

**KERNFORSCHUNGSZENTRUM
KARLSRUHE**

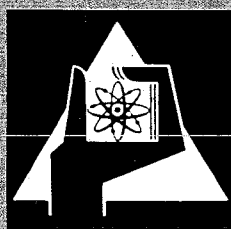
März 1972

KFK 1576

Institut für Neutronenphysik und Reaktortechnik
Projekt Schneller Brüter

**Die NUSYS-Phasen 41501 – 41505
Flächentreue Approximation von Treppenfunktionen
und ihre Anwendung in nuklearen Berechnungen
(Iteratives REMO-Verfahren)**

zusammengestellt von
D. Thiem



GESELLSCHAFT FÜR KERNFORSCHUNG M. B. H.
KARLSRUHE

Als Manuskript vervielfältigt

Für diesen Bericht behalten wir uns alle Rechte vor

GESELLSCHAFT FÜR KERNFORSCHUNG M. B. H.
KARLSRUHE

KERNFORSCHUNGSZENTRUM KARLSRUHE

März 1972

KFK 1576

Institut für Neutronenphysik und Reaktortechnik
Projekt Schneller Brüter

Die NUSYS-Phasen 41501 - 41505

Flächentreue Approximation von Treppenfunktionen und ihre Anwendung
in nuklearen Berechnungen (Iteratives REMO-Verfahren)

zusammengestellt von D. Thiem

mit Beiträgen von

K. Böhnel

E. Stein

D. Thiem

G. Willerding

Gesellschaft für Kernforschung mbH., Karlsruhe

Kurzfassung

Die sogenannte REMO-Methode wird im Karlsruher nuklearen Programmsystem NUSYS benutzt zur Verbesserung der mit dem bekannten σ_0 -Verfahren bestimmten effektiven bremselastischen Wirkungsquerschnitte für Multigruppenrechnungen (z.B. 26 Gruppen). Bei der Bestimmung der verbesserten Gruppenkonstanten für die elastische Ausstreuung benötigt man als Wichtungsspektrum eine geeignete Vielgruppenstoßdichte (z.B. 208 Gruppen). Die mit den verbesserten Gruppenkonstanten berechnete neue Multigruppenstoßdichte kann zu einer weiteren iterativen Verbesserung der Gruppenkonstanten und Spektren benutzt werden. Dabei ist es notwendig die Multigruppenstoßdichte durch Glättung und Neueinteilung in energetische Feingruppen in eine Vielgruppenstoßdichte überzuführen. Der vorliegende Bericht beschreibt einige dafür entwickelte NUSYS-Programme und gibt eine Benutzeranleitung zur iterativen REMO-Methode.

Abstract

The so-called REMO-Method is used in the Karlsruhe Nuclear Code System NUSYS for the correction of the effective elastic removal multigroup constants, which are normally determined by the well-known σ_0 -concept. A suitable manygroup (e.g. 208 groups) collision density is needed as weighting function to generate the improved elastic removal group constants. The multigroup (e.g. 26 groups) collision density obtained when applying the improved group constants can be used for a further iterative improvement of the multigroup elastic removal constants and the corresponding neutron spectrum. To provide a new weighting function one has to modify the multigroup collision density in an appropriate manner to obtain a function with a manygroup structure. This is performed by smoothing the multigroup collision density and rearranging the result into the manygroup scheme. The present paper describes several NUSYS-Codes developed for this purpose and gives an instruction to the user for the application of the iterative REMO-Method.

11/11/2019

1. The first part of the question asks us to identify the type of reaction that occurs when a metal reacts with an acid. This is a displacement reaction. In a displacement reaction, a more reactive element displaces a less reactive element from its compound. In this case, the metal (zinc) is more reactive than hydrogen, so it displaces hydrogen from the acid (hydrochloric acid). The products are a metal salt (zinc chloride) and hydrogen gas.

2. The second part of the question asks us to write a balanced chemical equation for the reaction between zinc and hydrochloric acid. The unbalanced equation is:

$$\text{Zn} + \text{HCl} \rightarrow \text{ZnCl}_2 + \text{H}_2$$

To balance this equation, we need to ensure that the number of atoms of each element is the same on both sides of the equation. In this case, we need to balance the chlorine atoms. There are two chlorine atoms in zinc chloride, so we need two hydrochloric acid molecules. This gives us:

$$\text{Zn} + 2\text{HCl} \rightarrow \text{ZnCl}_2 + \text{H}_2$$

3. The third part of the question asks us to identify the type of reaction that occurs when a metal reacts with an acid. This is a displacement reaction. In a displacement reaction, a more reactive element displaces a less reactive element from its compound. In this case, the metal (zinc) is more reactive than hydrogen, so it displaces hydrogen from the acid (hydrochloric acid). The products are a metal salt (zinc chloride) and hydrogen gas.

4. The fourth part of the question asks us to write a balanced chemical equation for the reaction between zinc and hydrochloric acid. The unbalanced equation is:

$$\text{Zn} + \text{HCl} \rightarrow \text{ZnCl}_2 + \text{H}_2$$

To balance this equation, we need to ensure that the number of atoms of each element is the same on both sides of the equation. In this case, we need to balance the chlorine atoms. There are two chlorine atoms in zinc chloride, so we need two hydrochloric acid molecules. This gives us:

$$\text{Zn} + 2\text{HCl} \rightarrow \text{ZnCl}_2 + \text{H}_2$$

5. The fifth part of the question asks us to identify the type of reaction that occurs when a metal reacts with an acid. This is a displacement reaction. In a displacement reaction, a more reactive element displaces a less reactive element from its compound. In this case, the metal (zinc) is more reactive than hydrogen, so it displaces hydrogen from the acid (hydrochloric acid). The products are a metal salt (zinc chloride) and hydrogen gas.

6. The sixth part of the question asks us to write a balanced chemical equation for the reaction between zinc and hydrochloric acid. The unbalanced equation is:

$$\text{Zn} + \text{HCl} \rightarrow \text{ZnCl}_2 + \text{H}_2$$

To balance this equation, we need to ensure that the number of atoms of each element is the same on both sides of the equation. In this case, we need to balance the chlorine atoms. There are two chlorine atoms in zinc chloride, so we need two hydrochloric acid molecules. This gives us:

$$\text{Zn} + 2\text{HCl} \rightarrow \text{ZnCl}_2 + \text{H}_2$$

Inhalt:

1. Die REMO-Methode als Ausgangsproblem
 2. Das Problem des Flächenausgleichs; Prinzipien der Programmentwicklung
 3. Allgemeine Übersicht über die Aufgaben der einzelnen Programme 41501 - 41505 und ihr Zusammenwirken
 4. Programmbeschreibungen:
 - 4.1 Die NUSYS-Phasen 41501 und 41502
 - a) Die Treppenfunktion als Eingabegröße und die Definition verschiedener Bereiche
 - b) Erläuterungen zur Eingabebeschreibung
 - c) Bemerkungen zur Druckausgabe
 - d) Berechnung der Mittelwerte von $1/v$
 - e) Operationen im LILI-Feld
 - f) Datenstruktur der LILI-Blöcke
 - g) Eingabeüberprüfung und Fehlermeldungen
 - h) Erfahrungen beim Flächenausgleich
 - 4.2 Die NUSYS-Phase 41503-Sammelphase
 - 4.3 Die NUSYS-Phase 41504-Darstellungsphase
 - 4.4 Die NUSYS-Phase 41505-Umordnungsphase
 5. Benutzeranleitung zum iterativen REMO-Verfahren
 - 5.1 Phasenablauf der NUSYS-Rechnung
 - 5.2 Hinweise und Bemerkungen
 6. Literaturverzeichnis
- Anhang I: Eingabebeschreibungen
Anhang II: Programmtechnische Daten
Anhang III: Einige Abbildungen zur REMO-Methode

1. Einleitung: Die REMO-Methode als Ausgangsproblem

Mischungsabhängige Wirkungsquerschnitte werden im NUSYS-System aus den 26-Gruppen-Datensätzen nach dem σ_0 -Konzept berechnet. Diese Methode berücksichtigt nur die Resonanzselbstabschirmung, das heißt den Einfluß der Eigenresonanzen eines Isotops auf das Wichtungsspektrum bei der Berechnung der effektiven Wirkungsquerschnitte für dieses Isotop selbst. Innerhalb der Wichtungsgruppe wird hierbei der Einfluß der übrigen Mischungsisotope als von der Energie unabhängig betrachtet. Das ist eine relativ grobe Näherung insbesondere bei der Berechnung der elastischen Ausstreuquerschnitte (elastic removal). Hinzu kommt, daß in NUSYS zur Bestimmung des effektiven elastischen Ausstreuquerschnittes der Selbstabschirmfaktor des totalen elastischen Streuquerschnittes der ganzen Gruppe verwendet wird. Für genauere Rechnungen ersetzt man deshalb nachträglich die von der NUSYS-Phase 00446 erzeugten Querschnitte dieses Typs durch neu berechnete Werte, die aus differentiellen Wirkungsquerschnittsdaten und einem geeigneten Wichtungsspektrum in Energiefineinteilung bestimmt wurden. Man nennt dieses von Küsters und Metzneroth /1/ eingeführte Verfahren die REMO-Methode. Die Wahl des geeigneten Wichtungsspektrums spielt natürlich für die zu erzielende Verbesserung eine bedeutende Rolle /2, 10/. Das Mischungseigene Flußspektrum ist zunächst unbekannt und muß durch eine Anfangsnäherung ersetzt werden. Mit den verbesserten Querschnitten kann anschließend ein neues besseres Spektrum berechnet werden als zuvor mit den unkorrigierten Querschnitten des σ_0 -Konzepts. Auf diese Weise kann man durch sukzessives Einsetzen der jeweils neu berechneten Eigenspektren eine bedeutende Verbesserung der elastischen Ausstreuquerschnitte der Flußspektren und anderer nuklearer Parameter erreichen. Dieses Verfahren wird im folgenden als iterative REMO-Methode bezeichnet.

Aus rechentechnischen Gründen wendet man das REMO-Verfahren nur auf die ersten 14 Gruppen der 26-Gruppen-Skala an. Zur Feingruppen-Wichtung ist jede der 14 Makrogruppen in jeweils 14 gleichgroße Lethargieintervalle unterteilt. Man benötigt deshalb das Wichtungsspektrum in einer 196-Gruppen-Struktur. Bei der iterativen REMO-Methode teilt man daher das 14-Makrogruppen-Spektrum in ein 196 Mikrogrammen-Spektrum auf, wobei die Stoßrate innerhalb einer Makrogruppe erhalten bleiben muß. Diese Forderung führt zum Problem der flächentreuen Approximation einer Treppenfunktion durch eine glatte Kurve und deren Neuaufteilung und Integration in Untertreppen. Da die Flüsse benachbarter Energie-

gruppen über die Streuung stark miteinander verknüpft sind, erwartet man aus physikalischen Gründen, daß bei diesem Vorgehen der globale Verlauf der Stoßdichte recht gut approximiert werden kann. Denn auch beim Glättungsverfahren gehen neben dem Wert der Treppenfunktion einer bestimmten Makrogruppe die Werte der benachbarten Makrogruppen stark in die Bestimmung des Funktionsverlaufs der glatten Kurve in der betreffenden Makrogruppe ein. Viele inzwischen ausgeführte Rechnungen und Vergleiche mit dem 208-Gruppensystem KARCOS haben die Richtigkeit dieser Annahme bestätigt.

Die iterative REMO-Methode bedarf einer aufwendigen Datenverarbeitung. Um die Methode routinemäßig für Reaktorberechnungen einsetzen zu können, war ihre programmtechnische Automation notwendig. Darin ist eingeschlossen die datentechnische Überarbeitung des NUSYS-Programms 06780 (Erzeugung von Stoßraten) und der Phasen 01794/01796/01799 (Wichtung der elastischen Streuquerschnitte), wie auch die Entwicklung der neuen NUSYS-Phasen 41501 - 41505, die den Flächenausgleich, die Neuintegrationen der Mikrogruppen, den Datentransfer und die Datendarstellung betreffen. Der vorliegende Bericht dokumentiert die neuentwickelten Phasen und gibt schließlich eine formale Benutzeranleitung zur Gewinnung des REMO-Korrektur-Faktors für k_{eff} nach dem iterativen Verfahren. Dieser Bericht beschreibt nicht die mathematische Methode des Flächenausgleichs und nicht die Theorie der REMO-Methode. Auf Untersuchungen zur physikalischen Problematik des iterativen REMO-Verfahrens wird hingewiesen.

2. Das Problem des Flächenausgleichs; Prinzipien der Programmentwicklung; Spezielle Möglichkeiten

Die in der Einleitung geschilderte komplexe Aufgabe enthält als mathematischen Kern die Berechnung glatt verlaufender Ausgleichskurven über vorgegebene Treppenfunktionen unter der Bedingung, daß in jedem einzelnen Treppenintervall die Fläche unter der Ausgleichskurve gleich groß ist wie die Fläche unter der Treppenkurve.

Zur Lösung dieses Problems wurde ein von H. Späth entwickeltes und programmiertes Verfahren /3/ benutzt. Die hierbei erzielten Lösungen müssen nicht immer physikalisch sinnvoll sein, da das Problem eine Vielzahl von Lösungen zuläßt. Außerdem wird bei dem Glättungsprozess neben der eigentlichen Treppenkurve keine zu-

sätzliche physikalische Information verwendet wie z.B. über die Lage und Breite von Resonanzen. Deshalb sollte der Benutzer in die Lage versetzt werden das Resultat der Ausgleichsrechnung zu beurteilen und durch eine Veränderung der frei wählbaren Parameter in geeigneter Weise zu modifizieren. Die Automatisierung des REMO-Verfahrens wurde damit nicht nur zu einem Problem der Datenorganisation, sondern auch zu der eigenständigen Aufgabe ein für den Benutzer leicht zu bedienendes, gut kontrollierbares, variables NUSYS-Programm zu erstellen. In Erweiterung der ursprünglichen Aufgabe wurden die NUSYS-Phasen 41501 - 41505 deshalb zu einem kleinen System entwickelt, das es dem Benutzer ganz allgemein erlaubt, extern oder intern eingebare Treppenfunktionen unter dem Prinzip der Flächengleichheit zu glätten und Treppenfunktionen wie auch Ausgleichskurven in variabler Form darzustellen.

So ist es zum Beispiel möglich Flüsse, Spektren, adjungierte Flüsse und Reaktionsraten ohne große Mühen durch Treppen- oder glatte Kurven darzustellen und mit der Rechenmaschine zeichnen zu lassen.

Eine Integrationsroutine erlaubt es, die geglätteten Kurven zwischen beliebigen Intervallgrenzen zu integrieren (so zum Beispiel zur Gewinnung von Raten in einer anderen Gruppenstruktur). Weiterhin ermöglicht es eine Suchroutine die Intervallgrenzen so zu variieren, daß eine vorgegebene Flächengröße erreicht wird. Diese Möglichkeit benutzt man z.B. zur Berechnung der sogenannten mittleren Spaltenergie E_m

$$\left(\int_0^{E_m} \phi(E) \Sigma_f(E) dE \right) = 1/2 \int_0^{\infty} \phi(E) \Sigma_f(E) dE.$$

Ein spezieller Programmzweig gestattet außerdem die Berechnung mittlerer Neutronengeschwindigkeiten.

3. Übersicht über Aufgaben, Wirkungsweise und Zusammenspiel der einzelnen NUSYS-Phasen

Die Hauptphase 41501 übernimmt die zu verarbeitenden Treppenfunktionen aus LILI-Blöcken oder aus der externen Karteneingabe und bereitet sie für die Phase 41502 vor. Dort finden die eigentlichen Berechnungen statt. Die Ergebnisse werden nach 41501 zurückübertragen und in Druck oder Zeichnung ausgegeben. Ein- und Ausgangsdaten können auch intern von der Phase 41503 angesammelt und dann von 41504 in

vergleichender Form dargestellt werden. Die Speicher-Phase 41503 wird wahlweise von 41502 angelaufen. Die Phase 41505 schließlich ordnet die Daten verschiedener NUSYS-Blöcke um in einen neuen Block, der von der Hauptphase 41501 gelesen werden kann. Sie besitzt ebenso wie die Phase 41504 eine eigene externe Eingabe.

Das zur Neuberechnung der bremselastischen Querschnitte benötigte Feingruppen-Wichtungsspektrum wird unmittelbar nach dem Ausgleich in 41502 berechnet und im FL-Block an die Phase 01794 weitergegeben.

4. Programmbeschreibungen:

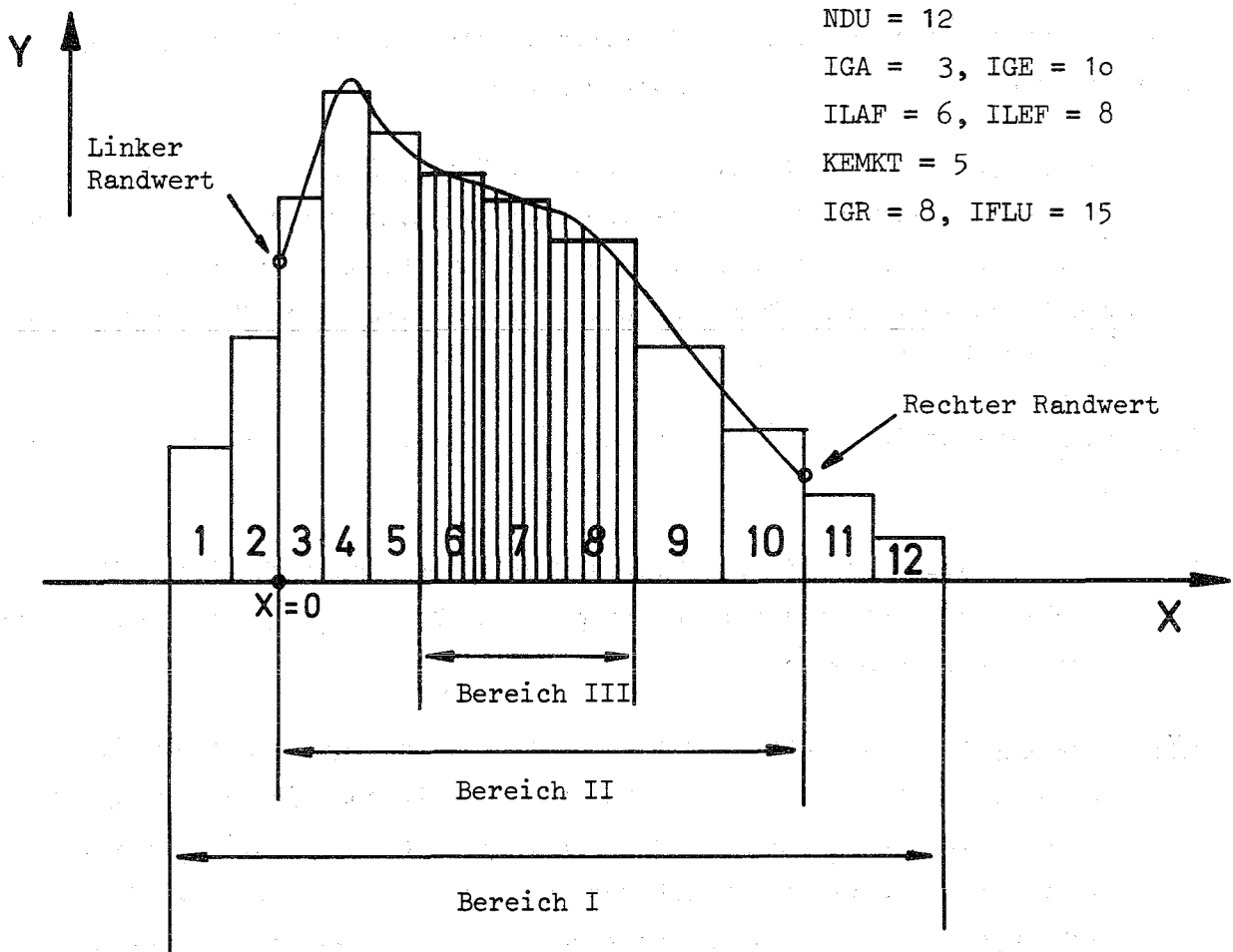
4.1 Die NUSYS-Phasen 41501 und 41502

Die Phase 41501 überprüft und verarbeitet die externen und internen Eingabedaten und gibt sie an das eigentliche Berechnungsprogramm 41502 über die Zwischendatenblöcke RES41 und RES42 weiter. Sie übernimmt auf dem gleichen Wege die Ergebnisdaten und stellt, wenn gefordert, aus den Teiltreppenflächen den LILI-Block FL zusammen (Wichtungsspektren für REMO-Programme).

a) Die Treppenfunktion als Eingabegröße und die Definition verschiedener Bereiche

Hierzu eine Beispiel-Skizze:

Beispiel-Skizze



NDU = 12
IGA = 3, IGE = 10
ILAF = 6, ILEF = 8
KEMKT = 5
IGR = 8, IFLU = 15

Bereich I: Eingabe: NDU Makrotreppen

Bereich II: Glättungsbereich (Ausgleichsbereich), die X-Achse beginnt an der linken Grenze der ersten Treppe des Glättungsbereiches.
Die Breite (das X-Intervall) jeder Treppe wird in KEMKT - gleichgroße Intervalle unterteilt. Die Funktionswerte an allen Intervallgrenzen und die Flächen aller Intervalle (Mikroflächen) werden berechnet.

Bereich III: Die Mikroflächen dieses Bereichs (Anzahl = IFLU) werden auf den FL-Block gebracht.

b) Erläuterungen zur Eingabebeschriftung

Die maschinenintern gespeicherte, vom Benutzer abrufbare Eingabebeschriftung ist in den Anhang I dieses Berichtes übernommen. Aus programmtechnischen Gründen ist sie kurzgefaßt. Zum besseren Verständnis der Eingabeparameter seien hier noch einige Erläuterungen gegeben.

C1: Der Programmaufruf erfolgt normal. Der Kernspeicherbedarf für Programm und System beträgt 110 K. Das Programm benötigt immer 2014-LILI-Feld-Worte für die Zwischendatenblöcke RES41 und RES42. Die Rechenzeit für die Behandlung einer Treppenfunktion mit 14 Treppenstufen beträgt auf der IBM 360/65 etwa 1 sec.

K2: Eingabeparameter KLF \neq 0: Löschung der Datenblöcke erfolgt am Programmende.

C6: Die Abszissenwerte (X) der Treppenfunktionen sind nicht über LILI-Blöcke einlesbar. Sie werden entweder von Karten eingelesen oder intern generiert (ABN-Skala).

C7: Randwerte: Für den ersten und letzten Abszissenwert des Ausgleichbereichs (Bereich II) müssen Ordinatenwerte (Treppenhöhen) vorgegeben werden. Sie können entweder eingelesen oder auch in variabler Weise vom Programm selbst generiert werden. Wenn durch die vorgewählte Berechnungsart ein negativer Randwert erzeugt werden sollte, versucht das Programm automatisch durch Anlaufen einer anderen Extrapolationsroutine einen neuen sinnvollen Randwert zu erhalten. Dies gilt jedoch nicht für die Spezialfälle 2 und 8.

Mikroflächen: Das Abszissenintervall jeder Makrotreppe wird in KEMKT-gleichgroße Mikrointervalle unterteilt und über jedem Mikrointervall die Fläche berechnet. Im Falle der REMO-Prozedur wird die X-Achse aus Lethargie-Intervallen gebildet. Die Makrogruppen 1 - 14 der ABN-Skala werden in jeweils 14 gleichgroße Lethargie-Mikrointervalle unterteilt.

Plot: Von jeder Treppenfunktion und ihrer Glättungskurve kann die Phase 41502 selbst eine Maschinenzeichnung herstellen. Sie soll dem Benutzer einen graphischen Eindruck über das Verhalten der Glättungskurve geben.

K13: Die Größen (E1, E2) haben nur Bedeutung im Falle der REMO-Prozedur. Sie stellen die obere und die untere Energiegrenze der ersten ABN-Gruppe dar und dienen zur Berechnung des linken Randwertes der Ausgleichskurve bei Extrapolation nach dem Watt-Spaltspektrum.

K15: Die Größe (Eo) wird benötigt, wenn die Abszisse logarithmische Werte besitzt, die Ausgabe der Abszisse aber in linearem Maßstab erfolgen soll (Eo = 10.5 MeV bei Lethargie-Achse der 26-Gruppen-ABN-Skala).

c) Bemerkungen zur Druckausgabe

Ausgegeben werden von 41501 zunächst alle direkten und alle aufbereiteten Eingabegrößen (wie z. B. die Flächen, die Höhen, die Abszissen und Randwerte der Treppenfunktion). Dann folgen die Startwerte und gewählten Schrittweiten des Iterationsmechanismus, schließlich die Ergebnisse der Ausgleichsrechnung.

Iteriert werden während des Ausgleichvorganges die Schnittpunkte der glatten analytischen Kurve mit den waagrechten Treppenstufen. Als Startwerte dienen zunächst die jeweiligen Mitten der Treppenintervalle. Die iterierten Endwerte sind in der Ausgabe mit dem Wort "Unbekannte" bezeichnet. Sie grenzen den Gültigkeitsbereich der Polynome dritten Grades ab. Das erste Polynom hat Gültigkeit vom Anfangswert der Abszisse bis zur ersten "Unbekannten", das letzte Polynom hat Gültigkeit von der letzten "Unbekannten" bis zum Endwert der Abszisse. Infolgedessen gibt es für N-Treppenstufen (N+1)-Polynome mit jeweils vier Polynomkoeffizienten.

Die absoluten und prozentualen Flächendifferenzen werden aus altem Wert (Treppe) minus neuem Wert (Fläche unter glatter Kurve) gebildet.

Flächendifferenzen wie auch die Amplitudenwerte der glatten Kurve werden im Späthschen Programm direkt aus Differenzenformeln des Ausgleichformalismus in einem früheren Programmstadium gebildet als die Polynomkoeffizienten.

Die Berechnung der Mikroflächen und ihre Überprüfung in der Subroutine PRUEFE erfolgt über die Polynome. Infolge Verschiedenartigkeit der Datenquellen und

Rechenformalismen und infolge der beschränkten Rechengenauigkeit können außer der Vorzeichenumkehr weitere Differenzen in den Ergebnissen der Späthschen Druckausgabe und der PRUEFE-Ausgabe auftreten.

d) Die Berechnung der Mittelwerte von $1/v$

Ist in K7 der Eingabeparameter IZEI = 2, so erfolgt eine zonenabhängige Mittelung der $1/v$ -Werte mit den geglätteten Spektren über jede Makrogruppe. In der Ausgabe erscheinen neben dem Ergebnis Angaben über Gruppen Grenzen und, sofern der Mischungsblock SIGMA existiert, die im Gruppensatz vorhandenen Werte, sowie deren Verhältnis zu den neuen mit den Eigenspektren gemittelten Werten. Der Block SIGMA selbst wird nicht verändert, da die Ergebnisse an Hand der gezeichneten Ausgleichskurven eventuell auf deren Sinngehalt hin überprüft werden müssen.

e) Operationen im LILI-Feld

Die Phase 41501 erzeugt immer die beiden Zwischendatenblöcke RES41 (468 Worte) und RES42 (1546 Worte). Das LILI-Feld muß also beim Aufruf von 41501 mindestens noch 2014 freie Worte besitzen. Am Programmende werden RES41 und RES42 automatisch gelöscht.

Bei der Generierung eines FL-Blockes (Mikroflächen für REMO-Prozedur) werden 1002 weitere LILI-Worte benötigt.

Bei programminternem Aufruf der Phase 41503 zur Speicherung der Daten im DAT43-Block muß für diesen Block zusätzlicher LILI-Speicher bereitgestellt werden, dessen Größe sich nach der Zahl der aufzunehmenden Daten richtet (siehe hierzu den Abschnitt 4.2).

Bei der Erzeugung des FL-Blockes wird folgendermaßen verfahren: Jeder 41501-Aufruf der externen NUSYS-Eingabe erzeugt höchstens einen FL-Block. Die Mikroflächen des Bereiches III werden, falls der Eingabeparameter ILAF ungleich null ist, in der Reihenfolge der gerechneten Treppenfunktionen nacheinander angeordnet. Die Gesamtzahl (NONZ) aller Mikroflächen im FL-Block ist auf 1000 beschränkt (Fehlermeldung bei Überschreiten).

In den Phasen 41501 und 41502 ist weiterhin das Prinzip verwirklicht, daß vor dem Schreiben eines neuen Blockes in das LILI-Feld alle früheren Blöcke gleichen Namens gelöscht werden mit Ausgabe einer anzeigenden Meldung. Von LILI können die Blöcke RKOMB, INTER oder INTAM gelesen werden, die in einer in Abschnitt (4.1 f) beschriebenen Datenstruktur die Flächen oder Höhen der auszugleichenden Treppenfunktionen enthalten.

f) Die Datenstruktur der LILI-Blöcke

RKOMB, INTER, INTAM: Die Struktur dieser drei Datenblöcke ist gleich. Jeder Datenblock enthält beliebig viele Unterblöcke. Jeder Unterblock enthält Kenndaten und die Werte einer Treppenfunktion oder Treppenfunktionsgruppe (das ist eine Aneinanderreihung mehrerer Treppenfunktionen, die sich durch gleiche Abszissenwerte auszeichnen).

Satz 1: NZGES Gesamtzahl der LILI-Worte (einschließlich NZGES) des Blockes
Dann folgen für jede Treppenfunktion oder Treppenfunktionsgruppe die Sätze:

Satz 2: K, NAMK, NZT, NGRT und NZT-mal

Satz 3: NGRT, (R(I,N), I = 1, NGRT)

Bedeutung der Größen von Satz 2 und Satz 3:

- K Anzahl der Worte eines Unterblockes $K = NZT * (NGRT+1) + 5$
- NAMK Kennzeichen für einen Unterblock (8-Byte α -Wort)
- NZT Anzahl der Treppenfunktionen innerhalb einer Treppenfunktionsgruppe (bzw. eines Unterblockes).
Das Vorzeichen von NZT identifiziert die R(I,N) als Flächen (positiv) oder als Höhen (negativ).
- NGRT Anzahl der Treppenstufen. NGRT entspricht dem Eingabeparameter NDU auf Karte 7 der Eingabe von 41501. Die Gleichheit beider Größen wird beim Lesen der Datenblöcke überprüft.
- R(I,N) ist die I-te Fläche oder Höhe der N-ten Treppenfunktion eines Unterblockes.
(I = 1, NGRT), (N = 1, NZT)

Der FL-Block: Er enthält einen einzigen Datensatz von der Form:

KG, NO, NONZ, (FLUFLA(I), I = 1, NONZ)

Bedeutung der Größen:

KG Anzahl der Blockdaten
 (einschließlich KG)

NO Anzahl der Mikrotreppen einer Treppenfunktion

NONZ Anzahl aller Mikrotreppenflächen des FL-Blockes

FLUFLA(I) das ist die I-te Mikrotreppenfläche des Blockes

Im FL-Block sind also NONZ/NO Spektren enthalten.

Zusatzbemerkung: Die Struktur des FL-Blockes wurde bereits bei der Programmierung des REMO-Programms NUSYS-Phase 01794 festgelegt.

g) Eingabeüberprüfung und Fehlermeldungen

Die Parameter von Karte 1, 5, 7 und 22 werden überprüft. Zusätzlich finden Kontrollen der Datenorganisation, der Datenverträglichkeit und des Programmablaufs statt. Alle Fehlermeldungen sind selbsterklärend.

h) Erfahrungen beim Flächenausgleich

Das in /3/ beschriebene Späthsche Glättungsverfahren eignet sich gut für Funktionen, deren Treppenbreiten nicht zu sehr variieren, und deren Verlauf keine allzugroßen Gradienten aufweist. Sind diese beiden Eigenschaften nur wenig ausgeprägt oder gar nicht vorhanden, dann können beim Ausgleich erhebliche Schwierigkeiten und Fehler auftreten. Die glatte Kurve erfüllt nicht mehr die Bedingung der Flächentreue und neigt zum Überschwingen.

Um in einem solchen Falle dennoch sinnvolle Werte zu erhalten, gibt es folgende Möglichkeiten:

- 1) Verkürzung des Glättungsbereiches II
- 2) Abänderung von Randwerten
- 3) Änderung der Startwerte

Die zweite und dritte Korrekturmöglichkeit wird vom Programm selbst versucht. H. Späth hat inzwischen ein neues Verfahren entwickelt /4, 5/ in dem die Schwächen des alten Verfahrens eliminiert sein sollen. Die neue Methode konnte in 41502 aus folgenden Gründen noch nicht angewandt werden: die Argumente im Programmaufruf der neuen Späthschen Subroutinen sind wesentlich anders, so daß ihr Einbau in 41501/02 eine weitgehende Neuprogrammierung erfordern würde, verbunden mit einem noch zu rechtfertigenden enormen Arbeitsaufwand. Über die Erfahrungen mit den Programmen 41501/02 innerhalb der REMO-Prozedur wird in Abschnitt (5.2) berichtet.

4.2 Die NUSYS-Phase 41503

Die Eingabevariable IZEI auf Karte 7 der Phase 41501 bestimmt den Aufruf der Datensammelroutine 41503 jedesmal nach der Bearbeitung einer Treppenfunktion von der Phase 41502 aus. 41503 besitzt keine äußere Eingabe. Die Phase übernimmt die signifikanten Daten jeder einzelnen Treppenfunktion und ihrer Glättungskurve aus den Zwischendatenblöcken RES⁴₁ und RES⁴₂ und ordnet sie in den Datenblock DAT⁴₃ unter einem Kennwort und einer laufenden Nummer ein. Der Block DAT⁴₃ wird beim ersten Aufruf neu erzeugt. Das Kennwort einer Treppenfunktion ist identisch mit der Eingabevariablen LAB auf Karte 7 in der Phase 41501. Alle Fehlermeldungen von 41503 sind selbsterklärend.

Der eigentliche Zweck der Phase 41503 ist es dem Programm 41504 die Daten der Treppenfunktionen in einem einzigen Datenpaket zuzuführen, um sie dort in vergleichender Darstellung maschinell aufzuzeichnen.

Struktur des DAT⁴₃-Blockes

Vorbemerkung: Die mit einem * versehenen Variablen sind 8-Byte α-Worte. Die Hinweise beziehen sich auf die Eingabevariablen der Hauptphase 41501. Mit Date ist ein 4 Byte-Wort zu verstehen.

Satz 1: NDA⁴₃ Gesamtzahl der Daten im Block (einschließlich von NDA⁴₃)

Satz 2: NDAT Gesamtzahl der Daten des Unterblockes (einschl. NDAT)

*BLO (Vgl. K5) } Namen des Unterblockes

*LAB (Vgl. K7)

NSA Anzahl der Sätze des Unterblockes (NSA = 3 * NZO + 6)

NUM Laufende Nummer bei Unterblöcken gleichen Namens

Satz 3: (IAD(I), IL(I), I = 1, NSA)

Relativadressen der Sätze und Satzlängen des Unterblockes

Satz 4: NDU, IGA, IGE, *NABN, NRL, NRR, ILAF, ILEF, KEMKT, *LET, IZEI, IPAR, INTEG, EO, NXD, IGR, JJ, IMIK, NZO

Eingabeparameter der Phase 41501 mit Ausnahme von

IGR = IGE - IGA + 1

JJ = Laufende Nummer der Treppenfunktion innerhalb einer Treppenfunktionsgruppe

IMIK = Anzahl der Ordinaten der Glättungskurve

= IGR * KEMKT - 1

Satz 5: (XD(I), I = 1, NXD)

Abszissenwerte der Treppenfunktion

Satz 6: (DU(I), I = 1, NDU)

Treppenbreiten

Satz 7: (XW(I), I = 1, IMIK)

Abszissenwerte der Glättungskurve

L = 7

Satz (L+1): (YD(I), I = 1, NDU) Treppenflächen

Satz (L+2): (YW(1), YW(IGR+2), JK) Randordinaten und Zonennummer

Satz (L+3): (YW(I), I = 1, IMIK) Ordinatenwerte der Glättungskurve

L = L+3

und Rücksprung bis L = NSA

Die Länge des DAT43-Blockes berechnet sich zu

$$NDA43 = \Sigma(NDAT) + 1$$

wobei $NDAT = (2 * NSA + NXD + NDU + IMIK + 28) + NZDA$

und $NZDA = NZO * (NDU + IMIK + 3)$

Bei jedem Aufruf von 41503 ist außerdem zu beachten, daß bei vorheriger Existenz des DAT43-Blockes auf LILI zum Verschieben des alten DAT43-Blockes ein neuer LILI-Feld-Bereich von der Länge des alten Blockes benötigt wird.

Der effektive Feldbedarf LXL beim Aufruf der Phase 41503 ist also

$$\text{LXL} = \text{NDA43 (alt)} + \text{NDAT (neu)}$$

Die Wiederholungskennziffer NUM wird automatisch bei Einordnung von Unterblöcken gleichen Namens erhöht. Dies ermöglicht die bequeme Datenaufzeichnung bei iterativen Programmabläufen innerhalb von NUSYS.

4.3 Die NUSYS-Phase 41504

Die Phase 41504 besitzt die Aufgabe, die im LILI-Block DAT43 angesammelten Daten der Treppenfunktionen auf dem Drucker mit Hilfe der Subroutine KURVE /6/ von S. Kleinheins oder auf dem Plotter mit Hilfe des Programms PLOPRO /7/ von C. Broeders graphisch darzustellen. Um die Abbildung möglichst zweckmäßig gestalten zu können sind die Eingabefunktionen von 41504 sehr variabel gehalten. So können zum Beispiel die einzelnen Funktionen normiert oder auch miteinander arithmetisch verknüpft werden.

Aus dem Bedürfnis der NUSYS-Benutzer heraus ein möglichst allgemeines Datendarstellungsprogramm zu besitzen, wurde die Phase 41504 in letzter Zeit beträchtlich erweitert. So wuchs sie aus der Rolle einer Unterphase des Flächenausgleichsprogramms heraus. Weiterhin ist ihre Eingabe so umfangreich, daß die ausführliche Beschreibung in einem eigenen Bericht erfolgen soll.

4.4 Die NUSYS-Phase 41505

Der Zweck der Phase 41505 ist die Zuführbarkeit möglichst vieler LILI-Daten zur Glättungsphase 41501/02 oder sofort zur Darstellungsphase 41504.

Zur Zeit kann 41505 die Fluß-Blöcke FLUX1, ADFL1, SPEKT und ADFLO sowie die Querschnittsblöcke SIGMA, SRATE, SABBR und SRAMI in den INTER oder INTAM Block umordnen. Dabei können bestimmte Datengruppen ausgewählt werden. Die Aufnahme weiterer Datenblöcke zur Umordnung erfordert keinen großen Aufwand.

Die Eingabebeschriftung erklärt zugleich auch die einfachen Programmfunktionen (siehe Anhang I)

5. Benutzeranleitung zum iterativen REMO-Verfahren

5.1 Der Phasenablauf der NUSYS-Rechnung

- oo397 NUSYS-Eröffnung
- oo446 Die Wirkungsquerschnitte werden für jede Mischung nach dem σ_0 -Konzept berechnet (→ SIGMA-Block)
Die Querschnitte der Grundtypen SCAPT, SELSC, SFISS und SINSC werden für alle Materialien im SRATE-Block niedergelegt.
- ~~o1794~~ REMO-Programm berechnet neue elastische Ausstreuquerschnitte und setzt sie in den SIGMA-Block ein. Dieser erste Aufruf von o1794 ist nur möglich, wenn bereits ein Wichtungsspektrum zur Verfügung steht, z.B. von einem ähnlichen Reaktor. Andernfalls fällt der Aufruf von o1794 an dieser Stelle aus. (Siehe hierzu Abschnitt 5.2 a)
- o6731 Die Flußberechnung liefert den ortsabhängigen Flußblock FLUX1 und den nullten k_{eff} -Wert
- 198oo Das Steuerprogramm übernimmt die Ablauffolge der Programmphasen während der folgenden Iterationen
- 1442o Aus den Flüssen, den Querschnitten und der Geometrie werden zonenabhängige Reaktionsraten berechnet (→ REAKT-Block)
- o678o Die Raten der Grundtypen werden zur totalen Stoßrate addiert (→ RKOMB-Block)
- 415o1 Die treppenförmigen Stoßratespektren werden geglättet und zu einem 196 Gruppenspektrum verarbeitet (→ FL-Block)
- oo446 wiederholter Anlauf des Querschnittsprogramms. Der alte SIGMA-Block wird gelöscht, ein neuer generiert (siehe Abschnitt 5.2 c)
- o1794 REMO-Programm berechnet im direkten Anschluß an oo446 neue elastische Ausstreuquerschnitte und setzt sie in den SIGMA-Block ein. Wichtungsspektrum aus FL-Block.
- o6731 Flußberechnung mit den verbesserten Querschnitten (→ neuer FLUX1-Block). Erster verbesserter k_{eff} -Wert.
- 198oo Rücksprung nach Programm 1442o und erneutes Durchlaufen der Schleife.

5.2 Hinweise und Bemerkungen

- a) Um zunächst ein Wichtungsspektrum für den ersten Verbesserungsschritt zu erhalten, ist es im vorstehenden Phasenablauf möglich, sofort nach der Querschnittsberechnung in der Phase 00446 die Flußberechnung in der Phase 06731 anzulaufen. Dieses aus den unverbesserten 00446-Querschnitten berechnete Anfangsspektrum kann sich jedoch je nach Art der Mischung recht stark vom ausiterierten Endspektrum unterscheiden. Insbesondere an ausgeprägten Resonanzstellen, wie z.B. bei Na, Fe und O, kann dieses Anfangsspektrum $F(E)$ eine stark vom Endspektrum abweichende Energieabhängigkeit aufweisen, so daß die Steigung $dF(E)/dE$ am niederenergetischen Ende einer Gruppe, die maßgeblich in die Bestimmung des Ausstreuquerschnittes eingeht, sich erheblich von derjenigen des Endspektrums unterscheidet. Die Folge ist eine schlechte Konvergenz beim Iterationsverfahren. In solchen REMO-empfindlichen Fällen kann man häufig eine wesentlich bessere Konvergenz erzielen, wenn von vornherein nach 00446 die Phase 01794 angelaufen wird mit einem über Karten eingebaren besser geeigneten Wichtungsspektrum. Die Ursache dieses Verhaltens liegt in der Eigenschaft des Verfahrens an Resonanzstellen bei Verwendung eines schlecht geeigneten Wichtungsspektrums ein starkes Überschwingen zu erzeugen, das dann nach Möglichkeit in den weiteren Iterationsschritten wieder kompensiert werden muß.

Die mit dem 446-Grouco-Konzept berechneten bremselastischen Querschnitte können in Gruppen mit Resonanzstruktur außerordentlich falsche Werte annehmen (siehe hierzu Anhang III, Bild 4). Wie schon in der Einleitung erwähnt, ist dieses Verhalten nicht nur auf die Anwendung des σ_o -Verfahrens an sich zurückzuführen, sondern auch wesentlich eine Folge der Benutzung des f-Faktors der gesamtelastischen Streuung zur Berechnung des effektiven Ausstreuquerschnittes. Diese gelegentlich um Faktoren falsch berechneten Bremsquerschnitte erzeugen infolge ihres hohen Anteils am Removal-Querschnitt ein entsprechend verfälschtes Stoßdichtespektrum, dessen Verlauf im ersten Remo-Verbesserungsschritt die Wichtung entscheidend beeinflusst (siehe hierzu auch Anhang III, Bild 7).

Deshalb ist es empfehlenswert als Ausgangsspektrum der Remo-Iterationen nicht ein mit reinem 446-Querschnitten berechnetes Spektrum zu benutzen, sondern von vornherein ein besser geeignetes Fremdspektrum einzuführen und die falschen 446-Ausstreuquerschnitte zu eliminieren.

- b) Der zur Bildung des Stoßdichtespektrums notwendige effektive totale Gesamtquerschnitt muß aus den effektiven Teilquerschnitten zusammengesetzt werden:

$$\bar{\Sigma}_{\text{total}} = \bar{\Sigma}_c + \bar{\Sigma}_f + \bar{\Sigma}_{\text{in}} + \bar{\Sigma}_{\text{el}}$$

Dieses komplizierte Vorgehen hat folgenden Grund: Beide auf GROUCO befindlichen totalen Querschnittstypen $\bar{\Sigma}_{\text{STOT}}$ und $\bar{\Sigma}_{\text{STOTb}}$ sind nicht verwendbar, weil der erste Querschnitt sich aus unendlich verdünnten Querschnitten zusammensetzt, der zweite Querschnitt aber nach dem ABN-Konzept die f-Faktoren enthält, die durch Stromwichtung und nicht wie die übrigen f-Faktoren durch Flußwichtung bestimmt wurden.

Das Produkt aus Fluß und aufsummiertem Querschnitt $\bar{\Sigma}_{\text{total}}$ ergibt dann die benötigte Stoßdichte

$$F(u)du = \bar{\Sigma}_{\text{total}}(u) \cdot \phi(u)du$$

Die Stoßdichtespektren beziehen sich wie die Gruppenkonstanten auf homogenisierte Materialzonen.

- c) Der SRATE-Block enthält den im Programmablauf benötigten Gesamtwirkungsquerschnitt für elastische Streuung SELSC. Diejenigen Querschnittstypen, die direkt mit der elastischen Ausstreuung zusammenhängen, werden bei der REMO-Korrektur primär im SIGMA-Block korrigiert. In Spezialfällen gestattet ein spezieller Zweig in der Phase 00446 auch eine Korrektur der analogen Querschnitte im SRATE-Block unter Verwendung der im SABBR-Block enthaltenen Ergebnisse. Der Querschnittstyp SELSC im SRATE-Block wird dabei jedoch nicht verändert. Die Änderung der zur Wichtung benötigten Stoßdichtespektren geschieht also immer nur über die Änderung der Flußspektren. Dieser Fehler ist jedoch als gering zu betrachten im Vergleich mit den Approximationen, die bei der Gewinnung der Feingruppen vorgenommen werden.
- d) Der zweite Aufruf von 00446 ist aus zwei Gründen notwendig. Rechentechnisch sind die Phasen 00446 und 01794 über einen gemeinsamen Common-Bereich miteinander verknüpft. Weiterhin werden von 01794 benötigte Querschnitte von der Phase 00446 nur dann automatisch weitergegeben, wenn als Folgeprogrammnummer 01794 angegeben wurde.

- e) Zur Konvergenz der iterativen REMO-Methode ist folgendes zu bemerken:
Die einzelnen Verbesserungsschritte ergeben nur in seltenen Fällen k_{eff} -Werte, deren Änderungen von Schritt zu Schritt kleiner werden und sich monoton dem Endwert nähern. Der Endwert ist dann erreicht, wenn das rückgeführte Wichtungsspektrum keine größeren Änderungen in k_{eff} hervorruft als die beschränkte Genauigkeit der Flußberechnung.

In vielen Fällen neigt das Verfahren zu mehr oder weniger großen Schwüngen bei der Annäherung an den Endwert. Man sollte deshalb in Zweifelsfällen genügend lange (8 - 16 Iterationen) iterieren und dabei das Verhalten der k_{eff} -Werte und des Spektrums beobachten.

- f) Die Ergebnisse der iterativen REMO-Methode sind nur als mehr oder minder gute Approximation der Korrektur der Gruppenkonstanten für die elastische Ausstreuung zu werten. Das ausiterierte Flußspektrum und der k_{eff} -Endwert sind sehr eng mit dem angewandten Verfahren verknüpft. Die Güte der Approximation ist überprüfbar, wenn statt des geglätteten und anschließend in Mikrogruppen aufgeteilten Spektrums ein Feingruppenspektrum benutzt wird, das direkt aus einer Feingruppenrechnung entnommen wurde. Entsprechende Untersuchungen wurden z.B. von Herrn E. Kiefhaber /8, 9/ mit den ersten 196-Gruppen des 208-Gruppen KARCOS-Spektrum durchgeführt, so daß die Problematik des iterativen REMO-Verfahrens inzwischen recht gut bekannt ist.

6. Literaturverzeichnis

- /1/ H. Küsters et.al.: The Group Cross Section Set KFK-SNEAK, Preparation and Results
KFK 628, Okt. 1967
- /2/ K.E. Schroeter: Einfluß von Berechnungsmethoden auf den Multiplikationsfaktor k_{eff} und den Voideffekt Δk_v für einen großen schnellen natriumgekühlten Brutreaktor
KFK 1180, April 1970
- /3/ H. Späth: Ein Verfahren und ein Fortran IV-Programm zur flächentreuen Approximation von Treppenfunktionen durch glatte Kurven
KFK 738, Mai 1968
- /4/ H. Späth: Die numerische Berechnung von interpolierenden Spline-Funktionen mit Blockunterrelaxation
KFK 1132, Jan. 1970
- /5/ H. Späth: QUINT2 - Eine Fortran IV-Routine zur Berechnung von SPLINE-Funktionen vom Grad fünf
Persönliche Mitteilung
- /6/ S. Kleinheins: KURVE - Ein Unterprogramm zur graphischen Darstellung von Kurven auf dem Zeilendrucker
Persönliche Mitteilung
- /7/ C. Broeders: PLOPRO - Ein vereinfachtes Programm zum Plotten
Persönliche Mitteilung
- /8/ E. Kiefhaber: Brauchbarkeit von 26-Gruppen-REMO-korrigierten Spektren zum Vergleich mit Experimenten
KFK 1271/2, Sept. 1971, 2. Vierteljahresbericht des PSB, Abschnitt 122 - 1
- /9/ E. Kiefhaber et.al.: Fertigstellung der KFKINR-Gruppenkonstanten-Datenbibliothek; Projekt Schneller Brüter 4. Vierteljahresbericht 1971, KFK 1271/4; wird ausführlicher in einem getrennten KFK-Bericht dokumentiert
- /10/ H. Huschke: Gruppenkonstanten für dampf- und natriumgekühlte schnelle Reaktoren in einer 26-Gruppendarstellung
KFK 770, April 1968

Anhang II: Programmtechnische Daten

Die NUSYS-Phasen 41501, 41502, 41503 und 41505 sind in FORTRAN IV des IBM/360 Systems geschrieben und wurden mit dem H2-Compiler, Release 18, auf der IBM 360/65 übersetzt. Die 32 Subroutinen sind in einer Overlay-Struktur angeordnet, deren längster Zweig etwa 28 K-Bytes Kernspeicherplatz benötigt. Die Programme umfassen insgesamt etwa 2500 Fortran-Statements. Die Rechenzeit für die Bearbeitung einer Treppenfunktion liegt auf der IBM 370/165 etwa in der Größenordnung einer viertel Sekunde.

Anhang III: Einige Abbildungen zur iterativen REMO-Methode

Die folgenden Abbildungen sind als qualitative Schaubilder zum REMO-Verfahren zu verstehen. Sie sollen außerdem einen Eindruck von der Leistungsfähigkeit der Phasen 41501 - 41505 vermitteln. Alle Bilder sind vollautomatisch erzeugt, d.h. ohne Handeingabe irgendwelcher der dargestellten Daten.

Berechnet wurde ein schneller natriumgekühlter Standardreaktor. Die Stoßdichtespektren und die Querschnitte sind der inneren Core-Zone entnommen.

In den Abbildungen 1 bis 6 trägt die Abszisse eine logarithmische Energieskala in MeV-Einheiten. Rechts im Bild befindet sich die hohe Energie (Anfang bei 10 MeV), links im Bild die niedrige Energie (Ende bei 1 keV). Dieser Bereich entspricht etwa den ersten 14 ABN-Gruppen, deren Grenzen oberhalb der Abszissenachse durch aufsitzende Trennstriche angegeben sind (Jede zweite Gruppe ist nummeriert). Der logarithmischen Energieachse entspricht eine lineare Lethargieachse, deren Richtung von rechts nach links verläuft, die aber nicht markiert ist.

In Bild 1 sind die Stoßdichtespektren $F(u)$ mehrerer Iterationsschritte aufgetragen. Bild 2 zeigt die gleichen Spektren jedoch mit fortschreitender Iterationszahl nach oben verschoben. Die unterste Kurve stellt das Stoßdichtespektrum des normalen σ_0 -Verfahrens (446-Grouco-Konzept) dar, die nächste darüberliegende Kurve das Spektrum nach dem ersten REMO-Verbesserungsschritt und so fort. In Bild 3 wurde das zweite Spektrum auf das erste bezogen, das dritte auf das zweite

und so fort. Man erkennt beim Vergleich der Bilder 1 bis 3 deutlich das Auftreten starker Überschwingungen während der ersten Iterationsschritte und die fortlaufende Verkleinerung dieser durch das ausgesprochen schlechte σ_0 -Ausgangsspektrum hervorgerufenen Anfangsfehler.

In Bild 4 sind die bremselastischen Wirkungsquerschnitte der ersten 14 ABN-Gruppen aufgetragen, und zwar diejenigen Querschnitte, aus welchen die dargestellten Stoßdichtespektren erzeugt wurden. Die Querschnitte der einzelnen Gruppen häufen sich mit fortschreitender Iterationszahl an den Konvergenzstellen. Die nach dem σ_0 -Verfahren berechneten Ausgangsquerschnitte liegen im allgemeinen am weitesten von den späteren Konvergenzstellen weg.

Bild 5 zeigt die Removal-Querschnitte des σ_0 -Konzepts (auf Bildunterschrift mit "Iteration Nr. 1" bezeichnet und durch Kreise markiert) und des letzten Iterationsschrittes (ohne Markierungen).

Aus Bild 6 kann man einen Eindruck vom relativen Anteil des bremselastischen Querschnitts am Removal-Gesamtquerschnitt gewinnen. Er liegt von der 5. bis zur 13. Gruppe bei 80 %.

In Bild 7 schließlich ist die 13. ABN-Gruppe herausgegriffen um zu demonstrieren, wie stark sich die Form des Stoßdichtewichtungsspektrums auf die Bestimmung des elastischen Ausstreuquerschnittes auswirken kann, wenn sich, wie hier im Falle des Natriums, eine starke Resonanz im Gebiet der Wichtung befindet. Die Kurvenschar auf der linken Bildseite zeigt die Stoßdichtewerte $F(u)$ der 13. Gruppe entnommen aus Bild 1. Die Markierungszeichen kennzeichnen die gleiche Iterationsreihenfolge wie in Bild 2 von Spektrum Nr. 1 bis Nr. 5. Die lineare Lethargieachse verläuft in Bild 7 in umgekehrter Richtung als in den vorhergehenden Abbildungen. Die Richtung der Abwärtsstreuung geht also in Bild 7 von links nach rechts. Die Zahlenwerte der Abszissenskala sind bedeutungslos. Sie ließen sich durch die Art der Darstellung und die Eigenart der Plotroutine nicht vermeiden. Auf der rechten Bildseite sind die mit den zugeordneten Stoßdichtespektren berechneten bremselastischen Wirkungsquerschnitte der 13. Gruppe dargestellt.

EINGABEBESCHREIBUNG DER PROGRAMME 41501/02/03
PROGRAMME 41501/02/03

FLAECHEENTREUE APPROXIMATION VON TREPPENFUNKTIONEN(TFU)
NACH DEM VERFAHREN VON H. SPAETH, KFK-738, MAI 68

AUTOREN E. STEIN / D. THIEM

VERSION 3.00.00 / 10.11.71 / FLAP3

SPRACHE IBM-FORTRAN-IV, H2, IBM-360/65, RELEASE 18

ZWECK DARSTELLUNG VON TREPPENFUNKTIONEN DURCH GLATTE KURVEN
BESONDERE ANWENDUNG IM REMO-VERFAHREN ZUM AUSGLEICH
VON STOSSDICHTEN-FUNKTIONEN

DATENQUELLEN A) LILI-BLOECKE RKOMB INTER INTAM
B) EXTERNE KARTEN-EINGABE

- HINWEISE 1) DIE NUSYS-PHASEN 41502 UND 41503 BESITZEN KEINE
EXTERNE KARTENEINGABE. SIE WERDEN AUTOMATISCH VON
DER PHASE 41501 AUFGERUFEN.
2) DAS PROGRAMM 41505 UEBERTRAGT DIE DATEN FOLGEN-
DER BLOECKE NACH INTER ODER INTAM :
SPEKT ADFLO FLUX1 ADFL1 SIGMA SRATE SRAMI SABBR
3) DAS PROGRAMM 41503 SAMMELT DIE DATEN ALLER
BEARBEITETEN TFU IM BLOCK (DAT43)
4) DAS PROGRAMM 41504 ZEICHNET MIT DEM DRUCKER IN
VARIABLER WEISE DIE DATEN DER BLOECKE:
RKOMB INTER INTAM DAT43
DARUEBER HINAUS SIND BELIEBIGE FUNKTIONEN UBER
KARTEN EINGEBBAR UND DARSTELLBAR.
5) ZU EINEM BESSEREN VERSTAENDNIS DER FUNKTIONSWEISE
IST ES NOTWENDIG DEN ZUEHORDERIGEN ARBEITSBERICHT
ZU LESEN.

ABKUERZUNGEN K=EINGABEKARTE, S=VERZWEIGUNG, C=KOMMENTAR
TFU=TREPPENFUNKTION, TFLGR=TFU-GRUPPE
AGLB=AUSGLEICHSBEREICH

EINGABE

K1 @41501@ PROGRAMMEROEFFNUNG
K2 NFPR,LILI,KLF,KLE NUSYS-KONVENTIONSKARTE
S3 FALLS (KLF.NE.0) FOLGT K4, SONST K5
K4 (KC(I),I=1,IABS(KLF)) LOESCHTYPEN(@-WCRTE)

C (KLE) IST HIER IRRELEVANT.

K5 @STEW@ STEUERWORT

C5 JEDES STEUERWORT EROEFFNET EINEN EIGENEN PRO-
GRAMMTEIL, NACH DEM STEUERWORT FOLGT DIE ZUE-
HORDERIGE EINGABE, DANACH FOLGT EIN BELIEBIGES
NEUES STEUERWORT.

FALLS DAS STEUERWORT GLEICH IST @RKOMB@, @INTER@, @INTAM@,
@EXTER@, @EXTAM@, FOLGT K7

FALLS DAS STEUERWORT GLEICH IST @KARTE@ FOLGT K29
MIT DEM STEUERWORT @ENDE@ SCHLIESST DIE EINGABE.

C5 FOLGENDE STEUERWORTE SIND MOEGLICH :

@EXTER@, @EXTAM@, @RKOMB@, @INTER@, @INTAM@, @KARTE@,
@ENDE4@.

(EXTER,EXTAM) DIE EINGABE DER TFU -ORDINATEN(FLAECHEEN,
HOEHEEN) ERFOLGT DURCH EXTERNE KARTENEINGABE.
(RKOMB,INTER,INTAM) DIE EINGABE DER TFU ERFOLGT UEBER
LILI-BLOECKE GLEICHEN NAMENS
(KARTE) MIKROFLAECHEEINGABE UEBER EXTERNE KARTENEINGABE
SPEZIALFALL : REMO-PROZEDUR

K7 @LAB@,NDU,IGA,IGE,@NABN@,NRL,NRR,EPS1,EPS2,ILAF,ILEF,
KEMKT,@LET@,IZEI,IPAR,INTEG

C7 (LAB) NAME DER AUSZUGLEICHENDEN TFU IN DEN LILI-
BLOECKEN RKOMB, INTER, INTAM
(LAB) IST IRRELEVANT BEI @EXTER@ @EXTAM@
(NDU) GESAMTZAHL DER TREPPEN EINER VORGEGEBENEN TFU
(4...26)
(IGA) NUMMER DER ERSTEN TREPPE DES AGLB
(1...(IGE-3))
(IGE) NUMMER DER LETZTEN TREPPE DES AGLB
((IGA+3)...NDU)
(NABN) @ABN@ ODER BELIEBIGES 2-WORT
KENNWORT, DAS DIE EINGABE DER ABSZISSEN-WERTE
BESTIMMT. FALLS (NABN)=@ABN@ WIRD DIE
LETHARGIE-SKALA DES ABN-SATZES INTERN BEREIT-
GESTELLT. ANDERNFALLS ERFOLGT DIE EINGABE DER
ABSZISSENWERTE UEBER EXTERNE KARTENEINGABE.
(NLR) LINKE RANDKENNZIFFER (-1,0,1,7,8)
(NRR) RECHTE RANDKENNZIFFER (-1,0,1,7)
-1 =EINLESEN
0 =LINEARE EXTRAPOLATION
1 =QUADRATISCHE EXTRAPOLATION
2 =EXPONENTIELLE EXTRAPOLATION
7 RANDWERT=FAKTOR*HOEHE DER RANDTREPPE
DER FAKTOR IST ABHAENGIG VOM HOEHENVER-
VERHAELTNIS DER RANDTREPPE ZUR SICH NACH
INNEN ANSCHLIESSENDEN TREPPE :
GT.1 : FAKTOR=5, =1 : FAKTOR=0.5,
LT.1 : FAKTOR=0.1
8 SPEZIALFALL REMO-PROZEDUR : EXTRAPOLATION
AM LINKEN RAND(HOHE ENERGIE) GEMAESS DER
FUNKTION EINES SPALTSPEKTRUMS
(WATT-SPEKTRUM FUER PU239 :
 $CHI(E)=EXP(-E)*SINH(SQR(2*E))$)
(EPS1) RELATIVER FEHLER DER SUMME DER MIKROFLAECHEEN
EINER
(EPS2) ALLER MAKROTREPPEN DES AUSGLEICHBEREICHS.
WENN DIE BERECHNETEN FEHLER GROSSER SIND
ALS (EPS1, EPS2) ERFOLGT EINE WARNMELDUNG.
(ILAF) NUMMER DER ERSTEN
(ILEF) NUMMER DER LETZTEN TREPPE VOM MIKROFLAECHEEN-
UEBERGABEBEREICH.
(ILAF, ILEF) DEFINIEREN DEN BEREICH, AUS DEM
DIE BERECHNETEN MIKROFLAECHEEN FUER DEN (FL)-
BLOCK BEREITGESTELLT WERDEN. DIESER BEREICH
MUSS INNERHALB DES AGLB LIEGEN.
FALLS (ILAF=0, ILEF=BELIEBIG) KEINE UEBERGABE.

(KEMKT) (2,...,75) ANZAHL DER ZU BERECHNENDEN MIKRO-
FLAECHEEN PRO TREPPE (IM REMO-FALL SIND NUR
14 ERLAUBT (KEMKT=14)).
DIE GESAMTZAHL (IGE-IGA+1)*KEMKT MUSS KLEINER
ODER GLEICH 300 SEIN (REMO-FALL : 196)

WARNUNG : AUF DEN FL-BLOCK DUERFEN HOECHSTENS
100 MIKROFLAECHEEN GEBRACHT WERDEN (DESHALB
ZONENZAHL BESCHRAEKEN)

(LET) @LIN@ LINEARE AUSGABE DER ABSZISSE (Z.BSP. DER
LETHARGIE)
@LOG@ EXPONENTIELLE AUSGABE DER ABSZISSE (Z.BSP.
DER ENERGIE) - HIERBEI IST DIE ANGABE EINES
ANFANGSPUNKTES (EO) ERFORDERLICH (SIEHE K15)

(IZEI) KENNZIFFER FUER PLOTTEN, DRUCKAUSGABE UND
DATENRESERVIERUNG.

TABELLE :

IZEI	PLOT	ERWEITERTE AUSGABE	DAT43-BLOCK
0	NEIN	NEIN	NEIN
1	JA	NEIN	NEIN
2	JA	JA	NEIN
3	NEIN	NEIN	JA
4	JA	NEIN	JA
5	JA	JA	JA
6	NEIN	NEIN	NEIN

(IPAR) (0,1,2) KENNZIFFER, DIE DIE ART DER ABSZISSEN-
WERTE BEI EXTERNER EINGABE ANGIBT (SIEHE C19)

(INTEG) (0,1,2,3,4) STEUERKENNZIFFER FUER FLAECHEEN-
BERECHNUNGEN UEBER BELIEBIG DEFINIERTE
ABSZISSEN-INTERVALLE (SIEHE C28, C30)

C SPEZIALFAELLE :

- A) BEI (IZEI=2) ERFOLGT EINE BERECHNUNG MITTLERER
GESCHWINDIGKEITEN.
B) WENN (IZEI=NEGATIV), DANN FOLGT UNMITTELBAR NACH DEM
NAECHSTEN STEUERWORT EINE EINGABEKARTE K(S) FUER DIE
ABSZISSEN-STARTWERTE (Z(I)) DER AUSGLEICHSFUNKTION.

K(S) (Z(I), I=1, IGR) WOBEI (IGR=IGE-IGA+1)

- C) WENN (KEMKT=NEGATIV), DANN FOLGT FUER JEDE ZONE AN
DER STELLE VON K(S) ODER JEWEILS VOR K(S) DIE EINGABE
EINER PARAMETERKARTE K(A) ZUR AUTOMATISCHEN STARTWERT
ABAENDERUNG :

K(A) FMA, ISIG, TEIL, NWI, AKEMI, IWIMA, FESU

- C (FMA) MAXIMALE PROZENT-FEHLERGRENZE EINER TREPPE
(ISIG) (=+1,-1) VORZEICHEN DER STARTWERTKORREKTUR
(TEIL) (LE 1.0) GROESSE DER KORREKTUR
(NWI) ZAHL DER UNBEDINGT DURCHZUFUEHRENDEN WIEDERHOLUNGEN
(AKEMI) MAXIMALE PROZENTFEHLERGRENZE (BEI KENN=-1)
(IWIMA) MAXIMALE WIEDERHOLUNGSZAHL
(FESU) PROZENT-FEHLERGRENZE DER FLAECHEENSUMME

- C DIE KARTEN K(A) ODER/UND K(S) MUESSEN BEI (NZO)-ZONEN
(NZO)-MAL WIEDERHOLT WERDEN.

C EINE AUTOMATISCHE STARTWERTABÄNDERUNG WIRD DURCHFUEHRT, WENN (KENN=+1), ODER WENN (KENN=-1) UND DIE FEHLER EINER ODER MEHRERER TREPPEN DIE FEHLERGRENZE (AKEMI) UEBERSCHREITEN, ODER WENN (KENN=-1) UND DIE ITERATIONSZAHLEN (NWI) NOCH NICHT UEBERSCHRITTEN WURDE.

DIE STARTWERTITERATIONEN ERFOEGEN AUTOMATISCH OHNE ZUTUN DES BENUTZERS. MIT (KEMKT=NEGATIV) KOENNEN NUR DIE INTERN BEREITS VORGEGEBENEN PARAMETER UEBERSCHRIEBEN WERDEN.

DIE INTERNEN PARAMETER BESITZEN FOLGENDE WERTE (IN DER REIHENFOLGE DER KARTE K(A)) : 5.0 -1 0.5 1 10.0 10 0.7)

C DER STARTWERT EINER TREPPE WIRD AUF FOLGENDE WEISE ABGEÄNDERT : $Z(I) = Z(I) - (Z(I) - XX(J)) * TEIL$

DABEI IST $J = I + 1$, WENN (ISIG=POSITIV)

$J = I$, WENN (ISIG=NEGATIV)

(Z(I) LIEGT ZWISCHEN DEN TREPPENGRENZEN $XX(I)$ UND $XX(I+1)$)

C LIEGT DIE BEDINGUNG FUER EINE STARTWERT-ITERATION VOR, DANN WERDEN DIE STARTWERTE DERJENIGEN TREPPEN ABGEÄNDERT, DEREN PROZENTUALE FLÄCHENFEHLER DIE GRÖSSE (FMA) UEBERSCHREITEN

C DIE STARTWERT-ITERATIONEN WERDEN ABGEBROCHEN, WENN (KENN=0) ERREICHT WIRD, ODER WENN DIE ITERATIONSZAHLEN (NWI, IWIMA) UEBERSCHRITTEN WERDEN, ODER WENN DIE FEHLERGRENZE (AKEMI) BEI KEINER TREPPE MEHR UEBERSCHRITTEN WIRD, ODER WENN DER MITTLERE QUADRATISCHE FEHLER DER FLÄCHENSUMME KLEINER IST ALS (FESU).

S8 FALLS (NLR=-1) FOLGT K9, SONST S10

K9 YE(1) LINKER RANDWERT (EINE HOEHE)

S10 FALLS (NRR=-1) FOLGT K11, SONST S12

K11 YE(IGR+2) RECHTER RANDWERT (HOEHE) (IGR=IGE-IGA+1)

S12 FALLS (NLR=8) FOLGT K13, SONST S14

K13 E1, E2 LINKER, RECHTER ABSZISSENWERT DER ERSTEN TREPPE (E1, E2) STELLEN DIE OBEREN UND UNTEREN ENERGIEGRENZEN DER ERSTEN ABN-GRUPPE DAR : 10.5 6.0 (MEV)

S14 FALLS (LET)=@LOG@ FOLGT K15, SONST S18

K15 EC (EC) ANFANGSWERT DER ENERGIE (1. ABN-GR.=10.5)

S18 FALLS (NABN).NE.@ABN@ FOLGT K19, SONST S21
 K19 NXD,(XD(I),I=1,NXD) ABSZISSENWERTE

C19 EXTERNE KARTENEINGABE : DIE BEDEUTUNG DER
 ABSZISSENWERTE IST ABHAENGIG VON DER KENN-
 ZIFFER (IPAR) :

FALLS (IPAR=0) GILT $XD(I)=x$ -INTERVALLE (NXD=NDU)
 FALLS (IPAR=1) GILT $XD(I)=x$ -PUNKTE (NXD=NDU+1)
 FALLS (IPAR=2) GILT $XD(I)=x$ -PUNKTE (NXD=NDU+1),
 AUS DENEN FINE LOGARITHMISCHE ACHSE GEBILDET WIRD
 (ABSTEIGENDE ZAHLENFOLGE, MIT DEM GROESSTEN WERT
 BEGINNEN.)

S21 FALLS DAS STEUERWORT @RKOMB@,@INTER@,@INTAM@ FOLGT K22,
 SONST S23

K22 NZO,(KB(I),I=1,NZO) ANZAHL UND NUMMERN DER TFUN
 (Z.BSP. ZONENNUMMERN). DIE TFUN DER ANGEgebenEN
 NUMMERN WERDEN NACHEINANDER UNTER DEN GLEICHEN
 VORGEgebenEN PARAMETERN K7-K19 VERARBEITET.

S23 FALLS DAS STEUERWORT @EXTER@ FOLGT K24, SONST S25
 K24 (YD(I),I=1,NDU) EXTERNE EINGABE DER TREPPENFLAECHE

S25 FALLS DAS STEUERWORT @EXTAM@ FOLGT K26, SONST S27

K26 (YAM(I),I=1,NDU) EXTERNE EINGABE DER TREPPENHOEHEN

C27 FALLS (INTEG.NE.0) FOLGEN NUN DIE EINGABEPARAMETER FUER
 FLAECHEBERECHNUNGEN :

S27 FALLS (INTEG=0) FOLGT K5, SONST K28,S29

K28 NEUZ,(TX(I),I=1,NEUZ) ABSZISSENWERTE

C28 DIE BEDEUTUNG DER ABSZISSENWERTE (TX) HAENGT
 AB VON DEN KENNZIFFERN (IPAR) UND (INTEG) :

FALL 1) (INTEG=1,IPAR.NE.2) (TX)= ABSOLUTE x-WERTE IN
 AUFSTIEGENDER REIHENFOLGE (BZW. x-INTERVALLE)

FALL 2) (INTEG=2(4),IPAR=2) (TX) .. IN ABSTEIGENDER ..
 ZWISCHEN TX(I) UND TX(I+1) WIRD DIE FLAECHE
 UNTER DER GEGLAETTETEN KURVE BERECHNET.

FALL 3) (INTEG=3) DIE TX(I) WERDEN ALS PAARE VON
 ABSOLUTEN x-WERTEN BETRACHTET, UEBER DEREN
 x-INTERVALL DIE FLAECHE BERECHNET WERDEN
 FALLS (IPAR=2) MUSS DER GROESSERE x-WERT VOR
 DEM KLEINEREN STEHEN.

C28A DIE FLAECHEBERECHNUNG ERFOLGT IM NORMALFALL DURCH DIE
 INTEGRATION DER GEGLAETTETEN KURVE IM GESAMTEN INTEGRATIONS
 INTERVALL. HIERBEI UEBERLAGERN SICH DIE EINZELNEN FLAECHE-
 FEHLER DER IM INTEGRATIONSINTERVALL LIEGENDEN MAKROTREPPEN.
 MAN ERHAELT EIN GENAUERES ERGEBNIS, WENN MAN ZUNAECHST UEBER
 ALLE DIE MAKROFLAECHEEN SUMMIERT, DIE VOLLSTAENDIG IM
 INTEGRATIONSGBIET LIEGEN UND ERST DANN UEBER DIE ANALYTI-
 SCHEN FUNKTIONEN DER RANDTREPPEN INTEGRIERT, DEREN FLAECHE
 NUR NOCH ZUM TEIL IM INTEGRATIONSGBIET LIEGEN.
 DIESES GENAUERE VERFAHREN WIRD AUSGEFUEHRT, WENN DIE GROESSE
 (GENAU) IN KARTE K30 NEGATIV GESETZT WURDE.
 DABEI GILT DIE EINSCHRAENKUNG, DASS DIE LINKE INTEGRATIONS-
 GRENZE MIT EINER TREPPENGRENZE ZUSAMMENFALLEN MUSS.

- S29 FALLS (INTEG=2,4) FOLGT K30, SONST K5
- C29 FALLS FLAECHEITERATIONEN AUSGEFLEHRT WERDEN SOLLTEN,
FOLGT NUN DIE EINGABE DER ITERATIONSPARAMETER :
- K30 SOLL,NOBUN,GENAU
- C30 (SOLL) IST EIN FAKTOR ODER EIN SOLLWERT DER
FLAECHE

FALLUNTERSCHIEDUNGEN

INTEG	NEUZ	BEDEUTUNG
2	4	(SOLL=FAKTOR) : SOLLWERT DER ERSTEN FLAECHE=SOLL*2.FLAECHE
2	2	SOLL=SOLLWERT DER ERSTEN FLAECHE
4	2	(SOLL=FAKTOR) : SOLLWERT DER ERSTEN FLAECHE = SOLL*SUMME ALLER EINGEGEBENEN NDU-TREPPENFLAECHE.

C NACH K30 FOLGT EIN NEUES STEUERWORT K5.

- C BEI DEN FLAECHEITERATIONEN WIRD DURCH ABAENDERUNG EINER
DER BEIDEN X-INTERVALLGRENZEN DER JEWEILS ERSTEN ZU
BERECHNENDEN FLAECHE VERSUCHT FUER DIESE FLAECHE DEN SOLL-
WERT ZU ERREICHEN.
FALLS (NOBUN=-1) WIRD DIE LINKE X-INTERVALL-GRENZE,
FALLS (NOBUN=+1) DIE RECHTE ABGEAENDERT.
DIE FLAECHEITERATION WIRD ERFOLGREICH ABGEBROCHEN, WENN DER
ABSOLUT-BETRAG DER RELATIVEN AUF DEN SOLLWERT BEZOGENEN
ABWEICHUNG DER ITERIERTEN ERSTEN FLAECHE KLEINER IST ALS
DIE ITERATIONSFEHLERGRENZE (GENAU).
SPEZIALFALL : (GENAU=NEGATIV) SIEHE C28A .

KARTENEINGABE VON MIKROFLAECHE FUEER DEN FL-BLOCK :

- K31 IFLU,NONZ,ILAF,ILEF,KEMKT
- C31 (IFLU) ANZAHL DER MIKROFLAECHE EINER SPEKTRUMS
(NONZ) GESAMTZAHL DER EINZULESENDEN MIKROFLAECHE
(ILAF,ILEF,KEMKT) BEDFUTUNG WIE IN K6
- K32 (FLUFLA(I),I=1,NONZ) MIKROFLAECHE FUEER FL-BLOCK
- C32 EXTERN VORLIEGENDE MIKROFLAECHE KENNEN MIT
@KARTE@ IN DEN FL-BLOCK EINGEORDNET WERDEN, SO
ALS OB SIE INTERN VOM PROGRAMM BERECHNET WORDEN
WAEREN.

FEHLER-LISTE :

ALLE UNTER PROGRAMMKONTROLLE STEHENDEN FEHLER WERDEN
DURCH WURTMELDUNGEN DIREKT ERKLAERT.

*** ENDE DER EINGABEBESCHREIBUNG DER PROGRAMME (41501/02/03).*

EINGABEBESCHREIBUNG DES PROGRAMMS 41505

PROGRAMM 41505 UMORDNUNG DER LILI-BLOECKE
SPEKT,ADFL0,FLUX1,ADFL1,SIGMA,SRATE,SRAMI,SABBR
IN DIE LILI-BLOECKE INTER CDER INTAM

AUTOR D.THIEM
STAND 1.5.71
SPRACHE IBM-FORTRAN-IV, H2, IBM-360/65, RELEASE 19

ZWECK ZUFUEHRUNG VON DATEN ZUM KURVENGLAETTUNGSPROGRAMM
NUSYS-PHASE 41501/02 UND ZUM DARSTELLUNGSPROGRAMM
NUSYS-PHASE 41504

HINWEIS DIE PROGRAMME 41501/02/03/04/05 ERMUEGLICHEN ES, DIE
DATEN DER ERWAEHNTEN BLOECKE IN ABHAENIGKEIT VON DER
ENERGIE DURCH GLATTE ODER STUFENFOERMIGE FUNKTIONEN
DARZUSTELLEN

EINGABE

K1 @41505@ PROGRAMMEROEFFNUNG
K2 NFPR,LILI,KLF,KLE NUSYS-KONVENTIONSKARTE
C2 (LILI=0,1) AUSDRUCK DER UEBERTRAGENEN DATEN(NEIN,JA)
(KLE=0) FALLS DER LILI-BLOCK (BLO1)(SIEHE K5)
VORHANDEN IST,WIRD DIE NEUE FUNKTIONSGRUPPE UNTER
DEM KENNWORT (LAB) HINZUGEFUEGT,ANDERNFALLS WIRD
(BLO1) NEU ERZEUGT
(KLE=1) (BLO1) WIRD AUF JEDEN FALL NEU ERZEUGT
ALLE FRUEHEREN BLOECKE GLEICHEN NAMENS WERDEN
GELOESCHT

S3 FALLS(KLF.NE.0,10000) FOLGT DIE EINGABE DER LCESCHBLOECKE,
SONST FOLGT K5

K4 (KC(I),I=1,IABS(KLF)) LOESCHBLOECKE(a-WORTE) -
GELOESCHT WIRD AM PROGRAMMENDE

K5 @BLO1@,@BLO2@,@LAB@
(BLO1) NAME DES AUSGANGSBLOCKS
(BLO2) NAME DES ZIELBLOCKS
(LAB) NAME DER TREPPENFUNKTION ODER TFU-GRUPPE
(LAB) IST FREI WAELHBAR

S6 FALLS (BLO1) EIN QUERSCHNITTSBLOCK FOLGT K10, SONST K7

K7 NZT,(NZ(I),I=1,NZT) ANZAHL UND NUMMERN DER FUNKTIONEN
IN (BLO1), DIE UEBERTRAGEN WERDEN SOLLEN

K8 NGR,NGR1,NGR2
(NGR) ANZAHL DER TREPPEN IN (BLO1)
(NGR1) NUMMER DER ERSTEN
(NGR2) NUMMER DER LETZTEN ZU UEBERTRAGENDEN
TREPPE AUS (BLO1)

S9 ENDE DER EINGABE

K10 NGR,NGR1,NGR2 BEDEUTUNG WIE BEI K8
K11 NZT ANZAHL DER QUERSCHNITTSTYPEN

S12 ES FOLGT NZT-MAL K13

K13 @STYP@,K,@MAT@,MI
(STYP) QUERSCHNITTSTYP Z.BSP. @SCAPT@
(K) SPALTENINDEX (=0 BEI SKALAREN TYPEN)
(MAT) MATERIALTYP Z.BSP. @U2380@ ,SIEHE C13
(MI) MISCHUNGSNUMMER

C13 WENN (BLO1) = @SIGMA@ DANN (MAT) = @MAGRC@
 = @SRATE@ DANN (MAT) = NAME DER MATERIALKOMBINATION
 = @SABBR@ DANN (MAT) = NAME DES ISOTOPES
 S14 ENDE DER EINGABE

FEHLERLISTE

NR.-1 FEHLER WIRD DURCH MELDUNG SELBST ERKLAERT
 NR. 0 KEIN FEHLER
 NR. 1 AEUSSERE EINGABE FEHLT ODER DIE ALFRUFKARTE IST FALSCH
 NR. 2 (BLO1) IST NICHT UEBERTRAGBAR
 NR. 3 (BLO1) BESITZT WENIGER TREPPEN(ENERGIEGRUPPEN), ALS NGR
 ANGIBT
 NR. 4 (NZE.LT.1.OR.NZE.GT.15)
 NR. 5 (NGR1.LT.1.OR.NGR1.GE.NGR2)
 NR. 6 (NZE*NGRT.GT.1000)

*** ENDE DER EINGABEBESCHREIBUNG DES PROGRAMMS (41505). ***

***** PROGRAMM 1 *****
 ***** TIME= 14.44.49(H/MIN/SEC) *****
 ***** TIME USED = 0.10SEC *****
 ***** TOTAL TIME USED= 0.38SEC *****
 ***** FREE STORAGE IN REGION= 6K BYTES *****

NEXT PROGRAM 0

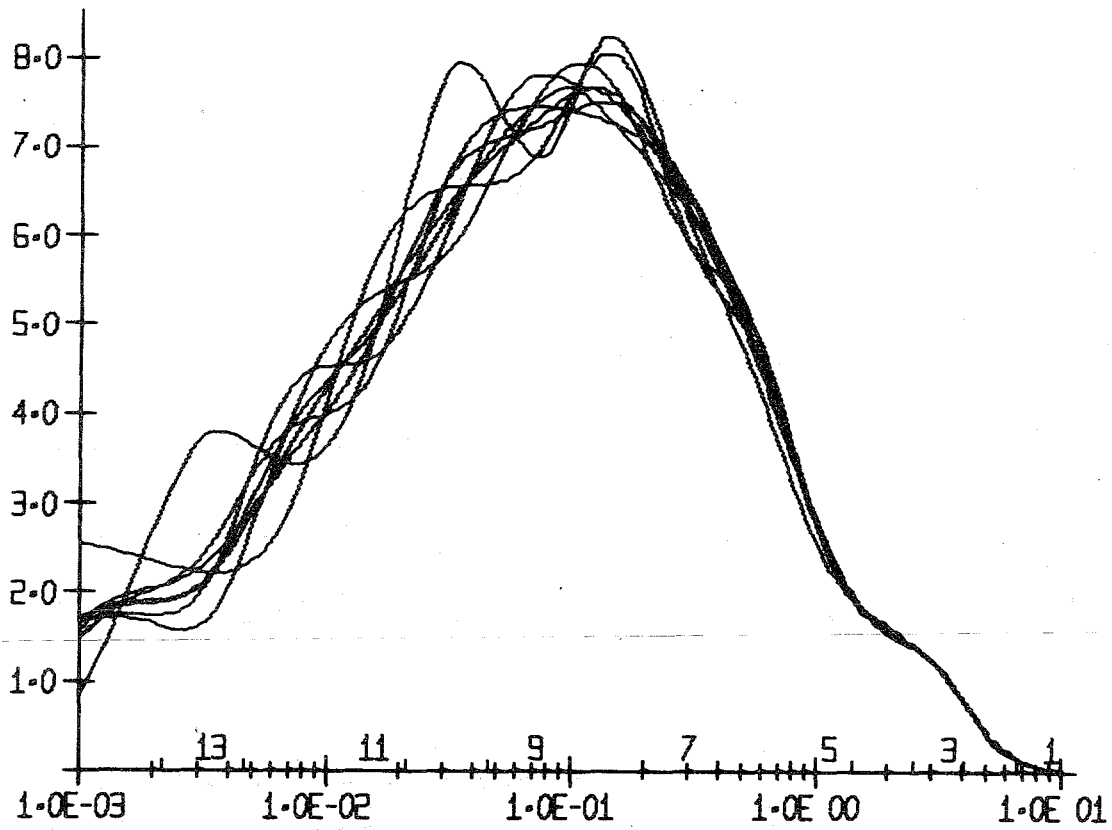


ABB-00001 STOSSDICHTESPEKTREN VON ITERATION NR. 1 BIS NR. 8

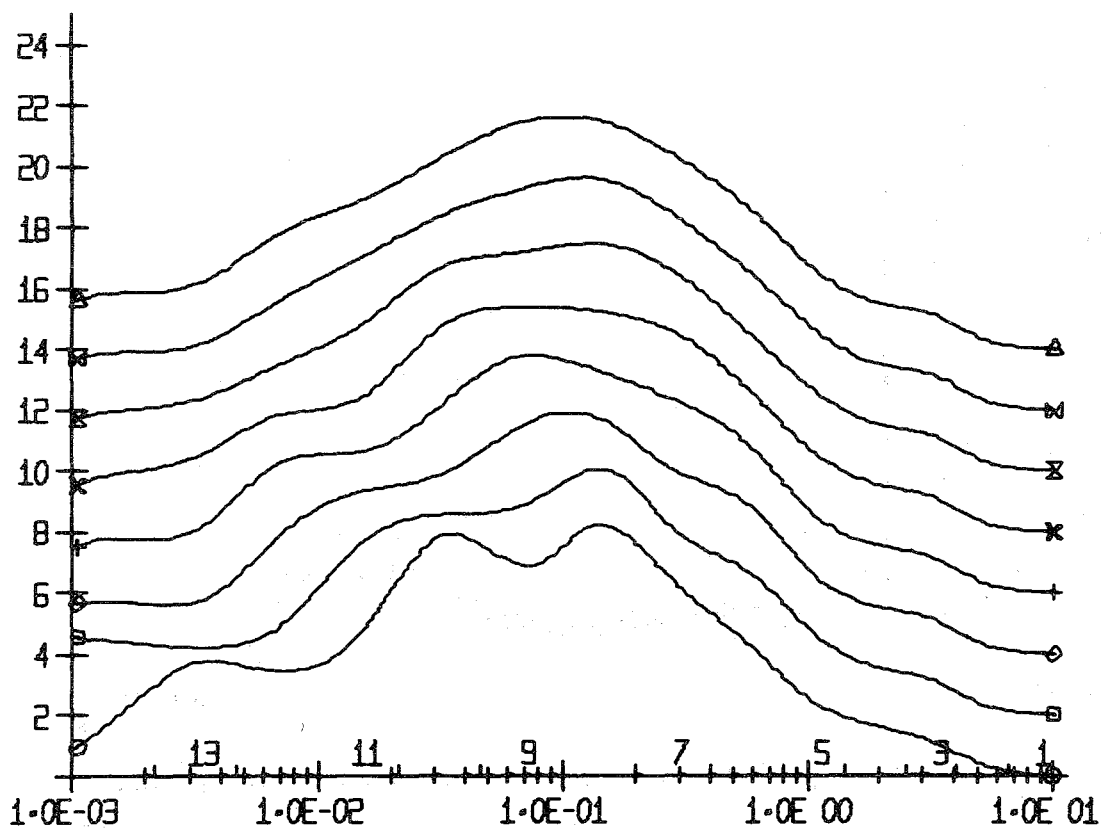


ABB-00002 STOSSDICHTESPEKTREN 1 BIS 8 UEBEREINANDER VERSCHOBEN

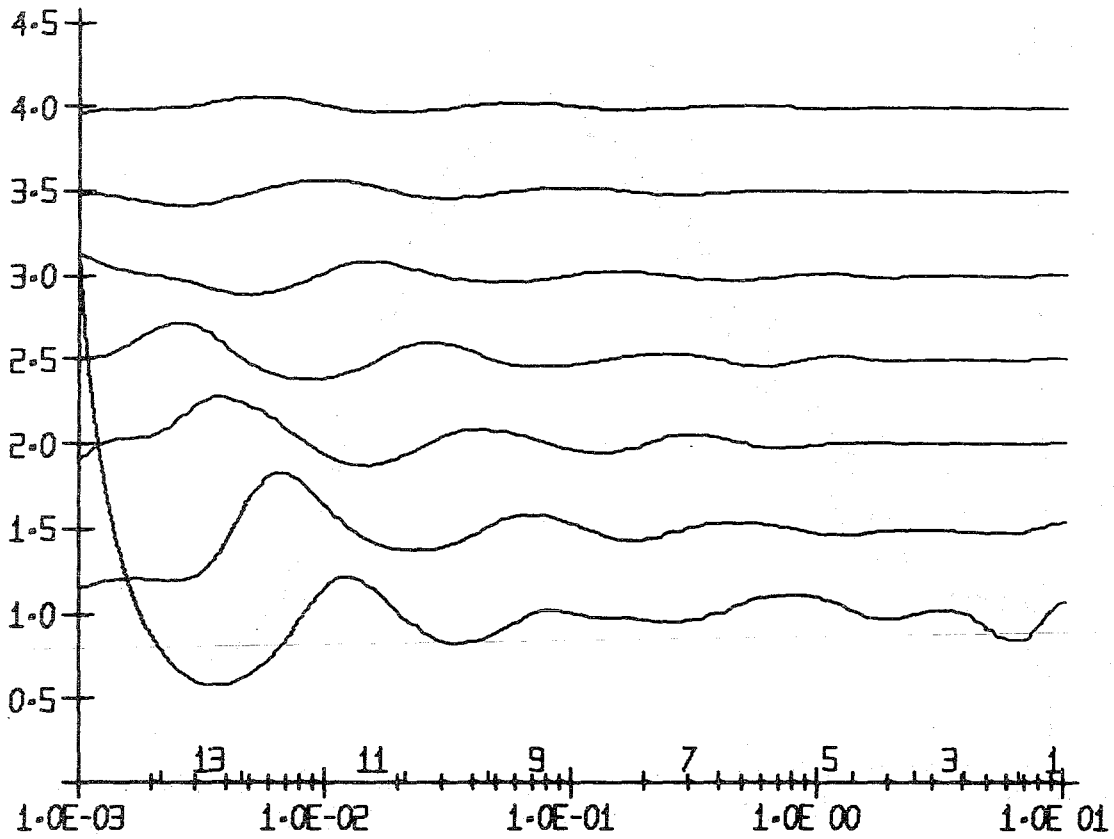


ABB-00003 VERHAELTNISSE AUF EINANDER FOLGENDER STOSSDICHTESPEKTREN

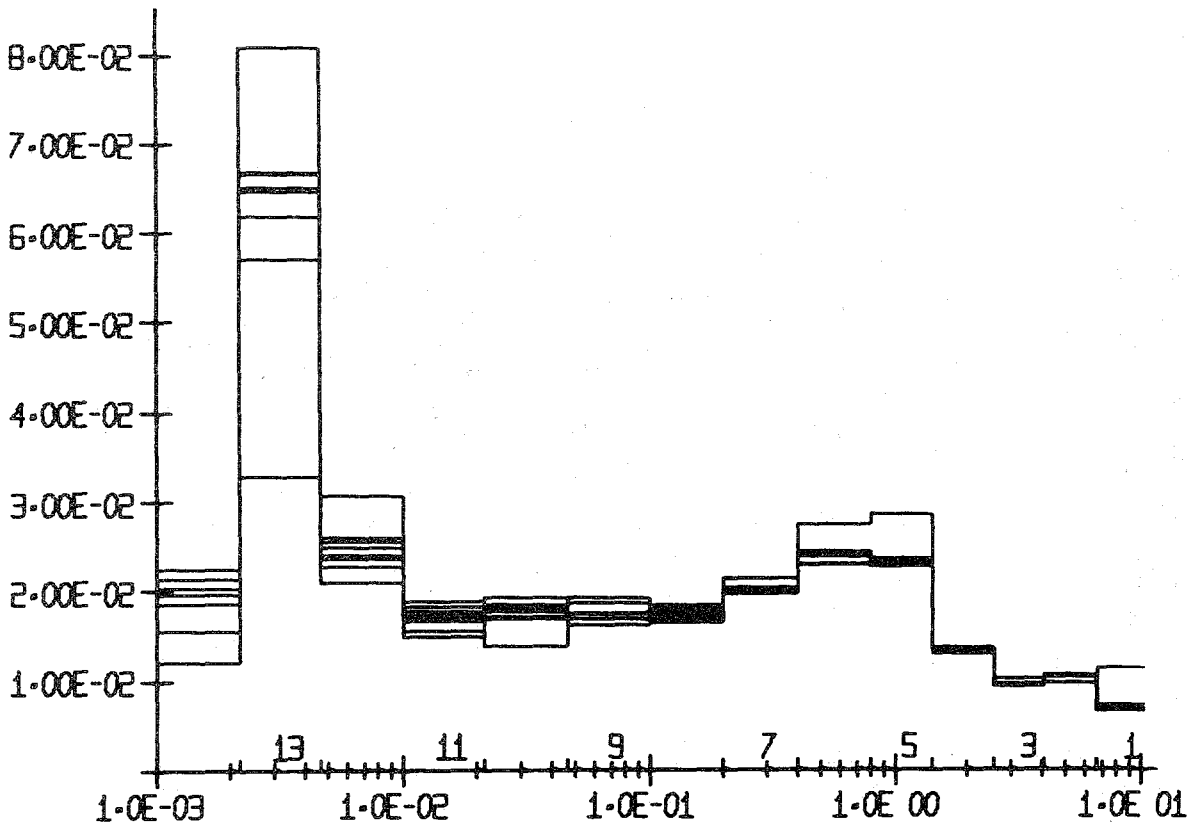


ABB-00004 BREMSLASTISCHE QUERSCHNITTE VON ITERATION NR-1-NR-8

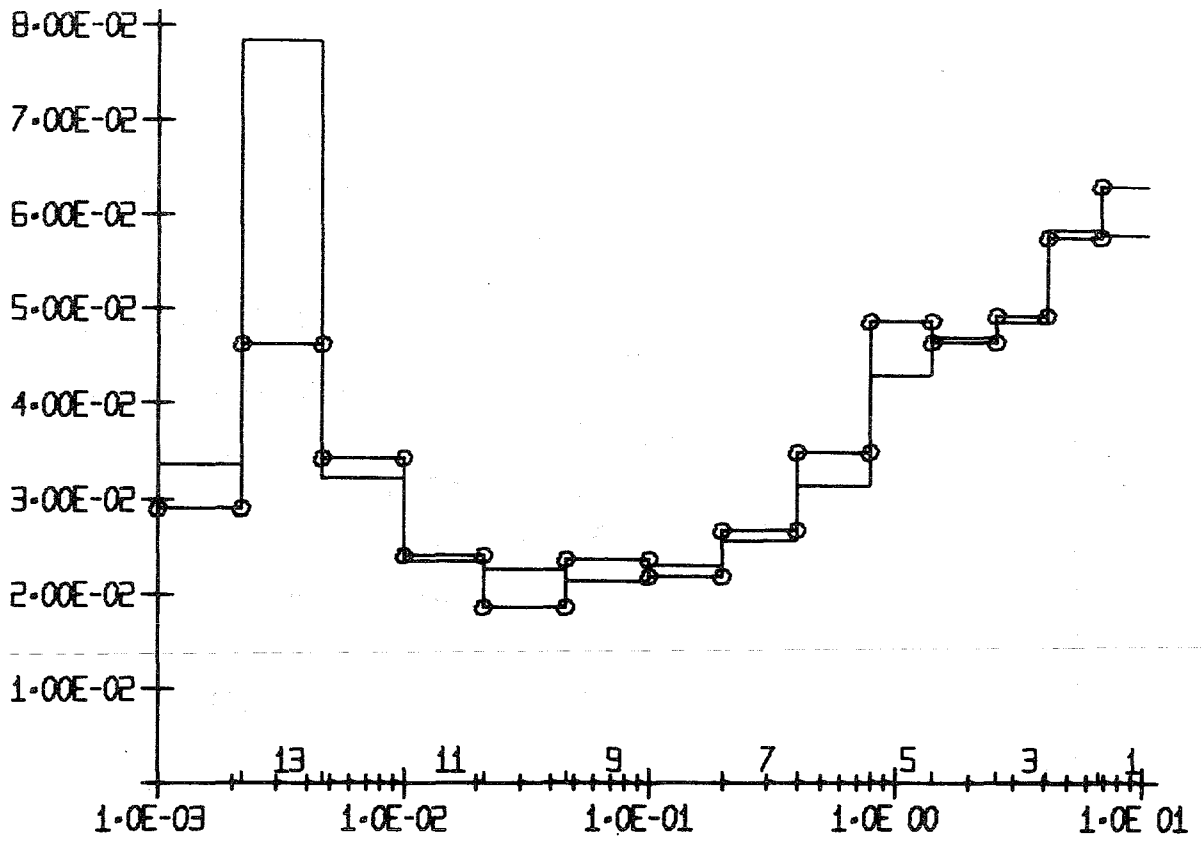


ABB-00005 REMOVAL WIRKUNGSQUERSCHNITTE VON ITERATION NR-1 UND NR-8

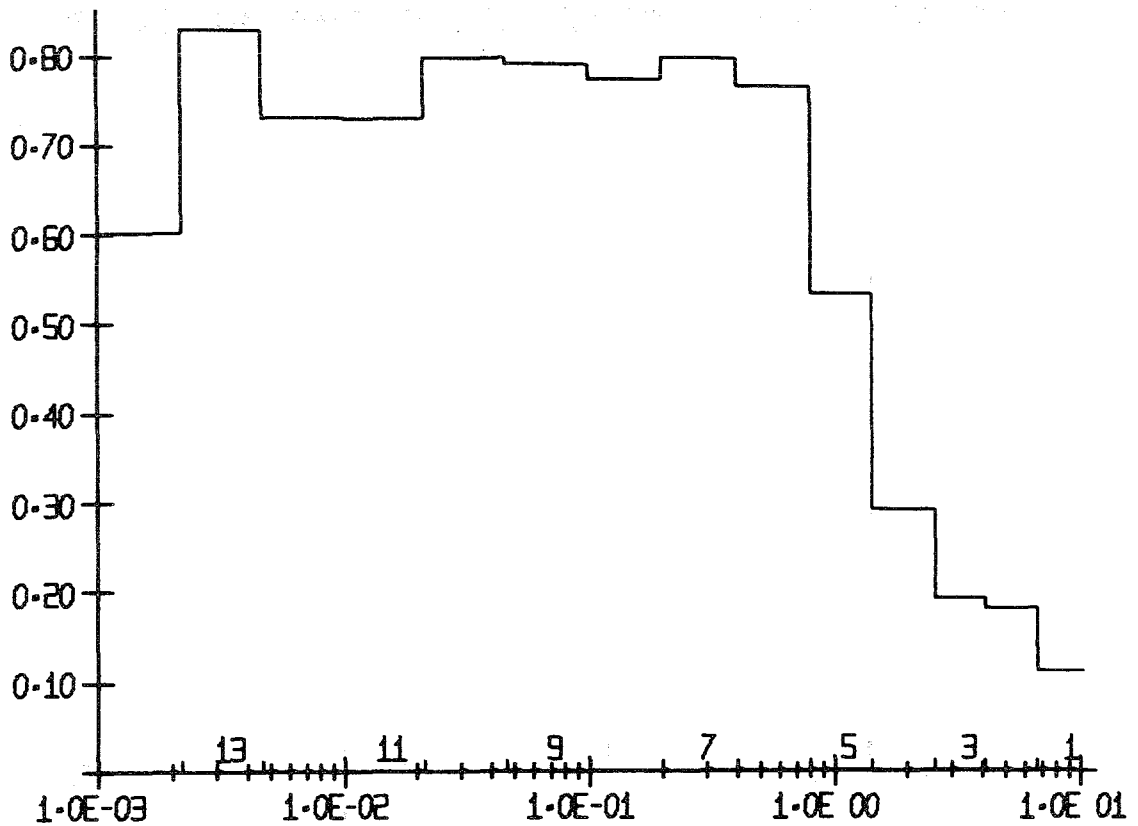


ABB-00006 VERHAELTNIS SBEL/SREM FUER ITERATION NR-8

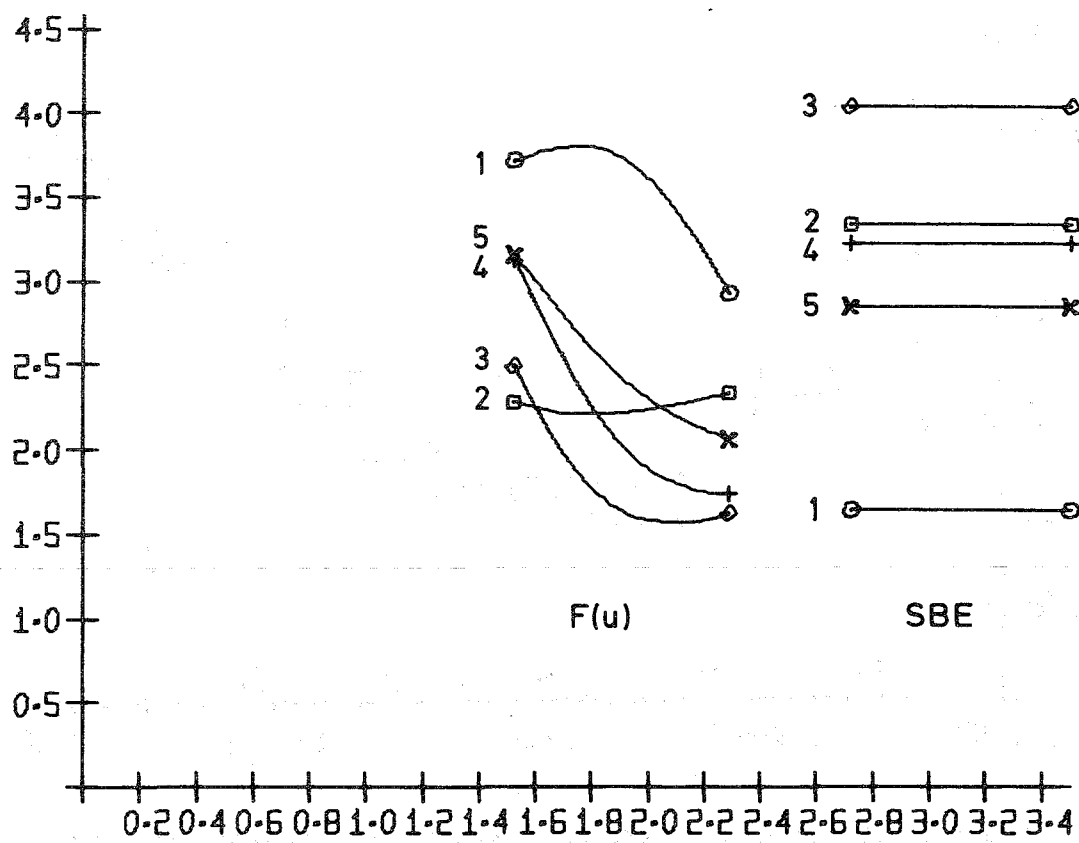


ABB-00007 STOSSDICHTE UND SBEL IN DER 13- GRUPPE VON ITERATION 1 BIS 5