KERNFORSCHUNGSANLAGE JÜLICH
GESELLSCHAFT MIT BESCHRÄNKTER HAFTUNG
Zentralinstitut für Angewandte Mathematik

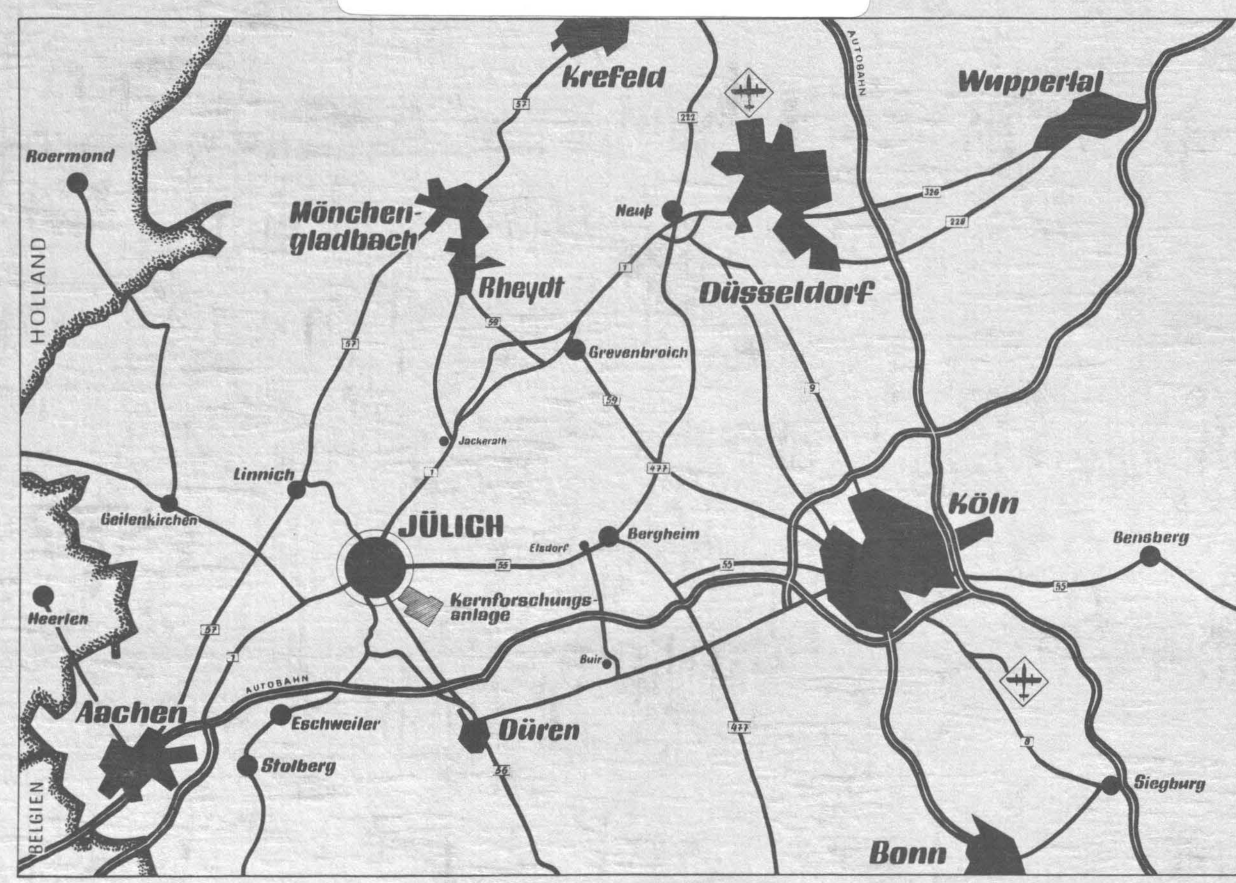
Lösung der stationären Neutronentransportgleichung bei Kugelsymmetrie

von

W. Hanke, E. Horlitz und W. Petry

Jül - 634 - MA
Dezember 1969

Als Manuskript gedruckt



Berichte der Kernforschungsanlage Jülich – Nr. 634

Zentralinstitut für Angewandte Mathematik Jül – 634 – MA

Dok.: Neutrons - Transport Theory
Integral Equations

DK: 539.125.52.001.1
517.9

Zu beziehen durch: ZENTRALBIBLIOTHEK der Kernforschungsanlage Jülich GmbH, Jülich, Bundesrepublik Deutschland

Lösung der stationären Neutronentransportgleichung bei Kugelsymmetrie

von

W. Hanke, E. Horlitz und W. Petry

I N H A L T S V E R Z E I C H N I S

1. EINLEITUNG

Das in diesem Bericht behandelte Problem trat im Institut für Reaktorentwicklung der Kernforschungsanlage Jülich GmbH im Zusammenhang mit der Entwicklung des Kugelhaufenreaktors auf.[1]

Die allgemeine stationäre Neutronentransportgleichung hat die Gestalt

$$(1.1)\qquad \begin{aligned}&(\Omega\cdot\nabla_{r})\cdot\phi(r,\Omega,E)+\Sigma(r,E)\cdot\phi(r,\Omega,E) = S(r,E)\\ &+\int\limits_{E\text{-Bereich}} dE'\int d\Omega'\;\Sigma_s(r,(\Omega\cdot\Omega'),E'\to E)\;\phi(r,\Omega',E')\end{aligned}$$

Hierbei bedeuten:

r	Ortsvektor des Neutrons,
Ω	Einheitsvektor der Geschwindigkeit des Neutrons,
E	Energie des Neutrons,
Σ	totaler Wirkungsquerschnitt,
Σ_s	differentieller Wirkungsquerschnitt,
S	Quelle,
ϕ	Neutronenfluß.

Als Zusatzbedingung wird gefordert, daß nichts in den Reaktor fließt, d. h.

(1.2) $\phi(r,\Omega,E)=0$ für r auf dem Rand und Ω in das Innere des Reaktors gerichtet.

Da es sich hier um den Kugelhaufenreaktor handelt, wird im folgenden die kugelsymmetrische Form von (1.1) (vgl. (2.1)) mit der Randbedingung (1.2) behandelt und in eine Fredholmsche Integralgleichung zweiter Art transformiert. Es werden Existenzsätze, Eindeutigkeitssätze und ein Iterationsverfahren für die Lösung angegeben. Für den Fall der Abwärtsstreuung wird auch das diskretisierte Problem diskutiert. Hierfür wurden mehrere Beispiele gerechnet.

---

[1] Die Verfasser danken den Herren Dr. H. Gerwin und Dr. L. Wolf vom Institut für Reaktorentwicklung für ihre anregenden Diskussionen.

2. TRANSFORMATION AUF INTEGRALGLEICHUNG

In diesem Abschnitt wird die stationäre Neutronentransportgleichung bei Kugelsymmetrie unter der Voraussetzung, daß von außen nichts in die Kugel fließt, in eine Fredholmsche Integralgleichung zweiter Art transformiert.

Die kugelsymmetrische Transportgleichung hat die Gestalt (vgl. [5], Kap.XI)

(2.1)
$$\left(\mu \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1-\mu^2}{r} \frac{\partial}{\partial \mu} + \Sigma(r,E)\right) \cdot \phi(r,\mu,E) = S(r,E)$$
$$+ \int\limits_{E\text{-Bereich}} dE' \int\limits_{-1}^{+1} d\mu' \int\limits_{0}^{2\pi} d\varphi' \, \Sigma_s(r, \cos\vartheta_0, E' \rightarrow E) \cdot \phi(r,\mu',E')$$

mit
$$\cos\vartheta_0 := \mu \cdot \mu' + \sqrt{(1-\mu^2)(1-\mu'^2)} \cdot \cos(\varphi-\varphi') .$$

Hierbei bedeuten:

$$r := |\mathfrak{r}| ,$$
$$\mu := \Omega_r \qquad \text{(Projektion von } \Omega \text{ auf } \mathfrak{r} \text{).}$$

Die Randbedingung (1.2) lautet für die Kugel (Mittelpunkt: Koordinatenursprung; R: Radius):

(2.2)
$$\phi(R,\mu,E) = 0 \qquad \text{für} \quad \mu < 0 .$$

Der Definitionsbereich der auftretenden Größen sei

$$B := \left\{ X : X = (r,\mu,E); \ 0 \le r \le R ; -1 \le \mu \le 1; \ E_{min} \le E \le E_{max} \right\}.$$

Für Legendrepolynome gilt das folgende Additionstheorem (siehe [13], S. 98)

$$P_n(\cos\vartheta_0) = P_n(\mu) \cdot P_n(\mu')$$
$$+ 2 \sum_{\nu=1}^{n} \frac{(n-\nu)!}{(n+\nu)!} P_n^{\nu}(\mu) P_n^{\nu}(\mu') \cos\nu(\varphi-\varphi') .$$

Daher ist folgende Approximation

(2.3)
$$\Sigma_s(r, \cos\vartheta_0, E' \rightarrow E) = \frac{1}{2\pi} \sum_{n=0}^{N} \Sigma_s^{\,n}(r, E' \rightarrow E) \cdot P_n(\cos\vartheta_0)$$

zweckmäßig und in der physikalischen Literatur üblich (P_N - Näherung).

Setzt man (2.3) in (2.1) ein und integriert über φ', so entsteht

(2.4) $$\left(\mu \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1-\mu^2}{r} \frac{\partial}{\partial \mu} + \Sigma(r,E)\right) \phi(r,\mu,E) = g(r,\mu,E)$$

mit

(2.5) $$g(r,\mu,E) := S(r,E) + \int\limits_{E\text{-Bereich}} dE' \int_{-1}^{+1} d\mu' \left(\sum_{n=0}^{N} \Sigma_s{}^n (r,E'\to E)\, P_n(\mu)\, P_n(\mu')\, \phi(r,\mu',E') \right).$$

Ferner folgt aus (1.1) und (2.3) durch Integration über φ'

(2.5*) $$\sum_{n=0}^{N} \Sigma_s{}^n (r,E'\to E)\, P_n(\mu)\, P_n(\mu') \geq 0 \quad \text{auf } B \times B \;.$$

Die Transformation von (2.4) mit (2.2) in eine Integralgleichung erfolgt mittels des Charakteristikenverfahrens (vgl. z. B. [3]).

Die charakteristischen Gleichungen von (2.4) nach Multiplikation mit r lauten

(2.6) $$\frac{dr(t)}{dt} = r(t)\cdot\mu(t) \,,$$

(2.7) $$\frac{d\mu(t)}{dt} = 1-\mu^2(t)$$

(2.8) $$\frac{d\phi(t)}{dt} = -r(t)\cdot\Sigma(r(t),E)\,\phi(t) + r(t)\cdot g\big(r(t),\mu(t),E\big) \;.$$

Für das System (2.6), (2.7), (2.8) werden folgende Anfangsbedingungen betrachtet:

$$r(0) = r_0 \;;\quad \mu(0) = \mu_0 \;;\quad \phi(0) = \phi_0 \;.$$

Durch sukzessive Lösung der Differentialgleichungen (2.7), (2.6) und (2.8) unter Beachtung der Anfangsbedingungen erhält man

$$\mu(t) = \frac{\sinh t + \mu_0 \cosh t}{\cosh t + \mu_0 \sinh t},$$

(2.9) $$r(t) = r_0 \left(\cosh t + \mu_0 \sinh t \right),$$

$$\phi(t) = \phi_0 \exp\left(-\int_0^t a(p)\,dp\right) + \int_0^t b(q) \exp\left(-\int_q^t a(p)\,dp\right) dq$$

mit

$$a(p) := r(p) \cdot \Sigma\left(r(p), E\right),$$

$$b(p) := r(p) \cdot g\left(r(p), \mu(p), E\right).$$

Die Anfangskurve für die Lösungsfläche von (2.4) wird durch die Randbedingung (2.2) festgelegt. Diese kann mittels eines Parameters s mit $-1 \leq s < 0$ in der Form

(2.10) $$r_0(s) = R \;;\quad \mu_0(s) = s \;;\quad \phi_0(s) = 0$$

dargestellt werden.

Hierbei ist zu beachten, daß die Richtungen der Projektion der Anfangskurve in den Grundraum ($r_0 - \mu_0$ - Ebene) und der charakteristischen Grundkurven nirgends übereinstimmen, was aber wegen

$$\left.\frac{dr(t)}{dt}\right|_{t=0} \cdot \frac{d\mu_0(s)}{ds} - \left.\frac{d\mu(t)}{dt}\right|_{t=0} \cdot \frac{dr_0(s)}{ds} = R \cdot s \cdot 1 \neq 0$$

für $-1 \leq s < 0$ stets erfüllt ist.

Setzt man (2.10) in (2.9) ein, so erhält man die Lösung von (2.4) in Parameterdarstellung (s,t)

(2.11) $$\mu = \mu(t,s) := \frac{\sinh t + s \cosh t}{\cosh t + s \sinh t},$$

$$r = r(t,s) := R\left(\cosh t + s \sinh t\right),$$

(2.12.a) $\phi = \phi(t,s) := \int\limits_0^t b(q,s)\, exp\left(-\int\limits_q^t a(p,s)\,dp\right) dq$

mit

$$a(p,s) = r(p,s) \cdot \Sigma\left(r(p,s), E\right)$$

$$b(q,s) = r(q,s) \cdot g\left(r(q,s), \mu(q,s), E\right) .$$

Um die Lösung ϕ in Abhängigkeit von r und μ zu erhalten, berechnet man aus den Gleichungen (2.11) t und s als Funktionen von r und μ. So ergibt sich

(2.12.b)
$$\cosh\, t(r,\mu) = \frac{R}{r}\; \frac{1+\mu\sqrt{1-\left(\frac{r}{R}\right)^2 (1-\mu^2)}}{1-\mu^2} ,$$

$$s(r,\mu) = -\sqrt{1-\left(\frac{r}{R}\right)^2 (1-\mu^2)} .$$

Setzt man dies in (2.12.a) ein, so erhält man die gesuchte Integralgleichung für $\phi = \phi(r,\mu,E)$.

Es ist leicht nachzuprüfen, daß die Integralgleichung (2.12) die Randbedingung (2.2) erfüllt: Für r = R und $\mu<0$ folgt nämlich aus (2.12.b)

$t(R,\mu)=0$ und somit $\phi(R,\mu,E)=0$ nach (2.12.a) .

(2.12) hat allerdings noch nicht die Gestalt einer Fredholmschen Integralgleichung. Ersetzt man q durch $r' = R\,(\cosh q + s(r,\mu)\sinh q)$, so entsteht nach elementarer aber längerer Rechnung für die gesuchte Funktion $\phi(r,\mu,E)$ nach Einsetzen von $g(r,\mu,E)$ eine Fredholmsche Integralgleichung zweiter Art. Diese lautet

(2.13.a)
$$\phi(r,\mu,E) = \int\limits_0^R dr'\,(K_1+K_2)(r,\mu,E,r') \cdot S(r',E)$$
$$+ \int\limits_0^R dr' \int\limits_{E\text{-Bereich}} dE' \int\limits_{-1}^{+1} d\mu'\; K(r,\mu,E,r',\mu',E')\;\phi(r',\mu',E')$$

mit

$$\text{(2.13.b)}\quad\left\{\begin{aligned}
&K := K_1 \Sigma^+ + K_2 \Sigma^- ,\\
&\Sigma^\pm := \sum_{n=0}^{N} \Sigma_s^{\,n}(r', E' \to E)\, P_n(\pm\alpha)\, P_n(\mu'),\\
&K_1(r,\mu,E,r') = \begin{cases} \frac{1}{\alpha}\exp\left[-\left(\int_{r\sqrt{1-\mu^2}}^{r'} \beta(x)\,dx + \int_{r\sqrt{1-\mu^2}}^{r} \beta(x)\,dx\right)\right] & \text{für } r\sqrt{1-\mu^2} \le r' \le R;\ \mu \ge 0 \\ \frac{1}{\alpha}\exp\left[-\int_{r}^{r'} \beta(x)\,dx\right] & \text{für } r \le r' \le R;\ \mu \le 0 \\ 0 & \text{sonst}, \end{cases}\\
&K_2(r,\mu,E,r') = \begin{cases} \frac{1}{\alpha}\exp\left[-\int_{r'}^{r} \beta(x)\,dx\right] & \text{für } r\sqrt{1-\mu^2} \le r' \le r;\ \mu \ge 0 \\ 0 & \text{sonst}, \end{cases}\\
&\alpha := \frac{1}{r}\sqrt{r'^2 - (1-\mu^2)\,r^2}\,, \qquad \beta(x) := \frac{x\,\Sigma(x,E)}{\sqrt{x^2-(1-\mu^2)\,r^2}}
\end{aligned}\right.$$

Damit ist die Integrodifferentialgleichung (2.1) mit den Randbedingungen (2.2) auf die Integralgleichung (2.13) zurückgeführt.

Setzt man

$$(2.14) \qquad f(r,\mu,E) := \int_0^R (K_1+K_2)(r,\mu,E,r') \cdot S(r',E)\,dr',$$

so kann man die Integralgleichung (2.13) in der Form

$$(2.15) \qquad \phi(X) = \int_B K(X,X')\,\phi(X')\,dX' + f(X)$$

schreiben.

Es gelten folgende Eigenschaften:

Lemma 1: f ist eine stetige Funktion auf B.

Beweis: folgt aus (1.1) und (2.14).

Lemma 2: Es gilt

$K(X,X') \geqslant 0$ auf $B \times B$ und $f(X) \geqslant 0$ auf B.

Beweis: Dies folgt aus (2.5^*), (2.13) und (2.14).

Lemma 3: Jede meßbare beschränkte Funktion auf B wird durch K in eine stetige Funktion auf B abgebildet.

Beweis: Die einzige Unstetigkeit in K wird durch den Faktor $\frac{1}{\alpha}$ erzeugt, was nach Integration zu einer stetigen Funktion auf B führt.

3. EXISTENZ, EINDEUTIGKEIT UND KONSTRUKTION

Wir betrachten die Integralgleichung (2.13) bzw. (2.15) im Raum $C^o(B)$ der stetigen Funktionen auf B mit der Norm $\|y\| := \max_{t \in B} |y(t)|$ (Banachraum).

Um eine Lösung der Gleichung (2.15) zu konstruieren, wird das folgende Iterationsverfahren

$$(3.1) \qquad \phi_{\nu+1}(X) = \int_B K(X, X')\, \phi_\nu(X')\, dX' + f(X) \qquad (\nu = 0, 1, 2, \ldots)$$

mit $\phi_o \in C^o(B)$

betrachtet.

Unter der Voraussetzung

$$(3.2) \qquad \|K\| := \sup_{\|\phi\| \leq 1} \|K\phi\| < 1$$

konvergiert das Iterationsverfahren (3.1) nach einem Satz der Funktionalanalysis gegen die eindeutige Lösung ϕ^* von (2.15).

Die Anwendung dieses Satzes auf (2.13) ergibt den folgenden

Satz 1 (Existenz und Eindeutigkeit) : Es gelte

$$(3.3) \qquad 2 \max_{X \in B} \int_0^R \int_{E_{min}}^{E_{max}} (K_1 + K_2)(r, \mu, E, r')\, \Sigma_s^o(r', E' \to E)\, dE'\, dr' < 1 .$$

Dann konvergiert in $C^o(B)$ das Verfahren (3.1) gegen die eindeutige Lösung ϕ^* von (2.15). Es ist $\phi^* \geq 0$.

Beweis : a) Nach den Lemmata 1 und 3 erzeugt $K\phi + f$ eine Abbildung von $C^o(B)$ in sich.

b) Sei $\phi \in C^o(B)$, dann gilt

$$\|K\| = \sup_{\|\phi\| \leq 1} \max_{X \in B} \left| \int_B K\phi \right| \leq \max_{X \in B} \int K \|\phi\|$$

$$= \max_{X \in B} \iiint K \, dr' d\mu' dE' = \max_{X \in B} \iiint (K_1 \Sigma^+ + K_2 \Sigma^-)$$

$$= 2 \max_{X \in B} \int_0^R dr' (K_1 + K_2)(r, \mu, E, r') \int_{E_{min}}^{E_{max}} dE' \, \Sigma_s^{\,o} (r', E' \to E) < 1$$

c) $\phi^* \geq 0$ folgt aus der Neumannschen Reihe unter Beachtung von Lemma 2.

Bemerkung :

a) Für den Spezialfall eines homogenen Mediums, d. h. Σ, Σ_s und S sind unabhängig von r, kann (3.3) teilweise ausgewertet werden.

Es ergibt sich die numerisch leicht anwendbare Bedingung

$$\text{(3.3')} \qquad \max_{E_{min} \leq E \leq E_{max}} \frac{\int_{E_{min}}^{E_{max}} \Sigma_s^{\,o} (E' \to E) \, dE'}{\Sigma(E)} \left(1 - e^{-2R\Sigma(E)} \right) < 1 .$$

b) Ein ähnliches hinreichendes Kriterium für die Existenz und Eindeutigkeit einer nichtnegativen Lösung findet man in [1], [2].

c) Für die nichtlineare Transportgleichung werden Existenz- und Eindeutigkeitssätze in [12] bewiesen.

Satz 1 gibt ein hinreichendes Kriterium für die Konvergenz des Verfahrens (3.1) an. Unter der Voraussetzung der Existenz einer nichtnegativen Lösung von (2.15) gilt der folgende

Satz 2 (Konstruktion) : (2.15) besitze mindestens eine nichtnegative Lösung $\tilde{\phi} \in C^o(B)$. Dann konvergiert das Iterationsverfahren (3.1) mit $\phi_o = 0$ in $C^o(B)$ monoton von unten gegen die nichtnegative Minimallösung $\phi^* \in C^o(B)$ von (2.15).

Beweis : a) Es gilt für alle ν

$\phi_{\nu+1} \geq \phi_\nu$.

Der Beweis erfolgt durch vollständige Induktion. Aus (3.1) mit $\nu = 0$ erhält man mittels Lemma 2 $\phi_1 = f \geq 0 = \phi_0$. Sei $\phi_i \geq \phi_{i-1}$ für $i \leq \nu$, dann folgt aus (3.1) mittels Lemma 2

$\phi_{\nu+1} - \phi_\nu = \int_B K(\phi_\nu - \phi_{\nu-1}) \geq 0$, womit die Behauptung bewiesen ist.

b) Es gilt für alle ν

$\tilde{\phi} \geq \phi_\nu$

Für $\nu = 0$ ist die Behauptung wegen $\phi_0 = 0$ richtig. Sei nun $\tilde{\phi} \geq \phi_i$ für $i \leq \nu$ bewiesen, dann folgt analog wie bei (a)

$\tilde{\phi} - \phi_{\nu-1} = \int_B K(\tilde{\phi} - \phi_\nu) \geq 0.$

c) Sei $X \in B$, dann ist somit die Folge $\{\phi_\nu(X)\}$ monoton nichtfallend und nach oben beschränkt. Es existiert daher

$$\lim_{\nu \to \infty} \phi_\nu(X) = \phi^*(X) \leq \tilde{\phi}(X).$$

d) Da $|K(X,X')\phi_\nu(X')| \leq K(X,X')\tilde{\phi}(X')$ und $K(X,X')\tilde{\phi}(X')$ bezüglich X' summierbar ist, folgt aus (3.1) mit Hilfe des Satzes von Lebesgue

$$\phi^*(X) = \int_B K(X,X')\,\phi^*(X')\,dX' + f(X) , \tag{3.4}$$

d. h. ϕ^* ist Lösung von (2.15).

e) Da $f \in C^0(B)$ und ϕ^* beschränkt ist (nach c)), folgt aus (3.4) mit Lemma 3, daß ϕ^* stetig ist auf B. Die monoton nichtfallende Folge $\{\phi_\nu\}$ stetiger Funktionen konvergiert daher gegen die stetige Funktion ϕ^*. Nach dem Satz von Dini konvergiert dann $\{\phi_\nu\}$ gleichmäßig gegen ϕ^*. Da $\tilde{\phi}$ eine beliebige nichtnegative Lösung von (3.1) ist und $\phi^* \leq \tilde{\phi}$ gilt, ist ϕ^* Minimallösung des Problems.

Andere iterative Verfahren zur Konstruktion einer Lösung der Transportgleichung findet man z. B. in [4], [9], [10], [11].

4. ABWÄRTSSTREUUNG

Für den physikalischen Sonderfall schneller Neutronen, der im folgenden betrachtet wird, gilt

(4.1) $\quad \Sigma_s^n(r, E' \to E) = 0$ für $E' < E$ (Abwärtsstreuung)

Zur Berechnung wird der Energiebereich $E_{min} \leq E \leq E_{max}$ in L Gruppen $G_\ell = [E_{\ell+1}, E_\ell]$ $\quad (\ell = 1, \dots, L)$ aufgeteilt,

$$0 \qquad E_{min} = E_{L+1} \qquad \dots \qquad E_3 \qquad E_2 \qquad E_1 = E_{max}$$

wobei aus rechentechnischen Gründen die Zählung nach fallender Energie erfolgt.

Setzt man $\quad B_0 := \{ x = (r, \mu) \, ; \; 0 \leq r \leq R \, ; \; -1 \leq \mu \leq 1 \}$ und

$\phi^\ell(x, E) := \phi(X)$ für $E \in G_\ell$, dann entsteht aus (2.15)

unter der Voraussetzung (4.1) das Integralgleichungssystem

$$(4.2) \qquad \phi^\ell(x,E) = \int_{B_0} dx' \sum_{\ell'=1}^{\ell} \int_{max(E_{\ell'+1}, E)}^{E_{\ell'}} dE' \; K(x,E,x',E') \, \phi^{\ell'}(x',E') \; + f(x,E)$$

für $E \in G_\ell$.

Aus später ersichtlichen Gründen (siehe 5.) betrachten wir anstelle von (4.2) das System

$$(4.3) \qquad \phi^\ell(x,E) = \int_{B_0} dx' \sum_{\ell'=1}^{\ell} \int_{G_{\ell'}} dE' \; K(x,E,x',E') \, \phi^{\ell'}(x',E') \; + f(x,E)$$

$E \in G_\ell$.

Das Iterationsverfahren (3.1) für (4.3) kann in der Form

$$(4.4) \qquad \phi^\ell_{\nu+1}(x,E) = \int_{B_0} dx' \sum_{\ell'=1}^{\ell} \int_{G_{\ell'}} dE' \; K(x,E,x',E') \, \phi^{\ell'}_\nu(x',E') + f(x,E)$$

$E \in G_\ell \qquad\qquad (\nu = 0, 1, \dots)$

geschrieben werden.

Eine weitere Möglichkeit zur Konstruktion einer Lösung von (4.3) ist das folgende (numerisch effektivere) Verfahren:

Sei $\phi^{\ell}(x,E)$ für alle $\ell < \ell_o \leq L$ bekannt, dann werde $\phi^{\ell_o}(x,E)$ durch das folgende Iterationsverfahren

$$\phi^{\ell_o}_{\nu+1}(x,E) = \int_{B_o} dx' \int_{G_{\ell_o}} dE'\, K(x,E,x',E) \cdot \phi^{\ell_o}_{\nu}(x',E') \tag{4.5}$$

$$+ \int_{B_o} dx' \sum_{\ell'=1}^{\ell_o-1} \int_{G_{\ell'}} dE'\, K(x,E,x',E')\, \phi^{\ell'}(x',E') + f(x,E)$$

für $E \in G_{\ell_o}$

mit $\phi^{\ell_o}_o(x,E) = 0$ bestimmt.

Es gilt der

<u>S a t z 3 :</u> (2.15) besitze mindestens eine nichtnegative Lösung $\tilde{\phi} \in C^o(B)$. Dann konvergiert das Iterationsverfahren (4.5) für $l_o = 1,2,..,L$ mit $\phi^{\ell_o}_o = 0$ in $C^o(B_o \times G_{\ell_o})$ monoton von unten gegen die nichtnegative Minimallösung $\phi^*_{\ell_o} \in C^o(B_o \times G_{\ell_o})$ von (2.15).

Der Beweis verläuft analog wie bei Satz 2.

5. ENTWICKLUNG NACH LEGENDREPOLYNOMEN

Aufgrund der Approximation (2.3) ist es zweckmäßig, für $\phi(r,\mu,E)$ den folgenden Ansatz zu machen

$$(5.1) \qquad \phi(r,\mu,E) = \sum_{n=0}^{\infty} \phi^n(r,E)\, P_n(\mu) \, .$$

Durch Einsetzen von (5.1) in (2.13) entsteht unter Beachtung der Orthogonalität der Legendrepolynome das folgende Integralgleichungssystem

$$(5.2) \qquad \frac{2}{2n+1}\, \phi^n(r,E) = \int_0^R dr' \int_{-1}^{+1} d\mu\, (K_1+K_2)\, P_n(\mu)\, S(r',E)$$

$$+ 2\pi \sum_{n'=0}^{N} \int_0^R dr' \int_{-1}^{+1} d\mu \left(K_1+(-1)^{n'}K_2\right) P_n(\mu) \cdot P_{n'}(-\alpha) \int_{E_{min}}^{E_{max}} dE'\, \Sigma_s^{n'}(r',E'\rightarrow E)\, \frac{2}{2n'+1}\, \phi^{n'}(r',E')$$

$$(n = 0,1,2,\dots\ )$$

mit

$$\alpha = \frac{1}{r'} \sqrt{r'^2 - (1-\mu^2)\, r^2} \, .$$

Man erhält somit ein gekoppeltes Integralgleichungssystem für $\phi^0, \phi^1, \dots, \phi^N$, während die restlichen ϕ^n mit $n > N$ aus (5.2) und $\phi^0, \phi^1, \dots, \phi^N$ berechnet werden können.

Setzt man

$$(5.3) \qquad y^n(r,E) = \frac{1}{2n+1}\, \phi^n(r,E) \, ,$$

dann genügt es, anstelle von (5.2) das System

$$(5.4) \qquad y^n(r,E) = \frac{1}{2} \int_0^R dr' \int_{-1}^{+1} d\mu\, (K_1+K_2)(r,\mu,E,r')\, P_n(\mu)\, S(r',E)$$

$$+ 2\pi \sum_{n'=0}^{N} \int_0^R dr' \int_{-1}^{+1} d\mu \left(K_1+(-1)^{n'}K_2\right) P_n(\mu)\, P_{n'}(-\alpha) \int_{E_{min}}^{E_{max}} dE'\, \Sigma_s^{n'}(r',E'\rightarrow E) \cdot y^{n'}(r',E')$$

$$(n = 0,1,\dots,N)$$

zu betrachten.

Die Lösung ϕ von (2.15) kann aus $\phi^o,\ldots,\phi^N$ bzw. $y^o,\ldots,y^N$ (ohne Kenntnis von ϕ^n bzw. y^n mit $n > N$) berechnet werden. Es gilt nämlich das

Lemma 4 : Sei y^n für $n \leq N$ Lösung von (5.4). Setzt man

$$f(r,\mu,E) := \int_0^R dr'(K_1+K_2)(r,\mu,E,r')\cdot S(r',E)$$

$$F(r,\mu,E;y^o,\ldots,y^N) := 2\pi\sum_{n'=0}^{N}\int_0^R dr'\,(K_1+(-1)^{n'}K_2)\,P_{n'}(-\alpha)\cdot$$

$$\cdot\int_{E_{min}}^{E_{max}} dE'\,\Sigma_s^{n'}(r',E'\to E)\,y^{n'}(r',E')\ ,$$

dann gilt die Darstellung

$$\phi(r,\mu,E) = f(r,\mu,E) + 2F(r,\mu,E;y^o,\ldots,y^N)\ . \tag{5.5}$$

Beweis : Aus (5.4) folgt

$$y^n(r,E) = \frac{1}{2}\int_{-1}^{+1} f(r,\mu,E)P_n(\mu)d\mu + \int_{-1}^{+1} F(r,\mu,E;y^o,\ldots,y^N)P_n(\mu)d\mu$$

Setzt man diese Beziehung in (5.1) ein, so erhält man aufgrund der Beziehung ($g \in C^o([-1,+1])$)

$$g(\mu) = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(\mu)\cdot\frac{2n+1}{2}\int_{-1}^{+1} P_n(\mu')\,g(\mu')d\mu'$$

(Vollständigkeit von $P_n(\mu)$ in $C^o([-1,+1])$) die Behauptung.

6. DISKRETISIERUNG

a) Diskretisierung bezüglich des Ortes

Das Intervall $[0,R]$ wird in die Teilintervalle $I_{i+1} = [r_i, r_{i+1}]$ $(i = 0,1,\ldots K-1)$ mit $r_0 = 0$ und $r_K = R$ zerlegt. Für $r \in I_i$ gelte

$$\Sigma(r,E) = \Sigma_i(E),$$
$$S(r,E) = S_i(E),$$
$$\Sigma_s^n(r,E'\to E) = \Sigma_{s\,i}^{\;n}(E'\to E).$$

Für $y^n(r,E)$ $(n = 0,1,\ldots,N)$ wird ein Polygonzug angesetzt in der Form

$$y^n(r,E) = y^n(r_i,E) + \frac{r-r_i}{r_{i+1}-r_i}\left(y^n(r_{i+1},E) - y^n(r_i,E)\right) \tag{6.1}$$
$$\text{für } r \in J_{i+1} \quad (i = 0,1,\ldots,K-1) \;.$$

Betrachtet man (5.4) an den Stellen $r = r_i$ $(i = 0,\ldots,K)$, und setzt man ferner in die rechte Seite von (5.4) die Relation (6.1) ein, so erhält man für die $y_i^n(E) := y^n(r_i,E)$ das Integralgleichungssystem

$$\begin{aligned} y_i^n(E) = {} & \frac{1}{2}\sum_{i'=0}^{K-1}\left(\bar{\Delta}_{i\,i'}^{\,n\,0}(E) + \tilde{\Delta}_{i\,i'}^{\,n\,0}(E)\right) S_{i'}(E) \\ & + 2\pi\sum_{n'=0}^{N}\sum_{i'=0}^{K}\int_{E_{min}}^{E_{max}} dE'\Big[\bar{\Delta}_{i\,i'}^{\,n\,n'}(E)\cdot\Sigma_{s\,i'}^{\;n'}(E'\to E) \\ & \qquad + \tilde{\Delta}_{i\,i'-1}^{\,n\,n'}(E)\,\Sigma_{s\,i'-1}^{\;n'}(E'\to E)\Big]\, y_{i'}^{n'}(E') \end{aligned} \tag{6.2}$$

$$(i = 0,\ldots,K;\quad n = 0,\ldots,N) \;.$$

Dabei ist

$$\bar{\Delta}_{i i'}^{n n'}(E) := \begin{cases} \int_{r_{i'}}^{r_{i'+1}} dr' \int_{-1}^{+1} d\mu \, (K_1 + (-1)^{n'} K_2)(r_i, \mu, E, r') \cdot P_n(\mu) \\ \quad \cdot P_{n'}(-\alpha) \dfrac{r_{i'+1} - r'}{r_{i'+1} - r_{i'}} & \text{für } i' = 0, 1, \ldots, K-1 \\ 0 \quad \text{für } i' = K \end{cases}$$

$$\tilde{\Delta}_{i i'}^{n n'}(E) := \begin{cases} \int_{r_{i'}}^{r_{i'+1}} dr' \int_{-1}^{+1} d\mu \, (K_1 + (-1)^{n'} K_2)(r_i, \mu, E, r') \cdot P_n(\mu) \\ \quad \cdot P_{n'}(-\alpha) \dfrac{r' - r_{i'}}{r_{i'+1} - r_{i'}} & \text{für } i' = 0, 1, \ldots, K-1 \\ 0 \quad \text{für } i' = -1 \end{cases}$$

b) <u>Diskretisierung bezüglich der Energie</u>

In jeder Energiegruppe G_l $(l = 1, \ldots, L)$ werden die $\Sigma_l(E)$ an **diskreten** Energiepunkten gegeben und die Funktionen $S_l(E)$, $\Sigma_{s\,l}^{\;n}(E' \to E)$ und $y_l^n(E)$ als Fourierreihen dargestellt. Für die Berechnung der Fourierkoeffizienten vergleiche man [6]. Mit den Abkürzungen

$$\varphi_{l,0}(E) = \frac{1}{\sqrt{E_l - E_{l+1}}}$$

(6.4)
$$\left.\begin{array}{l} \varphi_{l,j}(E) \\ \varphi_{l,j+F}(E) \end{array}\right\} = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{E_l - E_{l+1}}} \left\{\begin{array}{c} \sin \\ \cos \end{array}\right\} \left(\pi j \, \frac{2E - (E_l + E_{l+1})}{E_l - E_{l+1}}\right)$$

$$(j = 1, 2, \ldots, F)$$

wird der folgende Ansatz gemacht $(E \in G_l,\ E' \in G_{l'})$

$$S_i(E) = \sum_{j=0}^{2F} S_{i\,j}^{\ell} \cdot \varphi_{\ell_j}(E),$$

(6.5)
$$\Sigma_{s\,i}^{\,n}(E' \to E) = \sum_{j=0}^{2F} \sum_{j'=0}^{2F} \sigma_{i\;\,j\,j'}^{n\,\ell\,\ell'} \cdot \varphi_{\ell_j}(E) \cdot \varphi_{\ell'_{j'}}(E'),$$

$$y_i^n(E) = \sum_{j=0}^{2F} y_{i\;\,j}^{n\,\ell} \cdot \varphi_{\ell_j}(E).$$

Setzt man (6.5) in (6.2) ein, so erhält man unter Beachtung der Orthonormalität von $\left\{\varphi_{1_j}\ ;\ j = 0,\dots,2F\right\}$ das lineare Gleichungssystem

(6.6)
$$y_{i\,j}^{n\,\ell} = \frac{1}{2} \sum_{i'=0}^{K-1} \sum_{j''=0}^{2F} S_{i'\,j''}^{\ell} \left(\bar{D}_{i\,i'\,j''\,j}^{\,n\,o\,\ell} + \tilde{D}_{i\,i'\,j''\,j}^{\,n\,o\,\ell}\right)$$

$$+ 2\pi \sum_{n'=0}^{N} \sum_{i'=0}^{K} \sum_{\ell'=1}^{L} \sum_{j'=0}^{2F} \sum_{j''=0}^{2F} \Big[\sigma_{i'\;\,j''\,j'}^{n'\,\ell\,\ell'} \cdot \bar{D}_{i\,i'\,j''\,j}^{\,n\,n'\,\ell}$$

$$+ \sigma_{i'-1\;\,j''\,j'}^{n\;\;\ell\;\;\ell'} \cdot \tilde{D}_{i\,i'-1\,j''\,j}^{\,n\,n'\,\ell} \Big] \cdot y_{i'\,j'}^{n'\,\ell'}$$

$$(i = 0,\dots,K\ ;\ n = 0,\dots,N\ ;\ \ell = 1,\dots,L\ ;\ j = 0,\dots,2F)$$

mit

(6.7)
$$\bar{D}_{i\,i\,j''\,j}^{\,n\,n'\,\ell} = \int_{G_\ell} \bar{\Delta}_{i\,i'}^{\,n\,n'}(E) \cdot \varphi_{\ell_j}(E) \cdot \varphi_{\ell_{j''}}(E)\,dE,$$

$$\tilde{D}_{i\,i'\,j''\,j}^{\,n\,n'\,\ell} = \int_{G_\ell} \tilde{\Delta}_{i\,i'}^{\,n\,n'}(E) \cdot \varphi_{\ell_j}(E) \cdot \varphi_{\ell_{j''}}(E)\,dE.$$

c) Abwärtsstreuung

Für den in 4. beschriebenen Spezialfall vereinfacht sich das System (6.6).

Setzt man für $l = 1,..,L$

$$y^{\ell} = (y_{i\,j}^{n\,\ell} \;;\; n = 0,\dots,N\,;\; i = 0,\dots,K\,;\; j = 0,\dots,2F),$$

dann hat das System (6.6) die Gestalt

$$y^{\ell} = b^{\ell} + \sum_{\ell'=1}^{\ell} A_{\ell\ell'}\, y^{\ell'} \qquad (\ell = 1,\dots,L) \tag{6.8}$$

wobei b^l und $A_{ll'}$ $(N + 1)\times(K + 1)\times(2F + 1)$ reihige Vektoren bzw. Matrizen sind.

Auf das Gleichungssystem (6.8) kann das Iterationsverfahren (4.5) angewendet werden:

Sei y^l für alle $l < l_o \leq L$ bekannt, dann werde y^{l_o} durch das folgende Iterationsverfahren

$$y_{\nu+1}^{\ell_o} = A_{\ell_o\ell_o}\, y_{\nu}^{\ell_o} + \sum_{\ell'=1}^{\ell_o-1} A_{\ell_o\ell'}\, y^{\ell'} + b^{\ell_o} \qquad (\nu = 0,1,2,\dots) \tag{6.9}$$

bestimmt mit $y_o^{l_o} = (0)$.

7. NUMERIK

Der Integrand der $\bar{\Delta}^{nn'}_{ii'}(E)$ und $\tilde{\Delta}^{nn'}_{ii'}(E)$ von (6.3) ist wegen der Singularität in K_1, K_2 (vgl. (2.13.b)) für gerades n' und für $i \gg i'$ singulär, sonst stetig. In den singulären Fällen erhält man durch Vertauschung der Integrationsreihenfolge und anschließende partielle Integration ebenfalls nichtsinguläre Integrale.

Somit lassen sich also die $\bar{D}$ und $\tilde{D}$ (vgl. (6.7)), aus denen sich die Koeffizienten des Gleichungssystems (6.6) berechnen, als 3-fache Integrale über (r,μ,E) mit stetigem Integranden darstellen.

Für den Spezialfall 6.(c) wurde hiernach ein FORTRAN-Programm für die IBM /360-75 angefertigt (vgl. hierzu [7]). Die 3-fach-Integrale wurden hierbei nach der Trapez- bzw. Simpsonregel berechnet. Das lineare Gleichungssystem (6.6) wird mittels des Iterationsverfahrens (6.9) gelöst. Ferner wird die Konvergenz des Iterationsverfahrens mit Hilfe des hinreichenden Konvergenzkriteriums (3.3) überprüft.

Das Programm wurde für maximal 572-reihige Matrizen $A_{ll'}$ (vgl. (6.8)) und $L = 25$ Energiegruppen angefertigt.
Es wurden einige Beispiele gerechnet, deren Ergebnisse mit den physikalisch zu erwartenden Weiten gut übereinstimmten.
So ergab sich für ein Beispiel mit einer relativen Genauigkeit der Ergebnisse von 10^{-2} eine mittlere Anzahl von 12 Iterationen pro Energiegruppe. In diesem Fall benötigte das Programm 100 Minuten.

L i t e r a t u r :

[1] Case, K. M. and Zweifel, P. F. — Existence and uniqueness theorems for the neutron transport equation.
J. Math. Phys. 4 (11), 1376 - 1385 (1963).

[2] Case, K. M. and Zweifel, P. F. — Linear transport theory.
Addison-Wesley Publishing Company, Inc. Reading (Mass.), Palo Alto, London, Don Mills (Ontario) 1967.

[3] Courant, R. und Hilbert, D. — Methoden der mathematischen Physik, Bd II.
Springer, Berlin 1937.

[4] Crawford, B. W. — An iterative solution method for the neutron transport equation with unisotropic scattering.
Univ. California, Berkeley, Ph. D. 1966.

[5] Davison, B. — Neutron transport theory.
Oxford University Press, Oxford 1958.

[6] Gerwin, H. — Zur Konvergenz der PN-Näherung in Spektralberechnungen.
KFA-Jülich, Interner Bericht IRG - 67 - 7.

[7] Hanke, W. und E. Horlitz — Ein Programm zur Lösung der stationären Neutronentransportgleichung.
In Vorbereitung.

[8] Inönü, E. and Zweifel, P. F. — Developments in transport theory.
Academic Press. London - New York 1967.

[9] Laussermair, F. — Eine iterative Methode zur Behandlung der energieabhängigen Transportgleichung.
Acta Physica Austriaca 18, 146 - 158 (1964).

[10] Lebedev, V. I. The methods of characteristics for the solution of the kinetic equation.
U. S. S. R. Comp. Math. and Math. Phys. 6 (2), 78 - 111 (1966).

[11] Marcuk, G. I. Some application of splitting-up methods to the solution of mathematical physics problems.
Apl. Mat. 13, 103 - 132 (1968)(M. R. 37#6042).

[12] Pazy, A. and Rabinowitz, P. H. A nonlinear Integral Equation with Applications to neutron transport theory.
Arch. Rational Mech. Anal. 32, 226 - 246 (1969).

[13] Rottmann, K. Mathem. Formelsammlung.
Bibliographisches Institut, Mannheim 1960.