTRAN-Ergebnisse, der ANTRA2-Ergebnisse sowie der Meßwerte erlaubt die Genauigkeit der TWOTRAN-Rechnung zu bestimmen. Es ist dabei eine  $P_1$ -Entwicklung zu finden, die die anisotrope Streuung in Beryllium hinreichend gut beschreibt. Hierfür sind die TWOTRAN-Rechnungen für  $P_0$ - bis  $P_5$ -Näherungen durchgeführt worden. Die Ergebnisse dieser Rechnungen wurden in der Abbildung 7.9 dargestellt. Zum Vergleich sind auch die Meßergebnisse miteingetragen. Wie aus der Abb.7.9 zu ersehen ist, zeigt das bei der  $P_0$ -Näherung berechnete Leckage-Spektrum einen verringerten Ausfluß der hochenergetischen

Neutronen. Diese Unterbewertung kam als Folge der Annahme einer isotropen Winkelverteilung der Neutronen nach jedem Stoß zustande. Demgegenüber wird bei einem Zylinderradius von ca. 31,5 cm ein größerer Teil der Neutronen mehrfach gestreut. Dies führt zu einer Überbewertung des experimentell bestimmten Spektrums in dem niedrigeren Energiebereich ( von 4 bis ca. 500 keV), da hier die Zahl der mehrfach gestreuten Neutronen bei weitem überwiegt. Weiterhin ist aus der Abb.7.9 zu erkennen, daß mit zunehmender Ordnung der  $P_L$ -Näherung ( d.h. mit wachsendem  $L$  ) eine Konvergenz der TWOTRAN-Ergebnisse gegenüber den ANTRA2-Ergebnissen eintritt. Schon bei der  $P_1$ -Approximation weicht das berechnete Leakage-Spektrum wesentlich weniger von den ANTRA2-Ergebnissen ab. Noch bessere Übereinstimmung tritt bei der  $P_5$ -Näherung auf .

Angesichts dieser Feststellung und in Zusammenhang mit den Ergebnissen des 7.Kapitels kann in allen weiteren Untersuchungen die  $P_5$ -Entwicklung des Übergangsquerschnitts für Beryllium als ausreichende Näherung angesehen werden.



**Abbildung 7.9 JAERI-Experiment:** Vergleich zwischen den mit TWOTRAN- sowie ANTRA2-Programm berechneten Leakage-Spektren und den Meßergebnissen.

### 7.5 **Schlußfolgerungen.**

Die Analyse der mit ANTRA2 berechneten und in JAERI gemessenen Leakage-Spektren aus der 5,08 cm dicken Beryllium-Schicht gibt einen Hinweis auf die Aussagekraft der Nachrechnungen des KIM-Experimentes.

Da sich für den in JAERI durchgeführten Versuch eine gute Übereinstimmung zwischen berechneten und gemessenen Werten ergab, können die bei der Nachrechnung des KIM-Experimentes auftretende Diskrepanzen im hohen Energiebereich teilweise auf die vereinfachte Darstellung der Energieverteilung der Quellneutronen zurückgeführt werden. Weiterhin kommen als mögliche Fehlerquellen

- die Unsicherheiten in dem differentiellen Wirkungsquerschnitt für elastische Neutronenstreuung am Beryllium ( in dem EFF-1-Datensatz) und
- die Verzerrung der räumlichen Neutronenquellverteilung durch das Strukturmaterial des Targethalters sowie durch das Kühlmittel für das Target

in Betracht.

Darüberhinaus muß an dieser Stelle erwähnt werden, daß die experimentelle Geometrie in einem eindimensionalen Ansatz nur mit vereinfachenden Annahmen wie Vernachlässigen der Meßkanäle sowie Vereinfachen der Geometrie des Targetsystems dargestellt werden konnte. Es ist nicht auszuschließen, daß bei dem Experiment die 14 MeV-Quellneutronen im Targetsystem gestreut wurden. Die entstandenen epithermischen Neutronen könnten den Meßwert verfälschen.

Die Hinweise auf mögliche Fehler in dem differentiellen Wirkungsquerschnitt für Beryllium auf dem EFF-1 Datensatz werden auch durch [17] gestützt. In der Abb.7.10, die [17] entnommen wurde, sind die mit dem Monte-Carlo-Programm MCNP berechneten Leakage-Spektren an der oberen Grundfläche des Beryllium-Zylinders dargestellt. Den Rechnungen lag die LANL-Auswertung der Wirkungsquerschnitte für Beryllium von Young und Steward zugrunde. Die in dieser Arbeit benutzten Kerndaten für Be basieren auf derselben Auswertung. Betrachtet man die Verläufe des über bestimmte Energiebereiche integrierten Leakage-Spektrums im Verhältnis zu den Meßwerten, so kann aus diesem Vergleich geschlossen werden, daß die im Bereich  $E > 10$  MeV auftretenden Unterschiede zwischen berechneten und gemessenen Werten auf Fehler in den Winkelverteilungen der elastisch gestreuten Neutronen für Beryllium hindeuten ( s. Abb.7.11). Die Diskrepanzen im Bereich  $E \leq 0,6$  MeV sind auf die Unzulänglichkeiten in der Energie-Winkelverteilungen der Sekundärneutronen aus der (n,2n)-Reaktionen zurückzuführen. Diese Aussage stimmt mit den Schlüssen zum KIM-Experiment überein.

Insgesamt ist daher hinreichend nachgewiesen, daß die Transportprogramme ANTRA1 und ANTRA2 in der Lage sind, die Wechselwirkungen der hochenergetischen Neutronen mit den Kernen aller Art (d.h. schweren, mittelschweren und leichten) sicher zu beschreiben.

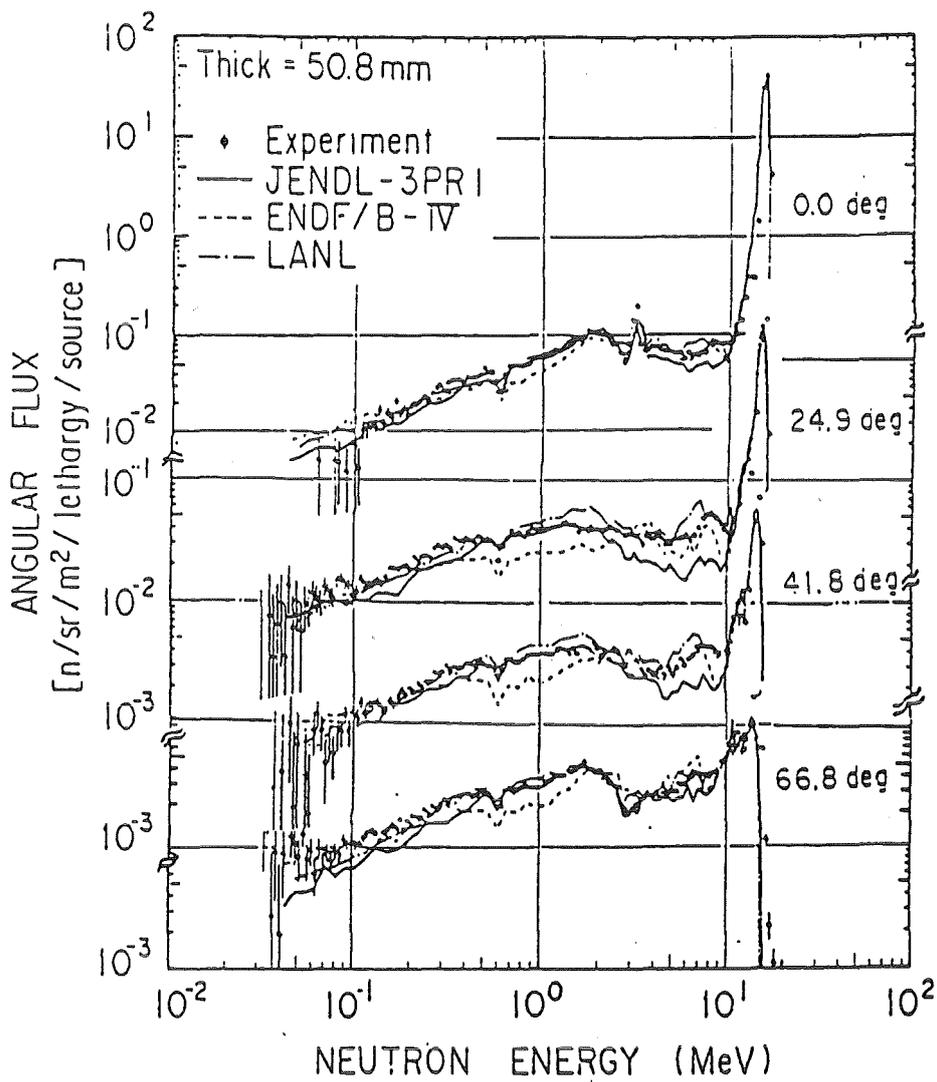


Abbildung 7.10 JAERI-Experiment: Vergleich zwischen den mit dem MCNP-Programm berechneten Leckagespektren und den Meßwerten.

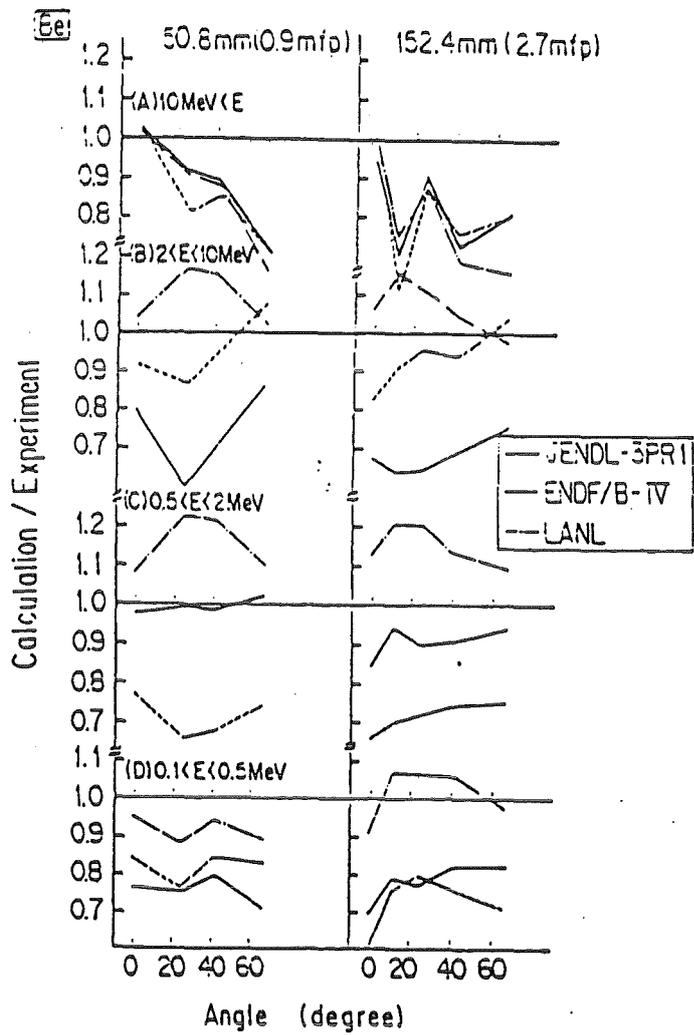


Abbildung 7.11 JAERI-Experiment: Das Verhältnis zwischen der mit MCNP-Ergebnissen und den Meßergebnissen in einzelnen Energiebereichen.

## 8. Zusammenfassung

Die vorliegende Untersuchung befaßt sich mit der strengen Behandlung der Anisotropie der Neutronenstreuung bei Neutronentransportrechnungen. Die vorgegebene Aufgabenstellung, nämlich die Entwicklung eines Rechenprogramms zur Durchführung der Neutronentransportrechnungen in eindimensionalen Geometrien sowie eines Rechenprogramms für Neutronentransportrechnungen in der zweidimensionalen (r,z)-Geometrie bei strenger Berücksichtigung der anisotropen Streuung konnte in allen Punkten erfüllt werden. Folgende wesentliche Arbeitsschritte sind erfolgreich abgeschlossen worden:

### 1. *Verbesserung der grundlegenden Theorie.*

Die über die herkömmliche  $P_L$ -Darstellung des Streukerns bei dem Neutronentransportverfahren bereits hinausgehende strenge Behandlung der anisotropen Streuung mittels der  $l^*$ -Methode wurde auf die eindimensionale zylindrische sowie zwei- und drei-dimensionalen Geometrien erweitert. Dem Zweck gemäß, wurde die strenge  $l^*$ -Methode auf ihre Anwendbarkeit in den oben erwähnten Geometrien überprüft. Im Rahmen der Untersuchungen wurde festgestellt, daß die durch Takahashi eingeführte Darstellung des Streuintegrals in der Boltzmann-Gleichung für den Neutronentransport im Falle der Abhängigkeit der Neutronenflußdichte vom Azimutwinkel des Richtungseinheitsvektors  $\Omega$  falsch hergeleitet worden war. Diese fehlerhafte Darstellungsweise wurde durch eine neue, mittels einer geeigneten Umwandlung des im Streuintegral enthaltenen Integrals über den Azimutwinkel ersetzt.

Die physikalische Bedeutung dieser Verbesserung besteht darin, daß hierdurch zum erstenmal die Streubeiträge von solchen Neutronen korrekt erfaßt werden, die infolge eines Stoßes aus ihrer ursprünglichen Flugrichtung abgelenkt werden mit einer Azimut-Drehung von weniger als  $\pi$ .

### 2. *Entwicklung eines Integrationsverfahrens zur numerischen Berechnung des Streuintegrals in eindimensionaler zylindrischer und zweidimensionaler Geometrie.*

Die nach der Substitution der Integrationsvariablen erhaltene Form des Integranden stellt eine Funktion dar, die am Rande des Integrationsintervalls Singularitäten besitzt. Eine solche Funktion läßt sich mit Hilfe der Gauß-Tschebyscheff'schen Regel numerisch integrieren. Die Integration kann bei geeigneter Anzahl der Stützstellen beliebig genau durchgeführt werden. Zur numerischen Ausführung der zweiten Integration über die Polarwinkel wurde die Gauß-Legendre'sche Regel eingesetzt. Nach diesen beiden Regeln kann das doppelte Streuintegral numerisch berechnet werden.

### 3. *Bestimmung des neuen Quadraturatzes.*

Die bei der Integration benutzten diskreten Werte der Richtungsvariablen und die zugehörigen Gewichte wurden nach den Tschebyscheff'schen und den Legendre'schen Quadraturformeln gewählt.

### 4. *Einführung des neuen Verfahrens in die Transportprogramme ONETRAN und TWO-TRAN.*

Das neuentwickelte Integrationsverfahren wurde in die in Los Alamos erstellten  $S_N$ -Transportprogramme ONETRAN und TWO-TRAN eingefügt. Diese Rechenprogramme lösen die Transportgleichung für Neutronen und Photonen in der Multi-gruppen-Form nach der Methode der diskreten Ordinaten. Die Richtungsabhängig-

keit der Streuquelle wird in diesen Programmen durch eine Entwicklung des Streukerns und folglich der Neutronenflußdichte nach Legendre-Polynomen bzw. Kugelfunktionen beschrieben. Die Einarbeitung der  $l^*$ -Methode in bereits existierende Programme erfordert sorgfältiges Vorgehen, da der Rechengang der Lösung der Multigruppen-Transportgleichung keinesfalls verletzt werden darf und keine Inkonsistenzen beim Erstellen der neuen Programmversionen entstehen dürfen. Die durch die Einführung der strengen Darstellung des Streukerns im Rahmen dieser Arbeit erstellten Programme ANTRA1 und ANTRA2 bieten hinsichtlich der Behandlung der anisotropen Streuung die Wahl zwischen der herkömmlichen  $P_L$ -Näherung und der strengen  $l^*$ -Methode. Die strenge Darstellung des Streuintegrals stützt sich auf die Anwendung der doppelt-differentiellen, d.i. energie- und winkelabhängigen Neutronenemissionsquerschnitte. Dadurch wird die experimentell bestimmte Winkel- und Energieverteilung der Neutronen nach einem Stoß in die neutronenphysikalische Analyse direkt eingebracht. Der Erfolg dieses Vorgehens konnte durch umfangreiche numerische Tests nachgewiesen werden.

Mit Hilfe der Rechenprogramme ANTRA1 und ANTRA2 wurden die bei Neutronentransportrechnungen bisher bestehenden Unsicherheiten darüber, welche Methoden und Daten für die Bedürfnisse des NET-Reaktors geeignet sind, geklärt. Die mit den neuentwickelten Verfahren erzielten Ergebnisse stimmen in allen Fällen mit verlässlichen experimentellen Meßwerten gut überein. Allen Nachrechnungen lag das Europäische Fusionsdaten-File (EFF-1) zugrunde.

Für drei Benchmark-Experimente, an der Technischen Universität in Dresden (TUD), am Kurchatov-Institut im Moskau (KIM) und bei JAERI in Japan, sind neutronenphysikalische Nachrechnungen mit den Programmen ANTRA1 und ANTRA2 durchgeführt worden. Die Vergleiche der Ergebnisse ( ANTRA1 gegenüber ONETRAN, ANTRA2 gegenüber TWOTRAN) geben Aufschluß über die heutzutage verfügbaren nuklearen Daten und Rechenmethoden.

5. Zur **Verifizierung von ANTRA1** wurde die TUD-Messung der Neutronenmultiplikation von Blei bei 14 MeV Neutroneneinschußenergie nachgerechnet. Bei dem Experiment wurde die Neutronenmultiplikation in der Blei-Kugelschale sowie das Neutronenausflußspektrum gemessen. Dieses Ausflußspektrum konnte durch die Rechnung gut wiedergegeben werden. Die berechnete Neutronenmultiplikation in der Blei-Kugelschale beträgt 1,76 und ist mit dem nicht sehr genauen Meßergebnis  $1.94 \pm 10\%$  noch verträglich. Eine Wiederholungsmessung am Kurchatov-Institut ergab - ebenso wie die Rechnung - einen niedrigeren Wert für die Neutronenmultiplikation und zwar  $1,857 \pm 4\%$ . Die auftretenden Unterschiede können somit weniger auf differentielle Daten und Rechenmethoden als auf Ungenauigkeiten bei den integralen Messungen zurückgeführt werden. Eine Empfindlichkeitsstudie die mit dem Transportprogramm ANISN neulich durchgeführt wurde ergab, daß eine Erhöhung des in EFF-1 enthaltenen Wirkungsquerschnitts für die (n,2n)-Reaktion von 2,10 barn auf 2,193 barn zu einer um etwa 1-1,5 % höheren Neutronenmultiplikation führen würde [28]. Diese Erhöhung des Wirkungsquerschnitts bewirkt auch bessere Übereinstimmung zwischen der ANTRA1-Rechnung und der Messung.

Die spektrale Verteilung der Leckageneutronen wird mit dem ANTRA1-Programm und EFF-Daten gut reproduziert. Die Ergebnisse der Rechnungen mit anderen Programmen und mit konkurrierenden Auswertungen von Blei-Daten (aus ENDF/B-V, ENDL-85) sind dagegen schlechter. Da der Effekt der anisotropen Streuung an den schweren Bleikernen ziemlich klein ist, ergaben die mit dem ONETRAN-Programm in  $P_1$ -Näherung durchgeführten Transportrechnungen im Vergleich zu ANTRA1 na-

hezu dieselben Ergebnisse, wie zu erwarten war. Das ANTRA1-Programm kann aufgrund dieser Feststellung als zuverlässig angesehen werden.

6. Zwecks **Überprüfung der Genauigkeit der Datenauswertung für Beryllium in EFF-1** wurde das Programm ANTRA1 zur Nachrechnung des KIM-Experimentes eingesetzt. Bei diesem Experiment wurde die Neutronenmultiplikation in drei Beryllium-Kugelschalen von verschiedener Dicke (1,5 cm, 5 cm und 8 cm) gemessen. Darüberhinaus wurde für die 5 cm dicke Kugelschale das Neutronenausflußspektrum experimentell ermittelt. Die berechnete Neutronenmultiplikation stimmt mit den gemessenen Werten gut überein. In den Ausflußspektren zeigen sich dagegen einige Unterschiede. Aus den im Bereich von etwa 6 MeV bis 14 MeV gefundenen Diskrepanzen zwischen den Meß- und Rechenergebnissen kann geschlossen werden, daß noch einige Unzulänglichkeiten in den Winkelverteilungen der in Beryllium elastisch gestreuten Neutronen in EFF-1 bestehen. Die im Energiebereich  $E \leq 600$  keV auftretenden Unterschiede deuten auf die Unzulänglichkeiten in den Energie-Winkelverteilungen der Sekundärneutronen aus dem (n,2n)-Prozeß hin. Die Aussagekraft dieser Nachrechnungen ist jedoch beschränkt. Die Ergebnisse lassen sich nicht eindeutig interpretieren, da die bei der neutronenphysikalischen Rechnung benutzte Energieverteilung der Quellneutronen - angesichts mangelnder Dokumentation - vereinfacht dargestellt werden mußte.
7. Zur **Verifizierung des ANTRA2-Programms** wurde das bei JAERI in Japan durchgeführte Experiment nachgerechnet. Das numerisch ermittelte Neutronenleckage-Spektrum stimmt mit den Meßergebnissen gut überein. Dies bestätigt, daß das neue Transportprogramm ANTRA2 in der Lage ist, die Wechselwirkungen hochenergetischer Neutronen mit leichten Kernen gut zu beschreiben.

Das JAERI-Experiment wurde zwecks Überprüfung der Genauigkeit von Kerndaten für Beryllium durchgeführt. Der bereits bei JAERI unternommene Vergleich zwischen den Ergebnissen des Monte-Carlo-Programms MCNP und den Meßergebnissen hat auf mögliche Fehler in den Winkelverteilungen der Neutronen nach der elastischen Streuung sowie in den Energie-Winkel-Verteilungen der Sekundärneutronen aus der (n,2n)-Reaktion hingewiesen.

8. Nachdem ANTRA1 bzw. ANTRA2 als Referenzprogramme für Transportrechnungen mit strenger Behandlung der anisotropen Streuung angesehen werden können, läßt sich auch die Frage beantworten, wie stark bei einem leichten Kern wie Beryllium **der Einfluß der Anisotropie-Darstellung auf die hier diskutierten Ergebnisse** ist. (Für den schweren Kern Blei wurde dies bereits im Punkt 5 behandelt).

Dazu wurden Vergleichsrechnungen mit den Rechenprogrammen TWOTRAN und ANTRA2 unter folgenden Ausgangsbedingungen vorgenommen:

- Ordnung der  $S_N$ -Approximation:  $N = 16$
- Variation der Approximationsordnung der  $P_L$ -Näherung:  $L = 1,3,5$
- Anzahl der Energiegruppen  $G = 30$  ( LANL-Gruppenstruktur)

Eine Gegenüberstellung der ANTRA2 und der TWOTRAN Ergebnisse zeigte, daß in allen weiteren Untersuchungen  $P_5$ -Reihenentwicklung des Streukerns für Beryllium als hinreichend genaue Näherung der Anisotropie betrachtet werden kann. Somit sind die von Takahashi bei verschiedenen Annahmen bezüglich der Winkelverteilung der Sekundärneutronen erhaltenen Unterschiede in den Neutronenspektren an der Oberfläche der Beryllium-Kugel mehr auf die bestehenden Ungenauigkeiten in den für Beryllium benutzten Kerndaten ( ENDF/B-IV ) als auf die Rechenverfahren zurückzuführen. Weiterhin läßt sich daraus schließen, daß keineswegs hohe Entwick-

lungsordnungen in der  $P_L$ -Darstellung des Streukerns notwendig sind, wenn man Größen wie Neutronenmultiplikation oder Neutronenausflußspektren berechnen will. Dies ist für Anwendungen und Vergleiche mit den Rechnungen anderer Labors eine wesentliche Aussage.

Damit sind alle eingangs gestellten Aufgaben im Zusammenhang mit der strengen Berücksichtigung der Anisotropie der Neutronenstreuung beim Neutronentransportverfahren gelöst. Rechenprogramme zur Durchführung der Neutronentransportrechnung mit strenger Behandlung der anisotropen Streuung wurden entwickelt und als Referenzprogramme erfolgreich eingesetzt.

## Anhang A. Eigenschaften der I\*-Funktion.

Sei  $D(\mu, \mu', \mu_L) = 1 - \mu^2 - \mu'^2 - \mu_L^2 + 2\mu\mu'\mu_L$  so läßt sich die I\*-Funktion schreiben als

$$I^*(\mu, \mu', \mu_L) = \begin{cases} \frac{1}{\pi\sqrt{D}} & \text{wenn } D > 0 \\ 0 & \text{wenn } D \leq 0 \end{cases} \quad (\text{A.1})$$

Die  $\sqrt{D}$ -Funktion kann folgendermaßen ausgedrückt werden [24]

$$\sqrt{D(\mu, \mu', \mu_L)} = \begin{cases} \sqrt{(1 - \mu_L^2)(1 - \mu'^2)(1 - x^2)} \\ \sqrt{(1 - \mu_L^2)(1 - \mu^2)(1 - y^2)} \\ \sqrt{(1 - \mu^2)(1 - \mu'^2)(1 - z^2)} \end{cases} \quad (\text{A.2})$$

wobei

$$x = \frac{\mu - \mu_L\mu'}{\sqrt{(1 - \mu_L^2)}\sqrt{(1 - \mu'^2)}} \quad dx = \frac{1}{\sqrt{(1 - \mu_L^2)}\sqrt{(1 - \mu'^2)}} d\mu \quad (\text{A.3})$$

$$y = \frac{\mu' - \mu_L\mu}{\sqrt{(1 - \mu_L^2)}\sqrt{(1 - \mu^2)}} \quad dy = \frac{1}{\sqrt{(1 - \mu_L^2)}\sqrt{(1 - \mu^2)}} d\mu' \quad (\text{A.4})$$

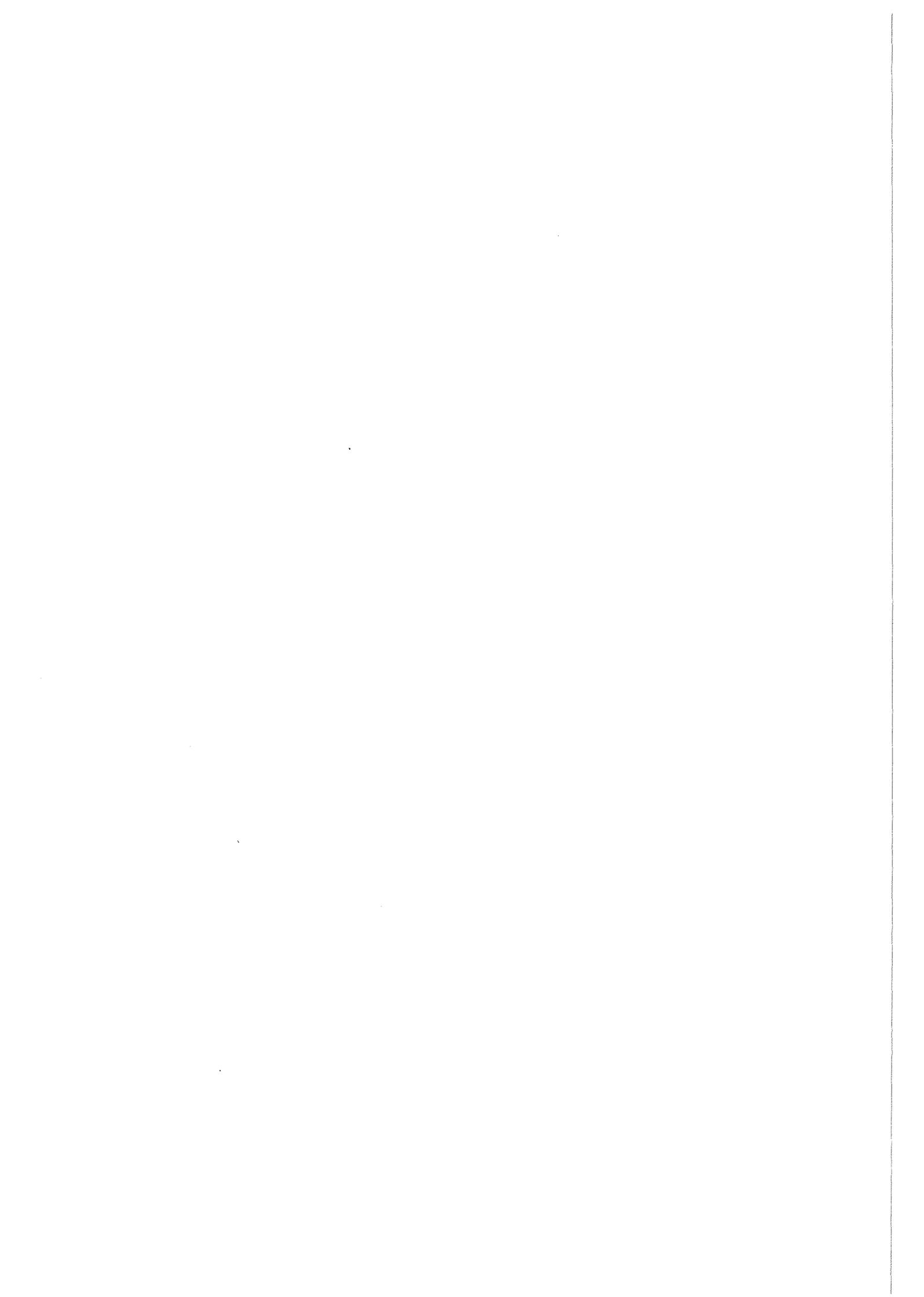
$$z = \frac{\mu_L - \mu\mu'}{\sqrt{(1 - \mu^2)}\sqrt{(1 - \mu'^2)}} \quad dz = \frac{1}{\sqrt{(1 - \mu^2)}\sqrt{(1 - \mu'^2)}} d\mu_L \quad (\text{A.5})$$

Nach der Substitution von (A.3)-(A.5) in die Integrale(2.22) erhält man in den einzelnen Fällen:

$$\int_{-1}^1 I^*(\mu, \mu', \mu_L) d\mu_L = \int_{\frac{\mu\mu' - \sqrt{(1-\mu^2)}\sqrt{(1-\mu'^2)}}{\mu\mu' + \sqrt{(1-\mu^2)}\sqrt{(1-\mu'^2)}}}^1 I^*(\mu, \mu', \mu_L) d\mu_L = \frac{1}{\pi} \int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{(1-z^2)}} dz = \frac{1}{\pi} \arcsin(z) \Big|_{-1}^1 = 1$$

$$\int_{-1}^1 I^*(\mu, \mu', \mu_L) d\mu = \int_{\frac{\mu'\mu_L - \sqrt{(1-\mu'^2)}\sqrt{(1-\mu_L^2)}}{\mu'\mu_L + \sqrt{(1-\mu'^2)}\sqrt{(1-\mu_L^2)}}}^1 I^*(\mu, \mu', \mu_L) d\mu = \frac{1}{\pi} \int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{(1-x^2)}} dx = \frac{1}{\pi} \arcsin(x) \Big|_{-1}^1 = 1$$

$$\int_{-1}^1 I^*(\mu, \mu', \mu_L) d\mu' = \int_{\frac{\mu\mu_L - \sqrt{(1-\mu^2)}\sqrt{(1-\mu_L^2)}}{\mu\mu_L + \sqrt{(1-\mu^2)}\sqrt{(1-\mu_L^2)}}}^1 I^*(\mu, \mu', \mu_L) d\mu' = \frac{1}{\pi} \int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{(1-y^2)}} dy = \frac{1}{\pi} \arcsin(y) \Big|_{-1}^1 = 1$$



## Anhang B. Das im ONETRAN-Programm gelöste System von algebraischen Gleichungen

Das in dem ONETRAN-Programm gelöste System von algebraischen Gleichungen hat die Form

$$\begin{bmatrix} \Delta A_i \frac{\alpha_{m+\frac{1}{2}}}{W_m} + \sum_t^g V_{i-\frac{1}{2}} & \mu A_{i+\frac{1}{2}} + \Delta A_i \frac{\alpha_{m+\frac{1}{2}}}{W_m} + \sum_t^g V_{i+\frac{1}{2}} \\ \mu Z_3 + Z_5 \frac{\alpha_{m+\frac{1}{2}}}{W_m} + \sum_t^g Z_1 & \mu Z_4 + Z_5 \frac{\alpha_{m+\frac{1}{2}}}{W_m} + \sum_t^g Z_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_{i-\frac{1}{2}}^g \\ \psi_{i+\frac{1}{2}}^g \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} q_{i+\frac{1}{2}}^g V_{i-\frac{1}{2}} + q_{i-\frac{1}{2}}^g V_{i-\frac{1}{2}} + \Delta A_i \frac{\alpha}{W_m} \psi_{m-\frac{1}{2}}^g + \mu A_{i-\frac{1}{2}} \psi_b^g \\ q_{i-\frac{1}{2}}^g Z_1 + q_{i+\frac{1}{2}}^g Z_2 + Z_3 \frac{\alpha}{W_m} \psi_{m-\frac{1}{2}}^g \end{bmatrix} \quad \text{für } \mu > 0 \quad (B.1)$$

und

$$\begin{bmatrix} -\mu A_{i-\frac{1}{2}} + \Delta A_i \frac{\alpha_{m+\frac{1}{2}}}{W_m} + \sum_t^g V_{i-\frac{1}{2}} & \Delta A_i \frac{\alpha_{m+\frac{1}{2}}}{W_m} + \sum_t^g V_{i+\frac{1}{2}} \\ \mu Z_8 + Z_{10} \frac{\alpha_{m+\frac{1}{2}}}{W_m} + \sum_t^g Z_6 & \mu Z_9 + Z_{10} \frac{\alpha_{m+\frac{1}{2}}}{W_m} + \sum_t^g Z_7 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_{i-\frac{1}{2}}^g \\ \psi_{i+\frac{1}{2}}^g \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} q_{i+\frac{1}{2}}^g V_{i-\frac{1}{2}} + q_{i-\frac{1}{2}}^g V_{i-\frac{1}{2}} + \Delta A_i \frac{\alpha}{W_m} \psi_{m-\frac{1}{2}}^g - \mu A_{i-\frac{1}{2}} \psi_b^g \\ q_{i-\frac{1}{2}}^g Z_6 + q_{i+\frac{1}{2}}^g Z_7 + Z_{10} \frac{\alpha}{W_m} \psi_{m-\frac{1}{2}}^g \end{bmatrix} \quad \text{für } \mu < 0 \quad (B.2)$$

wobei  $\alpha = \alpha_{m-\frac{1}{2}} - \alpha_{m+\frac{1}{2}}$  ist.  $\psi_b^g$  ist der Neutronenflußwert am Rande der vorhergehenden Orts-Zelle.

Für die Anfangsrichtungen ergibt sich

$$\begin{bmatrix} -\frac{1}{2} \mu (A_{i-\frac{1}{2}} + A_{i+\frac{1}{2}}) + \sum_t^g V_{i-\frac{1}{2}} & -\frac{1}{2} \mu \Delta A_i + \sum_t^g V_{i+\frac{1}{2}} \\ \mu (Z_8 + \frac{1}{2} Z_{10}) + \sum_t^g Z_6 & \mu (Z_9 - \frac{1}{2} Z_{10}) + \sum_t^g Z_7 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_{i-\frac{1}{2}}^g \\ \psi_{i+\frac{1}{2}}^g \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} q_{i-\frac{1}{2}}^g V_{i-\frac{1}{2}} + q_{i+\frac{1}{2}}^g V_{i+\frac{1}{2}} - \mu A_{i+\frac{1}{2}} \psi_b^g \\ q_{i+\frac{1}{2}}^g Z_6 + q_{i-\frac{1}{2}}^g Z_7 \end{bmatrix} \quad (B.3)$$

Die in den Gln.(B.1), (B.2) und (B.3) auftretenden Konstanten, sind in der Tab.B.1 definiert.

Größe	ebene Geometrie	zylindrische Geometrie	sphärische Geometrie
$\Delta r$	$r_+ - r_-$	$r_+ - r_-$	$r_+ - r_-$
$A_-$	1	$2\pi r_-$	$4\pi r_-^2$
$a_+$	2	$2\pi r_+$	$4\pi r_+^2$
$\Delta A$	0	$A_+ - A_-$	$A_+ - A_-$
$V_-$	$\frac{1}{2} \Delta r$	$\frac{\pi}{3} \Delta r (r_+ + 2r_-)$	$\frac{\pi}{3} \Delta r (r_+^2 + 2r_+r_- + 3r_-^2)$
$V_+$	$\frac{1}{2} \Delta r$	$\frac{\pi}{3} \Delta r (2r_+ + r_-)$	$\frac{\pi}{3} \Delta r (3r_+^2 + 2r_+r_- + r_-^2)$
$z_1$	$10\Delta r$	$5\Delta r (r_+ + r_-)$	$(3r_+^2 + \Delta r_+r_- + 3r_-^2)\Delta r$
$z_2$	$20\Delta r$	$5\Delta r (3r_+ + r_-)$	$(12r_+^2 + 6r_+r_- + 2r_-^2)\Delta r$
$z_3$	-30	$-10(r_- + 2r_-)$	$-5(r_+^2 + 2r_+r_- + 3r_-^2)$
$z_4$	30	$10(4r_+ + 2r_-)$	$5(9r_+^2 - 2r_+r_- - r_-^2)$
$z_5$	0	$30\Delta r$	$20(2r_+ + r_-)\Delta r$
$z_6$	$20\Delta r$	$5(r_+ + 3r_-)\Delta r$	$(2r_+^2 + 6r_+r_- + 12r_-^2)\Delta r$
$z_7$	$10\Delta r$	$5(r_+ + r_-)\Delta r$	$(3r_+^2 + 4r_+r_- + 3r_-^2)\Delta r$
$z_8$	-30	$10(r_+ + r_-)$	$5(r_+^2 + 2r_+r_- - 9r_-^2)$
$z_9$	30	$10(2r_+ - r_-)$	$5(3r_+^2 + 2r_+r_- + r_-^2)$
$z_{10}$	0	$30\Delta r$	$20(r_+ + 2r_-)\Delta r$

**Tabelle B.1 ONETRAN:** Definition der in den Gln.(B.1)-(B.3) auftretenden geometrischen Parameter.

Zeichen Erklärung:

$$r_+ = r_{i+\frac{1}{2}}, \quad r_- = r_{i-\frac{1}{2}}.$$

Der Index i entfällt bei allen angeführten Größen.

## Literaturverzeichnis

- [1] R. Toschi et al., "Next European Torus, Objectives, General Requirements, and Parameter Choices", Fusion Technology, 14, 1, 19, (1988).
- [2] M. Dalle Donne et al., "Pebble Bed Canister, a Ceramic Breeder Blanket with Helium Cooling for NET", Proc. of the Fourteenth Symposium on Fusion Technology, Avignon, 8-12 September 1986, p. 423.
- [3] W. Dänner, M. Rieger et al., "Progress in Design and Analysis of the NET Water Cooled Liquid Breeder Blanket", Proc. of the Fourteenth Symposium on Fusion Technology, Avignon, 8-12 September 1986, p. 1281.
- [4] ENDF-B/IV, National Neutron Cross Section Center, Brookhaven National Laboratory, (July 1979).
- [5] H. Bachmann et al., "Neutron Spectra and Tritium Measurements in a Lithium Sphere to Check Fusion Reactor Blanket Calculations", Nuclear Science and Engineering, 67, 74, (1978).
- [6] C. Wong, E. F. Plechaty et al., "Measurements and Calculations of the Leakage Multiplication from Hollow Beryllium Spheres", Fusion Technology, 8, 1, 1165, (1985).
- [7] M. E. Sawan, E. T. Cheng, "Benchmark Calculations for Fusion Blanket Development", Proc. of the Int. Conf. on Nucl. Data for Basic a. Appl. Sci., Santa Fe, 13-17 May 1985, p. 167.
- [8] A. Takahashi, "Integral Measurements and Analyses of Nuclear Data Pertaining to Fusion Reactors", Proc. of the Int. Conf. on Nucl. Data for Basic a. Appl. Sci., Santa Fe, 13-17 May 1985, p. 59.
- [9] K. Furuta, Y. Oka, S. Kondo, "Accuracy of Multigroup Transport Calculation in D-T Fusion Neutronics", J. of Nuclear Science and Technology, 24, 4, 333, (1987).
- [10] M. Z. Youssef, M. A. Abdou, "Uncertainties in Production of Tritium Breeding in Candidate Blanket Design Due to Present Uncertainties in Nuclear Data Base", Fusion Technology, 9, 2, 286, (1986).
- [11] H. Brockmann, "Treatment of Anisotropic Scattering in Numerical Neutron Transport Theory", Nuclear Science and Engineering, 77, 377, (1981).
- [12] A. Takahashi, J. Yamamoto, M. Ebisuya, K. Sumita, "Method for Calculating Anisotropic Transport Using Scattering Kernel without Polynomial Expansion", J. of Nuclear Science and Technology, 16, 1, 1, (1979).
- [13] A. Takahashi, D. Rusch, "Fast Rigorous Numerical Method for the Solution of the Anisotropic Neutron Transport Problem and the NITRAN System for Fusion Neutronics Application", Part I- KfK-2832/I, Part II-KfK-2832/II, Kernforschungszentrum Karlsruhe, (1979).
- [14] J. Yamamoto, A. Takahashi et al., "Measurement and Analysis of Leakage Neutron Spectra from Lithium Spheres with 14 MeV Neutrons", Proc. of the Int. Conf. on Nucl. Data for Basic a. Appl. Sci., Santa Fe, 13-17 May 1985, p. 171.

- [15] J. Yamamoto, A. Takahashi, Y. Sakakihara, "Neutron Transport Calculations by Using Double-Differential Cross-Sections", J. of Nuclear Science and Technology, 19, 4, 276, (1982).
- [16] H. Gruppelaar, "Status of the European Fusion File", Int. Conference on Nuclear Data for Science and Technology, Mito (Japan), May 30 - June 3, 1988.
- [17] Y. Oyama et al., "Measurements and Analysis of an Angular Neutron Flux on a Beryllium Slab Irradiated with Deuterium-Tritium Neutrons", Nuclear Science and Engineering, 97, 220, (1987).
- [18] V. A. Zagryadsky et al., "Measurements and Comparison with Calculations of Neutron Leakage Spectra from U, Pb, Be Spheres with Central 14 MeV Neutron Source", Specialists CMEA Meeting on Neutronics and Thermohydraulic of OTR Project, Varna (Bulgarien), 5-7 May, 1987.
- [19] T. Elfruth et al., "The Neutron Multiplication of Lead at 14 MeV Neutron Incidence Energy", Atomkernenergie Kerntechnik, 49, 3, 115, (1987).
- [20] T. Hill, "ONETRAN: A Discrete Ordinates Finite Element Code for the Solution of the One-Dimensional Multigroup Transport Equation", LA-5990-MS, Los Alamos National Laboratory, (1975).
- [21] K. D. Lathrop, F. W. Brinkley, "TWOTRAN-II: An Exportable Version of the TWOTRAN Code for Two-Dimensional Transport", LA-4848-MS, Los Alamos Scientific Laboratory, (1973).
- [22] D. Emendörfer, K.-H. Höcker, "Theorie der Kernreaktoren: Bd.1. Der stationäre Reaktor", Bibliographisches Institut Mannheim, (1982).
- [23] E. Lewis, W. Miller, "Computational Methods of Neutron Transport", John Wiley & Sons, New York, (1983).
- [24] J. Ligou, P. Miazza, "Numerical Improvements of the Exact Kernel Method in Transport Theory", Nuclear Science and Engineering, 99, 109, (1988).
- [25] U. Fischer, E. Wiegner, "DOUBLE, A Programme for the Generation of Multigroup Transfer Matrices from Single- and Double-Differential Neutron Cross-Sections", Kernforschungszentrum Karlsruhe, nicht veröffentlicht.
- [26] V. I. Krylov, "Approximate Calculation of Integrals", The Macmillan Company, New York, (1962).
- [27] W. Werle, et al., "Messung und Berechnung der Neutronenleckage-Spektren von Eisenkugeln mit einer  $^{252}\text{Cf}$ -Quelle im Zentrum", KfK 2219, Kernforschungszentrum Karlsruhe, (November 1975).
- [28] V. Goulo, private Mitteilung.
- [29] E.T. Cheng, "Review of the Nuclear Data Status and Requirements for Fusion Reactors", Int. Conference on Nuclear Data for Science and Technology, Mito, Japan, May 30 - June 3, 1988.
- [30] B. G. Carlson, "Transport Theory: Discrete Ordinates Quadrature Over the Unit Sphere", LA-4554, Los Alamos Scientific Laboratory, (1970).

- [31] T. E. Booth et al., "MCNP-A General Monte Carlo Code for Neutron and Photon Transport, Version 3A, LA-7396M, Los Alamos National Laboratory, (1986).
- [32] W. W. Engle, "A User Manual for ANISN", Report K-1693, Oak Ridge National Laboratory, (1967).
- [33] W. A. Rodes, "DOT-IV, Two Dimensional Diskrete Ordinates Radiation Transport Code System, ORNL-CCC-320, Oak Ridge Nat. Lab., (1979).
- [34] U. Fischer, A. Schwenk-Ferrero, E. Wiegner, "Neutron Multiplikation in Lead: A Comparative Study Based on a New Calculational Procedure and New Nuclear Data", Fusion Engineering and Design 10, 139, (1989).
- [35] Y. Oyama, "Experimental Study of Angular Neutron Flux Spectra on a Slab Surface to Assess Nuclear Data and Calculational Methods for a Fusion Reactor Design", JAERI-M/88-101, Japan Atomic Energy Research Institute, (June 1988).
- [36] G. I. Bell, S. Glasstone, "Nuclear Reactor Theory" Van Nostrand Reinhold Company, (1970).
- [37] U. Fischer, A. Schwenk-Ferrero, E. Wiegner, "On the Calculation of Neutron Leakage Spectra in the IAEA Benchmark on the TUD Lead Sphere Experiment", wird veröffentlicht als IAEA-Bericht.
- [38] H. Greenspan, C. N. Kelber, D. Okrent, "Computing Methods in Reactor Physics", Gordon and Breach Science Publishers, New York, (1968).
- [39] K. D. Lathrop, B. G. Carlson, "Discrete Ordinates Angular Quadrature of the Neutron Transport Equation", LA-3186, Los Alamos Scientific Laboratory, (1965).
- [40] D. Smidt, "Reaktortechnik", Band 1 und 2, G. Braun, Karlsruhe, (1971).
- [41] A. Schwenk-Ferrero, "GANTRAS - A System of Codes for the Solution of the Multi-group Transport Equation with a Rigorous Treatment of Anisotropic Neutron Scattering. Plane and Spherical Geometry", KfK-4163, Kernforschungszentrum Karlsruhe, (1986).