

Nicht  
entleihbar

KBB - Ber. 15  
/KFK-15

KERNREAKTOR  
Bau- und Betriebs-Gesellschaft m. b. H.

- Karlsruhe -

19.10.1959

Institut für Neutronenphysik  
und Reaktortechnik

Bericht Nr. 15

= [ Interner Bericht 59/58 ]

Berechnung des thermischen Neutronenflusses  
in einer zylindersymmetrischen Wigner-Seitz-Zelle  
nach der  $P_N$ - und  $S_N$ -Methode

von

H. Küsters

KERNREAKTOR  
Bau- und Betriebs-Gesellschaft m. b. H.  
Zentralbücherei

**KERNREAKTOR**  
Bau- und Betriebs-Gesellschaft m. b. H.

- Karlsruhe -

---

19.10.1959

Institut für Neutronenphysik  
und Reaktortechnik

Bericht Nr. 15

---

Berechnung des thermischen Neutronenflusses  
in einer zylindersymmetrischen Wigner-Seitz-Zelle  
nach der  $P_N$ - und  $S_N$ -Methode

von

H. Küsters

**KERNREAKTOR**  
Bau- und Betriebs-Gesellschaft m. b. H.  
Zentralbücherei

Als Manuskript vervielfältigt

Für diesen Bericht behalten wir uns alle Rechte vor.

K E R N R E A K T O R  
Bau- und Betriebs-Gesellschaft m.b.H.

## Inhaltsverzeichnis

	Seite
Einleitung	2
I. Die Kugelfunktionsmethode ( $P_N$ )	4
1. Die Kugelfunktionsmethode für beliebige Geometrie	4
2. Spezialisierung auf Zylindersymmetrie	8
3. Der Quellterm	12
4. Die Randbedingungen	13
5. Ungerade und gerade Approximation	14
6. Konvergenzverhalten	15
7. Skalarer Fluß und Strom in der $P_N$ -Theorie	16
8. Das Mehrschichtenproblem	17
II. Die $S_N$ -Methode	
1. Die energieabhängige Transportgleichung für den Kugelfall	20
2. Definition der $S_N$ -Methode	21
3. Die Integration über $\mu$	22
4. Die Integration über $r$	24
5. Numerische Durchführung	27
6. Die $S_N$ -Methode für zylindrische Geometrie	28
7. Spezialisierung auf eine Energiegruppe von thermischen Neutronen	32
8. Die Randbedingungen bei der Berechnung einer Wigner-Seitz-Zelle	32
9. Beispiel einer $S_4$ -Rechnung für eine zylindergeometrische Zelle	34
10. Konvergenzfragen	35
III. Numerische Ergebnisse	
1. Die FR2-Zelle	37
2. Das Zweimedienproblem	38
3. Das Fünfmедienproblem	42
Anhang	44

### Zusammenfassung

Im ersten Teil dieser Arbeit wird die Lösung der monoenergetischen Transportgleichung durch Entwicklung der Neutronenverteilungsfunktion nach Kugelfunktionen ( $P_N$ -Methode) beschrieben. Der zweite Teil enthält die Darstellung des Näherungsverfahrens zur Lösung der Transportgleichung durch numerische Integration ( $S_N$ -Methode).

Der letzte Abschnitt gibt einen Vergleich der einzelnen Näherungslösungen beider Methoden. Die Abhängigkeit des thermischen Nutzungsfaktors  $f$  von der Näherung wird angegeben. Ferner wird dort untersucht, wie stark Aluminiumschichten (Can und Führungsröhre) von einigen Millimetern Dicke den Neutronenfluß und den  $f$ -Faktor beeinflussen.

### Einleitung

Die Anwendbarkeit der Diffusionstheorie, mit der eine Vielzahl von Problemen der Reaktorphysik behandelt werden, ist an die Bedingung geknüpft, daß in dem betrachteten Bereich keine Quellen und Ränder liegen, und daß außerdem das Medium kein starker Absorber ist. Diese Theorie enthält nur die Dichte der Neutronen  $n(\vec{r}, t)$  ( $\vec{r}$  = Ortsvektor), den Fluß  $\phi(\vec{r}, t)$  und den Strom  $\vec{j}(\vec{r}, t)$ ; dagegen werden nicht berücksichtigt die verschiedenen Flugrichtungen der Neutronen.

Im allgemeinen läßt sich eine Gesamtheit von Neutronen nicht allein durch eine Dichte im gewöhnlichen dreidimensionalen Raum beschreiben, sondern nur durch eine Dichte in einem sechsdimensionalen Phasenraum  $(x, y, z, v_x, v_y, v_z)$ , die wesentlich mehr Information liefert. Es ist nun üblich, statt des Geschwindigkeitsvektors die Energie und den Einheitsvektor  $\vec{\Omega}$  in Flugrichtung der Neutronen einzuführen; ist dann die Anzahl der Neutronen groß, so gehorcht die so definierte Dichte einer der Diffusionsgleichung analogen exakten Gleichung, der Boltzmannschen Transportgleichung. Sie ist eine Bilanzgleichung für die Anzahl der Neutronen, die in ein Volumenelement des Raumes hineinströmen und es schließlich wieder verlassen. Nur werden jetzt eben noch in Erweiterung der gewöhnlichen Diffusionstheorie Streuungen in ein Raumwinkelelement  $d\Omega$  und Streuung aus  $d\Omega$  heraus in die Bilanz mitaufgenommen. Da wir in dieser Arbeit nur monoenergetische (thermische) Neutronen betrachten wollen, wird die Transportgleichung von der Energie unabhängig. Ist  $\psi(\vec{r}, \vec{\Omega}) \cdot d\Omega$  der Fluß der Neutronen am Orte  $\vec{r}$ , deren Flugrichtung innerhalb des Raumwinkelelementes  $d\Omega$  liegen, so lautet die Transportgleichung im stationären Falle:

$$\vec{\Omega} \text{ grad } \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}) + \Sigma_a \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}) + \Sigma_S \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}) = q(\vec{r}, \vec{\Omega}) + \int_{\Omega'} \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}') \Sigma_S(\vec{\Omega}, \vec{\Omega}') d\Omega'$$

Wir erläutern die einzelnen Glieder dieser Gleichung:

$$\vec{\Omega} \text{ grad } \psi(\vec{r}, \vec{\Omega})$$

gibt den Ausfluß von Neutronen pro Volumen-, Zeit- und Raumwinkeleinheit an;

$$\Sigma_a \psi(\vec{r}, \vec{\Omega})$$

ist die Anzahl der pro Volumen-, Zeit- und Raumwinkeleinheit absorbierten Neutronen,  $\Sigma_a$  = makroskopischer Absorptionswirkungsquerschnitt;

$\Sigma_S \psi(\vec{r}, \vec{\Omega})$

beschreibt die Anzahl der Neutronen, die pro Volumen-, Zeit- und Raumwinkelelement gestreut werden;  $\Sigma_S$  = makroskopischer Streuquerschnitt;

$q(\vec{r}, \vec{\Omega})$

gibt die Anzahl der Neutronen an, die durch künstliche Quellen oder infolge Abbremsung in der Volumen- und Raumwinkeleinheit pro Zeiteinheit entstehen;

$d\Omega \int_{\Omega'} \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}') \Sigma_S(\vec{\Omega}, \vec{\Omega}') d\Omega'$

stellt die Gesamtzahl der von allen möglichen Richtungen  $\Omega'$  in das betrachtete Raumwinkelelement  $d\Omega$  pro Volumen- und Zeiteinheit hineingestreuten Neutronen dar.

$\Sigma_S(\Omega, \Omega')$  ist der Streuquerschnitt für Streuung von  $\Omega' \rightarrow \Omega$ .

Ist die Streuung isotrop im Laborsystem, so ist  $\Sigma_S(\vec{\Omega}, \vec{\Omega}') = \frac{\Sigma_S}{4\pi}$ . Dann ergibt sich die Boltzmannsche Gleichung:

$$(1) \quad \vec{\Omega} \text{ grad } \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}) + \frac{\psi(\vec{r}, \vec{\Omega})}{l} = \frac{c}{4\pi l} \int_{\Omega'} \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}') d\Omega' + q(\vec{r}, \vec{\Omega})$$

Hierbei ist  $l$  die mittlere freie Weglänge der Neutronen:

$$l = \frac{1}{\Sigma} = \frac{1}{\Sigma_a + \Sigma_S}; \quad c = \frac{\Sigma_S}{\Sigma}$$

Da die Diffusionstheorie die Vektorvariable  $\vec{\Omega}$  nicht enthält, kann sie die Verhältnisse dort nicht genau wiedergeben, wo a priori eine starke Winkelabhängigkeit besteht, wie z.B. in der Nähe von Quellen und Rändern. Außerdem läßt sich bei stark absorbierenden Materialien, in denen der Absorptionsquerschnitt vergleichbar ist mit dem Streuquerschnitt, schwerlich von einer "Diffusion" mit definierter Diffusionskonstante sprechen, da fast jedes zweite Neutron in diesem Medium absorbiert wird. Trotzdem kann man in den Fällen, in denen es nicht so sehr auf die absolute Genauigkeit der Ergebnisse ankommt, durch Einführung von Extrapolationslängen und Transportweglängen Diffusionstheorie betreiben.

Wir wollen nun die Transportgleichung für eine Reaktorzone nach den beiden bekanntesten Verfahren lösen. Dabei machen wir folgende Voraussetzungen:

- 1.) Die Reaktorzelle wird ersetzt durch einen Zylinder von gleicher Querschnittsfläche.
- 2.) Die Zelle ist unendlich lang (Translationsinvarianz in Richtung der Zylinderachse  $z$  und Invarianz bezüglich Spiegelung an der Ebene  $z = 0$ ).
- 3.) Die Neutronenverteilung ist in jeder Zelle dieselbe; das bedeutet, daß der Netto-Neutronenstrom am Zellrand null ist.
- 4.) Die Abbremsung der Neutronen im Moderator wird ersetzt durch eine einheitliche Erzeugung von thermischen Neutronen im Moderator; dagegen werden keine Quellen im Uran oder im Umkleidungsmaterial des Urans angenommen.
- 5.) Isotrope Streuung im Laborsystem.

Demnach haben wir Gl.(1) für den Fall zylindersymmetrischer Geometrie zu untersuchen. Dabei richten wir uns bei der Entwicklung der  $P_N$ -Methode nach einer Arbeit von B.Davison [1], der  $S_N$ -Methode nach einem Bericht von B.G.Carlson [2].

## I. Die Kugelfunktionsmethode ( $P_N$ )

### 1. Die Kugelfunktionsmethode für beliebige Geometrie

Die Grundidee dieses Verfahrens ist sehr einfach: Man entwickelt die Funktion  $\Psi(\vec{r}, \vec{\Omega})$  nach Kugelfunktionen bis zur Ordnung  $N$ ; die Kugelfunktionen, die eine Ordnung größer als  $N$  haben, werden vernachlässigt. Diese Entwicklung wird in die Transportgleichung eingesetzt und für das so entstehende Gleichungssystem eine Lösung gesucht.

Bei ebenen und kugelsymmetrischen Problemen wird die Richtungsabhängigkeit der Winkelverteilung  $\Psi(\vec{r}, \vec{\Omega})$  bereits durch einen Winkel vollkommen bestimmt, so daß die Entwicklung nach Kugelfunktionen nur zonale Kugelfunktionen (Legendre Polynome  $P_n(\cos \vartheta)$ ) enthält. Im allgemeinen hängt jedoch  $\Psi(\vec{r}, \vec{\Omega})$  sowohl vom Poldistanz- wie vom Azimutalwinkel ab. Das ist z.B. der Fall, wenn in ebenen oder kugelsymmetrischen Problemen die Randbedingungen nicht vollkommen symmetrisch sind, oder wenn man eine Anordnung mit zylindersymmetrischer Geometrie untersuchen will. Dann hat



man eine Entwicklung nach Kugelflächenfunktionen  $P_{nm}(\vec{\Omega}) \sim e^{im\varphi} P_n(\cos\vartheta)$  vorzunehmen, siehe W. Magnus und F. Oberhettinger [3, insbesondere § 3]. Jetzt treten aber nicht wie im Kugelfall nur eine Kugelfunktion  $P_n$  einer bestimmten Ordnung  $n$  auf, sondern  $2n+1$  Kugelfunktionen entsprechend der  $2n+1$  möglichen Werte von  $m$ .

Demnach haben wir folgende Entwicklung anzusetzen:

$$(2) \quad \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^{+n} a_{nm} \Psi_{nm}(\vec{r}) P_{nm}(\vec{\Omega})$$

Hierbei ist  $a_{nm}$  ein Normierungskoeffizient.

Der weiteren Behandlung legen wir folgendes Theorem zugrunde (siehe Whittaker und Watson [4, insbesondere S. 392]):

Jeder Ausdruck der Form  $f = r^n P_{nm}(\cos\vartheta) \cos m\varphi$  und  $f' = r^n P_{nm}(\cos\vartheta) \sin m\varphi$  ist ein Polynom der Ordnung  $n$  in  $x = r \sin\vartheta \cos\varphi$ ,  $y = r \sin\vartheta \sin\varphi$  und  $z = r \cos\vartheta$  und ist eine Partikulärlösung der Laplace-Gleichung:  $\nabla_r^2 f = 0$ ;  $\nabla_r^2 f' = 0$ . Umgekehrt kann jede im Ursprung analytische Lösung der Laplace-Gleichung geschrieben werden in der Form

$$V = \sum_{n=0}^{\infty} r^n A_n P_n(\cos\vartheta) + \sum_{m=1}^n \left\{ (A_n^m \cos m\varphi + B_n^m \sin m\varphi) P_{nm}(\cos\vartheta) \right\}$$

Mit unserer oben angeführten Notation läßt sich dieser Sachverhalt folgendermaßen ausdrücken: Für alle  $m$  und  $n$  gilt

$$(3) \quad \nabla_r^2 \left\{ r^n P_{nm}(\vec{\Omega}) \right\} = 0$$

Jede Lösung dieser Gleichung, die homogen vom Grade 0 in  $x, y, z$  und proportional zu  $r^n$  ist, ist eine Kugelfunktion der Ordnung  $n$ .

Wir definieren daher einen Vektor  $\vec{U}$  in Richtung von  $\vec{\Omega}$ , dessen Betrag  $U$  noch offen bleibt:

$$(4) \quad \vec{U} = U \vec{\Omega}$$

Ferner sei eine Funktion  $\chi$  gegeben durch

$$(5) \quad \chi_n = \frac{4\pi U^n}{2n+1} \sum_{m=-n}^{+n} a_{nm} \psi_{nm}(\vec{r}) \cdot P_{nm}(\vec{\Omega})$$

Dann ist wegen (3)

$$(6) \quad \nabla_U^2 \chi_n = 0$$

Die Reinenentwicklung (2) ist jetzt

$$(7) \quad \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \frac{1}{4\pi} \sum_n (2n+1) [\chi_n]_{U=1}$$

Der erste Term  $\vec{\Omega} \text{grad}_r \psi(\vec{r}, \vec{\Omega})$  in der Transportgleichung (1) macht beim Einsetzen der Entwicklung (7) einige Schwierigkeiten; diese lassen sich jedoch durch eine allgemeine Betrachtung beseitigen. Es gilt zunächst die Identität

$$(8) \quad \vec{\Omega} \text{grad}_r (2n+1) \chi_n \Big|_{U=1} = \left\{ (2n+1) \vec{U} - U^2 \text{div}_U \right\} \text{grad}_r \chi_n \Big|_{U=1} + \text{div}_U \text{grad}_r \chi_n \Big|_{U=1}$$

Die beiden Terme auf der rechten Seite von (8) erfüllen aber die Laplace-Gleichung.

Beim ersten Glied haben wir zunächst:

$$\nabla_U^2 \left\{ (2n+1) \vec{U} \text{grad}_r \chi_n \right\} = 2 \cdot (2n+1) \text{div}_U \text{grad}_r \chi_n$$

Wegen  $\nabla^2(a \cdot b) = a \nabla^2 b + b \nabla^2 a + 2 \nabla a \nabla b$  ist mit  $a = U^2$  und  $b = \text{div}_U \text{grad}_r \chi_n$

$$a \nabla^2 b = 0 \quad \text{wegen (6)}$$

$$b \nabla^2 a = 6 \text{div}_U \text{grad}_r \chi_n$$

$$\nabla a = 2 \vec{U}$$

Zur Berechnung von  $2 \nabla a \nabla b$  benötigen wir die Tatsache, daß wegen  $\nabla^2 b = \nabla_U^2 \text{div}_U \text{grad}_r \chi_n = \nabla_U \nabla_r \nabla_U^2 \chi_n = 0$   $b$  ein Polynom vom Grade  $(n-1)$  in  $U$  ist (Divergenzbildung vermindert die Ordnung um eine Einheit):

$$b \sim U^{n-1} P_{n-1,m}(\vec{\Omega}) = b_{n-1}(\vec{U})$$

Mit Hilfe der Eulerschen Identität

$$\vec{U} \cdot \nabla_U b_n(\vec{U}) = n \cdot b_n(\vec{U})$$

ergibt sich dann

$$\vec{U} \cdot \nabla_U b_{n-1}(\vec{U}) = (n-1) b_{n-1}(\vec{U})$$

$$\sqrt{2} \nabla_a \nabla b = 4(n-1) \operatorname{div}_U \operatorname{grad}_r \chi_n$$

Das erste Glied der rechten Seite von (8) liefert also bei Anwendung von  $\nabla_U^2$  jetzt:

$$\nabla_U^2 \left\{ (2n+1) \vec{U} - U^2 \operatorname{div}_U \right\} \operatorname{grad}_r \chi_n = \left\{ 2(2n+1) - 6 - 4(n-1) \right\} \operatorname{div}_U \operatorname{grad}_r \chi_n = 0$$

Das zweite Glied von (8) gibt dann wegen (6) ebenfalls

$$\nabla_U^2 \left\{ \operatorname{div}_U \operatorname{grad}_r \chi_n \right\} = 0$$

Das oben angeführte Theorem mit Hilfe von Gleichung (3) besagt nun, daß das erste Glied der rechten Seite von (8) proportional ist der Kugelfunktion der Ordnung  $n+1$ ; der zweite Term enthält nur Kugelfunktionen der Ordnung  $(n-1)$ .

Ignorieren wir in der Transportgleichung (1) vorläufig den Quellterm  $Q(\vec{r}, \vec{\Omega})$ , so muß man beim Einsetzen der Entwicklung (7) jetzt die Terme mit Kugelfunktionen gleicher Ordnung getrennt null setzen. Dann folgt:

$$(9) \quad \operatorname{div}_U \operatorname{grad}_r \chi_{n+1} + \left\{ (2n-1) \vec{U} - U^2 \operatorname{div}_U \right\} \operatorname{grad}_r \chi_{n-1} + (2n+1-c) \delta_{on} \frac{\chi_n}{1} = 0$$

Hierbei folgt das Kronecker-Symbol  $\delta_{on}$  aus der Integration von

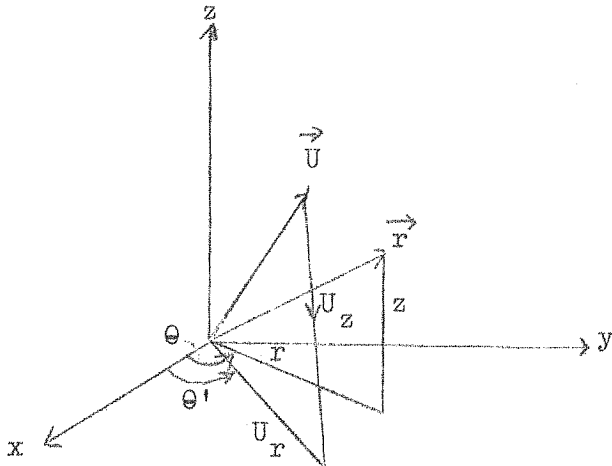
$$\frac{c}{4\pi l} \int P_{nm}(\vec{\Omega}') d\vec{\Omega}' = \frac{c}{4\pi l} \int P_{om} P_{nm} d\vec{\Omega}' = \frac{c}{l} \delta_{on}$$

Entsprechend der Näherung der  $P_N$ -Methode haben wir nun alle Kugelfunktionen bis zur Ordnung  $n \leq N$  zu berücksichtigen; die Forderung, daß die Entwicklung mit  $n = N$  abbrechen soll, wird garantiert durch

$$(10) \quad \chi_{N+1} = 0$$

2. Spezialisierung auf Zylindersymmetrie

Der Ortsvektor  $\vec{r}$  wird in Zylinderkoordinaten charakterisiert durch  $\vec{r} = \{r, z, \theta\}$ , die Richtung  $\vec{\Omega}$  bzw.  $\vec{U}$  durch  $\vec{U} = \{U_r, U_z, \theta'\}$ . Die z-Achse ist dabei durch die Zylinderachse bestimmt; die Größen



$r, U_r$  und die Azimutwinkel  $\theta, \theta'$  werden in einer zur z-Achse senkrechten Ebene gemessen (siehe Skizze).

$$\begin{aligned} x &= r \cos \theta \\ y &= r \sin \theta \\ z &= z \\ U_x &= U_r \cos \theta' \\ U_y &= U_r \sin \theta' \\ U_z &= U_z \end{aligned}$$

Rotationssymmetrie um die z-Achse bedeutet, daß  $\Psi(\vec{r}, \vec{\Omega})$  nur von der Differenz der Winkel  $(\theta' - \theta)$  abhängen kann; ferner darf das Vorzeichen dieser Differenz keine Rolle spielen, wenn Invarianz bezüglich Spiegelung an der Ebene  $z = 0$  bestehen soll. Dasselbe gilt dann natürlich auch für die durch (5) eingeführten Größen:

$$\chi_n(\vec{r}, \vec{U}) = \chi_n(r, z; U_r, U_z; |\theta' - \theta|)$$

$\chi_n$  ist nun nach (5) ein homogenes Polynom der Ordnung n in  $U_r \cos \theta', U_r \sin \theta', U_z$ . Wenn wir also  $\chi_n$  in eine Fourier-Reihe nach  $\theta'$  entwickeln, so ist diese Reihe endlich und wird abgebrochen mit den Gliedern  $\cos n \theta'$  und  $\sin n \theta'$ . Dasselbe gilt dann natürlich auch für eine Entwicklung nach der Winkeldifferenz  $(\theta' - \theta)$ . Infolge der Unabhängigkeit vom Vorzeichen dieser Differenz kann aber nur eine gerade Funktion von  $(\theta' - \theta)$  auftreten:

$$(11) \quad \chi_n = \sum_{m=0}^n \cos m(\theta' - \theta) \cdot A_{nm}(r, z; U_r, U_z)$$

Die Größe  $A_{nm}$  ist nun ein homogenes Polynom vom Grad n in  $U_r$  und  $U_z$ . Da  $\nabla_U^2 \chi_n = 0$ , sollte jeder Term der Fourier Entwicklung derselben Gleichung gehorchen. Das bedeutet, da  $(r, z)$  von  $(U_r, U_z)$  unabhängige Variable sind, Separierbarkeit für  $A_{nm}$ , die dann über das Theorem bis auf einen von

$(U_r, U_z)$  unabhängigen Faktor bestimmt sind:

$$A_{nm} = B_{nm}(U_r, U_z) \cdot \Psi_{nm}(r, z)$$

Also haben wir dann

$$\chi_n = \sum_{m=0}^n \cos m(\theta' - \theta) \Psi_{nm}(r, z) \cdot B_{nm}(U_r, U_z)$$

Für das  $B_{nm}$  findet man bis auf einen Normierungsfaktor  $F$  [5; insbesondere S. 170]

$$(12) \quad B_{nm} = U_z^{n-m} \cdot U_r^m \sum_{l=0}^{\infty} F_{nm}^l \left( -\frac{1}{4} \frac{U_r}{U_z} \right)^{2l}$$

Die Voraussetzung (2) der Einleitung, daß der betrachtete Zylinder unendlich lang ist, hat zunächst Translationsinvarianz in z-Richtung zur Folge; das bedeutet, daß die Momente  $\chi_{nm}$  von z nicht mehr abhängen:

$\Psi_{nm} = \Psi_{nm}(r)$ . Hinsichtlich  $U_z$  haben wir weiter Spiegelungsinvarianz bezüglich der Ebene  $z = 0$ . Ersetzt man nun in (12)  $U_z$  durch  $-U_z$ , so bleibt  $B_{nm}$  nur dann unverändert, wenn  $(n-m)$  gerade ist. Damit ergibt sich endgültig:

$$(13) \quad \chi_n = \sum_{\substack{m=0 \\ (n-m) \text{ gerade}}}^n \cos m(\theta' - \theta) \Psi_{nm}(r) \cdot B_{nm}(U_r, U_z)$$

Geht man mit den durch (13) bestimmten Funktionen  $\chi_n$  jetzt in Gl. (9) ein, so erhält man unter Berücksichtigung von (10) ein Gleichungssystem für  $\Psi_{nm}(r)$ . Eine partikuläre Lösung dieses Gleichungssystems ist

$$(14) \quad \Psi_{nm}(r) = b_{nm} K_m \left( -\nu \frac{r}{l} \right)$$

mit den noch zu bestimmenden Konstanten  $b_{nm}$  und  $\nu$ .  $K_m(y)$  ist die modifizierte Besselfunktion zweiter Art. Die Gleichung (10) wird befriedigt durch

$$(15) \quad b_{N+1, m} = 0 \quad \text{für alle } m.$$

Die weitere Untersuchung wird nun von dem Gedanken geleitet, daß es dem Superpositionsprinzip zufolge möglich sein muß, die Lösung in irgendeiner Form darzustellen durch Funktionen, die schon bei der Lösung des ebenen oder kugelsymmetrischen Problems auftreten und bereits weitgehend tabelliert sind. Wir wollen die mathematisch sehr spitzfindige Rechnung nicht im einzelnen verfolgen, da sie zum physikalischen Verständnis des Verfahrens nichts mehr beiträgt; sie ist eingehend in [1] dargestellt. Das Ergebnis ist:

$$(16) \quad \psi_{nm}(r) = \sum_{k=0}^n I_{nm}^k \sum_{j=\pm 1}^{\pm(N+1-k)/2} A_{jk} \cdot G_{nk}(v_{jk}) K_m(-v_{jk} \frac{r}{l})$$

k gerade

Die Größen  $A_{jk}$  sind Integrationskonstanten, die durch die Randbedingungen des Problems zu bestimmen sind,  $I_{nm}^k$  und  $G_{nk}(v_{jk})$  sind durch Rekursionsformeln definiert. Die Möglichkeit der Bildung solcher Rekursionsformeln ist gegeben durch die Tatsache, daß die Größen  $B_{nm}(U_r, U_z)$  in (12) wegen  $\nabla_U^2 \chi_n = 0$  durch Kugelfunktionen darstellbar sein müssen. Die Rekursionsformeln für die Kugelfunktionen ergeben dann entsprechende Rekursionsformeln für die  $B_{nm}$  und damit schließlich auch für die  $b_{nm}$  in (14).

Die in [1] tabellierten Größen  $I_{nm}^k$  ergeben sich aus

$$(17) \quad \begin{cases} 2(n-k+1)I_{nm}^k = (1+\delta_{0,m-1})(n-m+2)I_{n+1,m-1}^k + (n+m+2)I_{n+1,m+1}^k, \\ 2(1-\delta_{nk})(n+k)I_{nm}^k = (1+\delta_{0,m-1})(n+m-1)I_{n-1,m-1}^k + (n-m-1)I_{n-1,m+1}^k. \end{cases}$$

Die Funktionen  $G_{nk}(v)$  sind bestimmt durch

$$(18) \quad \begin{cases} (n-k+1)G_{n+1,k}(v) + (2n+1-c\delta_{on}) \frac{G_{nk}(v)}{v} + (n+k) \cdot G_{n-1,k}(v) = 0, \\ G_{k-1,k}(v) = 0, \\ G_{kk}(v) = 1, \end{cases} \left. \vphantom{\begin{cases} (n-k+1)G_{n+1,k}(v) + (2n+1-c\delta_{on}) \frac{G_{nk}(v)}{v} + (n+k) \cdot G_{n-1,k}(v) = 0, \\ G_{k-1,k}(v) = 0, \\ G_{kk}(v) = 1, \end{cases}} \right\} G_{nk}(v) = 0 \text{ für } n \leq k-1$$

Anstelle der Bedingung (10) bzw. (15) tritt jetzt

$$(19) \quad G_{N+1,k}(v) = 0$$

Diese Gleichung liefert die in (14) zulässigen Werte  $v_{jk}$  von  $v$ . Wenn  $N$  ungerade ist (siehe Diskussion von gerader und ungerader Approximation in Abschnitt 5) und  $k$  gerade, so kann man sich leicht davon überzeugen, daß  $G_{N+1,k}(v)$  ein Polynom von Grade  $\frac{1}{2}(N+1-k)$  in  $\frac{1}{v^2}$  ist. Die Wurzeln der Gleichung (19) kommen daher in Paaren vor; ist  $v = v_{jk}$  eine Nullstelle, so ist es auch  $-v_{jk}$ . Es läßt sich zeigen, daß sämtliche Wurzeln  $v_{jk}$  voneinander verschieden sind, siehe B. Davison [5; insbesondere S.122]; dann können wir die Nullstellen so numerieren, daß

$$v_{jk}^2 < v_{j+1,k}^2$$

Außerdem sei  $-v_{jk} = v_{-jk}$ .

Für  $k = 0$  stimmen die Größen  $G_{no}(v)$  und  $v_{jo}$  mit den entsprechenden Größen für ebene Symmetrie überein und können z.B. den Tabellen von C. Mark [6] entnommen werden. Ist  $k > 0$ , so wird  $G_{nk}^{(v)}$  materialunabhängig; dies folgt direkt aus (18), da die Konstante  $c$ , welche die Materialeigenschaften enthält, mit dem Kronecker Symbol  $\delta_{on}$  multipliziert ist ( $k \geq n+1$ ). Damit lassen sich in diesem Fall die Größen  $v_{jk}$  und  $G_{nk}$  für beliebige Ordnung  $N$  tabellieren [1]. Bei der Durchrechnung eines Problems hat man folglich nur noch die Wurzeln  $v_{jo}$  und die zugehörigen Funktionen  $G_{no}(v_{jo})$  zu einem bestimmten  $c$  neu auszurechnen, falls diese etwa nicht in [6] zu finden sind.

Die Beschränkung auf gerades  $k$  in (16) ergibt sich aus der Bedingung, daß die Größen  $B_{nm}$  in (12) invariant sein sollen bezüglich Spiegelung an der Ebene  $z = 0$ .

Um die Größen  $\Psi_{nm}(r)$  ausrechnen zu können, haben wir das negative Argument der Besselfunktionen zu beseitigen. Mit

$$K_m(-z) = (-1)^m K_m(z) - i\pi I_m(z)$$

( $I_m(z)$  = modifizierte Besselfunktion 1. Art) und

$$G_{nk}(-v_{jk}) = (-1)^n G_{nk}(v_{jk}) \text{ folgt:}$$

$$(20) \quad \Psi_{nm}(r) = \sum_{k=0}^n I_{nm}^k \sum_{j=1}^{\frac{(N+1-k)}{2}} G_{nk}(v_{jk}) \left\{ B_{jk} I_m\left(v_{jk} \frac{r}{l}\right) + (-1)^m c_{jk} K_m\left(v_{jk} \frac{r}{l}\right) \right\}$$

k gerade

Hierbei ist

$$B_{jk} = -i\pi A_{jk} ; \quad C_{jk} = A_{jk} + A_{-jk}$$

Drückt man die Größen  $B_{nm}(U_r, U_z)$  in (12) durch Kugelfunktionen aus und setzt (13) in Gleichung (7) ein, so lautet die Entwicklung von  $\Psi(\vec{r}, \vec{\Omega})$  jetzt

$$(21) \quad \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \frac{1}{4\pi} \sum_n \sum_{m=0}^n (2n+1) \cos m(\Theta' - \Theta) \cdot \Psi_{nm}(r) \frac{P_{nm}(\Omega_z)}{P_{nm}(0)}$$

n-m gerade

### 3. Der Quellterm

In der bisherigen Diskussion haben wir den Quellterm  $Q(\vec{r}, \vec{\Omega})$  der Gleichung (1) ignoriert. Entsprechend der Entwicklung von  $\Psi(\vec{r}, \vec{\Omega})$  hat man jetzt natürlich auch  $Q(\vec{r}, \vec{\Omega})$  nach Kugelfunktionen zu entwickeln:

$$(22) \quad Q(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \frac{1}{4\pi} \sum_n \sum_m q_{nm}(\vec{r}) P_{nm}(\vec{\Omega})$$

Nach Voraussetzung (4) der Einleitung wird nun in unserem speziellen Problem die Abbremsung der Neutronen im Moderator ersetzt durch eine einheitliche Erzeugung von thermischen Neutronen im Moderator. Damit ist also  $Q(\vec{r}, \vec{\Omega})$  im Moderator räumlich konstant, isotrop und von der Größe  $\frac{Q_T}{4\pi}$ , wobei  $Q_T$  die Gesamtzahl der pro Sekunde und Volumeneinheit thermisch gewordenen Neutronen ist. Die Transportgleichung (1) lautet jetzt im Moderatormedium

$$(23) \quad \vec{\Omega} \text{ grad } \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}) + \frac{\Psi(\vec{r}, \vec{\Omega})}{l} - \frac{c}{4\pi l} \int \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}') d\Omega' = \frac{Q_T}{4\pi}$$

Die Entwicklung (22) enthält nur das erste Glied mit der Kugelfunktion  $P_{00}(\Omega_z) = 1$ . Zur allgemeinen Lösung (21) der homogenen Transportgleichung tritt jetzt noch eine spezielle Lösung der inhomogenen Gleichung (23) hinzu. Letztere ist gegeben durch  $\Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \text{const}$ ; dann gibt (23)

$$\frac{\Psi}{l} - \frac{c}{l} \Psi = \frac{Q_T}{4\pi} ; \quad \Psi = \frac{1}{1-c} \frac{Q_T}{4\pi} = \frac{1}{4\pi} \cdot \frac{Q_T}{\Sigma_a}$$

Folglich ist dann die Lösung der Transportgleichung im Moderatormedium



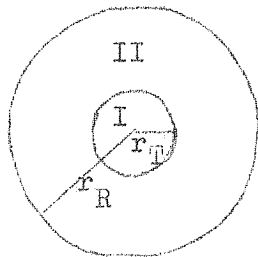
gegeben durch

$$(24) \quad \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \frac{1}{4\pi} \left\{ \sum_n \sum_{\substack{m \\ (n-m) \text{ gerade}}} (2n+1) \cos m(\theta' - \theta) \Psi_{nm}(r) \frac{P_{nm}(\frac{\Omega_z}{z})}{P_{nm}(0)} + \frac{Q_{00}}{\Sigma_a} \right\}$$

Dabei haben wir der besseren Übersicht halber in der Entwicklung  $Q_T = Q_{00}$  gesetzt.

#### 4. Die Randbedingungen

Betrachten wir einmal eine Reaktorzelle, die von zwei verschiedenen Medien gebildet wird.



Medium I sei z.B. der Brennstoff (Uran),  
Medium II der Moderator.  
Dann muß folgendes gelten:

a.)  $\Psi(\vec{r}, \vec{\Omega})$  muß für  $r \neq 0$  regulär bleiben.

Da nach Gleichung (20)  $\Psi(\vec{r}, \vec{\Omega})$  über die modifizierten Besselfunktionen  $I_m$  und  $K_m$  von  $r$  abhängt, müssen im Medium I sämtliche Koeffizienten  $C_{jk}$  null gesetzt werden, da  $K_m(z)$  für  $z = 0$  singular wird ( $K_m(0) = \infty$ ).

b.) An der Trennfläche  $r_T$  von I und II soll  $\Psi(\vec{r}, \vec{\Omega})$  einen stetigen Übergang besitzen.

Dies entspricht der Annahme, daß Neutronen in einem Winkelbereich  $d\Omega$ , die vom Medium I die Trennfläche passieren, in Medium II im selben Winkelbereich ankommen. In der Kugelfunktionsentwicklung ergibt das für die Momente die Bedingung

$$(25) \quad \Psi_{nm}^I(r_T) = \Psi_{nm}^{II}(r_T) \quad .$$

c.) Nach Voraussetzung (3) soll kein Nettostrom über die Zellen hinweg stattfinden. Diese Forderung kann man sofort dadurch erfüllen, daß gleichviel Neutronen am Zellrand  $r_R$  sowohl in Richtung  $\vec{\Omega}$  wie  $-\vec{\Omega}$  fliegen. Den Vektor  $-\vec{\Omega}$  erhält man durch Spiegelung an der Ebene  $z = 0$  und zusätzliche Drehung um  $180^\circ$ . Gegenüber der ersten Operation ist  $\Psi(r_R, \vec{\Omega})$  nach Voraussetzung (2) invariant, die zweite Operation vergrößert den

Azimutwinkel  $(\theta' - \theta) = \lambda$  um  $\pi$ . Nach (24) geht diese Winkeldifferenz in der Form  $\cos m \lambda$  ein, am Zellrand muß demnach sein:  $\cos m \lambda = \cos m(\lambda + \pi)$ . Das läßt sich nun erfüllen, wenn  $m$  gerade ist. Für ungerades  $m$  müssen demnach die Momente  $\Psi_{nm}(r_R)$  verschwinden:

$$(26) \quad \Psi_{nm}(r_R) = 0 \quad \text{für} \quad m = 2s+1$$

z.B. also  $\Psi_{11} = \Psi_{31} = \Psi_{33} = 0$ .

Mit diesen Bedingungen lassen sich die Koeffizienten  $A_{jk}$  bzw.  $B_{jk}$  und  $C_{jk}$  eindeutig bestimmen, wenn, wie im nächsten Abschnitt gezeigt wird, der Approximationsgrad  $N$  ungerade ist.

### 5. Ungerade und gerade Approximation

Die Entscheidung darüber, ob man die Kugelfunktionsentwicklung von  $\Psi(\vec{r}, \vec{\Omega})$  bei geradem oder ungeradem  $N$  abbrechen soll, kann man leicht durch eine Untersuchung der Randbedingungen an der Grenzfläche zweier Medien treffen.

Die Anzahl der Bedingungen an der Grenzfläche, die die Stetigkeit von  $\Psi_{nm}(r_T)$  garantieren, muß gleich der Anzahl der freien Konstanten  $A_{jk}$  in (16) sein. Die Zahl der  $A_{jk}$  ist aber nur gerade gleich der Zahl der Wurzeln  $v_{jk}$  der Gleichung (19). Wir beschränken uns im folgenden auf den Fall  $k = 0$ , der einer ebenen Symmetrie entspricht; dann fällt bei den Momenten der zweite Index  $m$  weg. Im Zylinderfall tritt nun  $m$  bei gegebenem  $n$  in der gleichen Häufigkeit wie  $k$  auf ( $n-m$  soll gerade sein!), so daß also ebensoviele Momente  $\Psi_{nm}$  und damit  $A_{jk}$  mehr als im ebenen Falle auftreten, wie es mehr Nullstellen  $v_{jk}$  gibt. Damit erübrigt sich die Überlegung für  $k > 0$ .

Für  $k = 0$  hat nun  $G_{N+1}(v)$  genau  $N+1$  endliche Wurzeln, wenn  $N$  ungerade ist; denn es ist dann

$$G_{N+1}(v) = A + \frac{B}{v^2} + \frac{C}{v^4} + \dots + \frac{Z}{v^{N+1}} = 0$$

Die Kontinuitätsbedingung ist jetzt

$$\Psi_n(r_T) \text{ stetig für } n = 0, 1, \dots, N.$$

Diese (N+1) Bedingungen für  $A_{j0}$  können demnach befriedigt werden. Ist N gerade, so folgt

$$G_{N+1}(\nu) = \frac{A'}{\nu} + \frac{B'}{\sqrt{3}} + \dots + \frac{Z'}{\nu^{N+1}} = 0.$$

Der Wert  $\nu = \infty$  erfüllt diese Bedingungsgleichung. Jedoch ist diese Lösung physikalisch unmöglich, da wegen  $\Psi_n \sim e^{\nu r}$  die Momente  $\Psi_n$  singularär würden. Es bleiben also nur N Wurzeln übrig, d.h. eine Randbedingung kann nicht befriedigt werden. Man wäre gezwungen, durch eine Zusatzbedingung diese durch gerade Approximation entstandene Lücke zu reparieren. Daraus ist zu schließen, daß eine ungerade Approximation dem Problem besser angepaßt ist als eine gerade Approximation.

## 6. Konvergenzverhalten

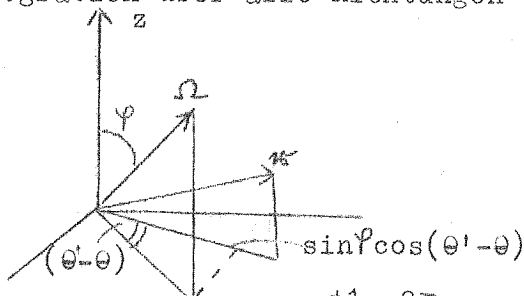
Eine Lösung der Transportgleichung durch Entwicklung der Neutronenverteilung  $\Psi(\vec{r}, \vec{\Omega})$  nach Kugelfunktionen kann im Hinblick auf praktische Verwendbarkeit natürlich nur dann sinnvoll sein, wenn man sich mit wenigen Gliedern der Reihe begnügen kann. Das wird am besten gewährleistet sein, wenn die Winkelverteilung der Neutronen nicht zu stark anisotrop ist; zumindest sollte die Anisotropie sich auf relativ kleine Bereiche des betrachteten Gebietes beschränken. Es ist daher auch nicht zu erwarten, daß dieses Verfahren bei Anwendung auf sehr dünne Schichten, wo stets eine ausgeprägte Anisotropie vorliegt, vernünftige Ergebnisse bringen wird. Das gilt vor allen Dingen auch an freien Oberflächen oder an Grenzflächen zweier Medien von stark verschiedenem Absorptionsgrad.

Dieser nicht sehr ermutigende Sachverhalt hat sich auch bei der Berechnung der Winkelverteilung  $\Psi(\vec{r}, \vec{\Omega})$  bestätigt. Jedoch zeigen dieselben Beispiele, daß die über die Winkel integrierte Verteilung wesentlich schneller konvergiert, siehe z.B. A. Weinberg und E. Wigner [7; insbesondere S. 261 ff]. Das ist theoretisch plausibel, da man die Integration als eine Art Mittelung auffassen kann.

Daher werden wir im folgenden auch stets nur die räumliche Verteilung betrachten; wegen Voraussetzung (2) hängt diese nur von der Koordinate  $r$  ab, so daß wir direkt den skalaren Neutronenfluß erhalten, der für die Zwecke der Reaktorphysik allein interessant ist.

### 7. Skalärer Fluß und Strom in der $P_N$ -Theorie

Der totale skalare Fluß ergibt sich aus der Verteilung  $\Psi(\vec{r}, \vec{\Omega})$  durch Integration über alle Richtungen von  $\vec{r}$  und  $\vec{\Omega}$ :



$$\phi(r) = \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}) \sin \varphi \, d\varphi \, d(\theta' - \theta) .$$

Aus (24) folgt dann mit  $\Omega_z = \cos \varphi = \mu$

$$\phi(r) = \frac{1}{4\pi} \sum_{\substack{n \\ \text{gerade}}} \sum_{\substack{m \\ n-m}} \frac{(2n+1)}{P_{nm}(0)} \int_{-1}^{+1} \int_0^{2\pi} \left\{ \cos m(\theta' - \theta) P_{nm}(\mu) \cdot \Psi_{nm}(r) + \frac{Q_{00}}{\Sigma_a} \right\} d(\theta' - \theta) d\mu$$

Die Integration über  $(\theta' - \theta)$  liefert nur einen Beitrag ( $2\pi$ ) für  $m = 0$ ; es bleibt dann

$$\int_{-1}^{+1} P_{n0}(\mu) d\mu = \frac{2}{2n+1} \delta_{0n} .$$

Damit ergibt sich nur ein Faktor 2 für  $n = 0$ . Bei der Integration über den konstanten Quellausdruck multipliziert sich dieser mit  $4\pi$ . Also ist

$$(27) \quad \phi(r) = \Psi_{00}(r) + \frac{Q_{00}}{\Sigma_a}$$

Im quellfreien Medium wird also der Fluß allein durch das Moment  $\Psi_{00}(r)$  dargestellt.

Den Neutronenstrom  $j(r)$  erhält man, wenn man die  $r$ -Komponenten von  $\Psi(\vec{r}, \vec{\Omega})$  über alle Richtungen aufaddiert:

$$j(r) = \int_{-1}^{+1} \int_0^{2\pi} \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}) \sin \varphi \cos(\theta' - \theta) \, d(\theta' - \theta) d\mu$$

Hier erhalten wir nur dann ein von null verschiedenes Ergebnis, wenn  $m = 1$  und  $n = 1$  ist ( $-\sin \Psi = P_{11}(\mu)$ ):

$$(28) \quad j(r) = \Psi_{11}(r) .$$

### 8. Das Mehrschichtenproblem

Besteht die Wigner-Zelle aus mehreren Medien, so ist die Berechnung der Flußgrößen  $\Psi_{nm}(r)$  durch Formulierung des Problems in Matrixschreibweise relativ einfach durchzuführen.

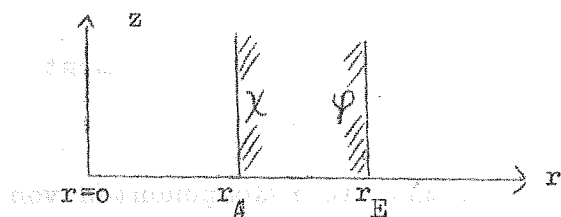
Ist  $N$  der Approximationsgrad, den wir ungerade wählen, so fassen wir sämtliche Größen  $\Psi_{nm}(r)$  als die  $\frac{1}{2}(N+1)(N+3)$  Komponenten eines Spaltenvektors  $\underline{\Psi}$  auf; ebenso die Koeffizienten  $B_{jk}$  und  $C_{jk}$  aus (20):

$$\underline{\Psi} = \begin{pmatrix} \Psi_{00} \\ \Psi_{11} \\ \vdots \\ \Psi_{NN} \end{pmatrix} \quad \underline{B} = \begin{pmatrix} B_{jk} \\ \\ \\ C_{jk} \end{pmatrix}$$

Dann gilt im quellfreien Medium stets

$$\underline{\Psi} = \underline{\alpha} \underline{B}$$

Die Transformationsmatrix  $\underline{\alpha}$ , die außer den Zahlfaktoren  $I_{nm}^k$  die Funktionen  $I_m(v_{jk} \frac{r}{l})$ ,  $K_m(v_{jk} \frac{r}{l})$  und  $G_{nk}(v_{jk})$  enthält, läßt sich direkt aus (20) ablesen. Sie ist für  $P_1$ -,  $P_3$ - und  $P_5$ -Rechnung im Anhang zusammengestellt. Greifen wir eine der Schichten mit den Begrenzungsradien  $r_A$  und  $r_E$  heraus,  $r_A < r_E$ . Verstehen wir unter  $\chi$  den Winkelflußvektor



am Anfang der Schicht und unter  $\psi$  den Vektor  $\underline{\Psi}$  am Schichtende, so ist

$$\chi = \alpha_A \underline{B}, \quad \psi = \alpha_E \underline{B}$$

$\alpha_A$  enthält als Ortskoordinate  $r_A$ ,  $\alpha_E$  den Radius  $r_E$ . Damit ergibt sich sofort

$$\psi = \alpha_E \alpha_A^{-1} \chi = \underline{L} \chi, \quad \underline{L} = \alpha_E \alpha_A^{-1}$$

Man kann also stets den Winkel-"Fluß"  $\varphi$  am Schichtende ausdrücken durch den Fluß am Schichtanfang.

Im Quellmedium tritt zu  $\Psi_{00}$  nun noch der Quellterm  $S = \frac{d}{\sum a}$  hinzu. Bezeichnen wir mit  $\delta$  den Spaltenvektor

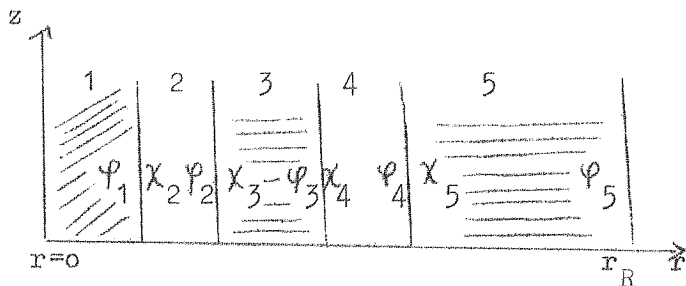
$$\delta = \begin{pmatrix} S \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \text{ so ist offenbar}$$

$$\chi = \alpha_A \mathcal{L} + \delta, \quad \varphi = \alpha_E \mathcal{L} + \delta$$

und damit

$$\varphi = \mathcal{L} \chi - (\mathcal{L} - \mathcal{L}') \delta$$

Nun betrachten wir eine Zelle aus fünf Medien. Es seien Medium 1, 2 und 4 quellfrei, 3 und 5 enthalte das Moderatormedium (Quellgebiet).



Die Randbedingung (25) schreibt sich jetzt:

$$\varphi_1 = \chi_2, \varphi_2 = \chi_3, \varphi_3 = \chi_4, \varphi_4 = \chi_5$$

Dann ist

$$\varphi_5 = \mathcal{L}_5 \chi_5 - (\mathcal{L}_5 - \mathcal{L}') \delta$$

und weiter:

$$\begin{aligned} \varphi_5 &= \mathcal{L}_5 \mathcal{L}_4 \chi_4 - (\mathcal{L}_5 - \mathcal{L}') \delta = \mathcal{L}_5 \mathcal{L}_4 \varphi_3 - (\mathcal{L}_5 - \mathcal{L}') \delta \\ &= \mathcal{L}_5 \mathcal{L}_4 \mathcal{L}_3 \chi_3 - \mathcal{L}_5 \mathcal{L}_4 (\mathcal{L}_3 - \mathcal{L}') \delta - (\mathcal{L}_5 - \mathcal{L}') \delta \\ &= \mathcal{L}_5 \mathcal{L}_4 \mathcal{L}_3 \mathcal{L}_2 \chi_2 - \mathcal{L}_5 \mathcal{L}_4 (\mathcal{L}_3 - \mathcal{L}') \delta - (\mathcal{L}_5 - \mathcal{L}') \delta \end{aligned}$$

$$\varphi_5 = \mathcal{L}_5 \mathcal{L}_4 \mathcal{L}_3 \mathcal{L}_2 \varphi_1 - \mathcal{L}_5 \mathcal{L}_4 (\mathcal{L}_3 - \mathcal{L}') \delta - (\mathcal{L}_5 - \mathcal{L}') \delta$$

(29)

$$\varphi_5 = U \varphi_1 + \mathcal{W} \delta$$

$$U = \mathcal{L}_5 \mathcal{L}_4 \mathcal{L}_3 \mathcal{L}_2, \quad \mathcal{W} = -\mathcal{L}_5 \mathcal{L}_4 (\mathcal{L}_3 - \mathcal{L}') - (\mathcal{L}_5 - \mathcal{L}')$$

Nun ist  $\varphi_5 = \alpha_{E5} \mathcal{L}_5 + \delta$   
 $\varphi_1 = \alpha_{E1} \mathcal{L}_1$

Dann folgt aus (29):

$$(30) \quad \alpha_{E5} \mathcal{L}_5 = U \alpha_{E1} \mathcal{L}_1 + (\psi - \ell) \delta$$

Durch dieses Gleichungssystem sind unter Berücksichtigung der Randbedingungen (4a) und (4c) die Koeffizientenvektoren  $\mathcal{L}_1$  und  $\mathcal{L}_5$  eindeutig bestimmt. Die restlichen Koeffizienten ergeben sich nun zu ( $\varphi_1 = \alpha_{E1} \mathcal{L}_1$ ):

$$\alpha_{E2} \mathcal{L}_2 = \varphi_2 = \mathcal{L}_2 \chi_2 = \mathcal{L}_2 \varphi_1 ; \quad \mathcal{L}_2 = \alpha_{A2}^{-1} \varphi_1 ;$$

$$\alpha_{E3} \mathcal{L}_3 + \delta = \varphi_3 = \mathcal{L}_3 \mathcal{L}_2 \varphi_1 - (\mathcal{L}_3 - \ell) \delta ; \quad \mathcal{L}_3 = \alpha_{A3}^{-1} \mathcal{L}_2 \varphi_1 - \alpha_{A3}^{-1} \delta ;$$

$$\alpha_{E4} \mathcal{L}_4 = \varphi_4 = \mathcal{L}_4 \mathcal{L}_3 \mathcal{L}_2 \varphi_1 - \mathcal{L}_4 (\mathcal{L}_3 - \ell) \delta , \quad \text{also:}$$

$$\mathcal{L}_4 = \alpha_{A4}^{-1} \mathcal{L}_3 \mathcal{L}_2 \varphi_1 - \alpha_{A4}^{-1} (\mathcal{L}_3 - \ell) \delta$$

Damit läßt sich nun der skalare Fluß  $\varphi(r) = \varphi_{00}(r)$  (+S) in jeder Schicht angeben. Es ist klar, daß man die Matrizenmultiplikation und Inversionen numerisch durchführen muß.

## II. Die $S_N$ -Methode

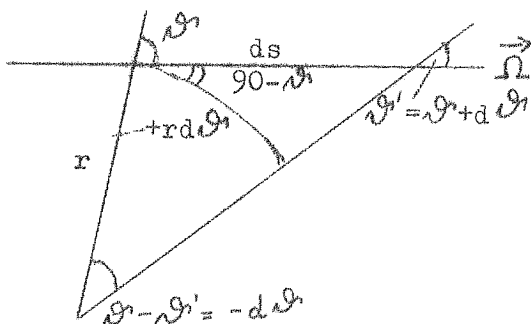
Dieses Verfahren zeichnet sich dadurch aus, daß es ohne wesentliche Abänderungen die Behandlung ebener, kugel- und zylindersymmetrischer Probleme erlaubt. Außerdem ist es prinzipiell möglich, beliebig viele Energiegruppen bei der Lösung der Transportgleichung zu berücksichtigen; das Mehrschichtenproblem erfordert keinen zusätzlichen Aufwand. Eine Zusammenstellung der Anwendungsmöglichkeiten der  $S_N$ -Methode ist von B.G. Carlson und I.G. Bell [8] gegeben worden.

Den mathematischen Formalismus, der auf den Methoden der Differenzenrechnung aufgebaut ist, wollen wir am Beispiel eines stationären kugelsymmetrischen Problems mit isotroper Streuung entwickeln und ihn später für zylindersymmetrische Geometrie verallgemeinern.

### 1. Die energieabhängige Transportgleichung für den Kugelfall

Teilen wir das Neutronenspektrum in diskrete Energiegruppen  $g$  auf, so lautet die Transportgleichung:

$$(1) \quad \left( \mu \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1-\mu^2}{r} \frac{\partial}{\partial \mu} + \sigma_g \right) \psi_g(r, \mu) = S_g(r)$$



$$\vec{n} \cdot \text{grad} = \frac{d}{ds} = \frac{\partial}{\partial r} \cdot \frac{dr}{ds} + \frac{\partial}{\partial \mu} \cdot \frac{d\mu}{ds},$$

$$\frac{dr}{ds} = \cos \vartheta = \mu; \quad \frac{d\mu}{ds} = \frac{\partial \vartheta}{\partial s} \cdot \frac{d\mu}{d\vartheta} = \frac{\sin^2 \vartheta}{r}$$

daraus folgt Gl.(1).

$\psi_g(r, \mu)$  bezeichnet den Neutronenfluß [ $\text{cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ] der Energiegruppe  $g$  am Punkte  $r$  in Richtung  $\vartheta$  ( $\mu = \cos \vartheta$ ).  $\sigma_g$  ist der totale makroskopische Wirkungsquerschnitt [ $\frac{1}{\text{cm}}$ ], der im allgemeinen natürlich von  $r$  abhängt. (Das Symbol  $\sum$  wollen wir im folgenden nur für Summationen verwenden). Das Quellglied  $S_g(r)$  koppelt die verschiedenen Gruppen aneinander und ist bei isotroper Streuung gegeben durch

$$(2) \quad S_g(r) = \sum_{g'} \sigma_{gg'} \psi_{g'}(r) + Q_g(r) = \sum_{g'} \sigma_{gg'} \cdot \frac{1}{2} \int_{-1}^{+1} \psi_{g'}(r, \mu) d\mu + Q_g(r)$$



Der erste Ausdruck gibt die Anzahl der Neutronen an, die aus allen möglichen Energiegruppen  $g'$  in die betrachtete Gruppe  $g$  hineingelangen,  $Q_g(r)$  ist eine spezielle unabhängige Quelle. Der Transfer-Wirkungsquerschnitt  $\sigma_{gg'}$  hängt mit den Wirkungsquerschnitten für die einzelnen Kernreaktionen über folgende Gleichung zusammen:

$$\sigma_{gg'} = \sigma_{g'}^e \delta_{gg'} + \sigma_{g'}^i \eta_{gg'} + \sigma_{g'}^f \nu_g$$

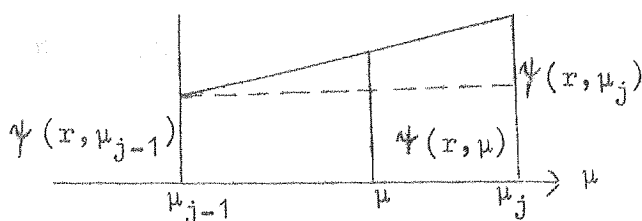
(3)

$$\sigma_{g'}^\lambda = \sigma_{g'}^a + \sigma_{g'}^e + \sigma_{g'}^i + \sigma_{g'}^f$$

Dabei sind  $\sigma_{g'}^\lambda$  die makroskopischen Wirkungsquerschnitte der Energiegruppe  $g'$  für Absorption ( $\sigma_{g'}^a$ ), elastische Streuung ohne Energieänderung ( $\sigma_{g'}^e$ ), inelastische Streuung einschl. Abbremsstreuung ( $\sigma_{g'}^i$ ) und Spaltung ( $\sigma_{g'}^f$ ).  $\delta_{gg'}$  ist das Kronecker Symbol,  $\eta_{gg'}$  das Streuspektrum mit  $\sum \eta_{gg'} = 1$  und  $\nu_g$  das Spaltspektrum mit  $\sum \nu_g = \nu$ , wenn  $\nu$  Neutronen bei einer Spaltung frei werden.

## 2. Definition der $S_N$ -Methode

Man approximiert das Integral im Quellausdruck (2), indem man das  $\mu$ -Intervall  $(-1,1)$  in  $N$  Intervalle aufteilt; in jedem dieser Teilintervalle soll sich  $\Psi(r, \mu)$  linear ändern. Lassen wir den Gruppenindex  $g$



fort, so folgt für eines der  $N$  Teilintervalle  $(\mu_{j-1}, \mu_j)$ ,

$$j = 1, 2, \dots, N, \mu_0 = -1, \mu_N = 1,$$

$$\mu_{j-1} \leq \mu \leq \mu_j :$$

$$\frac{\Psi(r, \mu) - \Psi(r, \mu_{j-1})}{\Psi(r, \mu_j) - \Psi(r, \mu_{j-1})} = \frac{\mu - \mu_{j-1}}{\mu_j - \mu_{j-1}}$$

$$(4) \quad \Psi(r, \mu) = \frac{\mu - \mu_{j-1}}{\mu_j - \mu_{j-1}} \Psi(r, \mu_j) + \frac{\mu_j - \mu}{\mu_j - \mu_{j-1}} \Psi(r, \mu_{j-1})$$

Die Ordnung der Approximation wird durch  $N$  angegeben. Setzt man (4) in (1) ein und integriert über  $\mu$  für jedes Intervall  $(\mu_{j-1}, \mu_j)$ , so ergeben

sich  $N$  Differentialgleichungen, die die  $(N+1)$  Funktionen  $\Psi(r, \mu_j)$ ,  $j = 0, 1, \dots, N$  enthalten. Die noch fehlende Gleichung erhält man dadurch, daß man  $\mu = -1$  direkt in (1) einsetzt.

### 3. Die Integration über $\mu$

Wir setzen die Intervalllänge  $\mu_j - \mu_{j-1} = l_j$  und charakterisieren die Winkelabhängigkeit durch einen hochgestellten Index:  $\Psi(r, \mu_j) = \Psi^j$ .

Die Integration des ersten Gliedes der Gleichung (1) ergibt mit (4):

$$\begin{aligned} \int_{\mu_{j-1}}^{\mu_j} \mu \frac{\partial}{\partial r} \Psi(r, \mu) d\mu &= \frac{\partial}{\partial r} \int_{\mu_{j-1}}^{\mu_j} \mu \Psi(r, \mu) d\mu = \frac{\partial}{\partial r} \left\{ \frac{\Psi^j}{l_j} \left( \frac{1}{3} \mu_j^3 - \frac{1}{3} \mu_{j-1}^3 + \frac{1}{2} \mu_{j-1}^3 - \frac{1}{2} \mu_{j-1} \mu_j^2 \right) \right. \\ &\quad \left. + \frac{\Psi^{j-1}}{l_j} \left[ \left( \frac{\mu_j}{2} (\mu_j^2 - \mu_{j-1}^2) - \frac{1}{3} (\mu_j^3 - \mu_{j-1}^3) \right) \right] \right\} \\ &= \frac{l_j}{2} \frac{\partial}{\partial r} \left\{ \frac{1}{3} (2\mu_j + \mu_{j-1}) \Psi^j + \frac{1}{3} (\mu_j + 2\mu_{j-1}) \Psi^{j-1} \right\} \end{aligned}$$

Genau so verfährt man mit den anderen Termen. Es ist zweckmäßig, folgende Abkürzungen einzuführen:

$$a_j = \frac{1}{3} (2\mu_j + \mu_{j-1}) \quad , \quad \bar{a}_j = \frac{1}{3} (\mu_j + 2\mu_{j-1}), \quad (5)$$

$$b_j = \frac{1}{l_j} \cdot \frac{2}{3} (3 - \mu_j^2 - \mu_j \mu_{j-1} - \mu_{j-1}^2) \quad .$$

Dann ergibt sich aus (1):

$$(6) \quad \left( a_j \frac{\partial}{\partial r} + \frac{b_j}{r} + \sigma \right) \Psi^j + \left( \bar{a}_j \frac{\partial}{\partial r} - \frac{b_j}{r} + \sigma \right) \Psi^{j-1} = 2s, \\ j = 1, 2, \dots, N.$$

Für  $j = 0$  ( $\mu_0 = -1$ ) folgt direkt aus (1):

$$(6a) \quad \left( -\frac{\partial}{\partial r} + \sigma \right) \Psi^0 = s.$$

Die Gleichungen (6) und (6a) fassen wir zu den sogenannten  $S_N$ -Gleichungen

zusammen:

$$(7) \quad \left( a_j \frac{\partial}{\partial r} + \frac{b_j}{r} + G \right) \Psi^j + \left( \bar{a}_j \frac{\partial}{\partial r} - \frac{b_j}{r} + G \right) \Psi^{j-1} = S_j S ,$$

$a_j, \bar{a}_j, b_j,$  aus (5) und  $S_j = 2$  für  $j = 1, 2, \dots, N$  ,  
 $a_j = -1, b_j = 0, \Psi^{j-1} = 0$  und  $S_j = 1$  für  $j = 0$  .

Der totale skalare Fluß ist mit (4)

$$(8) \quad \Psi(r) = \frac{1}{2} \int_{-1}^{+1} \Psi(r, \mu) d\mu = \sum_{j=0}^N p_j \Psi^j (r) ,$$

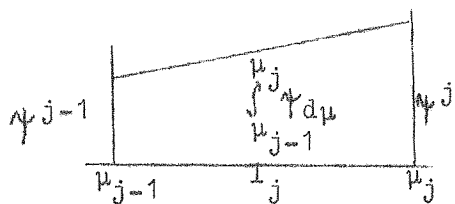
$$p_0 = \frac{1}{4}, p_N = \frac{1}{4}, p_j = \frac{l_j + l_{j-1}}{4} \quad \text{für } j = 1, \dots, N-1 ,$$

$$\sum_{j=0}^N p_j = 1 .$$

Es ist nämlich

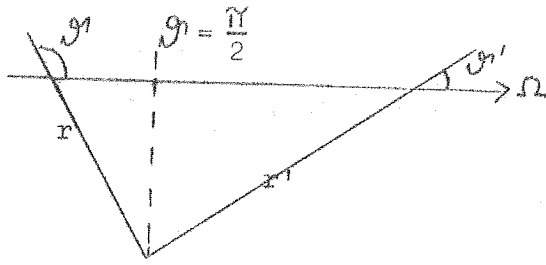
$$\int_{\mu_{j-1}}^{\mu_j} \Psi(r, \mu) d\mu = \frac{1}{2} l_j (\Psi^j + \Psi^{j-1}) \quad \text{und}$$

$$\Psi(r) = \frac{1}{4} \sum_{j=1}^N l_j (\Psi^j + \Psi^{j-1}) .$$

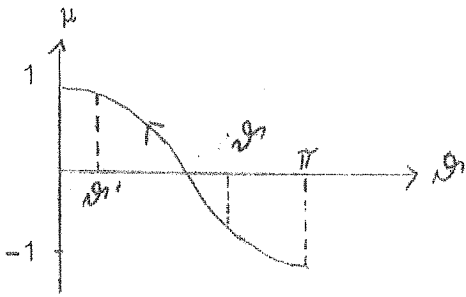


Letzteres ist nichts anderes als die halbe Summe aller Trapezflächen von  $j = 1, \dots, N$ . Die Summation liefert dann Gleichung (8).

Die oben angegebene Entwicklung gilt für eine beliebige Intervallaufteilung  $l_j$ , solange die Teilpunkte  $\mu = -1$  und  $\mu = +1$  enthalten. Die Integrationsrichtung ergibt sich aus der Überlegung, daß eine Strömung in einem kugelsymmetrischen System stets verbunden ist mit einem Anwachsen von



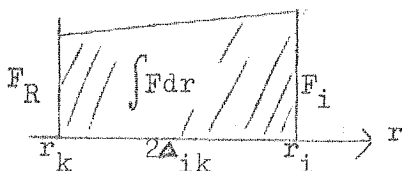
$\mu = \cos \vartheta$ .  $\mu < 0$  ( $\vartheta > \frac{\pi}{2}$ ) entspricht einlaufenden Teilchen,  $\mu = 0$  bedeutet Überfliegen des zentralen Gebietes und durch  $\mu > 0$  ( $\vartheta < \frac{\pi}{2}$ ) sind auslaufende Teilchen charakterisiert. Die einzige Ausnahme bildet ein Teilchenstrom direkt auf das Zentrum; dort wird  $\mu$  unstetig und springt von  $-1$  auf  $+1$ . Wenn wir also ein Neutron auf seinem Flug durch die Kugel verfolgen, so haben wir in positiver Richtung zu integrieren und bei  $\mu = -1$  ( $j = 0$ ) zu beginnen.



#### 4. Die Integration über $r$

Die Integration in positive  $\mu$ -Richtung bedeutet eine Aufspaltung der  $r$ -Integration in negative Richtung (abnehmendes  $r$  für  $\mu_j < 0$ ) und positive  $r$ -Richtung (zunehmendes  $r$  für  $\mu_j > 0$ ). Das ist stets dann eindeutig möglich, wenn  $\mu = 0$  ein Intervallteilpunkt ist. Wählt man die  $\mu$ -Einteilung äquidistant ( $l_j = \frac{2}{N}$ ), so ist damit  $N$  stets gerade. Für die weitere Untersuchung setzen wir immer eine solche "Standard"-Einteilung voraus.

Um die Transportgleichung für eine numerische Lösung zugänglich zu machen, reduzieren wir die  $S_N$ -Gleichungen (7) zu einem Satz von Differenzgleichungen. Zu diesem Zweck unterteilen wir das  $r$ -Intervall  $(0, r_I)$  in  $I$  Teilintervalle  $(r_{i-1}, r_i)$ ,  $i = 1, \dots, I$ ,  $r_0 = 0$ . Dieser Satz von Teilintervallen kann ganz willkürlich sein, nur soll er diejenigen Radien als Teilpunkte enthalten, welche verschiedene Mediensichten voneinander trennen. Wir nehmen nun an, daß die Wirkungsquerschnitte in jedem Teilintervall  $(r_i, r_k)$  konstant sind;  $\sigma(r)$  wird dann ersetzt durch  $\sigma_{ik}$ . Jede über  $(r_i, r_k)$  definierte Funktion  $F(r)$  wird durch eine Gerade approximiert.

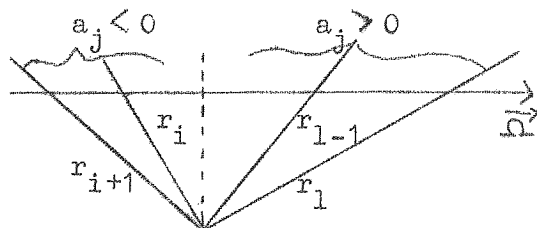


Die Integrale über  $\frac{\partial}{\partial r} F$  und  $F$  sind dann gegeben durch  $F_i - F_k$  bzw.  $\Delta_{ik} (F_i + F_k)$  wenn  $\Delta_{ik} = \frac{1}{2} (r_i - r_k)$ . Die  $\frac{1}{r}$ -Terme in Gl. (7) werden in ähnlicher Weise

ersetzt durch  $\frac{1}{r_{ik}}$  mit  $r_{ik} = \frac{1}{2} (r_i + r_k)$ .

Entsprechend den Überlegungen zu Anfang dieses Abschnittes haben wir zwei Integrationsrichtungen zu untersuchen; ist  $\mu = 0$  ein Intervallteilpunkt, so entspricht  $\mu_j < 0$  eindeutig  $a_j < 0$  und  $\mu_j > 0$  auch  $a_j > 0$ .

A.)  $a_j < 0$



Wir berechnen in diesem Fall von einfliegenden Teilchen den Flußwert  $\psi_i^j$  aus dem näher zum Rande gehörigen Wert  $\psi_{i+1}^j$  (die unteren Indizes kennzeichnen die r-Abhängigkeit). Mit  $i+1=k$  folgt für die

Intervalllänge  $r_k - r_i = 2\Delta_{ki}$ . Integration von (7) über  $(r_i, r_k)$  gibt, wenn  $m_j = |a_j|$  und  $\bar{m}_j = |a_j|$  ist:

$$-m_j (\psi_k^j - \psi_i^j) + \left(\frac{b_j}{r_{ik}} + \sigma_{ik}\right) \Delta_{ki} (\psi_i^j + \psi_k^j) - \bar{m}_j (\psi_k^{j-1} - \psi_i^{j-1}) + \left(\sigma_{ik} - \frac{b_j}{r_{ik}}\right) \Delta_{ki} (\psi_i^{j-1} + \psi_k^{j-1}) = 2\Delta_{ki} (S_i + S_k)$$



$$\psi_i^j = \frac{\left(m_j - \frac{b_j \Delta_{ki}}{r_{ik}} - \sigma_{ik} \Delta_{ki}\right) \psi_k^j + \left(\bar{m}_j + \frac{b_j \Delta_{ki}}{r_{ik}} - \sigma_{ik} \Delta_{ki}\right) \psi_k^{j-1} - \left(\bar{m}_j - \frac{b_j \Delta_{ki}}{r_{ik}} + \sigma_{ik} \Delta_{ki}\right) \psi_i^{j-1} + 2\Delta_{ki} (S_i + S_k)}{m_j + \frac{b_j \Delta_{ki}}{r_{ik}} + \sigma_{ik} \Delta_{ki}}$$

B.)  $a_j > 0$

Bei den wegfliegenden Teilchen haben wir jetzt  $\psi_i$  aus  $\psi_{i-1}$  zu berechnen durch Integration von (7) über das Intervall  $(r_{i-1}, r_i)$ . Setzen wir nun  $k = i-1$ , so ist die Intervalllänge  $r_i - r_k = 2\Delta_{ik}$ , und es folgt:

$$m_j (\psi_i^j - \psi_k^j) + \left(\frac{b_j}{r_{ik}} + \sigma_{ik}\right) \Delta_{ik} (\psi_i^j + \psi_k^j) + \bar{m}_j (\psi_i^{j-1} - \psi_k^{j-1}) + \left(\sigma_{ik} - \frac{b_j}{r_{ik}}\right) \Delta_{ik} (\psi_i^{j-1} + \psi_k^{j-1}) = 2\Delta_{ik} (S_i + S_k)$$

$$\psi_i^j = \frac{(m_i - \frac{b_i \Delta_{ik}}{r_{ik}} - G_{ik} \Delta_{ik}) \psi_k^j + (m_j + \frac{b_j \Delta_{ik}}{r_{ik}} - G_{ik} \Delta_{ik}) \psi_k^{j-1} - (m_j - \frac{b_j \Delta_{ik}}{r_{ik}} + G_{ik} \Delta_{ik}) \psi_i^{j-1} + 2 G_{ik} \Delta_{ik} (S_i + S_k)}{m_j + \frac{b_j \Delta_{ik}}{r_{ik}} + G_{ik} \Delta_{ik}}$$

(9) und (10) sind formal identisch, nur hat man in (9)  $k = i+1$  und in (10)  $k = i-1$  zu setzen.  $\Delta_{ki}$  und  $\Delta_{ik}$  ist in beiden Fällen gleich dem Betrag der halben Intervalllänge.

Um (9) und (10) übersichtlicher zu schreiben, führen wir folgende Abkürzungen ein:

$$\begin{aligned} \alpha_{ik}^j &= m_j - b_j \frac{|\Delta_{ik}|}{r_{ik}} - G_{ik} |\Delta_{ik}| \\ \beta_{ik}^j &= m_j + b_j \frac{|\Delta_{ik}|}{r_{ik}} - G_{ik} |\Delta_{ik}| \\ \gamma_{ik}^j &= m_j - b_j \frac{|\Delta_{ik}|}{r_{ik}} + G_{ik} |\Delta_{ik}| \\ \delta_{ik}^j &= m_j + b_j \frac{|\Delta_{ik}|}{r_{ik}} + G_{ik} |\Delta_{ik}| \\ \varphi_{ik} &= 2 G_{ik} |\Delta_{ik}| S_{ik} ; \quad S_{ik} = \frac{1}{2} (S_i + S_k) . \end{aligned} \tag{11}$$

Dann ist:

$$\psi_i^j = (\alpha_{ik}^j \psi_k^j + \beta_{ik}^j \psi_k^{j-1} - \gamma_{ik}^j \psi_i^{j-1} + \varphi_{ik}) \frac{1}{\delta_{ik}} . \tag{12}$$

$k = i+1$  für  $a_j < 0$ ;  $i = I-1, I-2, \dots, 0$ ,  $j = 0, 1, \dots, N/2$ ;  
 $i = I$  durch Randbedingung zu erfüllen.

$k = i-1$  für  $a_j > 0$ ;  $i = 1, 2, \dots, I$ ;  $j = \frac{N}{2} + 1, \dots, N$ ;  
 $i = 0$  durch Randbedingung zu erfüllen.

Gleichung (12) stellt die  $S_N$ -Lösung der Transportgleichung (1) für eine spezielle Energiegruppe  $g$  dar.

### 5. Numerische Durchführung

Wir wollen die numerische Behandlung der Gleichung (12) skizzieren, ohne vorerst mit speziellen Randbedingungen zu arbeiten. Nehmen wir einmal an, daß der Quellterm  $\mathcal{S}_{ik}^j$  gegeben sei. Die Größen  $\alpha_{ik}^j \dots \mathcal{S}_{ik}^j$  lassen sich bei festliegender Intervalleinteilung leicht angeben. Nach obigen Ausführungen haben wir die Rechnung am Zellrand  $r_I$  für  $\mu = -1$  ( $j=0$ ) zu beginnen. Ist  $\psi_I^0$  durch eine Randbedingung bestimmt, so kann man aus (12) mit  $k = i+1$  sukzessive die Größen  $\psi_{I-1}^0, \psi_{I-2}^0, \dots, \psi_0^0$  ausrechnen, da für  $j=0$   $\psi_{i,k}^{j-1} = 0$  zu setzen ist (siehe Gl. (7)). In ähnlicher Weise läßt sich das Verfahren für  $j = 1, \dots, \frac{N}{2}$  durchzuführen, indem man die (gegebenen)  $\mathcal{S}_{ik}^j$  und die im vorangegangenen Schritt berechneten Größen  $\psi_{i,k}^{j-1}$  benutzt.

$j = \frac{N}{2}$  entspricht dem Teilungspunkt  $\mu = 0$ ; die Berechnung von  $\psi_i^{N/2}$  geschieht nach (12) über die Größen  $\psi_i^{(N/2)-1}$ , gehören also noch zur einwärts gerichteten Integration  $a_j < 0$ .  $j > \frac{N}{2}$  entspricht dann den auslaufenden Teilchen  $a_j > 0$ . Dafür haben wir in (12)  $k = i-1$  zu setzen, wobei jetzt  $\psi_i^j$  durch eine Randbedingung gegeben sei. Man erhält also  $\psi_1^j, \psi_2^j, \dots, \psi_I^j$ . Damit sind dann sämtliche  $(N+1)(I+1)$  Flußgrößen  $\psi_i^j$  bekannt.

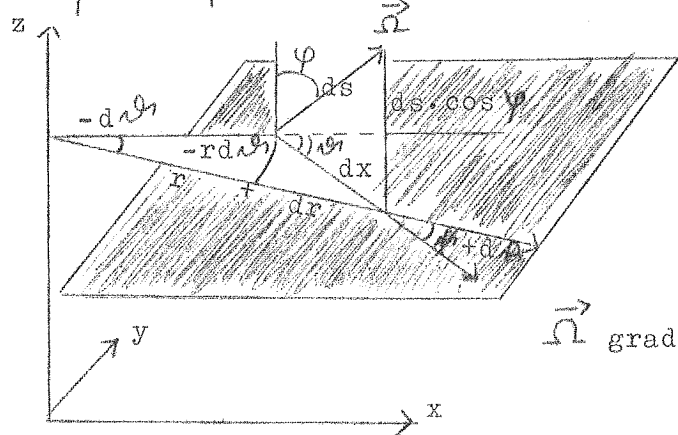
Da durch Stoßprozesse die Neutronen im allgemeinen abgebremst werden, beginnt man zweckmäßig die Berechnung mit der Gruppe größter Energie  $g = G$  und geht zu niedrigeren Energiegruppen über, bis alle Gruppen nach (12) berechnet sind. Dann läßt sich der Quellausdruck  $\mathcal{S}_{ik}^j$ , der über (12) und (8) mit den berechneten Größen  $\psi_i^j$  zusammenhängt, neu bestimmen und wir können den ganzen Prozeß von vorn durchlaufen.

Es ist ersichtlich, daß dieses Verfahren auf eine Iteration für  $\mathcal{S}_{ik}^j$  hinausläuft. Daraus ergibt sich z.B. schon ein sinnvoller Konvergenztest: Die Iteration soll dann abgebrochen werden, wenn die Differenz von  $\mathcal{S}_{ik}^j$ -Werten zweier aufeinanderfolgender Iterationen kleiner als eine Zahl  $\epsilon$  ist.

Diese allgemeine Diskussion werden wir später noch am speziellen Beispiel einer  $S_4$ -Rechnung für Zylindersymmetrie genauer erläutern (siehe Abschnitt 9).

### 6. Die $S_N$ -Methode für zylindrische Geometrie

Wir charakterisieren die Neutronenstrahlrichtung  $\vec{\Omega}$  durch den Ablenkwinkel  $\varphi$  mit  $\eta = \cos \varphi$  und den Azimut  $\vartheta$  mit  $\mu = \cos \vartheta$ ;  $\varphi$  und  $\vartheta$  werden von der achsialen (z) bzw. radialen (r) Richtung aus gemessen, und zwar  $\vartheta$  in einer zur Ursprungsebene  $z = 0$  parallelen Ebene. Dann ist



$$\vec{\Omega} \text{ grad} = \frac{d}{ds} = \frac{\partial}{\partial z} \cdot \frac{dz}{ds} + \frac{\partial}{\partial r} \cdot \frac{dr}{ds} + \frac{\partial}{\partial \mu} \frac{d\mu}{ds} ,$$

$$\frac{dz}{ds} = \cos \varphi = \eta ; \quad \frac{dr}{ds} = \frac{dr}{dx} \cdot \frac{dx}{ds} = \cos \vartheta \sin \varphi ; \quad \frac{d\mu}{ds} = \frac{d\mu}{d\vartheta} \cdot \frac{d\vartheta}{ds} = -\sin \vartheta \cdot \frac{d\vartheta}{ds} ;$$

$$\frac{d\vartheta}{ds} = \frac{d\vartheta}{dx} \cdot \frac{dx}{ds} = -\frac{\sin \vartheta}{r} \sin \varphi ; \quad \text{daraus folgt}$$

$$\vec{\Omega} \text{ grad} = \eta \frac{\partial}{\partial z} + \sqrt{1 - \eta^2} \left( \mu \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\sin^2 \vartheta}{r} \frac{\partial}{\partial \mu} \right) .$$

Dann lautet die Transportgleichung:

$$\left\{ \eta \frac{\partial}{\partial z} + \sqrt{1 - \eta^2} \left( \mu \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1 - \mu^2}{r} \frac{\partial}{\partial \mu} \right) + \sigma_g \right\} \psi_g(r, z, \mu, \eta) = S_g(r) .$$

Ist der Zylinder unendlich lang (Voraussetzung 2), so fällt die z-Abhängigkeit fort und wir haben:

$$(13) \quad \left\{ \sqrt{1 - \eta^2} \left( \mu \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1 - \mu^2}{r} \frac{\partial}{\partial \mu} \right) + \sigma_g(r) \right\} \psi_g(r, \mu, \eta) = S_g(r) .$$

Diese Gleichung stimmt mit der Transportgleichung für den Kugelfall (1) bis auf den Faktor  $\sqrt{1 - \eta^2}$  überein. Die Integration über r und  $\mu$  kann also in genau derselben Weise wie dort durchgeführt werden und ergibt eine der Gleichung (12) vollkommen analoge Formel

$$(14) \quad \psi_i^j(\eta) = (\bar{\alpha}_{ik}^j \psi_k^j(\eta) + \bar{B}_{ik}^j \psi_k^{j-1}(\eta) - \bar{\gamma}_{ik}^j \psi_i^j(\eta) + \bar{S}_{ik}^j) \frac{1}{\bar{\sigma}_{ik}^j} ,$$



wobei mit  $\lambda = \sqrt{1-\eta^2}$

$$\begin{aligned}
 \bar{a}_{ik}^j &= \lambda(m_j - b_j \frac{|\Delta_{ik}|}{r_{ik}}) - G_{ik} |\Delta_{ik}| \\
 \bar{b}_{ik}^j &= \lambda(\bar{m}_j + b_j \frac{|\Delta_{ik}|}{r_{ik}}) - G_{ik} |\Delta_{ik}| \\
 \bar{\gamma}_{ik}^j &= \lambda(\bar{m}_j - b_j \frac{|\Delta_{ik}|}{r_{ik}}) + G_{ik} |\Delta_{ik}| \\
 \bar{\sigma}_{ik}^j &= \lambda(m_j + b_j \frac{|\Delta_{ik}|}{r_{ik}}) + G_{ik} |\Delta_{ik}| \\
 \bar{\varphi}_{ik} &= 2 \varphi |\Delta_{ik}| \bar{S}_{ik} \\
 \bar{S}_{ik} &= \frac{1}{2} (\bar{S}_i + \bar{S}_k)
 \end{aligned}
 \tag{15}$$

Der Integrand des Quellterms  $S_g(r)$  ist jetzt natürlich wegen der  $\eta$ -Abhängigkeit vom Kugelfall verschieden. In (2) ist nämlich das erste Glied ( $S_g(r) = Q'_g(r) + Q_g(r)$ ):

$$\begin{aligned}
 Q'_g(r) &= \sum_{g'} G_{gg'} \psi'_g(r) = \sum_{g'} G_{gg'} \cdot \frac{1}{4\pi} \int_{\varphi=0}^{\pi} \sin\varphi \, d\varphi \int_{\vartheta'=0}^{2\pi} \psi_{g'}(r, \vartheta', \varphi) \, d\vartheta' \\
 Q'_g(r) &= \sum_{g'} G_{gg'} \cdot \left\{ \frac{1}{2} \int_{-1}^{+1} d\eta \left[ \frac{1}{\pi} \int_{-1}^{+1} \frac{\psi_{g'}(r, \mu, \eta)}{\sqrt{1-\mu^2}} \, d\mu \right] \right\}
 \end{aligned}
 \tag{16}$$

Betrachtet man allein die  $\mu$ -Abhängigkeit, so ist bei linearer Approximation von  $\psi$  im Intervall  $(\mu_{j-1}, \mu_j)$  nach Gl. (4):

$$\frac{1}{\pi} \int_{-1}^{+1} \frac{\psi(r, \mu, \eta)}{\sqrt{1-\mu^2}} \, d\mu = \sum_{j=0}^N p_j \psi^j(r, \eta); \quad \sum p_j = 1
 \tag{17}$$

Die  $p_j$ -Werte sind wegen des Terms  $\frac{2}{\pi \sqrt{1-\mu^2}}$  verschieden von denen im Kugelfall (Gl. (8)). Sie ergeben sich für die verschiedenen  $S_N$ -Approximationen zu:

$$S_2 : p_0 = p_2 = 0,3183 ; \quad p_1 = 0,3634$$

$$S_4 : p_0 = p_4 = 0,2180 ; \quad p_1 = p_3 = 0,2006 ; \quad p_2 = 0,1628$$

$$S_6 : p_0 = p_6 = 0,1764 ; \quad p_1 = p_5 = 0,1557 ; \quad p_2 = p_4 = 0,1144$$

$$p_3 = 0,1070$$

$$S_8 : p_0 = p_8 = 0,1518 ; \quad p_1 = p_7 = 0,1324 ; \quad p_2 = p_6 = 0,0931$$

$$p_3 = p_5 = 0,0827 ; \quad p_4 = 0,0801$$

Die Werte für  $S_2$  lassen sich sofort verifizieren. Mit  $\psi = \frac{1}{l_j} \left\{ (\mu - \mu_{j-1}) \psi^j + (\mu_j - \mu) \psi^{j-1} \right\}$  und  $l_j = 1$  folgt:

$$\frac{1}{\pi} \int_{-1}^{+1} \frac{\psi d\mu}{\sqrt{1-\mu^2}} = \frac{1}{\pi} \left\{ \psi^0 + \psi^1 [\arcsin 1 - \arcsin(-1) - 2] + \psi^2 \right\} = \frac{1}{\pi} \left\{ \psi^0 + (\pi - 2) \psi^1 + \psi^2 \right\}$$

$$\leadsto \quad p_0 = \frac{1}{\pi} ; \quad p_1 = \frac{\pi - 2}{\pi} ; \quad p_2 = \frac{1}{\pi}$$

Für die  $\eta$ -Integration in (16) bietet sich das Gaußsche Quadraturverfahren an, siehe z.B. A.D. Booth [9, insbesondere S. 41]. Die Integration einer geraden Funktion  $F(t)$  im Intervall  $(-1,1)$  ergibt danach

$$(18) \quad \int_{-1}^{+1} F(t) dt = 2 \sum_{l=1}^{n/2} w_l F(t_l) ; \quad \sum_{l=1}^{n/2} w_l = 1$$

$t_l$  sind die positiven Nullstellen des Legendre-Polynoms  $P_n = 0$ ,  $w_l$  sind die Gauß-Gewichte, die im Anhang für  $n = 2, 4, 6, 8$  zusammengestellt sind. Gl. (18) entspricht einer Approximation der Funktion  $F(t)$  durch ein Interpolationspolynom vom Grad  $n - 1$ .

Setzen wir  $n = N$ , so ist ( $\psi =$  gerade Funktion von  $\eta$ ):

$$\int_{-1}^{+1} \Psi(r, \eta) d\eta = 2 \sum_{l=1}^{N/2} w_l \Psi(r, \eta_l)$$

Damit haben wir

$$Q'_g(r) = \sum_{g'} G_{gg'} \left\{ \sum_{l=1}^{N/2} w_l \sum_{j=0}^N p_j \Psi_{g'}^j(r, \eta_l) \right\}$$

(19)

$$\Psi'_g(r) = \sum_{l=1}^{N/2} w_l \sum_{j=0}^N p_j \Psi_{g'}^j(r, \eta_l)$$

Bei der Integration über  $r$  ergibt sich dann für den in (15) definierten Ausdruck  $\bar{\Psi}_{ik}$ :

$$\bar{\Psi}_{ik} = 2 \bar{g} \Delta_{ik} (Q'_{ik} + Q_{ik})$$

(20)

$$Q'_{ik} = \frac{1}{2}(Q'_i + Q'_k) = \frac{1}{2} \sum_{g'} G_{gg'} \left\{ \sum_{l=1}^{N/2} w_l \sum_{j=0}^N p_j [g'_i \Psi_i^j(\eta_l) + g'_k \Psi_k^j(\eta_l)] \right\}$$

$Q_{ik} = \frac{1}{2}(Q_i + Q_k)$  = mittlerer Wert einer speziellen Quelle in  $(r_i, r_k)$ .

Die Gleichungen (14), (15) und (20) geben die Lösung der Transportgleichung bei Zylindergeometrie an; wir haben dann folgenden Iterationszyklus bei vorgegebenem  $\bar{\Psi}_{ik}$ :

- a.) In der Energiegruppe  $g = G$  Berechnung der  $(N+1)(I+1)$  Komponenten  $\Psi_i^j(\eta)$  für  $\eta = \eta_1$  wie im Kugelfall, dann sukzessive für  $\eta = \eta_2, \dots, \eta_{N/2}$
- b.) Sukzessive Berechnung der niedrigeren Energiegruppen in genau derselben Weise.
- c.) Neue Berechnung der  $\bar{\Psi}_{ik}$ .
- d.) Wiederholung der Prozesse a bis c mit dem berechneten  $\bar{\Psi}_{ik}$  und so fort.

7. Spezialisierung auf eine Energiegruppe von thermischen Neutronen

Nach Voraussetzung (4) soll die Abbremsung der Spaltneutronen im Moderator ersetzt werden durch eine einheitliche Erzeugung von thermischen Neutronen im Moderator. Da in diesem Falle nur elastische Streuung zu berücksichtigen ist, gilt  $\sigma_{gg'} = \sigma^e = c \sigma$ ;  $c = \frac{\sigma^e}{\sigma}$ . ( $\sigma = \sigma_{tot}$ ).

Dann folgt

$$(21) \quad \bar{\psi}_{ik} = 2 \beta \Delta_{ik} \left\{ (c \cdot \sigma)_{ik} \psi_{ik} + Q_{ik} \right\},$$

$$\psi_{ik} = \frac{1}{2} (\psi_i + \psi_k) = \frac{1}{2} \sum_{l=1}^{N/2} w_l (\psi_i(\eta_l) + \psi_k(\eta_l))$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{l=1}^{N/2} w_l \sum_{j=0}^N p_j (\psi_i^j(\eta_l) + \psi_k^j(\eta_l)) ;$$

$$\beta = \begin{cases} 1 & \text{für } j = 0 \\ 2 & \text{für } j = 1, \dots, N \end{cases}$$

$Q_{ik} = \frac{1}{2} (Q_i + Q_k)$  ist jetzt die Anzahl der im Intervall  $(r_i, r_k)$  thermisch gewordenen Neutronen.

8. Die Randbedingungen bei der Berechnung einer Wigner-Seitz-Zelle

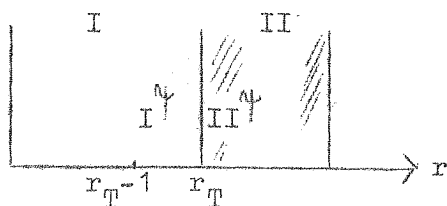
a.) Verhalten im Ursprung  $r = 0$ .

Infolge der Rotationssymmetrie um die z-Achse ist bei  $r = 0$  keine Richtung ausgezeichnet. Daher sind sämtliche  $\psi_0^j$  einander gleich. Insbesondere haben wir:

$$(22) \quad \psi_0^j = \psi_0^{N-j}, \quad j > \frac{N}{2}.$$

*Die Bedingung  $\psi_0^j = \text{const}$  wird nicht erfüllt, nur (22)*

b.) Übergang an den Grenzschichten verschiedener Medien.



Die r-Einteilung wird so gewählt, daß die Radien  $r_T$  der Trennflächen zugleich Teilungspunkte sind. Einem stetigen Übergang von  $\psi$  für jede ausgewählte Richtung  $\Omega_j$  entspricht

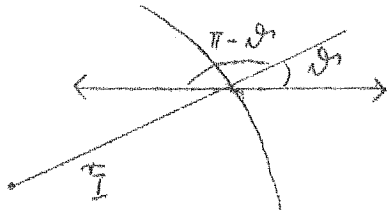
daher die Bedingung:

$$(23) \quad \text{I } \Psi_{r_T}^j(\eta_1) = \text{II } \Psi_{r_T}^j(\eta_1) .$$

Gleichung (23) wird bei der rekursiven Berechnung der Größen  $\Psi_i^j$  automatisch erfüllt. Bei einer Integration in negative r-Richtung ( $a_j < 0$ ) berechnet sich z.B.  $\text{II } \Psi_{r_T}^j$  aus Größen, die die Medieneigenschaften von II enthalten;  $\text{I } \Psi_{r_{T-1}}^j$  hätte man dann zu berechnen aus den (unbekannten)  $\text{I } \Psi_{r_T}^j$ . Bedingung (23) aber ermöglicht eine Fortsetzung der Berechnung ohne zusätzliche Manipulation. Das Mehrschichtenproblem benötigt also bei der  $S_N$  - Methode keine gesonderte Behandlung und kann in der gleichen Zeit wie ein Zweischichtenproblem gelöst werden.

c.) Verhalten am Zellrand  $r_I$

Die Bedingung, daß der Nettostrom auf dem Zellrand verschwindet, erfüllen wir wie in I,4 dadurch, daß wir den Fluß in Richtung  $\vec{\Omega}$  gleich dem Fluß in Richtung  $-\vec{\Omega}$  setzen. Das entspricht im Zylinderfall einer Ersetzung von  $\varphi$  durch  $\pi - \varphi$  und durch  $\tilde{\vartheta}_j$  durch  $\pi - \tilde{\vartheta}_j$ . Gegenüber der ersten Operation ist  $\Psi$



invariant, denn  $\Psi = f(\sqrt{1-\eta^2}) = f(\sin\varphi) \Rightarrow \Psi(\varphi) = \Psi(\pi-\varphi)$ . Die zweite Bedingung ist dann  $\Psi(\tilde{\vartheta}_j, \dots) = \Psi(\pi - \tilde{\vartheta}_j, \dots)$ . Ausgedrückt durch Indizierung ergibt das:

$$(24) \quad \Psi_I^j(\eta_1) = \Psi_I^{N-j}(\eta_1) \quad , \quad j > \frac{N}{2}$$

Für  $\tilde{\vartheta}_j = \frac{\pi}{2}$  erhält man eine direkte Beziehung aus der Transportgleichung (13). (Diese Zusatzgleichung ist notwendig bei der rekursiven Berechnung der  $\Psi_i^j$ ; Strom = null ist auch ohne sie erfüllt):

$$\left\{ \lambda \left( \cos \tilde{\vartheta}_j \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin \tilde{\vartheta}_j}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \sigma \right\} \Psi = S(r) .$$

Wegen  $\Psi(\tilde{\vartheta}_j, \dots) = \Psi(\pi - \tilde{\vartheta}_j, \dots)$  ist

$$\frac{\partial \Psi(\tilde{\vartheta}_j)}{\partial \tilde{\vartheta}_j} = - \frac{\partial \Psi(\pi - \tilde{\vartheta}_j)}{\partial \tilde{\vartheta}_j} .$$

Für  $\mathcal{S} = \frac{\pi}{2}$  folgt daraus  $\left. \frac{\partial \Psi}{\partial \mathcal{S}} \right|_{\frac{\pi}{2}} = 0$ .

Dann haben wir:

$$(25) \quad \Psi_I^j = \frac{N}{2} = \frac{S_I}{\mathcal{S}_I} = \frac{(c\mathcal{S})_I \Psi_I + Q_I}{\mathcal{S}_I}$$

9. Beispiel einer  $S_4$ -Rechnung für eine zylindersymmetrische Zelle

a.) Berechnung der Größen  $\mathcal{G}_{ik}$ ,  $c_{ik}$ ,  $\Delta_{ik}$ ,  $r_{ik}$ ,  $Q_{ik}$ .

*Woran?  
Qik*

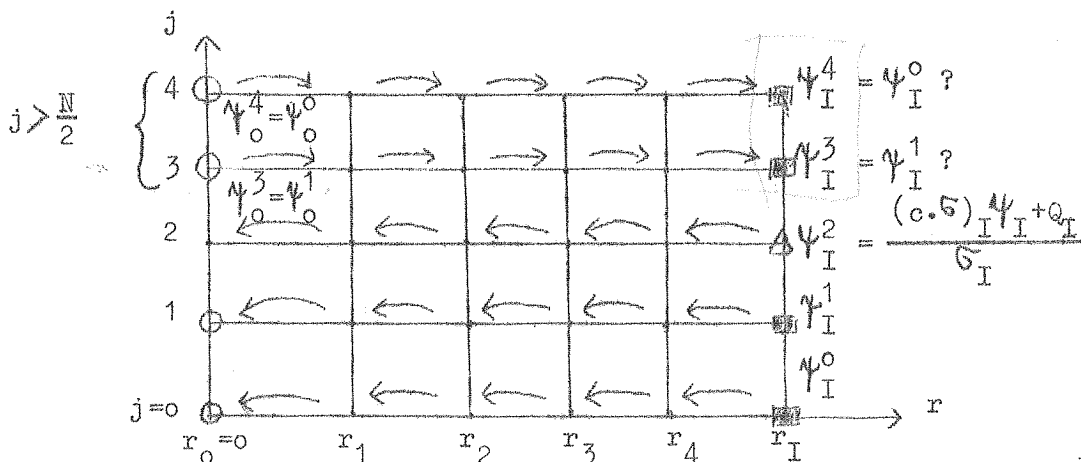
b.) Da am Zellrand nahezu Isotropie herrscht, können wir die Randwerte  $\Psi_I^j(\eta_1)$  für  $j < N/2$  durch einen Wert  $\Psi_I^0$  unabhängig von  $\eta_1$  ausdrücken, den wir zu Beginn der Rechnung z.B. einer Diffusionstheorie entnehmen können.

c.)  $\Psi_I^{j=N/2} = \Psi_I^2$  berechnet man zweckmäßig nach (25) mit  $\Psi_I = \Psi_I^0$ .

d.) Zur Berechnung der Größen  $\bar{\mathcal{P}}_{ik}$  aus (21) müßte  $\Psi_{ik}$  bekannt sein. Setzt man den Fluß über die ganze Zelle konstant gleich  $\Psi_I^0$ , so ist auch  $\Psi_{ik} = \Psi_I^0$  und  $\bar{\mathcal{P}}_{ik}$  ist berechenbar. Man kann jedoch eine etwas verbesserte Anfangsverteilung  $\bar{\mathcal{P}}_{ik}$  erhalten, wenn man  $\Psi_{ik}$  über die Zelle durch eine vom Zentrum aus ansteigende Gerade approximiert, was dem tatsächlichen Flußverlauf näher kommt als eine Horizontale  $\Psi_I^0$ .

e.) Berechnung von  $\lambda_1 \cdot b_j$ ,  $\lambda_1 \cdot m_j$ ,  $\lambda_1 \cdot \bar{m}_j$  mit  $\lambda_1 = \sqrt{1 - \eta_1^2}$  und den Größen  $b_j$ ,  $m_j$ ,  $\bar{m}_j$  aus (5). Damit sind auch  $\bar{\alpha}_{ik}^j, \dots, \bar{\sigma}_{ik}^j$  bestimmt.

f.) Berechnung der Größen  $\Psi_i^j(\eta_1)$  nach folgendem Schema:



g.) Berechnung von  $\Psi_i(\eta_1) = \sum_{j=0}^N p_j \Psi_i^j(\eta_1)$  und

$$\Psi_{ik}(\eta_1) = \frac{1}{2} (\Psi_i(\eta_1) + \Psi_k(\eta_1)).$$

h.) Erneutes Durchlaufen des Hauptprogramms e bis g mit  $\lambda_2 = \sqrt{1 - \eta_2^2}$ .

i.) Nach Füllung des zweiten Blockes für  $\eta = \eta_2$  Berechnung von

$$\Psi_i = \sum_{I=1}^2 w_I \Psi_i(\eta_I) \text{ und } \Psi_{ik} = \frac{1}{2} (\Psi_i + \Psi_k).$$

k.) Wir bestimmen den Fehler durch Untersuchung der Flußgleichheit am Zellrand:

$$\varepsilon = \sum_{k=1}^2 \sum_{j > N/2} |\varepsilon_k^j| \quad \text{mit} \quad \varepsilon_k^j = \frac{\Psi_I^j(\eta_k) - \Psi_I^{N-j}(\eta_k)}{\Psi_I^{N-j}(\eta_k)}.$$

l.) Ist die gewünschte Genauigkeit nicht erzielt, so erfolgt ein erneutes Durchlaufen des ganzen Prozesses e bis k, jetzt mit den über die Randbedingung (24) verbesserten Werten  $\Psi_I^j$  statt  $\Psi_I^{N-j}$  für  $j > N/2$  nach Gleichung (25) mit dem beim vorhergehenden Schritt berechneten  $\Psi_I$  und  $\bar{\Psi}_{ik}$  mit den gewonnenen  $\Psi_{ik}$ . Da die Normierung des Flusses noch frei ist, soll zu Anfang jeder Iteration der Flußwert bei  $r = 0$ , also  $\Psi_0$ , gleich Eins sein.

### 10. Konvergenzfragen

Aus der Annahme der linearen Änderung von  $\Psi(r, \mu, \eta)$  über den Intervallen  $(\mu_{j-1}, \mu_j)$  und  $(r_i, r_k)$  folgt, daß

- die Winkelabhängigkeit nicht stark anisotrop sein darf, wenn man sich auf geringe Ordnung beschränken will,
- die Einteilung des  $r$ -Intervalles  $(0, r_I)$  so gewählt werden muß, daß  $\Psi(r)$  in einem Teilintervall gut durch eine Gerade darstellbar ist. Bei starker räumlicher Krümmung des Flusses ist also eine große Zahl von Intervallen erforderlich, was die Rechenzeiten sehr vergrößert.

Die Aussage a) deckt sich mit der entsprechenden in der  $P_N$ -Methode. Was die Rechenzeiten anbetrifft, so haben wir bei der  $P_N$ -Methode wesentlich günstigere Verhältnisse. Das liegt daran, daß das Iterationsverfahren zur Lösung der Gleichung (14) sehr schlecht konvergiert. Für eine  $S_4$ -Rechnung braucht man bei 26 r-Intervallen mindestens 50 bis 60 Iterationen, wobei jede Iteration auf der Rechenmaschine vom Typ Zuse (Z 22) etwa 10 Minuten in Anspruch nimmt. Dabei ist die erzielte Genauigkeit noch nicht einmal besonders groß; fragt man auf die Gleichheit der Flüsse am Zellrand ab, so ist diese bis auf etwa 1% erfüllt. Eine vergleichbare  $P_5$ -Rechnung (2 Schichten) braucht ca. 2 bis 3 Stunden. Allerdings würde eine  $P_5$ -Rechnung für z.B. fünf Medien eine mit der  $S_4$ -Rechnung vergleichbare Zeit benötigen, da letztere ja für das Mehrschichtenproblem keine zusätzliche Rechenzeit benötigt. Darin liegt gerade der besondere Vorteil der  $S_N$ -Methode.

Eine Mehrgruppenrechnung nach der  $S_N$ -Methode ist nach obigen Angaben für die Z 22 nicht mehr sinnvoll. Sie wird auf besonders schnelle Maschinen, etwa vom Typ IBM 704, beschränkt bleiben. (Die IBM 704 ist bei Gleitkomma-Rechnung um einen Faktor 200 bis 300 schneller als die Z 22). Zur Berechnung des kritischen Radius eines schnellen Brütters wird von der IBM 704 bei zylindrischer Geometrie und 10 Energiegruppen mit  $S_4$  eine Rechenzeit von einer Stunde benötigt; 125 Iterationen sind notwendig, um einen "vernünftigen" Fehler zu erhalten, siehe W.B. Löwenstein und D. Okrent [10].



### III. Numerische Ergebnisse

#### 1. Die FR 2-Zelle

Das Hauptziel dieser Arbeit ist die Untersuchung des thermischen Neutronenflusses in einer Zelle des FR 2. Die bisherigen Rechnungen sind mit der gewöhnlichen Diffusionstheorie durchgeführt worden, die aus schon genannten Gründen in der Nähe von Rändern keine guten Ergebnisse liefern kann. Eine Veränderung des Flußverlaufs, die durch exaktere Behandlung des Problems sich ergeben muß, beeinflußt dann auch den Wert des thermischen Nutzungsfaktors  $f$ , in den die Flußmittelwerte eingehen. Es ist daher von Interesse, wie groß die Fehler sind, die den diffusionstheoretisch ausgerechneten Größen anhaften. Ferner soll untersucht werden, ob die Annahme gerechtfertigt ist, daß durch den Aluminiummantel des Urans und das Führungsrohr der Fluß nur unwesentlich verändert wird, verglichen mit dem Fluß in einer Zweimedienzelle Uran-Moderator.

Die FR 2-Zelle besteht aus einem zylindrischen Stab von natürlichem Uran mit einem Radius von  $r = 1,6$  cm, der von einem Aluminiummantel von 0,1 cm Dicke umgeben ist. Das Führungsrohr, ebenfalls Aluminium von 0,15 cm Dicke, umschließt einen Kühlpalt von  $r = 0,4$  cm. Der Radius des Zellrandes ist  $r_R = 9,5$  cm. Als Moderator und Kühlmittel wird  $D_2O$  verwendet. Folgende Konstanten liegen der Rechnung zugrunde:

Uran:	$\Sigma_a$	= 0,358	cm <sup>-1</sup>	$l = \frac{1}{\Sigma_{tot}} = 1,3441$	cm
	$\Sigma_S$	= 0,386	cm <sup>-1</sup>	$c = \frac{\Sigma_S}{\Sigma_{tot}} = 0,5188$	
	$\Sigma_{tot}$	= 0,744	cm <sup>-1</sup>		
$D_2O$ :	$\Sigma_a$	= $8 \cdot 10^{-5}$	cm <sup>-1</sup>	$l = 2,3995$	cm
	$\Sigma_S$	= 0,4167	cm <sup>-1</sup>	$c = 0,9998$	
	$\Sigma_{tot}$	= 0,4168	cm <sup>-1</sup>		

$$\begin{aligned}
 \text{Al:} \quad \Sigma_a &= 1,39 \cdot 10^{-2} \text{ cm}^{-1} & l &= 10,0604 \text{ cm} \\
 \Sigma_S &= 8,55 \cdot 10^{-2} \text{ cm}^{-1} & c &= 0,8602 \\
 \Sigma_{\text{tot}} &= 9,94 \cdot 10^{-2} \text{ cm}^{-1}
 \end{aligned}$$

## 2. Das Zweimedienproblem

Als erstes wollen wir die Diskussion der einzelnen Näherungslösungen an der vereinfachten Zelle durchführen, die aus den zwei Medien Uran-D<sub>2</sub>O besteht ( $r_1 = 1,6 \text{ cm}$ ,  $r_R = 9,5$ ). Die Ergebnisse nach der P<sub>N</sub>- und S<sub>N</sub>-Methode sind in Tabelle 1 und Abb. 1 zusammengefaßt (D = Diffusionsnäherung). Der Fluß  $\phi(r)$ , der proportional der Quellstärke  $S = \frac{Q_{00}}{4\pi r^2}$  ist, wurde so normiert, daß  $\phi(r=0) = 1$  wird ( $Q_{00}$  konstant).

Tab. 1: Flußwerte und f-Faktoren für die Zweimedienzelle U-D<sub>2</sub>O

Methode	$\bar{\phi}_u$	$\phi_u^{\text{Rd}} = \phi_u^{\text{Max}}$	$\frac{\phi_u^{\text{Rd}}}{\bar{\phi}_u}$	$\bar{\phi}_M$	$\phi_M^{\text{Max}}$	$\frac{\bar{\phi}_M}{\bar{\phi}_u}$	f
D	1,1687	1,3464	1,1521	2,0973	2,2383	1,7945	0,9865
P <sub>1</sub>	1,2784	1,5806	1,2364	2,4024	2,5566	1,8791	0,9858
P <sub>3</sub>	1,3030	1,6637	1,2769	2,7568	2,9426	2,1158	0,9841
P <sub>5</sub>	1,3369	1,7757	1,3282	2,9193	3,0990	2,1836	0,9836
S <sub>2</sub>	1,2785	1,6859	1,3187	2,7535	2,8748	2,1537	0,9838
S <sub>4</sub>	1,3150	1,7747	1,3496	2,8972	3,0150	2,2032	0,9834

### a.) Die P<sub>N</sub>-Näherungen

Die Diffusionsnäherung ist gewonnen aus der asymptotischen Lösung der Transportgleichung für einen unendlich ausgedehnten Halbraum. Hiermit

berücksichtigt man die Tatsache, daß Uran ein relativ starker Neutronenabsorber ist, vernachlässigt aber explizit die Effekte, die von Rändern herrühren können. Bestimmt wird die Größe  $\mathcal{K}_{\text{Uran}}$ , die in der Diffusionstheorie definiert ist als  $\mathcal{K} = \frac{1}{L} = \sqrt{\frac{\Sigma_a}{D}}$  (L = Diffusionslänge, D = Diffusionskonstante), aus der Gleichung

$$(1) \quad \frac{\Sigma_s}{2\mathcal{K}} \ln \frac{\Sigma_{\text{tot}} + \mathcal{K}}{\Sigma_{\text{tot}} - \mathcal{K}} = 1,$$

siehe z.B. [11 insbesondere S. 396]. Damit wird

$$\mathcal{K}_{\text{Uran}} = 0,707.$$

Für  $D_2O$  wurde  $\mathcal{K}_{D_2O} = 0,01$  angenommen.

Die Kugelfunktionsentwicklung liefert für die  $P_1$ -Näherung einen  $\mathcal{K}$ -Wert, der sich unabhängig von der Geometrie bestimmt aus  $G_{20}(\nu) = 0$  (siehe I, Gl. (19)) und gibt

$$\frac{\nu}{1} = \mathcal{K} = \sqrt{3 \frac{\Sigma_a}{\Sigma_{\text{tot}}}} = 0,8939.$$

Der mathematische Formalismus der  $P_1$ - und D-Näherung ist identisch; in beiden Fällen wird der Fluß in der zentralen Uranschicht wiedergegeben durch

$$\phi(r) \sim I_0(\mathcal{K}r).$$

Demnach wird wegen des größeren  $\mathcal{K}$ -wertes die  $P_1$ -Näherung ein stärkeres Ansteigen des Flusses zur Folge haben als die D-Näherung. Verglichen mit der  $P_3$ - und  $P_5$ -Approximation haben wir das wichtige Ergebnis, daß die bezüglich  $\mathcal{K}$  transporttheoretisch korrigierte Diffusionslösung schlechter ist als eine  $P_1$ -Näherung. Daraus ist bereits zu sehen, daß die Randeffekte, die die Ursache für dieses Verhalten sind, eine wesentliche Rolle spielen. Auch von der  $P_1$ -Approximation wird die Flußdepression im Uran noch erheblich unterschätzt. Die Flußverhältnisse  $\phi_U^{Ri} / \phi_U$  und  $\bar{\phi}_M / \phi_U$  sind bei  $P_5$  um 13% bzw. 18% größer als bei D; der Vergleich  $P_5$  zu  $P_1$  liefert immer noch 7, % bzw. 14%.

Das Konvergenzverhalten der  $P_N$ -Lösungen ist aus Abb. 1 ersichtlich. Betrachtet man das Verhältnis  $\frac{\bar{\phi}_M}{\phi_U}$ , so ergibt sich ein Fehler von 11 % beim Vergleich  $P_3$  zu  $P_1$ , dagegen nur noch 3,1% beim Vergleich von  $P_5$  zu  $P_3$ .

Bei  $\phi_U^{Rd} / \bar{\phi}_u$  liegen die Verhältnisse nicht so günstig. Das hat seinen Grund hauptsächlich darin, daß die freie Weglänge der Neutronen im Uran vergleichbar ist mit dem Radius des Uranstabes, die Uranzone also praktisch nur Randgebiet ist und erst in einer höheren Näherung einigermaßen gut beschrieben wird.

Theoretisch läßt sich dazu noch eine Aussage gewinnen durch Betrachtung der Nullstellen  $\nu_{j0}$  von  $G_{N+1}(\nu) = 0$  (Teil I, Gl. (19)). Es läßt sich zeigen, daß  $\nu_{10/1} = \mathcal{K}$  für  $N \rightarrow \infty$  ebenfalls der Gleichung (III,1) gehorcht, siehe B. Davison [5], p. 125. Das heißt aber, daß in der Flußverteilung im Uran ( $P_5$ )

$$\phi(r) \sim B_{10} I_0\left(\frac{\nu_{10}}{1} r\right) + B_{20} I_0\left(\frac{\nu_{20}}{1} r\right) + B_{30} I_0\left(\frac{\nu_{30}}{1} r\right)$$

der erste Term die asymptotische Lösung der Transportgleichung ist (unendlich ausgedehntes Medium); die restlichen Glieder enthalten dann also die Randeffekte. Bei  $P_3$  unterscheidet sich  $\nu_{10/1} = 0,7274$  noch um 2,9% von  $\mathcal{K} = 0,707$ , während bei  $P_5$   $\nu_{10/1} = 0,7113$  nur um 0,6% größer ist.

Für die "Übergangsglieder", die die Wurzeln  $\nu_{j0}$  mit  $j \geq 2$  enthalten, läßt sich ein derartiges Konvergenzkriterium nicht aufstellen.  $\nu_{j0}$  wird größer mit wachsendem  $j$  (Vergrößerung der Argumente der monoton wachsenden Besselfunktion  $I_0$ ), ohne daß dies durch merklich kleiner werdende Koeffizienten  $B_{j0}$  kompensiert wird. Bei  $P_5$  ist nämlich  $B_{20} \approx B_{10}$ ,  $B_{30} \approx \frac{1}{10} B_{10}$ . Aus diesem Grunde kann aus der Größe von  $\nu_{10}$  allein nichts über die Konvergenz gesagt werden. Erst eine  $P_7$ -Rechnung, die allerdings sehr aufwendig ist, kann die Vermutung bestätigen, daß die  $P_5$ -Näherung den tatsächlichen Flußverlauf bereits genügend genau wiedergibt.

Allerdings hat eine Reihe von exakt lösbaren Testproblemen gezeigt, daß eine  $P_5$ -Rechnung die wirklichen Verhältnisse gut beschreibt, siehe [6]. Außerdem ist vom physikalischen Standpunkt aus zu sagen, daß selten den experimentell bestimmten Wirkungsquerschnitten ein Fehler von weniger als 10% anhaftet, so daß also eine  $P_7$ -Approximation die Genauigkeit überfordern würde.

Das gilt besonders für den f-Faktor. Bei einem Zweischichtenproblem berechnet er sich aus

$$\frac{1}{f} = 1 + \frac{V_M \Sigma_M^a}{V_U \Sigma_U^a} \cdot \frac{\bar{\phi}_M}{\bar{\phi}_u} .$$

$V_M, \Sigma_M^a$  sind das Volumen und der Absorptionsquerschnitt des Moderators,  
 $V_U, \Sigma_U^a$  die entsprechenden Größen für Uran. Für den FR 2 ist

$$\frac{V_M}{V_U} = 34,254, \quad \frac{\Sigma_M^a}{\Sigma_U^a} = 2,2346 \cdot 10^{-4}.$$

Dieses extrem kleine Verhältnis der Wirkungsquerschnitte hat zur Folge, daß der f-Faktor sich von Näherung zu Näherung nur wenig ändert: von  $P_1$  zu  $P_3$  um 0,17%, von  $P_3$  zu  $P_5$  um 0,05%. Der f-Faktor nach  $P_5$  ist nur um 0,3% kleiner als der Wert der Diffusionstheorie. Daher können z.B. sämtliche Optimalisierungsprobleme für Reaktoren hinsichtlich f zunächst diffusionstheoretisch, besser noch mit einer  $P_1$ -Approximation, gerechnet werden. Erst mit den ausgewählten Parametern lohnt sich dann zur genaueren Untersuchung der Flußverhältnisse eine höhere  $P_N$ -Rechnung.

#### b.) Die $S_N$ -Lösungen

Wenn wir die  $S_N$ -Flußkurven der Abb. 1 betrachten, so zeigt sich, daß gegenüber den  $P_N$ -Kurven doch zum Teil erhebliche Abweichungen auftreten. Die punktweise Berechnung des Flusses scheint, jedenfalls in dieser Näherung, die physikalischen Verhältnisse etwas besser wiederzugeben als der analytisch festliegende Verlauf des  $P_N$ -Flusses. Wegen der schwachen Absorption im Moderator ( $\Sigma_a = 8 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^{-1}$ ) muß nämlich der Flußabfall in der Nähe des Uranstabes praktisch innerhalb einer freien Weglänge ( $l_M = 2,4 \text{ cm}$ ) erfolgen, was sowohl bei  $S_2$  wie  $S_4$  gut erfüllt ist. Es ist zu erkennen, daß die Abweichungen  $S_4$ - $P_5$  geringer sind als  $S_2$ - $P_3$ , so daß zu erwarten ist, daß in höherer Ordnung ( $P_7$ - $S_6$ ) die Kurven eng benachbart sind, wie es natürlich auch sein muß. Das Verhältnis  $\bar{\phi}_M/\bar{\phi}_U$  ist z.B. bei  $S_2$  um 1,8% größer als bei  $P_3$ , bei  $S_4$  nur noch um 0,9% größer als bei  $P_5$ . Für den f-Faktor fallen diese Unterschiede nicht ins Gewicht;  $f_{S_2}$  ist um 0,03% kleiner als  $f_{P_3}$ ,  $f_{S_4} < f_{P_5}$  um 0,02%.

Eine Entscheidung über die Qualität der beiden Näherungsverfahren zur Flußberechnung kann schließlich nur das Experiment liefern. Dabei ist aber sicherlich zu erwarten, daß Meßfehler und die Unsicherheit in der Kenntnis der Wirkungsquerschnitte wohl kaum eine eindeutige Zuordnung möglich machen werden.

### 3. Das Fünfmedienproblem

Einen Vergleich des nach  $P_3$  berechneten Flusses der fünfschichtigen FR 2-Zelle mit dem Fluß der vereinfachten Zweimedienzelle gibt Tab. 2 und Abb. 2 (Normierung auf gleichen mittleren Uranfluß).

Tab. 2: Vergleich der Fünf- und Zweimedienzelle nach  $P_3$  ( $P_5$ ).

Zelle	$\bar{\varphi}_{Al}^{(1)}$ d=0,1cm	$\bar{\varphi}_{D_2O}^{(1)}$ d=0,4cm	$\bar{\varphi}_{Al}^{(2)}$ d=0,15cm	$\bar{\varphi}_{D_2O}^{(2)}$ d=7,25cm	$\bar{\varphi}_M$	$\bar{\varphi}_M/\bar{\varphi}_U$	f
Fünf Schichten $P_3$	1,6995	1,8427	1,9706	2,7565	2,7308	2,0790	0,9642
Zwei Schichten $P_3$	1,7012	1,8662	2,0127	2,7825	2,7568	2,1158	0,9635
Zwei Schichten $P_5$	1,8202	2,0098	2,1710	2,9455	2,9193	2,1836	0,9620

Beim Zweischichtenproblem ist stets das Aluminium durch  $D_2O$  ersetzt. Ferner ist ( $V =$  Zellvolumen)

$$\bar{\varphi}_M = \frac{V_{Al}^{(1)}}{V} \bar{\varphi}_{Al}^{(1)} + \frac{V_{D_2O}^{(1)}}{V} \bar{\varphi}_{D_2O}^{(1)} + \frac{V_{Al}^{(2)}}{V} \bar{\varphi}_{Al}^{(2)} + \frac{V_{D_2O}^{(2)}}{V} \bar{\varphi}_{D_2O}^{(2)}$$

Der f-Faktor berechnet sich jetzt aus

$$\frac{1}{f} = 1 + \frac{\sum_{Al}^a (V_{Al}^{(1)} \bar{\varphi}_{Al}^{(1)} + V_{Al}^{(2)} \bar{\varphi}_{Al}^{(2)}) + \sum_{D_2O}^a (V_{D_2O}^{(1)} \bar{\varphi}_{D_2O}^{(1)} + V_{D_2O}^{(2)} \bar{\varphi}_{D_2O}^{(2)})}{\sum_U^a V_U \bar{\varphi}_U}$$

Es ergibt sich eine maximale Flußabweichung von 0,4% am Führungsrohr. Wegen der großen freien Weglänge von 10 cm bleibt ein Neutron praktisch durch die millimeterdicken Aluminiumschichten unbeeinflusst. Das zeigt auch der dort nahezu horizontale Flußverlauf. Man könnte demnach eine weit bessere Approximation als durch die Zweimedienzelle bekommen, wenn man statt der Aluminiumschichten einfach Luftspalte nimmt. Jedoch ist das im Rahmen der  $P_N$ -Theorie genau so aufwendig wie die direkte Behandlung des

Problems; dagegen kann man sich relativ schnell die Zweimedienwerte beschaffen. Für den f-Faktor macht das bei  $P_3$  einen Fehler von 0,07% aus, ist also vernachlässigbar klein.

Die entsprechende Berechnung von f nach  $P_5$  wird gegenüber der genauen Untersuchung der Fünfmedienzelle einen etwas größeren Fehler aufweisen als der von 0,07% bei  $P_3$ , da die Aluminiumschichten in den Bereich des steileren Anstiegs der  $P_5$ -Kurve fallen, an dem fast horizontalen Flußverlauf durch das Aluminium dagegen nichts geändert wird. Doch wird dieser Fehler kaum größer sein als 0,1%, so daß wir erhalten

$$\underline{f_{P_5}} = 0,9630 \quad .$$

Dieser Wert unterscheidet sich von dem diffusionstheoretisch berechneten  $f_D = 0,9690$  um 0.6%.

Aus den Ergebnissen in der Zweimedienzelle kann man schließen, daß eine  $S_N$ -Berechnung für den f-Faktor keine neuen Werte liefern wird.

Anhang

A. Die Transfermatrizen in der  $P_N$ -Approximation und die zu ihrer Berechnung notwendigen Größen.

1. Die Transfermatrix für  $P_1$

$$\underline{N} = \begin{pmatrix} N_{00} \\ N_{11} \end{pmatrix} \quad \underline{L} = \begin{pmatrix} B_{10} \\ C_{10} \end{pmatrix} \quad x = \frac{r}{l}$$

$$\underline{O} = \begin{pmatrix} I_0(v_{00}x) & K_0(v_{10}x) \\ G_{10}(v_{10}x) & -G_{10}(v_{10})K_1(v_{10}x) \end{pmatrix}$$

2. Die Transfermatrix für  $P_3$

$$\underline{N} = \begin{pmatrix} N_{00} \\ N_{11} \\ N_{20} \\ N_{22} \\ N_{31} \\ N_{33} \end{pmatrix} \quad \underline{L} = \begin{pmatrix} B_{10} \\ B_{20} \\ B_{12} \\ C_{10} \\ C_{20} \\ C_{12} \end{pmatrix}$$

Die Matrix geben wir spaltenweise an:

1. Spalte:

$$\begin{aligned} & I_0(v_{10}x) \\ & G_{10}(v_{10})I_1(v_{10}x) \\ & \frac{1}{4} G_{20}(v_{10})I_0(v_{10}x) \\ & \frac{3}{4} G_{20}(v_{10})I_2(v_{10}x) \\ & \frac{3}{8} G_{30}(v_{10})I_1(v_{10}x) \\ & \frac{5}{8} G_{30}(v_{10})I_3(v_{10}x) \end{aligned}$$

2. Spalte:

Erhält man aus der ersten Spalte, wenn man  $v_{10}$  durch  $v_{20}$  ersetzt.



3. Spalte:

$$\begin{aligned}
 & 0 \\
 & 0 \\
 & -\frac{1}{2} I_0(\sqrt{7}x) \\
 & \frac{1}{2} I_2(\sqrt{7}x) \\
 & \frac{5}{4\sqrt{7}} I_1(\sqrt{7}x) \\
 & -\frac{5}{4\sqrt{7}} I_3(\sqrt{7}x)
 \end{aligned}$$

4. Spalte:

$$\begin{aligned}
 & K_0(v_{10}x) \\
 & -G_{10}(v_{10})K_1(v_{10}x) \\
 & \frac{1}{4} G_{20}(v_{10})K_0(v_{10}x) \\
 & \frac{3}{4} G_2(v_{10})K_2(v_{10}x) \\
 & -\frac{3}{8} G_{30}(v_{10})K_1(v_{10}x) \\
 & -\frac{5}{8} G_{30}(v_{10})K_3(v_{10}x)
 \end{aligned}$$

5. Spalte: Erhält man aus der  
4. Spalte, wenn man  
 $v_{10}$  durch  $v_{20}$  er-  
setzt.

6. Spalte:

$$\begin{aligned}
 & 0 \\
 & 0 \\
 & -\frac{1}{2} K_0(\sqrt{7}x) \\
 & \frac{1}{2} K_2(\sqrt{7}x) \\
 & -\frac{5}{4\sqrt{7}} K_1(\sqrt{7}x) \\
 & \frac{5}{4\sqrt{7}} K_3(\sqrt{7}x)
 \end{aligned}$$

3. Die Transfermatrix für  $P_5$

Die 12 Komponenten des Vektors  $\Psi$  sind:

$$\Psi_{00}, \Psi_{11}, \Psi_{20}, \Psi_{22}, \Psi_{31}, \Psi_{33}, \Psi_{40}, \Psi_{42}, \Psi_{44}, \Psi_{51}, \Psi_{53}, \Psi_{55}$$

Der Vektor  $\mathcal{B}$  hat entsprechend die Komponenten:

$$B_{10}, B_{20}, B_{30}, B_{12}, B_{22}, B_{14}, C_{10}, C_{20}, C_{30}, C_{12}, C_{22}, C_{14}$$

Matrix  $\mathcal{A}$ :

1. Spalte:

$$\begin{array}{ccc}
 I_0(v_{10}x) & \frac{3}{8} G_{30}(v_{10}) I_1(v_{10}x) & \frac{35}{64} G_{40}(v_{10}) I_4(v_{10}x) \\
 \downarrow \left( \begin{array}{l} G_{10}(v_{10}) I_1(v_{10}x) \\ \frac{1}{4} G_{20}(v_{10}) I_0(v_{10}x) \\ \frac{3}{4} G_{20}(v_{10}) I_2(v_{10}x) \end{array} \right) & \downarrow \left( \begin{array}{l} \frac{5}{8} G_{30}(v_{10}) I_3(v_{10}x) \\ \frac{9}{64} G_{40}(v_{10}) I_0(v_{10}x) \\ \frac{5}{16} G_{40}(v_{10}) I_2(v_{10}x) \end{array} \right) & \downarrow \left( \begin{array}{l} \frac{15}{64} G_{50}(v_{10}) I_1(v_{10}x) \\ \frac{35}{128} G_{50}(v_{10}) I_3(v_{10}x) \\ \frac{63}{128} G_{50}(v_{10}) I_5(v_{10}x) \end{array} \right)
 \end{array}$$

2. Spalte: Erhält man aus der 1. Spalte, wenn man  $v_{10}$  durch  $v_{20}$  ersetzt.

3. Spalte: Erhält man aus der 1. Spalte, wenn man  $v_{10}$  durch  $v_{30}$  ersetzt.

$$\begin{array}{l}
 \text{4. Spalte:} \quad 0 \qquad -\frac{1}{4} G_{32}(v_{12}) I_1(v_{12}x) \qquad \frac{7}{48} G_{42}(v_{12}) I_4(v_{12}x) \\
 \qquad \qquad \qquad 0 \qquad \frac{1}{4} G_{32}(v_{12}) I_3(v_{12}x) \qquad -\frac{1}{16} G_{52}(v_{12}) I_1(v_{12}x) \\
 \qquad \qquad \qquad -\frac{1}{2} I_0(v_{12}x) \qquad -\frac{1}{16} G_{42}(v_{12}) I_0(v_{12}x) \qquad -\frac{1}{32} G_{52}(v_{12}) I_3(v_{12}x) \\
 \qquad \qquad \qquad \frac{1}{2} I_2(v_{12}x) \qquad -\frac{1}{12} G_{42}(v_{12}) I_2(v_{12}x) \qquad \frac{3}{32} G_{52}(v_{12}) I_5(v_{12}x)
 \end{array}$$

5. Spalte: Wie 4. Spalte mit  $v_{22}$  statt  $v_{12}$

$$\begin{array}{l}
 \text{6. Spalte:} \quad 0 \qquad \qquad \qquad 0 \qquad \qquad \qquad \frac{1}{8} I_4(\sqrt{11}x) \\
 \qquad \qquad \qquad 0 \qquad \qquad \qquad 0 \qquad \qquad \qquad \frac{1}{8} G_{54}(\sqrt{11}) I_1(\sqrt{11}x) \\
 \qquad \qquad \qquad 0 \qquad \qquad \qquad \frac{3}{8} I_0(\sqrt{11}x) \qquad -\frac{3}{16} G_{54}(\sqrt{11}) I_3(\sqrt{11}x) \\
 \qquad \qquad \qquad 0 \qquad \qquad \qquad -\frac{1}{2} I_2(\sqrt{11}x) \qquad \frac{1}{16} G_{54}(\sqrt{11}) I_5(\sqrt{11}x)
 \end{array}$$

$$\begin{array}{l}
 \text{7. Spalte:} \quad K_0(v_{10}x) \qquad -\frac{3}{8} G_{30}(v_{10}) K_1(v_{10}x) \qquad \frac{35}{64} G_{40}(v_{10}) K_4(v_{10}x) \\
 \qquad \qquad \qquad -G_{10}(v_{10}) K_1(v_{10}x) \qquad -\frac{5}{8} G_{30}(v_{10}) K_3(v_{10}x) \qquad -\frac{15}{64} G_{50}(v_{10}) K_1(v_{10}x) \\
 \qquad \qquad \qquad \frac{1}{4} G_{20}(v_{10}) K_0(v_{10}x) \qquad \frac{9}{64} G_{40}(v_{10}) K_0(v_{10}x) \qquad -\frac{35}{128} G_{50}(v_{10}) K_3(v_{10}x) \\
 \qquad \qquad \qquad \frac{3}{4} G_{20}(v_{10}) K_2(v_{10}x) \qquad \frac{5}{16} G_{40}(v_{10}) K_2(v_{10}x) \qquad -\frac{63}{128} G_{50}(v_{10}) K_5(v_{10}x)
 \end{array}$$

8. Spalte: Wie 7. Spalte mit  $v_{20}$  statt  $v_{10}$ .

9. Spalte: Wie 7. Spalte mit  $v_{30}$  statt  $v_{10}$ .

$$\begin{array}{l}
 \underline{10. \text{ Spalte:}} \quad 0 \quad \frac{1}{4} G_{32}(v_{12})K_1(v_{12}x) \quad \frac{7}{48} G_{42}(v_{12})K_4(v_{12}x) \\
 \quad \quad \quad 0 \quad -\frac{1}{4} G_{32}(v_{12})K_3(v_{12}x) \quad \frac{1}{16} G_{52}(v_{12})K_1(v_{12}x) \\
 \quad \quad -\frac{1}{2} K_0(v_{12}x) \quad -\frac{1}{16} G_{42}(v_{12})K_0(v_{12}x) \quad \frac{1}{32} G_{52}(v_{12})K_3(v_{12}x) \\
 \quad \quad \frac{1}{2} K_2(v_{12}x) \quad -\frac{1}{12} G_{42}(v_{12})K_2(v_{12}x) \quad -\frac{3}{32} G_{52}(v_{12})K_5(v_{12}x)
 \end{array}$$

11. Spalte: Wie 10. Spalte mit  $v_{22}$  statt  $v_{12}$ .

$$\begin{array}{l}
 \underline{12. \text{ Spalte:}} \quad 0 \quad 0 \quad \frac{1}{8} K_4(\sqrt{11}x) \\
 \quad \quad \quad 0 \quad 0 \quad -\frac{1}{8} G_{54}(\sqrt{11})K_1(\sqrt{11}x) \\
 \quad \quad \quad 0 \quad \frac{3}{8} K_0(\sqrt{11}x) \quad \frac{3}{16} G_{54}(\sqrt{11})K_3(\sqrt{11}x) \\
 \quad \quad \quad 0 \quad -\frac{1}{2} K_2(\sqrt{11}x) \quad -\frac{1}{16} G_{54}(\sqrt{11})K_5(\sqrt{11}x)
 \end{array}$$

4. Die Funktionen  $G_{nk}(v)$  ( $a = 1-c = \frac{2}{\Sigma} a$ ).

$$G_{00} = 1 ; \quad G_{10} = -\frac{a}{v}$$

$$G_{20} = \frac{3}{2} a \cdot \frac{1}{v^2} - \frac{1}{2}$$

$$G_{30} = -\frac{5a}{2} \cdot \frac{1}{v^3} + \frac{5+4a}{6} \cdot \frac{1}{v}$$

$$G_{40} = \frac{35a}{8} \cdot \frac{1}{v^4} - \frac{35+55a}{24} \cdot \frac{1}{v^2} + \frac{3}{8}$$

$$G_{50} = \frac{63a}{8} \cdot \frac{1}{v^5} + \frac{21+49a}{8} \cdot \frac{1}{v^3} - \frac{161+64a}{120} \cdot \frac{1}{v}$$

$$G_{60} = \frac{231a}{16} \cdot \frac{1}{v^6} - \frac{77+238a}{16} \cdot \frac{1}{v^4} + \frac{294+231a}{80} \cdot \frac{1}{v^2} - \frac{5}{16}$$

$$G_{32}(v_{12}) = -3,473732 ; \quad G_{42}(v_{12}) = 5,946772$$

$$G_{32}(v_{22}) = -1,252814 ; \quad G_{52}(v_{22}) = -1,401320$$

$$G_{52}(v_{12}) = -5,447038 ;$$

$$G_{54}(v_{14}) = G_{54}(\sqrt{11}) = -2,713602$$

$$G_{52}(v_{22}) = 3,558984$$

5. Die positiven Nullstellen  $v_{jo}$  von  $G_{N+1,0}(v) = 0$  für die in III,1 angegebenen Wirkungsquerschnitte.

a)  $G_{20} = 0$

Uran:  $v_{10} = 1,201499$

D<sub>2</sub>O:  $v_{10} = 2,4 \cdot 10^{-2}$

Al:  $v_{10} = 0,647707$

b)  $G_{40} = 0$

Uran:  $v_{10} = 9,776361 \cdot 10^{-1}$

$v_{20} = 2,423589$

D<sub>2</sub>O:  $v_{10} = 2,39981567 \cdot 10^{-2}$

$v_{20} = 1,972178$

Al:  $v_{10} = 6,109999 \cdot 10^{-1}$

$v_{20} = 2,090489$

c)  $G_{60} = 0$

Uran:  $v_{10} = 9,558314 \cdot 10^{-1}$

$v_{20} = 1,343129$

$v_{30} = 2,672694$

D<sub>2</sub>O:  $v_{10} = 2,399815673933 \cdot 10^{-2}$

$v_{20} = 1,225237$

$v_{30} = 3,203122$

Al:  $v_{10} = 6,105837 \cdot 10^{-1}$

$v_{20} = 1,248298$

$v_{30} = 3,334825$

Die Funktionen  $G_{no}(v_{10})$  für D<sub>2</sub>O müssen durch eine Reihenentwicklung um die Nullstelle  $v_{10}$  bestimmt werden. Bei P<sub>5</sub> muß  $v_{10}$  mindestens auf 19 Dezimalstellen errechnet werden.

d.) Die materialunabhängigen Wurzeln.

$$\sqrt{12} = 1,439\ 374$$

$$\sqrt{22} = 3,991\ 015$$

$$\sqrt{14} = \sqrt{11} = 3,316\ 625$$

B. Die positiven Nullstellen der Legendre Polynome  $P_n(x) = 0$   
und die zugehörigen Gauß-Gewichte  $w_1$ .

1.)  $P_2(x) = 0$

$$x_1 = 0,5773\ 5027 \qquad w_1 = 1$$

$$\sqrt{1-x_1^2} = \lambda_1 = 0,8164\ 9658$$

2.)  $P_4 = 0$

$$x_1 = 0,3399\ 8104 ; \lambda_1 = 0,9404\ 3229 ; w_1 = 0,6521\ 4515$$

$$x_2 = 0,8611\ 3631 ; \lambda_2 = 0,5083\ 7413 ; w_2 = 0,3478\ 5485$$

3.)  $P_6 = 0$

$$x_1 = 0,2386\ 1919 ; \lambda_1 = 0,9711\ 1322 ; w_1 = 0,4679\ 1313$$

$$x_2 = 0,6612\ 0939 ; \lambda_2 = 0,7502\ 0140 ; w_2 = 0,3607\ 6157$$

$$x_3 = 0,9324\ 6951 ; \lambda_3 = 0,3612\ 4868 ; w_3 = 0,1713\ 2449$$

4.)  $P_8 = 0$

$$x_1 = 0,1834\ 3464 ; \lambda_1 = 0,9830\ 3191 ; w_1 = 0,3626\ 8378$$

$$x_2 = 0,5255\ 3241 ; \lambda_2 = 0,8507\ 7358 ; w_2 = 0,3137\ 0665$$

$$x_3 = 0,7966\ 6648 ; \lambda_3 = 0,6044\ 1916 ; w_3 = 0,2223\ 8103$$

$$x_4 = 0,9602\ 8986 ; \lambda_4 = 0,2790\ 0429 ; w_4 = 0,1012\ 2854$$

Schrifttum

- [ 1 ] B.Davison: Spherical Harmonics Method for Neutron-Transport Problems on Cylindrical Geometry. Canadian J. Physics 35 (1957) S.576/93 und AECL 438.
- [ 2 ] B.G.Carlson: Solution of the Transport Equation by  $S_n$  Approximations. LA 1891 (1955).
- [ 3 ] W.Magnus u. F.Oberhettinger: Formeln und Sätze für die speziellen Funktionen der Mathematischen Physik. Berlin 1948.
- [ 4 ] E.T.Whittaker u. G.N.Watson: A Course of Modern Analysis. Cambridge 1952.
- [ 5 ] B.Davison: Neutron Transport Theory. Oxford 1957
- [ 6 ] C.Mark: The Spherical Harmonics Method. CRT-338 (1957).
- [ 7 ] A.Weinberg u. E.Wigner: The Physical Theory of Neutron Chain Reactors. Chicago 1958.
- [ 8 ] B.G.Carlson u. I.G.Bell: Solution of the Transport Equation by the  $S_N$ -Method. Sec.Int.Conf. Peace f.Uses of Atom. En., 1958, 15/P/2386.
- [ 9 ] A.D.Booth: Numerical Methods. London 1957.
- [ 10 ] W.B.Löwenstein u. D.Okrent: The Physics of Fast Power Reactors. Sec.Int.Conf. Peacef.Uses of Atom.Eng., 1958, 15/P/637.
- [ 11 ] S.Glasstone u. M.C.Edlund: The Elements of Nuclear Reactor Theory. New York 1957.

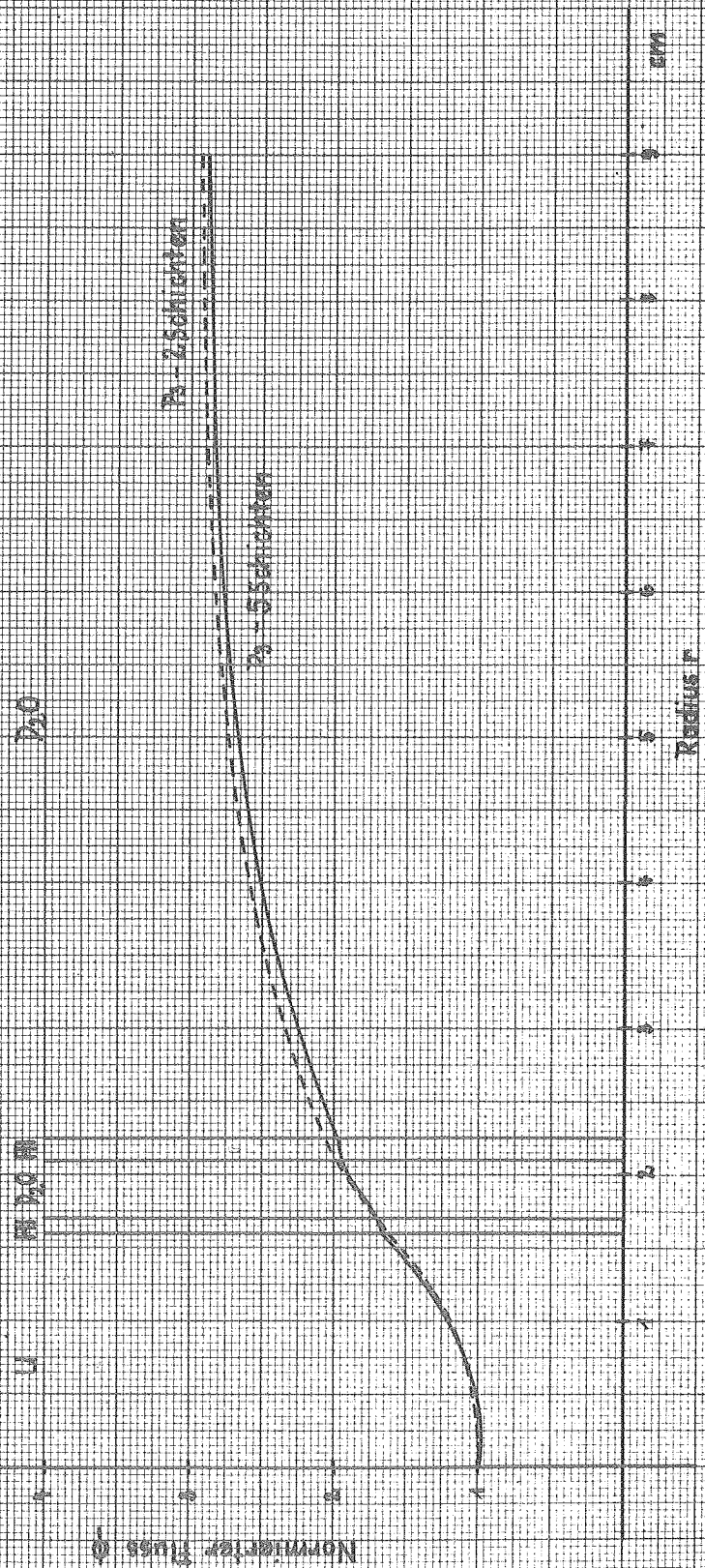


Abb.2 Flussverlauf in der 5- und 2-schichtigen Wigner-Seitz-Zelle nach  $P_2$

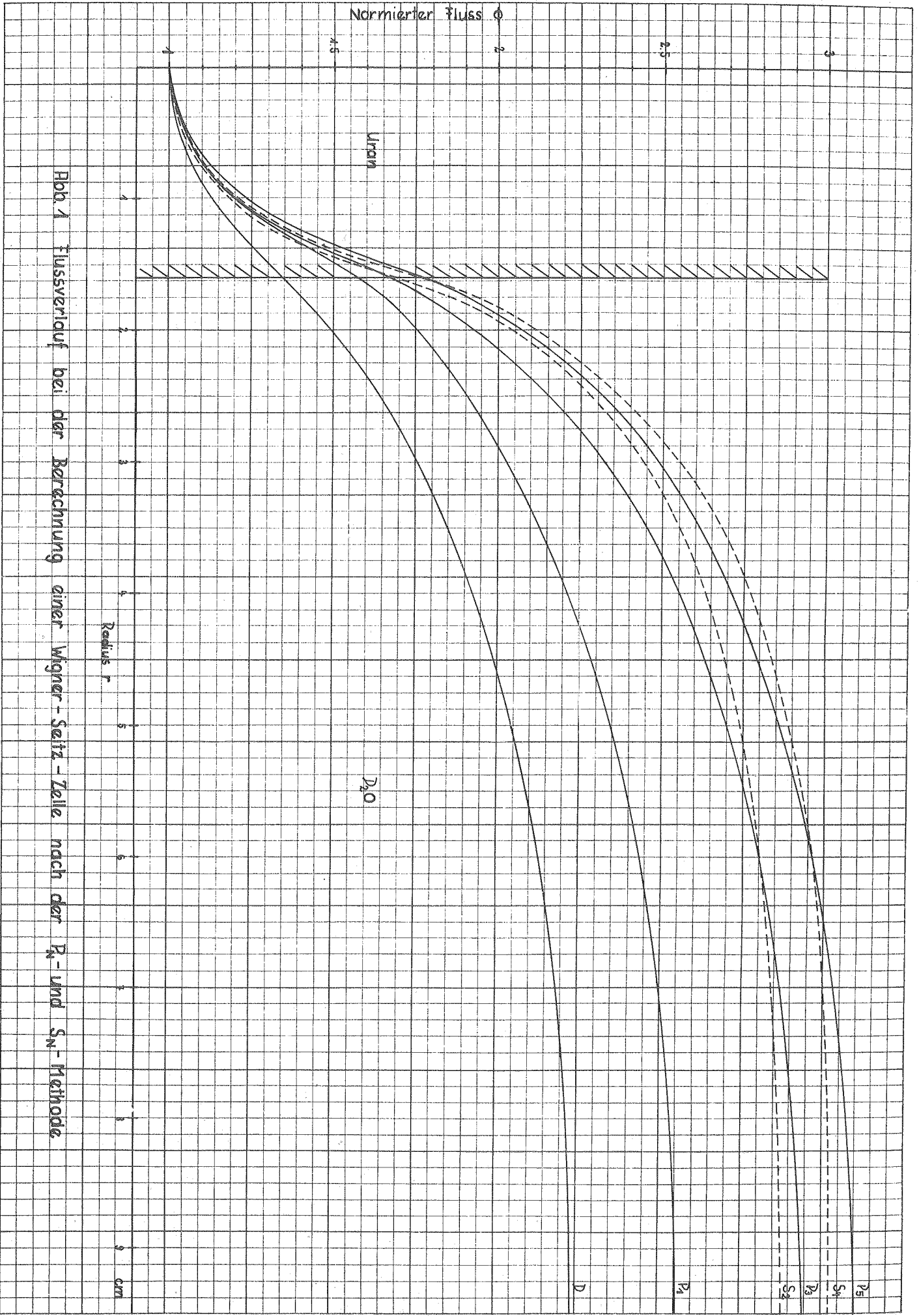


Abb. 1 Flussverlauf bei der Berechnung einer Wigner-Seitz-Zelle nach der  $R_N$ - und  $S_N$ -Methode