

FZR-245

Dezember 1998

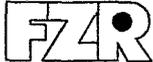
Archiv-Ex.:

Hans-Ulrich Barz und Jörg Konheiser

**Monte-Carlo Programm TRAMO-
Möglichkeiten und Anleitung zur Nutzung**

Herausgeber:
FORSCHUNGSZENTRUM ROSSENDORF
Postfach 51 01 19
D-01314 Dresden
Telefon +49 351 26 00
Telefax +49 351 2 69 04 61
<http://www.fz-rossendorf.de/>

Als Manuskript gedruckt
Alle Rechte beim Herausgeber

FORSCHUNGSZENTRUM ROSSENDORF 

FZR-245
Dezember 1998

Hans-Ulrich Barz und Jörg Konheiser

**Monte-Carlo Programm TRAMO-
Möglichkeiten und Anleitung zur Nutzung**

Inhaltsübersicht

Einleitung	S. 3
1. Neutronendaten	S. 5
1.1 ABBN-Form	
1.2 Aus dem Programm NJOY entwickelte Form	
1.2.1 Grundsätzliches	
1.2.2 Behandlung der auftretenden negativen Teile der Winkelverteilung für Streuungen	
1.2.3 Alternative Behandlung der elastischen Streuung nach dem für MCNP entwickelten Konzept	
2. Grundlagen von TRAMO	S. 7
2.1 Allgemeines	
2.2 Geometrie	
2.2.1 Mögliche Realisierungen	
2.2.2 Netzartige Grundfläche	
2.2.3 Einige Beispiele von geometrischen Formen	
2.3 Prinzipieller Ablauf der Berechnung	
2.4 Mögliche Besonderheiten	
2.5 Behandlung der Energieabhängigkeit	
2.6 Absorption, n_2n -Prozesse, Spaltung	
2.7 Ergebnisschätzungen und Darstellung	
2.8 Hilfsprogramme	
2.9 Grobschema des Programmablaufs in TRAMO	
3. Vorgesehene Maßnahmen zur Verbesserung der statistischen Genauigkeit in TRAMO	S. 14
3.1 "Weight Windows Method" in einer verallgemeinerten Form	
3.1.1 Grundsätzliches	
3.1.2 Das Programm TRAWEI zur Gewichtsberechnung	
3.2 Quellbiasing	
3.2.1 Veränderung der Quellverteilung	
3.2.2 Nutzung der berechneten Gewichtsfunktionen für das Quellbiasing	
3.3 Veränderung der Gewichte beim Transport der Teilchen	
3.4 Veränderung der Gewichte beim Stoßpunkt	
3.5 Offene Probleme	
4. Eingabegrößen und ihre Bedeutung in TRAMO	S. 18
4.1 Angaben zum allgemeinen Ablauf	
4.2 Eingabegrößen für den Standard-Eingabefile	
4.2.1 Grundgrößen und Steuergrößen	
4.2.2 Geometriedaten	
4.2.3 Sonstige Daten	
4.3 Eingabedaten aus anderen Files	

5. Eingabegrößen und ihre Bedeutung für das Programm TRAWEI	S. 26
5.1 Angaben zum allgemeinen Ablauf	
5.2 Eingabegrößen für den Standard-Eingabefile	
5.2.1 Grundgrößen und Steuergrößen	
5.2.2 Geometriedaten	
5.2.3 Sonstige Daten	
5.3 Eingabedaten aus anderen Files	
6. Programme zur Neutronendatenaufbereitung	S. 29
6.1 Die Programmumgebung von NJOY	
6.1.1 Das Programm INCHANGE	
6.1.2 Die Programme TRANDAT, FL und FSPRCTRUM	
6.2 Das Programm MODAJ	
6.3 Schema der Datenerzeugung	
7. Hilfsprogramm SUMMA zur Verarbeitung der Resultate bei Parallelberechnung	S. 33
Literaturangaben	S. 35

Einleitung

Dieser Bericht ist für mit den Grundlagen der Monte-Carlo Methode vertraute Leser bestimmt. Von Interesse für solche Leser könnten erfolgreiche Verallgemeinerungen und neue Ideen zur Verbesserung der statistischen Fehler sein. Andererseits sollen die wichtigsten Grundlagen des Vielgruppen-Monte-Carlo Programms TRAMO dargestellt und das Programm einschließlich notwendiger Eingabe so weit beschrieben werden, daß man nach in jedem Fall notwendige Anpassung an die spezielle Rechentechnik eine wesentliche Grundlage für die Durchführung eigenständiger Rechnungen hat.

Für die meisten Probleme unumgängliches Hilfsmittel für TRAMO ist ein Programm, welches für die Anwendung der varianzreduzierenden "Weight Window Method" die notwendigen Gewichte berechnet (Monte-Carlo Programm TRAWEL), sowie Programme zur Erzeugung der Neutronenquerschnittsdaten und Gruppendaten.

Das Programm TRAMO berechnet bei gegebener Quellverteilung von Neutronen in Vielgruppennäherung Vielgruppenflüsse, integrierte Gruppenflüsse und Dosiswerte für vorgegebene Teilvolumina und Flächen. Es gibt weitere Programmversionen zur Berechnung von Neutronen- und Gammaflüssen sowie zur Kritikalität, welche jedoch nicht Gegenstand dieses Berichtes sind.

Das Vorläuferprogramm von TRAMO war das Programm SMO [1]. Eine fortgeschrittene Version, bereits unter dem Namen TRAMO, wurde in [2] dargestellt. Das hier beschriebene Programm ist wesentlich verallgemeinert und verbessert, umfangreich getestet und für eine große Zahl von Problemen angewendet worden, vor allem für Abschreibungsberechnungen und für Berechnungen von Neutronenfluenzen (siehe [3-5]). Die oben erwähnten Voraussetzungen für die Nutzung des Programms sind die Bereitstellung von Gruppendaten (Nutzung des international gebräuchlichen Programms NJOY und eigenen Programmen, siehe Abschnitt 1 bzw. 6), die Berechnung von geeigneten Gewichtsfunktionen (Monte-Carlo Programm TRAWEL, siehe Abschnitt 3 bzw. Abschnitt 5) und die genaue Kenntnis der im Programm TRAMO gegebenen Möglichkeiten.

In Abschnitt 1 wird auf die Versorgung mit Neutronendaten eingegangen, Abschnitt 2 beschreibt die Möglichkeiten von TRAMO, in Abschnitt 3 werden die varianzreduzierenden Methoden beschrieben, vor allem wird hier auf die Grundlagen des Programms TRAWEL zur Berechnung der Gewichte ("Weight Window Method") Bezug genommen. Abschnitt 4 gibt eine Eingabebeschreibung des Programms TRAMO, in Abschnitt 5 wird auf die Handhabung von TRAWEL eingegangen, und Abschnitt 6 befaßt sich mit Programmen zur Neutronengruppendatenerzeugung bzw. abgeleiteter Größen in einem für das Programm TRAMO geeigneten Format und in 7 wird auf das Hilfsprogramm SUMMA zur Zusammenfassung von Ergebnissen bei Anwendung von Parallelrechnung eingegangen.

1. Neutronendaten

Neben der Nutzung des Programms NJOY, welches weitgehende Freiheit in der Anzahl der Neutronengruppen erlaubt und einen Anschluß an verschiedene moderne Kernendatenbibliotheken besitzt, können auch feste Gruppensätze mit f-Faktoren (Bibliothek FL-27, 26 russische ABBN-Gruppen) und eine Gruppensatzaufbereitung auf der Grundlage des Russischen Systems MULTIK (bis zu 299 Gruppen) verwendet werden. Für MULTIK wurde das System einschließlich eines speziell für TRAMO entwickelten Aufbereitungsprogramms übernommen [8].

Der Gruppensatz FL-27 ist in einer Form vorhanden, aus der man mit dem in 6.2 näher erläuterten Programm MODAJ direkt die Materialneutronendaten für TRAMO erhält. Für die Nutzung von NJOY wurde ein Programmsystem entwickelt, welches Eingabefiles für NJOY bereitstellt und das Anschlußformat für das Monte-Carlo Programm herstellt, welches ebenfalls mit dem Programm MODAJ verarbeitet wird (siehe 6.1). Insgesamt ist damit ein allgemeiner Anschluß an alle modernen Neutronendaten für das Programm TRAMO hergestellt.

Generell werden zunächst für die benötigten Isotope mikroskopische Vielgruppenbibliotheken mit einem Netz von f-Faktoren hergestellt bzw. vorausgesetzt. Für diese Bibliothek sind dann i.allg. Anpassungsprogramme zur Überführung in eine für die spätere Bearbeitung nötige Form erforderlich. Aus dieser Form werden dann für die vorkommenden Materialzusammensetzungen abgeschirmte mikroskopische Querschnitte bestimmt und aus diesen dann alle im Programm benötigten makroskopischen Gruppenquerschnitte bzw. Wahrscheinlichkeiten berechnet. Die Neutronendaten können in 2 verschiedenen Formen dargestellt werden:

1.1 ABBN-Form

Hier kann die Anisotropie der elastischen Streuung durch kumulative Winkelverteilungen (berechnet in [6]) für jedes Isotop und jede Energiegruppe gegeben sein. Im anderen Fall wird von Isotropie im Schwerpunktsystem für jedes Isotop ausgegangen.

Die inelastische Streuung wird isotrop angenommen. Die Winkel-Energieverlust-Korrelation wird für diese Voraussetzungen bei der elastischen Streuung exakt berücksichtigt. Das streuende Isotop wird mit der entsprechenden Wahrscheinlichkeit ausgewählt. Die Streugesetze für dieses Isotop werden dann exakt berücksichtigt. Das Programm MODAJ (zur Handhabung siehe Abschnitt 6.2) berechnet die bei verschiedenen konkreten Materialzusammensetzungen benötigten Neutronendaten für TRAMO aus der mikroskopischen Datenbibliothek FL-27 [7], in welcher an bestimmten Stützpunkten auch die f-Faktoren abgespeichert sind. Diese Daten werden zusammen mit den Anisotropiedaten ([6]) in TRAMO verarbeitet.

1.2 Aus dem Programm NJOY entwickelte Form

1.2.1 Grundsätzliches

Zunächst werden die Daten in der gewünschten Gruppenstruktur aus einer Datenbibliothek (ENDF/B, JENDL, JEF) mit dem Programm NJOY berechnet, wobei die Anisotropie der Streuung (elastische und inelastische) im Laborsystem durch Entwicklung nach Legendreschen Polynomen dargestellt wird. Im allgemeinen wird von einer P5-Ap-

proximation ausgegangen, jedoch können auch andere P_l -Approximationen benutzt werden.

Zu diesem Zweck werden mit einem Programmpaket (siehe 6.1) geeignete Eingangsscripts für NJOY hergestellt. Mit einem Interfaceprogramm wird eine für die Weiterverarbeitung in MODAJ benötigte Bibliotheksform in Anlehnung an die FL-27 Bibliothek geschaffen. Zusätzlich werden die höheren Momente der elastischen (außer beim Wasserstoff) und inelastischen Streuung abgespeichert. Das Programm MODAJ berechnet die benötigten makroskopischen Daten bzw. Wahrscheinlichkeiten für die konkret gegebenen Materialzusammensetzungen, wobei nur noch ein Streuquerschnitt vorliegt, der eine Überlagerung des elastischen und inelastischen Querschnittes darstellt. Eine Ausnahme ist die Streuung an Wasserstoff. Aus der in diesem Fall vorliegenden Isotropie im Schwerpunktsystem kann die neue Richtung und Energie entsprechend der exakten Streugesetze ohne Legendresche Entwicklung (wie in 1.1 beschrieben) berechnet werden. Gerade für Wasserstoff wäre eine solche Entwicklung wegen der starken Anisotropie im Laborsystem sehr ungünstig.

Eine etwas andere Verarbeitungslinie wird benutzt, wenn man von modernen russischen Daten ausgeht (MULTIK, Programm CONSYST 2 [8]). Die endgültige Form entspricht dann der soeben beschriebenen Form der Darstellung der Anisotropie mit Legendreschen Polynomen.

1.2.2 Behandlung der auftretenden negativen Teile der Winkelverteilung für elastische Streuung mit Monte-Carlo

Durch den Näherungscharakter der Legendreschen Entwicklung können für die konkreten Winkelverteilungen für einen gegebenen Energieübergang negative Werte auftreten. Deshalb mußte eine allgemein gültige Behandlung mit der Monte-Carlo Methode entwickelt werden.

Dies Problem wurde folgendermaßen gelöst:

Statt der sich ergebenden Winkelverteilung $f(\omega)$ mit teilweise negativen Werten geht man bei der zufälligen Auswahl von der Funktion

$$f_1(\omega) = C \cdot \text{abs}(f(\omega))$$

aus. C wird so bestimmt, daß f_1 wieder auf 1 normiert ist.

Für das statistisch aus f_1 ausgewählte konkrete ω^+ wird das Teilchengewicht

$$G = f(\omega^+) / f_1(\omega^+)$$

an das bisherige Teilchengewicht heranmultipliziert. Offensichtlich ist dieses Gewicht entweder $1/C$ oder $-1/C$. Diese G -Faktoren sind betragsmäßig größer 1, wenn negative Anteile auftreten. Die Varianz der Monte-Carlo Berechnung wird dadurch und durch die dabei auftretenden negativen Ergebnisteile zwar etwas schlechter. Es ist aber gewährleistet, daß man exakt die vorliegende Legendresche Entwicklung benutzt. Die i.a. auftretende Vergrößerung des Gewichtes bei jeder Streuung ist durch die Anpassung der Gewichte an die Zonensollgewichte (siehe Abschnitt 3.1) beherrschbar. Die auftretenden C -Werte für jeden Energieübergang und für jede auftretende Materialzusammensetzung werden zur Verbesserung der Rechenzeit vor der eigentlichen Monte-Carlo Rechnung bestimmt und gespeichert.

1.2.3 Alternative Behandlung der elastischen Streuung nach dem für MCNP entwickelten Konzept

Wegen der Nachteile der im vorigen Abschnitt skizzierten Behandlung insbesondere bei sehr vielen Energiegruppen, wo die Anisotropie für bestimmte Energieübergänge bei der elastischen Streuung eine schwer mit Legendreschen Polynomen darstellbare Funktion sein kann, wurde eine günstigere Methode als Möglichkeit verwendbar gemacht. Aus modernen Datenbibliotheken sind für die verschiedenen Isotope für ein Netz von Energiepunkten jeweils 32 gleichwahrscheinliche Winkelintervalle für die elastische Streuung im Schwerpunktsystem verfügbar. Für die gegebene Energie bei der Monte-Carlo Rechnung kann man die beiden nächsten gegebenen Energiepunkte für das vorher ausgespielte Isotop auswählen, mit entsprechenden Wahrscheinlichkeiten einen dieser Punkte auswählen.

Formelmäßig ergeben sich, wenn das entsprechende Energieintervall durch E_k und E_{k+1} bei einer Energie des Neutrons von E gegeben ist, die Wahrscheinlichkeit für die beiden Energiepunkte zu

$$W_k = (E_{k+1} - E) / (E_{k+1} - E_k) \text{ bzw. zu } W_{k+1} = (E - E_k) / (E_{k+1} - E_k)$$

Das entsprechende Winkelintervall M ergibt sich dann leicht leicht aus

$$M = \text{zufall} * 32 + 1 \text{ (zufall als Zufallszahl zwischen 0 und 1)}$$

Innerhalb dieses Intervalls wird wieder gleichverteilt ausgewählt. Wie für den in 1.1 beschriebenen Fall kann man aus dem Kosinus im Schwerpunktsystem unter Nutzung des Atomgewichtes des Isotops den Kosinus im Laborsystem und die neue Energie aus den bekannten Formeln für die elastische Streuung berechnen.

2. Grundlagen von TRAMO

2.1 Allgemeines

TRAMO berechnet die mittleren Neutronenflüsse bei gegebenem Energiegruppenschema für alle gegebenen Teilvolumina und Begrenzungsflächen der Teilvolumina. Obgleich die geometrischen Möglichkeiten sehr weitreichend sind (siehe 2.2), werden besonders Systeme unterstützt, die den gängigen Aufbau von Kernreaktoren einschließlich der äußeren Teile haben, z.B. zylindrische und hexagonale Strukturen. Bei der Berechnung der Ergebnisse werden verschiedene Schätzverfahren angewendet und die unterschiedlichen Ergebnisse zusammen mit den statistischen Fehlern bereitgestellt. Dazu gehören die Fluglängenschätzung, die Stoßpunktschätzung und bei Bedarf auch die Erwartungswertschätzung. Es wird generell ein nichtanaloges Monte-Carlo Verfahren verwendet (siehe Abschnitt 3). Vorgegeben werden eine äußere Quelle, welche eine beliebige Ortsabhängigkeit über die verschiedenen Zonen hat, und eine Energieverteilung, welche in der jetzigen Programmversion ortsunabhängig ist. Es ist möglich Resultate durch Quellen verschiedener Spaltisotope gesondert zu berechnen. Sekundärneutronen durch Spaltungen können bei Bedarf ebenfalls berücksichtigt werden.

2.2 Geometrie

2.2.1 Prinzipielle Möglichkeiten

In TRAMO sind beliebig geschachtelte Systeme achsenparalleler Körper möglich, welche jeder für sich eine beliebige Höheneinteilung haben kann. Die Grundflächen der Körper können Kreise und beliebige Vielecke sein, wobei eine hexagonale Struktur besonders unterstützt wird. Zylinder können noch in beliebige Sektoren eingeteilt sein, wobei jeder Sektor wiederum eine gesonderte Höhenverteilung haben kann. In einem Körper zählt in dem entsprechenden Höhenabschnitt der Volumenteil zu dem Körper, der nicht von in diesem Körper befindlichen anderen Körpern eingenommen wird. Jeder Körper kann also ein beliebiges System anderer Körper enthalten, jeder dieser inneren Körper wieder andere Körper usw., der Aufbau ist also hierarchisch.

Zur Begrenzungen in vertikaler Richtung werden i.a. für jeden Körper eine gesonderte Zahl von verschiedenen Ebenen $z_i=k_i$ angenommen.

Für Zylinder ohne inneren Körper oder mit einem inneren Zylinder mit gleicher Achse ist darüber hinaus auch eine Höhenbegrenzung der Form

$$H(r)=H_0+(r-raf)*aste$$

möglich, wobei $aste$ eine gegebene Konstante für den Höhenabschnitt, r der radiale Abstand von der Körperachse und raf der Radius des inneren Zylinders (wenn nicht vorhanden, ist dieser Wert Null) bedeuten soll.

Außerdem sind bei allen Körpern Höhenbegrenzungen der Form

$$H(x,y)=H_0+a1*x+a2*y$$

erlaubt.

In der neuen Version kann man eine beliebige Anzahl verschiedener der soeben beschriebenen geometrischen Systeme übereinandersetzen. Dadurch werden in der letzten Fassung die geometrischen Möglichkeiten wesentlich erweitert.

2.2.2 Netzartige Grundfläche

Auch beliebige Vielecke sind als Grundkörper zulässig. Man kann in der Ebene Konstruktionen realisieren, welche ähnlich aufgebaut sind wie Strukturen bei finiten Elementen. Körper können mit anderen Körpern gemeinsame Seitenflächen haben bzw. von anderen Körpern auch völlig umschlossen sein. In jedem Teilkörper des Netzes können sich wieder andere Körper bzw. auch andere Netze befinden usw. Insbesondere kann so eine hexagonale Brennelementstruktur eines Reaktors realisiert werden, wobei sich in jedem Brennelement noch weitere Strukturen befinden können.

2.2.3 Einige Beispiele von geometrischen Formen

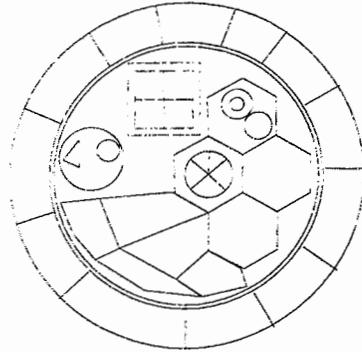
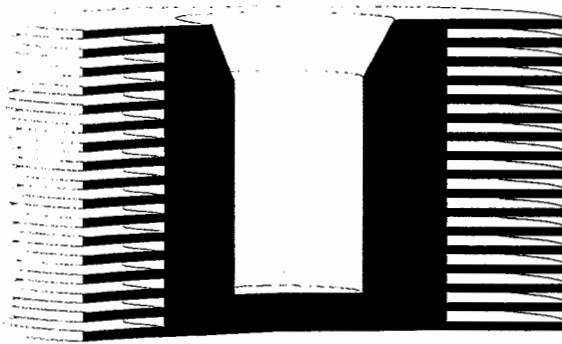


Abb.1: 3-dimensionales Element mit Kühlrippen

Abb.2: Horizontaler Schnitt durch mögliche Strukturen

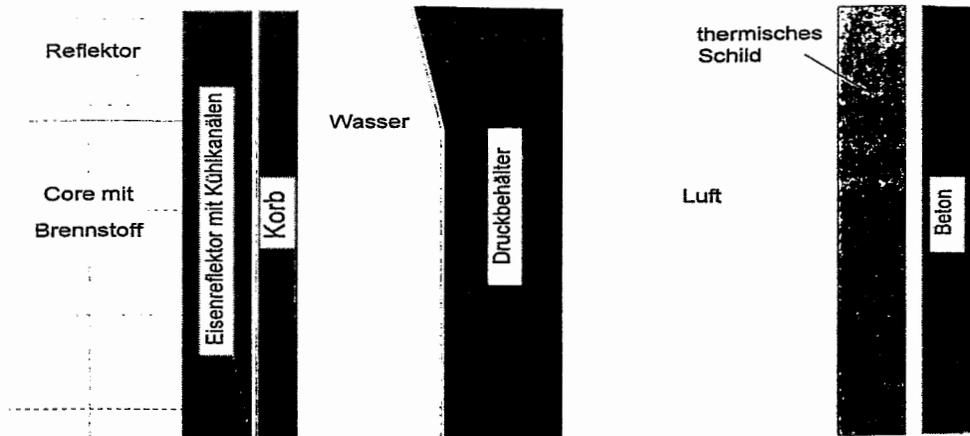


Abb. 3 Vertikaler Schnitt durch den WWER-1000 Reaktor

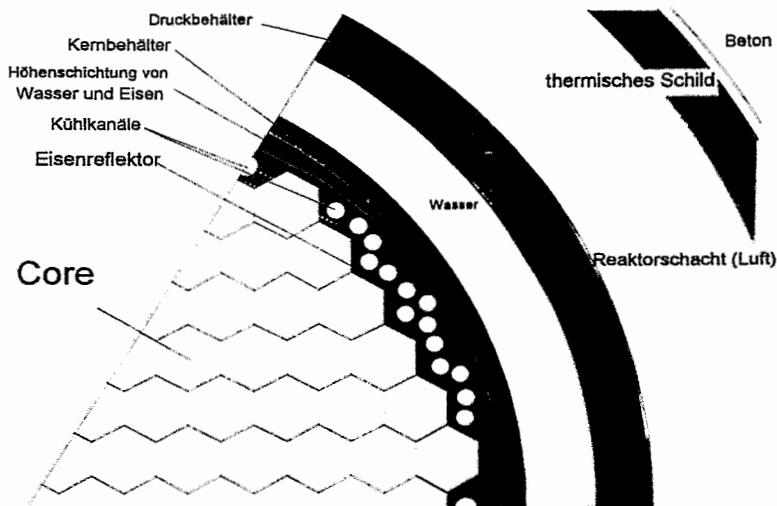


Abb.4 Horizontaler Schnitt durch den Reaktor WWER-1000 (60° Symmetriesektor)

2.3 Prinzipieller Ablauf der Berechnung

In diesem Abschnitt soll das prinzipielle Vorgehen bei dem in TRAMO verwendeten Monte-Carlo Verfahren kurz zusammenfassend skizziert werden. Auf die varianzmindernden Verfahren wird in Abschnitt 3 genauer eingegangen.

Es kann über die verschiedenen Ortszonen eine beliebige Quellverteilung angenommen werden, wobei bei jeder Ortszone Gleichverteilung und Isotropie vorausgesetzt wird. Zu Besonderheiten siehe 2.4. Die Energieverteilung der Quellen wird für alle Zonen gleich angenommen. Für die statistische Behandlung der Quellen wird die Anzahl der Quellneutronen für jede Energiegruppe nicht statistisch ausgewählt, sondern für jede Energiegruppe entsprechend dem mittleren Anteil festgelegt. Nur die dabei auftretenden Bruchteile von Teilchen werden zufällig entsprechend den vorhandenen Wahrscheinlichkeiten auf die Gruppen verteilt (siehe auch 2.5).

Die Berechnung erfolgt generationsweise, d.h. es wird jeweils eine bestimmte Anzahl von entsprechend der Quellverteilung $Q(z)$ (z bezeichnet die Ortszone) zufällig ausgewählter Quellneutronen gestartet und verfolgt. Für jedes Quellneutron wird entsprechend der fest gegebenen Energieverteilung $S(g)$ (g soll die Energiegruppe bedeuten) der Quellneutronen eine bestimmte Energiegruppe und in dieser eine bestimmte Energie ausgewählt.

Bei der Quellverteilung wird i.a. nichtanalog vorgegangen. Es wird sowohl eine künstliche Ortsverteilung $Q_1(z)$ als auch eine künstliche Energieverteilung $S_1(g)$ für die oben beschriebene Auswahl zugelassen. Zum Ausgleich wird das Neutronengewicht G mit $S \cdot Q / Q_1 \cdot S_1$ multipliziert. Als Option außerdem zugelassen, dieses Teilchengewicht mit dem Sollgewicht für die entsprechende Zone und Gruppe zu vergleichen. Durch Russisches Roulette oder Splitting wird dies Sollgewicht näherungsweise erreicht. Dadurch ist es möglich, daß statt einem Quellneutron eine ganze Schar von Teilchen gestartet werden, jedes näherungsweise mit dem Sollgewicht.

Bei jeder Ortszone wird Gleichverteilung und Isotropie vorausgesetzt wird. Zu Besonderheiten siehe 2.4.

Entsprechend der isotrop ausgewählten Richtung wird das Teilchengewicht weiter verfolgt. Entsprechend der Wahrscheinlichkeitsverteilung $\exp(-u)$ wird ein zufälliges u^* ausgewählt. Für eine Schar von Teilchen werden entsprechend der Teilchenzahl innerhalb der Schar verschiedene u_1 ausgewählt und von diesen zunächst das minimale betrachtet. Der Abstand S zum nächsten Stoßpunkt wird durch die Beziehung

$$u_1 = \int_0^S \Sigma(x) dx$$

berechnet. Σ ist der totale makroskopische Querschnitt in Abhängigkeit von x .

Falls sich auf dem Weg vom vorhergehenden Stoßpunkt bzw. Quellpunkt zum neuen Stoßpunkt eine Zonengrenze befindet, wird das Teilchengewicht des Teilchens (bzw. jedes Teilchens innerhalb der Schar) entsprechend dem neuen Sollgewicht verändert (bzw. die Anzahl der Teilchen innerhalb der Schar). Dabei können natürlich an Zonengrenzen entsprechend den neuen Sollgewichten auch neue Teilchen durch Splitting entstehen und damit auch neue u^* .

Bei jedem Stoßpunkt werden die Koordinaten des Teilchens (Gruppe, Energie, Zone,

Ortskoordinaten, Richtung) gespeichert. Falls noch andere Teilchen in der Schar sind, wird das neue Minimum von u^* gesucht und der Weg der Schar solange fortgesetzt, bis alle Teilchen abgearbeitet sind. Für dieses Quellneutron müssen dann noch alle zwischengespeicherten Teilchen behandelt werden. Es wird entsprechend der an diesem Ort vorhandenen Materialzusammensetzung und den alten Energie- und Richtungskoordinaten eine neue Energiegruppe, Energie und Richtung berechnet.

Das Teilchengewicht wird noch entsprechend der Absorptionswahrscheinlichkeit und der Teilchenerzeugung durch $(n,2n)$ -Prozesse verändert.

Entsprechend diesen neuen Teilchenkoordinaten werden auch neue Sollgewichte für das entstehende Teilchen wichtig. Deshalb wird wieder eine Teilchenschar erzeugt bzw. das Teilchen wird durch Russisches Roulette vernichtet. Danach verläuft alles wie oben beschrieben. Falls alle zwischengespeicherten Teilchen in dieser Weise behandelt wurden (diese Anzahl kann sich natürlich inzwischen auch wieder erhöhen), kann man das nächste Quellneutron innerhalb der Generation betrachten. Alles wiederholt sich bis alle Teilchen einer Generation behandelt worden sind.

Jede Generation liefert Beiträge zum Mittelwert und quadratischen Mittelwert aller benötigten Ergebnisse.

2.4 Mögliche Besonderheiten

TRAMO kann auch die spezielle Quellverteilung über die Brennstäbe berücksichtigen. Um die komplizierte Quelleingabe zu erleichtern, werden als Quelle nur die Verteilung über die Brennelemente gegeben und die auf 1 normierte Verteilung über die Brennstäbe für den gegebenen Höhenabschnitt gesondert eingegeben. Die Ortskoordinaten der verschiedenen Brennstäbe relativ zum Mittelpunkt des entsprechenden Brennelementes werden für verschiedene Reaktortypen bzw. Brennelementtypen in speziellen Subroutinen berechnet. Die Anzahl der Generationsneutronen wird in diesem Fall gleich der Zahl der Brennstäbe in einem Brennelement gesetzt.

In Zusammenhang mit der beschriebenen nichtstatistischen Auswahl der Energieverteilung muß man darauf achten, daß der vorgegebene Zusammenhang der Teilchennummer mit ganz bestimmten Brennstäben nicht zu einer Korrelation der Quellenergie mit den Brennstäben führt. Dies erreicht man dadurch, daß man die Reihenfolge der Brennstäbe zufällig auswählt.

Eine weitere Besonderheit ist die Berechnung Greenscher Funktionen für einen Brennelementabschnitt bei gegebener Brennstabverteilung. Die Ergebnisse werden gesondert abgespeichert und können dann später entsprechend der Reaktorgeschichte überlagert werden.

Ähnlich ist es möglich, statistisch unabhängige, aber gleichartige Rechnungen mit spezieller Speicherung der Ergebnisse parallel durchzuführen und die Einzelergebnisse danach zum Gesamtergebnis mit besserer Statistik zu überlagern.

2.5 Behandlung der Energieabhängigkeit

Prinzipiell wird die Energie durch die übliche Energiegruppendarstellung berücksichtigt. Aus der Energieabhängigkeit der Quelle wird, wie schon in 2.3 betont, nicht zufällig ausgewählt, sondern es wird für jede Energiegruppe genau die Zahl von Teilchen aus der Teilchengeneration genommen, die der entsprechenden Gruppe zukommt. Wenn also für eine Energiegruppe der Quellanteil genau 0.1 beträgt, werden genau 10% der Teilchen in dieser Gruppe gestartet. Nur die evtl. verbleibenden Bruchteile von Teilchen werden entsprechend ihrer Verteilung zufällig ausgewählt. Dadurch wird eine der

Ursachen statistischer Fehler wesentlich gemildert.

Wegen der exakten Behandlung der elastischen Streuung an Wasserstoff, die man analytisch unter Nutzung der Energievariablen darstellen kann, bzw. bei Nutzung der ABBN-Form der Querschnitte tritt jedoch die Energievariable im Monte-Carlo Spiel auch gesondert auf. Bei dieser elastischen Bremsung wird aus der alten Energie exakt die neue Energie berechnet und danach die neue Energiegruppe bestimmt. Für Streuakte, welche nicht an Wasserstoff stattfinden, wird die neue Energie gleichverteilt aus der neuen Gruppe ausgewählt.

2.6 Absorption, (n,2n)-Prozesse, Spaltung

Absorptionen und (n,2n)-Prozesse werden durch eine Veränderung des Teilchengewichtes berücksichtigt.

Im allgemeinen wird davon ausgegangen, daß die Spaltquellen als äußere Quelle gegeben sind. Spaltungen werden dann wie Absorptionen behandelt. Man kann jedoch wahlweise die Spaltprozesse auch direkt beim Monte-Carlo Spiel als besonderen Prozeß erfassen. Bei jedem Stoßpunkt werden dann für Materialzusammensetzungen mit positiver Spaltwahrscheinlichkeit zusätzliche Quellneutronen ausgewählt, zwischengespeichert und später weiterverfolgt. Natürlich muß gewährleistet sein, daß das Gesamtsystem sich in einem unterkritischen Zustand befindet.

2.7 Ergebnisschätzungen und Darstellung

Über Eingaben wird festgelegt, bis zu welcher Energiegruppe und bis zu welcher Zone Ergebnisse berechnet werden sollen. Für alle diese Zonen wird der totale Fluß sowie eine Dosis ausgegeben. Für speziell eingelesene Zonenbereiche werden zusätzlich alle Gruppenflüsse angegeben. Jede Ergebnisgröße wird zusammen mit dem 1σ -Fehler angeführt.

Die mittleren Flüsse über die Teilvolumina werden mit Stoßpunktschätzung und Fluglängenschätzung ermittelt. Wahlweise können auch Erwartungswerte geschätzt werden. Für jede Zone werden außerdem für die obere Deckfläche (für die unterste auch für die Grundfläche) und die Seitenflächen entsprechende Schätzwerte ausgegeben (natürlich nur Fluglängenschätzungen und evtl. Erwartungswertschätzungen).

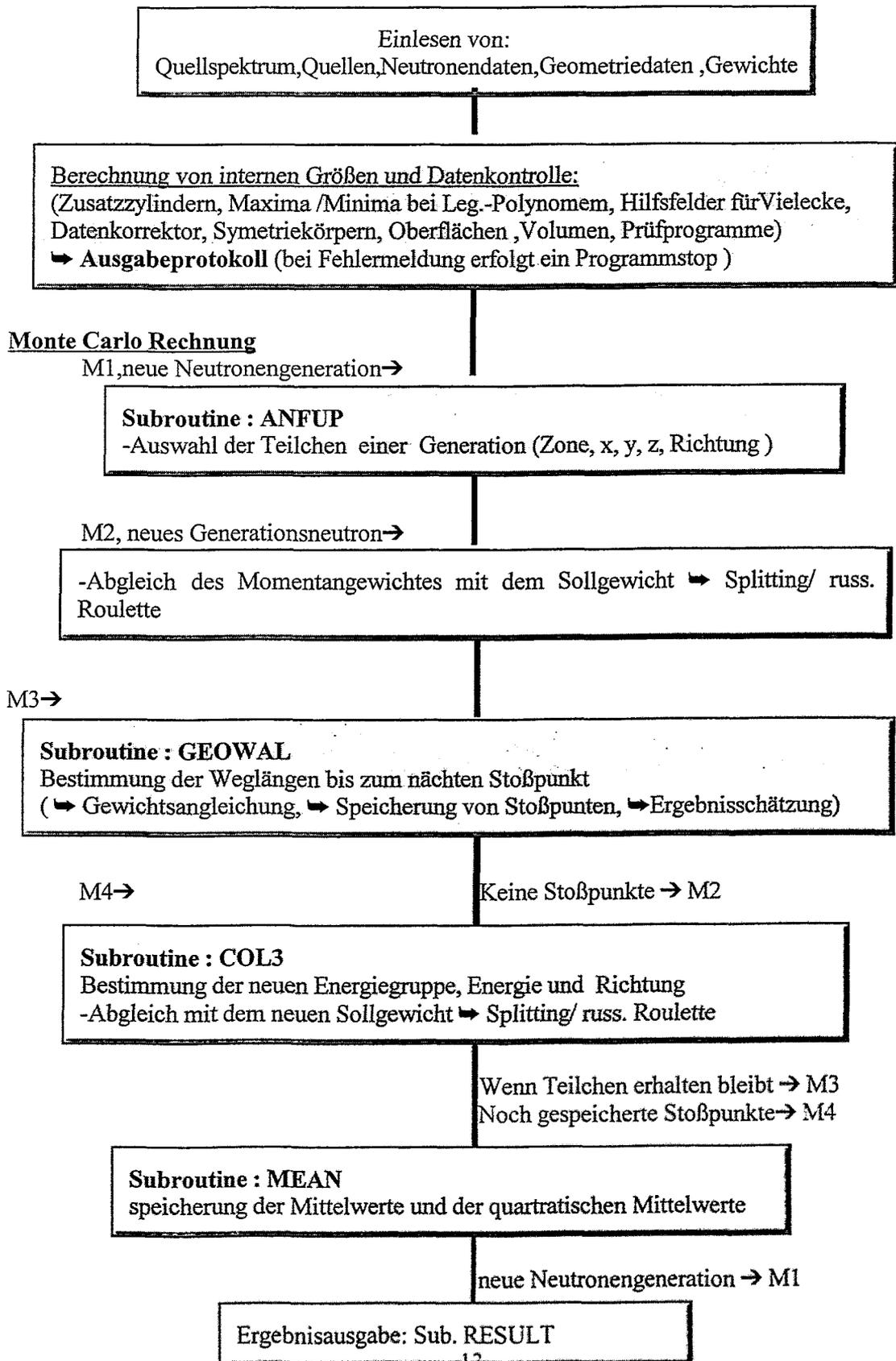
2.8 Hilfsprogramme

Die unter 2.4 dargestellten Möglichkeiten sind jetzt für Brennelemente des russischen Reaktortyps WWER realisiert. Auch die für die Fluenzbestimmung notwendigen Berechnungen der integralen Quellverteilung liegen für diesen Reaktortyp vor.

Die Quellen können für verschiedene Spaltisotope gesondert berechnet werden. Für andere Brennelemente (nicht WWER) müssen die Subroutinen für die Quellberechnung entsprechend der tatsächlichen Anordnung der Stäbe verändert werden.

Schema von TRAMO

- Steuergrößen zum Filemanagement
- Basisgrößen (geometrische, physikalische, programmtechnische)
- Speicherplatzverwaltung



3. Vorgesehene Maßnahmen zur Verbesserung der statistischen Genauigkeit in TRAMO

3.1 "Weight Windows Method" in einer verallgemeinerten Form

3.1.1 Grundsätzliches

In dieser Methode werden den Teilchen, die nicht in einem gewissen Korridor (Fenster) um die Sollgewichte liegen, d.h. bei genügendem Unterschied zu den Sollgewichten, orts- und gruppenabhängige Gewichte zugeordnet. Durch Splitting bzw. Russisches Roulette wird gleichzeitig gewährleistet, daß das gesamte Teilchengewicht erhalten bleibt. Diese Prozedur wird wie gesagt jedoch nur dann durchgeführt, wenn das Teilchengewicht einen vorgegebenen Korridor um das Sollgewicht verlassen hat.

Wenn das Gewicht nicht im zugelassenen Zielkorridor liegt, wird es durch Veränderung der Teilchenzahl so angepaßt, daß im statistischen Mittel das totale neue Gewicht, d.h. das Teilchengewicht multipliziert mit der neuen Teilchenzahl gleich dem entsprechenden alten Gewicht ist.

Um eine anschauliche Vorstellung von dieser Verfahrensweise zu vermitteln betrachten wir als Beispiel eine Teilchenschar von 3 Teilchen (unterschiedlich nur durch ihre optischen Weglängen u^* , siehe 2.3), jedes Teilchen mit dem Gewicht 1.4, die eine Zonengrenze überqueren. Die neue Zone soll in der entsprechenden Energiegruppe ein Sollgewicht von 2.4 haben. In diesem Fall kann man das alte Gesamtgewicht der Teilchen von 4.2 durch eine ganze Zahl in der neuen Zone nicht erreichen. Man würde der neuen Zone mit der Wahrscheinlichkeit 0.75 2 neue Teilchen bzw. mit der Wahrscheinlichkeit 0.25 1 Teilchen mit dem Gewicht 2.4 zuordnen. Das mittlere totale Gewicht wäre wieder 4.2. Man müßte also mit den entsprechenden Wahrscheinlichkeiten entweder in zufälliger Weise 2 bzw. 1 Teilchen vernichten.

Die Wirksamkeit dieser Methode hängt natürlich davon ab, daß man zuvor effektive Sollgewichte bestimmt.

Die potentiellen Möglichkeiten dieser Methode sind sehr groß. Für viele Fälle ist ein analoges Monte-Carlo Spiel hoffnungslos. Mit der "Weight Windows Method" können nach sehr dicken Abschirmungen noch Ergebnisse in ausreichender statistischer Genauigkeit bei vernünftigen Rechenzeiten erzielt werden. In [9] wurde an einfachen Modellen die Wirksamkeit der Methode nachgewiesen.

Diese Methode wurde zusammen mit der Berechnung der Sollgewichte bei Nutzung rekursiver Monte-Carlo Methoden in sehr allgemeiner Form verwendet, indem diese Gewichte nicht nur beim Teilchentransport, sondern auch beim Übergang zu anderen Gruppen und schon beim später zu beschreibenden Quellbiasing eingesetzt wurden. Diese Sollgewichte werden mit Hilfe des Monte-Carlo Programms TRAWEL [9] berechnet, wobei diese Gewichte davon abhängen, für welches Ergebnisgebiet (siehe hierzu nächsten Abschnitt) man statistisch besonders genau berechnen will. Es wird von der Regel ausgegangen, daß die Gewichte umgekehrt proportional zur Einflußfunktion sein müssen. Als Einflußfunktion $W(z,g)$ bezeichnet man den mittleren Beitrag zum vorgegebenen Ergebnis (siehe 3.1.2) bei vorgegebener Quelle in der Zone z und Energiegruppe g . Außer Plausibilität gibt es keinen allgemeinen Beweis, daß diese Annahme optimal ist, jedoch kann man zumindest an einfachen Modellen zeigen, daß diese Annahme zur günstigsten Rechenzeit bei vorgegebener statistischer Genauigkeit führt [1].

Die Einflußfunktionen werden für jede Energiegruppe und Ortszone mit einer rekursiven Methode mit direktem Monte-Carlo Spiel berechnet, wobei zur Verbesserung der Varianz bei dieser Berechnung jeder Stoßpunkt bei der Verfolgung der Teilchen wieder als

Quellpunkt betrachtet wird, so daß man bei der Historie eines Teilchens Ergebnisbeiträge für verschiedene Gruppen und Zonen erhält [9].

3.1.2 Das Programm TRAWEL zur Gewichtsrechnung

Im Programm TRAWEL wird für das zu betrachtende oder ein genügend ähnliches System eine große Anzahl von verschiedenen Monte-Carlo Rechnungen durchgeführt. Zunächst wird ein Teil des Konfigurationsraumes, bestimmt durch ein Orts-Energie-Bereich definiert (im Folgenden Ergebnisgebiet genannt), für welchen die Einflußfunktionen berechnet werden sollen. Nach Berechnung der Einflußfunktionen E ergeben sich die Gewichte G dann wie schon erwähnt aus der Beziehung

$$G(g,z)=c/E(g,z)$$

Die Konstante C wird so bestimmt, daß die Gewichte für das Hauptquellgebiet etwa 1 ergeben.

In bezug auf das Ergebnisgebiet muß man einen Kompromiß anstreben, da bei der folgenden Rechnung mit TRAMO i.a. in einem größeren Bereich genaue Ergebnisse benötigt werden. Für eine Einheitsquelle für jede Gruppe und jede Zone werden die Einflußfunktionen (integrale Flüsse im Ergebnisgebiet) berechnet. Es werden also (nog =Zahl der Energiegruppen, zon=Anzahl der Zonen)

$$N=nog*zon$$

verschiedene Einflußwerte in TRAMO benötigt.

Dies Problem wird vor allem durch den Einsatz rekursiver Methoden lösbar gemacht. In TRAWEL wird zunächst automatisch (man kann diese Reihenfolge wahlweise auch einlesen) eine günstige Reihenfolge der Zonen bestimmt. Als erste Zone wird das Ergebnisgebiet selbst genommen, dann ein möglichst nahes Gebiet usw. . Man beginnt mit der untersten Energiegruppe. Wenn man dann bei der Verfolgung der Teilchen auf ein Gebiet z' bei einer Gruppe g' stößt, für welches schon ein Wert für den Einfluß vorliegt, kann man das Teilchengewicht für diese Zone mit dem schon vorhandenen Einflußwert multiplizieren und hat so auch die Einflußfunktion für das gerade betrachtete Quellgebiet. Die beschriebene Verfahrensweise läßt sich einfach darstellen:

$$E(g,z)=W(g',z')*E(g',z'),$$

d.h. die gesuchte Einflußfunktion für die Energiegruppe g und die Zone z kann man darstellen als Wahrscheinlichkeit, ausgehend von einem Quellteilchen der Gruppe g und der Zone z die Zone z' mit der Gruppe g' zu erreichen und diese Wahrscheinlichkeit mit der schon bekannten Einflußfunktion E(g',z') zu multiplizieren.

Zur Verbesserung der Varianz wird bei dieser Berechnung jeder Stoßpunkt auch wieder als Quellpunkt betrachtet, so daß man bei der Verfolgung eines Teilchens Ergebnisbeiträge für verschiedene Gruppen und Zonen erhält [9].

Bei Gruppen mit höherer Energie endet die Historie des Teilchens häufig schon beim ersten Stoßpunkt, da für die unteren Gruppen in allen Zonen die Ergebnisse entsprechend der Reihenfolge bereits vorliegen.

Ein bei der Nutzung der Gewichte auftretendes Problem ist die geeignete Normierung der Gewichte. Momentan werden sie wie oben schon angedeutet so normiert, daß für eine Quellzone mit mittlerem Beitrag zum Ergebnis das Gewicht der Energiegruppe mit dem maximalen Anteil von Quellneutronen auf 1 normiert wird. Im Programm TRAMO kann man jedoch diese Normierung noch beliebig verändern. Für manche Fälle sind vor

der ausführlichen Rechnung kürzere Testrechnungen mit verschiedener Normierung ratsam, um die günstigste Variante in bezug auf die statistischen Fehler zu finden.

3.2 Quellbiasing

3.2.1 Veränderung der Quellverteilung

Es ist die Möglichkeit vorgesehen, die Ortsverteilung der Quellen bei gleichzeitiger Einführung entsprechender Gewichtungsfaktoren zu ändern, um wichtige Quellregionen statistisch genauer behandeln zu können (Quellbiasing). Unabhängig davon kann die Gruppenabhängigkeit der Quellen verändert werden. In der jetzigen Programmversion wird generell von einer Quellverteilung ausgegangen, welche in der Gruppenabhängigkeit und Ortsverteilung über die Zonen separierbar ist.

Entweder wird die gegebene Quellverteilung $Q(g,z)=q(z)*f(g)$ für die Zuordnung der Quellneutronen benutzt (g =Energiegruppe, z =Zone), oder eine künstliche Verteilung über den Ort und evtl. auch über die Energie. Nach Auswahl eines z^+ aus der künstlichen Ortsverteilung $q_1(z)$ bekommt das Teilchen in diesem Fall statt des Gewichtes 1 das notwendige Gewicht $q(z^+)/q_1(z^+)$. Entsprechend wird dies Gewicht noch bei einem biasing der Energie (Nutzung von f_1 statt f) mit dem Faktor $f(g^+)/f_1(g^+)$ multipliziert. Dieses Gewicht wird dann, wenn so vorgesehen, noch mit dem berechneten Sollgewicht verglichen und bei gleichzeitigem Splitting bzw. Russischem Roulette noch einmal verändert. Gestartet wird durch diese Prozedur in der gegebenen Gruppe entweder 1 Teilchen oder eine Gruppe von Teilchen, die sich jedoch nur durch die verschiedenen zufälligen optischen Weglängen unterscheiden.

Ein wichtiger Spezialfall für die reale Energieabhängigkeit ist die Annahme eines Spaltspektrums. Für diesen Fall wird innerhalb der Energiegruppen ein Wattspektrum angenommen, für andere Fälle eine Gleichverteilung innerhalb der Gruppe.

3.2.2 Nutzung der berechneten Gewichtsfunktionen für das Quellbiasing

Zusätzlich bzw. für sich alleine können für das Quellbiasing noch direkt die berechneten Gewichtsfunktionen benutzt werden. In diesem Falle wird wiederum in einem gewissen Korridor dafür gesorgt, daß das Teilchengewicht der Quellteilchen in die Nähe der Teilchengewichte für die entsprechende Energiegruppe und Ortszone kommt. Dies würde dazu führen, daß manche Quellteilchen schon beim Start durch Splitting vermehrt würden und andere Teilchen durch Russisches Roulette evtl. vernichtet werden. Vermehrung der Teilchen bedeutet, daß eine ganze Gruppe von Teilchen mit derselben Energie in dieselbe Richtung startet. Die Teilchen unterscheiden sich dann nur durch die verschiedenen ausgewählten Weglängen.

3.3 Veränderung der Gewichte beim Transport der Teilchen

An jeder Grenze eines Teilvolumens wird das Teilchengewicht durch Splitting bzw. Russisches Roulette wenn notwendig an den durch das Gewicht für das neue Gebiet vorgegebenen Zielkorridor angepaßt. In der nächsten kleinen Skizze wird das prinzipielle Verhalten bei reiner Ortsabhängigkeit gezeigt.

Kleinere Teilchenzahl	←	Quell-	→ größere Teilchenzahl	Resultats-
größere Gewichte	←	gebiet	→ kleinere Gewichte	Gebiet

Wenn eine ganze Gruppe von Teilchen auf die Grenze trifft, wird die Anzahl der Teilchen

entsprechend erhöht bzw. vermindert, wobei bei einer Verminderung die optischen Weglängen, welche dann weggelassen werden, zufällig ausgewählt werden müssen. Im anderen Fall kommen entsprechend der neuen Teilchenzahl neue optische Längen hinzu. Zur Vermeidung von sog. "Oversplitting", d.h. einer zu großen Anzahl von Splittingteilchen, wurde eine Reihe von Maßnahmen eingeführt, die bei zu großer Zahl von gesplitteten Teilchen den weiteren Splittingvorgang bremsen, ohne daß sich die für die Ergebnisse benötigten Mittelwerte verändern.

Die Einteilung der Teilvolumina ist natürlich durch das Ausgangsproblem gegeben. So erfordert jede neue Materialzusammensetzung ein neues Teilvolumen. Diese Einteilung reicht jedoch i.a. für eine effektive Anwendung der "Weight Window Method" nicht aus. Es muß also eine zusätzliche Unterteilung mit dem Ziel vorgenommen werden, die berechneten Sollgewichte benachbarter Zonen nicht zu stark auseinanderklaffen zu lassen. Der dritte Gesichtspunkt für eine Einteilung in Teilvolumina ist durch die örtliche Feinheit der gewünschten Ergebnisberechnung bestimmt. Die sich dabei ergebende feinste Einteilung ist dann sowohl für Materialgrenzen, Gewichte und Darstellung der Ergebnisse ausschlaggebend. Dabei werden sich i.a. für verschiedene Zonen gleiche Materialzusammensetzungen ergeben.

3.4 Veränderung der Gewichte beim Stoßpunkt

An jedem Stoßpunkt werden entsprechend den Streugesetzen eine neue Gruppe und eine neue Flugrichtung ausgewählt. Nach dieser Auswahl wird das Teilchengewicht wieder durch Veränderung der Teilchenzahl an das neue Sollgewicht angepaßt. Entweder werden wie beim Quellbiasing neue Teilchen erzeugt (d.h. gleiche Energie und Richtung, aber verschiedene optische Weglängen) oder das Teilchen wird mit Russischem Roulette behandelt, d.h. im letzteren Fall wird entweder mit höherem Gewicht weitergespielt oder aber das Teilchen vernichtet.

3.5 Offene Probleme

Die Programme laufen im wesentlichen automatisch ab, jedoch muß die Einteilung der Gebiete für die Gewichtsberechnung bzw. für die Änderung von Gewichten vorgegeben werden. Die von der Materialzusammensetzung bedingte Einteilung ist i.a. nicht fein genug. Bei dieser Einteilung ist eine gewisse Erfahrung des Programmanwenders unumgänglich. Eine zu grobe Einteilung gefährdet die Wirksamkeit der "Weight Window Method". Bei zu feiner Einteilung würden sich zu hohe Rechenzeiten ergeben. Eine Automatisierung dieses Problems wäre wünschenswert.

Ein anderes, schon weiter oben angesprochenes Problem ist die notwendige Normierung der Gewichte. Es ist derzeit noch unklar, ob man allgemeine Prinzipien für eine solche Normierung nutzen kann oder ob man sich auf die oben (siehe 3.1.2) vorgeschlagene Prozedur beschränken muß. Eine ungünstige Normierung würde z.B. zu viele Quellneutronen durch Russisches Roulette vernichten, bzw. zu viele gestartete Teilchen produzieren.

Eine in TRAWEL bzw. TRAMO bisher nicht genutzte Möglichkeit ist die Einführung von über Zonen- und Gruppenabhängigkeit hinaus auch winkelabhängigen Gewichten. Der damit verbundene höhere Speicheraufwand wäre bei modernen Rechnern noch vertretbar. Auch die Berechnung der Gewichtsfunktionen mit rekursiven Methoden könnte ähnlich wie oben beschrieben ablaufen. Es gibt bisher jedoch auch in der Literatur keine Erfahrung über die Wirksamkeit einer solchen Erweiterung.

4. Eingabegrößen und ihre Bedeutung in TRAMO

4.1 Angaben zum allgemeinen Ablauf

Zunächst werden die Namen der wichtigen Eingabebibliotheken und einige Grundgrößen eingelesen:

1. Name des Standard-Eingabefiles (z.B. **abcdef**).
2. Name des Files der Neutronengruppendaten (z.B. **mdata**).
3. Name des Files der Gewichtsfunktionen (z.B. **dawei**).
4. Ein bestimmter Buchstabe zur Kennzeichnung der Variante (z.B. **x**).
5. Text zur näheren Angabe der speziellen Rechenvariante (bis zu 50 Zeichen).
6. Weitere Angaben zur Variante (bis zu 50 Zeichen).
7. 7-stellige Integer-Zahl zur Festlegung der 1. Zufallszahl.
8. Bibliotheksname für die ortsabhängige Funktion des Quellbiasing (z.B. **qbias**).

Letztere Größe kann in Abhängigkeit von anderen Eingabegrößen irrelevant werden. Aus dem unter 1 gegebenen Namen (siehe Beispiel) werden weitere Namen von Bibliotheken abgeleitet.

- a) **rabcdef**==> Name des ausführlichen Ausgabefiles
- b) **rrabcdef**==> Name der Resultatsbibliothek für die Ergebnisse.
- c) **xabdf**==>Name der Bibliothek mit den energie- und ortsabhängigen Quellen
- d) **spab**==> Name der Bibliothek mit speziellen Eigenschaften der Brennstäbe
- e) **wabf**==> Name der Bibliothek der auf 1 normierten Verteilungsfunktion der Quellverteilung über die Brennstäbe für alle Brennelemente und Höhenschichten.

Die letzten 3 Bibliotheken sind nur für Fälle interessant, bei denen auf Brennstäbe verteilte Quellen vorliegen. (siehe 4.2).

4.2 Eingabegrößen für den Standardeingabefile

4.2.1 Grundgrößen und Steuergrößen

Zunächst werden hier einige Grunddaten und Steuergrößen benötigt.

1. **ipl**==>Grad der Legendreschen Entwicklung der Winkelverteilung der Streuung der Neutronengruppendaten.
2. **tim**==>maximal vorgesehene Rechenzeit für die Rechenvariante in Minuten. Nach dieser Zeit wird das Monte-Carlo Generationsspiel abgebrochen und nur noch die angefangene Generation beendet.

3. **kbias**==>für $kbias > 0$ wird die unter 8. gegebene Bibliothek für Quellbiasing verwendet.

kbias=1 ==>es wird eine zonenabhängige neue Quellverteilung vorgegeben.

kbias=2 ==>es werden Zahlen für jede Zone vorgegeben, durch die man die gegebene Quellverteilung teilen muß um daraus eine neue Quellverteilung zu bilden. Dabei wird berücksichtigt, daß jeweils die neuen Quellverteilungen auf 1 normiert werden müssen.

4. **source**==>totale Quellstärke in Neutronen/sec. (bzw. in Neutronen für die Berechnung von Fluenzen) für die Rechenvariante. Auch im Fall der Symmetrie ist stets die totale Quellstärke des Systems anzugeben.

5. **nvar**==> Angabe zur speziellen Behandlung der Schichten mit verschiedener Struktur.

nvar=0 ==> Es werden an der Schichtgrenze für die dort vorhandenen x,y-Koordinaten alle in der angrenzenden Schicht vorhandene Körper untersucht, um den richtigen neuen Körper zu ermitteln.

nvar=1 ==> Die zu untersuchenden Körpernummern werden für jede Schichtgrenze eingelesen.

nvar=2 ==> Die zu untersuchenden Körpernummern werden berechnet.

6. **isch**==> Anzahl der Schichten mit verschiedener Körperstruktur

7. **i1**==> Anzahl verschiedener Körper im System. Jeder Körper hat noch verschiedene Zonen in vertikaler Richtung.

8. **i2** ==> totale Anzahl von geometrischen Zonen im System.

9. **iko**es ==> Anzahl der Körper mit Sektoreinteilung.

10. **kzons** ==>Gesamtanzahl von Sektoren dieser Körper.

11. **nog** ==> Zahl der zu berechnenden Energiegruppen (von der Gruppe mit der höchsten Energie gerechnet).

12. **nogr** ==> Anzahl von Gruppen für die Ergebnisdarstellung. nogr kann offenbar nur kleiner oder gleich nog werden. Jede Darstellungsgruppe kann mehrere nebeneinander liegende Gruppen umfassen.

13. **hhg** ==> obere Begrenzung des Systems

14. **isymh** ==> Symmetrieparameter für die vertikale Richtung

isymh=0 ==> keine Höhengsymmetrie

isymh=1 ==> $z=0$ ist eine Symmetrieachse in vertikaler Richtung

15. **isymw** ==> Sektorsymmetrieparameter

isymw=0 ==> keine Sektorsymmetrie

isymw=1 ==> Spiegelsymmetrie

isymw>1 ==> Rotationssymmetrie

16. **alpha** ==> Sektorsymmetriewinkel, hat nur für $isymw > 0$ Bedeutung.

17. **non** ==> Anzahl der Teilchen in einer Generation. Wenn man sich z.B. nur für einen kleineren oberen Energieabschnitt interessiert werden Quellneutronen nur in dem so gegebenen oberen Energiegebiet gestartet. Die Resultate werden jedoch renormiert, so daß die Ergebnisse in den oberen Gruppen dem Fall entsprechen, als ob man eine Rechnung mit mehr Gruppen durchgeführt hätte. Die Gruppendaten werden dann nur für die gegebene Gruppenzahl eingelesen (siehe 4.3, Punkt 2).

18. **iig** ==> Anzahl zu berechnender Generationen. Diese Anzahl kann dann kleiner werden, wenn die Zeitbeschränkung (siehe Größe **tim**) dies erforderlich macht.

19. **iasam** ==> Vorgegebene maximale Anzahl von gespeicherten Stoßpunkten für ein Quellteilchen. Diese Größe geht bei der Verringerung des weiteren Splitting wesentlich ein. Es muß dafür gesorgt werden, daß nicht mehr Stoßpunkte als durch **iasam** zugelassen erzeugt werden. Notfalls wird für das entsprechende Teilchen der Splittingmechanismus ganz ausgeschaltet.

20. **ifl, ifk** ==> Zahl der Körper (entsprechend der Eingabereihenfolge), für welche überhaupt Ergebnisse geschätzt werden sollen und Zahl der entsprechenden Zonen.

21. **nog7** ==> Anzahl von Energiegruppen (von der höchsten Energie gerechnet) mit zusätzlicher Erwartungswertschätzung.

22. **isp** ==> Anzahl von Gruppen mit merklichem Beitrag zum Spaltspektrum.

23. **it6** ==> Steuergröße für die Behandlung von Quellteilchen.

it6=0 ==> weder Energiebiasing noch Anpassung an Sollgewichte für die Quellteilchen.

it6=1 ==> Energiebiasing und zusätzliche Anpassung an die Sollgewichte.

it6>1 ==> nur Energiebiasing, jedoch keine Anpassung an die Sollgewichte.

24. **izysz** ==> Körpermitte (wenn > 0), für welchen nach der Quellauswahl alle oder ein Teil der inneren Körper für die weitere Berechnung weggelassen und durch den äußeren Körper ersetzt werden.

25. **ikeza** ==> Anzahl der weggelassenen Körper.

26. **ibs1** ==> Anzahl der weggelassenen Zonen.

27. **wgrenz** ==> Grenzgewicht, oberhalb dessen die Teilchen nicht mehr berücksichtigt werden.

28. **idru1, idru2** ==> Zonenwerte, zwischen denen eine ausführliche Ergebnisdarstellung einschließlich der Gruppenflüsse gegeben ist. Diese Ergebnisse werden darüber hinaus auf eine Sonderbibliothek geschrieben (siehe Fall b), auf die man auch im Fall von Parallelrechnungen zurückgreifen kann.

29. **ipol** ==> Zahl der Körper mit einer Grundfläche aus Vielecken.

30. **ipols** ==> Gesamtzahl der Seiten dieser Körper. Dabei ist zu beachten, daß aus

programmtechnischen Gründen die zu zählende Seitenzahl pro Körper mindestens 4 sein muß.

31. **igreen** ==> Steuergröße, welche folgende Möglichkeiten regelt:

igreen=0 ==> übliche Rechnung.

igreen=1 ==> es werden die Ergebnisse nur für eine Quellzone berechnet.

igreen=2 ==> wie unter 1, jedoch wird für diese Quellzone eine innere Verteilung angenommen, welche durch die einzelnen Brennstäbe gegeben ist (Normierung auf 1).

igreen=3 ==> übliche Rechnung, jedoch für jede Zone ist die Quellverteilung durch die Brennstäbe gegeben.

Für **igreen>1** muß die Zahl der Generationsneutronen gleich der Zahl der Brennstäbe innerhalb eines Brennelementes sein. Derselbe Formalismus kann auch auf Teile von Brennelementen angewendet werden.

32. **cha** ==> Normierungsfaktor. Vor jeder Berechnung werden die Sollgewichte mit cha multipliziert. Dadurch hat man die Möglichkeit, die im Gewichtsprogramm TRAWEL festgelegte Normierung zu ändern.

33. **kkrum** ==> Anzahl der Zonen, bei denen die obere Höhenbegrenzung nicht durch eine Ebene gegeben ist (siehe Abschnitt 2.2.1).

34. **lpout** ==> Parameter für Kontrolldruck.

lpout=0 ==> kein Kontrolldruck nach jeder Generation

lpout=1 ==> Kontrolldruck

35. **abschluss** ==> Charaktergröße. Notwendig: **abschluss='end'**.

36. **irefo** (nur im Fall **isymw=0**) ==> **irefo >0** bedeutet schwarze Oberfläche an der oberen Begrenzungsfläche des Sektors.

37. **irefu** (nur im Fall **isymw=0**) ==> **irefo >0** bedeutet schwarze Oberfläche (totale Absorption) an der unteren Begrenzungsfläche des Sektors.

38. **rele** (nur bei **igreen>1**) ==> Radius des Brennstabes in den Brennelementen.

39. **gab** (nur bei **igreen>1**) ==> Gitterabstand zwischen den Mittelpunktskoordinaten der Brennstäbe.

40. **x34, y34, nrow** (nur bei **igreen=2**) ==> Mittelpunktskoordinaten des betreffenden Brennelementes, Kenngröße für die Anzahl von Brennstabreihen in dem Brennelement. Die Anzahl der Brennstäbe **nro** ist über **nrow** durch die Beziehung $nro=3*nrow*(nrow+1)$ gegeben (für WWER-typische Brennelemente).

41. **katego** (nur für **igreen=3**) ==> Anzahl von Brennelementzonen mit Stabstruktur.

42. **nogr7** (nur für **nogr7>0**) ==> Anzahl der Gruppen bei der Darstellung der Ergebnisse für die Erwartungswertschätzung.

43. **Zahlenfeld von (1:nogr)** ==> letzte Feingruppennummer für jede Grobgruppe

(Ergebnisdarstellung).

44. **Z1,Z2(1:isch)** ==> oberen Höhenbegrenzung und Anzahl der Körper der Schichten mit verschiedener Struktur (nur für isch >1)

4.2.2 Geometriedaten

Die geometrischen Daten werden entweder für das gesamte System oder für den festgelegten Symmetriesektor (für isymw>0) eingegeben.

Es gilt für die Eingabe die allgemeine Regel, daß die äußeren Körper Vorrang vor den inneren Körpern haben. Die Körpermitte für einen umgebenden Körper muß kleiner sein als die Körpermitte von in diesem Körper befindlichen Körpern. Weiterhin muß man beachten, daß alle Körper, die sich in einem gegebenen Körper befinden, aufeinanderfolgende Nummern haben müssen. Dabei muß außerdem berücksichtigt werden, daß von diesen inneren Körpern diejenigen an den Schluß gesetzt werden, welche von anderen Körpern vollständig eingeschlossen sind, also etwa Hexagone bzw. Körper mit Vieleckgrundflächen, deren sämtliche Seitenflächen direkt an andere derartige Körper grenzen (siehe auch Eingabebeispiel, Abb. 5).

Folgende Eingabedaten 1.-16. wiederholen sich für jeden Körper und sind in der Körperreihenfolge entsprechend den angeführten Regeln einzugeben:

1. **ie1** ==> Steuergröße mit 2 verschiedenen Funktionen:

a) **ie1<0** bedeutet, daß dieser Körper eine Sektoreinteilung besitzt. In diesem Fall ist die

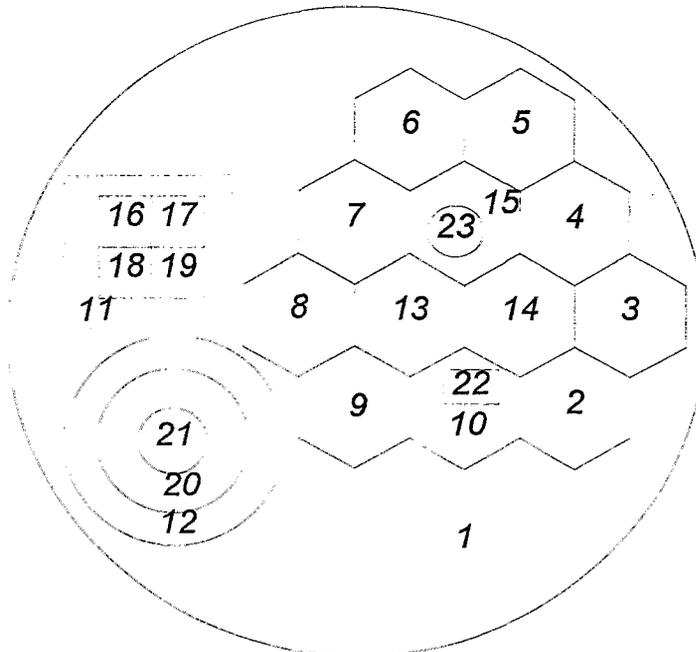


Abbildung 5: Beispiel einer richtigen Eingabereihenfolge

Sektoranzahl durch iabs(ie1) gegeben.

b) Für **ie1>0** sollen dieser und alle folgenden Körper bis zu einem Körper, für den wieder **ie2>0** ist, automatisch zur Verbesserung der Rechenzeit in einen künstlichen Zylinder eingeschlossen werden. Diese Möglichkeit sollte man nur dann nutzen, wenn sich in einem Körper sehr viele, dicht nebeneinander liegende andere Körper befinden.

2. **r1** ==> Radius für zylindrische Körper, Innenradius für Hexagone. Für unregelmäßige Körper ist hier 0.0 einzulesen, es sei denn dieser Körper ist symmetrisch und hat den Systemmittelpunkt als Mittelpunkt. Im letzteren Fall ist .01 einzulesen.

3. **aa1** ==> x-Koordinate des Mittelpunktes für Zylinder oder Hexagone, bzw. x-Koordinate eines Eckpunktes eines unregelmäßigen Körpers.

4. **bb1** ==> entsprechende y-Koordinate.

5. **jex** ==> Kennzeichnungsnummer für die Art des Körpers.

a) **jex=0** ==> es handelt sich um einen zylindrischen Körper.

b) **jex=1** ==> es handelt sich um ein freistehendes Hexagon.

c) **jex=2** ==> das Hexagon hat gemeinsame Seiten mit anderen Körpern, jedoch mindestens eine freie Seite.

d) **jex=3** ==> alle Seiten des Hexagons sind gleichzeitig Begrenzungsseiten anderer Körper.

e) **jex>3** ==> es handelt sich um (unregelmäßige) Vieleckkörper mit $jex-1$ Seitenflächen.

6. **ie2** ==> Anzahl der verschiedenen Höhenschichten dieses Körpers.

Die folgende Eingabe 7.-8. ist nur für Körper mit Sektoreinteilung notwendig und muß dann für alle Sektoren wiederholt werden ($i=1, iabs(ie1)$):

7. **ipp** ==> Anzahl der Höhenschichten im i. Sektorelement

8. **alac** ==> i. Sektorwinkel

Es folgt eine Eingabe für alle Höhenschichten des Körpers, jeweils beginnend mit der untersten Zone und nach oben fortschreitend. 9. läuft also im Zyklus von ($i=1, ie2$.)

9. **h** (Höhe der i. Schicht, diese Höhe kann auch zur Steuerung weiterer Eingabe negativ angegeben werden [siehe 10.-12.]), **mat** (Materialnummer der i. Schicht), **irei** (Kenngroße der i. Schicht),

iupf (Kenngroße für die i. Schicht bezüglich regulärer Grenze in vertikaler Richtung, $iupf>0$ bedeutet die spezielle radiale Höhenabhängigkeit, $iupf<0$ die x,y-Abhängigkeit der oberen Grenze).

$iupf$ entfällt für $kkum=0$ (siehe Eingabegröße 33 sowie 2.2.1).

h in cm, durch negatives h wird außerdem angezeigt, daß es sich um eine Zone mit Brennstabstruktur handelt (nur im Fall $igreen=3$ möglich). mat ist die Nummer der mit MODAJ berechnete Materialzusammensetzung, $irei$ ist eine Steuergröße mit folgender Bedeutung:

Wenn das 1. Mal **abs(irei)>4** auftritt, wird damit die erste Zone bzw. Körper festgelegt, ab der Quellneutronen vorhanden sind. Das erste **irei=3** legt für den entsprechenden Körper fest, daß er für die Teilchen als schwarz zu betrachten ist. Wenn irgendein **irei<0** auftritt, wird im Programm festgelegt, daß alle Kernspaltungen als zusätzliche Quellterme betrachtet werden.

Nachfolgend werden alle Zonen daraufhin untersucht, ob eine spezielle Eingabe bezüglich einer vorhandenen Brennstabstruktur notwendig ist.

Die folgende Eingabe 10. beschränkt sich auf einen solchen Fall ($h<0.0$). In diesem Fall ist eine einmalige Eingabe 10.-12. notwendig, welche für andere Zonen mit Brennstoff-

struktur im selben Körper nicht wiederholt werden darf.

10. **aa3** ==> x-Koordinate für einen Bezugspunkt zu den Brennstäben

11. **bb3** ==> entsprechende y-Koordinate

12 **iip** ==> Zahl, welche die Art der Anordnung der Brennelemente charakterisiert.

Falls es sich bei dem betrachteten Körper um einen Körper handelt, der kein Zylinder oder Hexagon ist, werden noch folgende Eingabegrößen (siehe unter 13.) für alle Eckpunkte des Körpers verlangt:

13. **axx, bxx** ==> x- und y-Koordinaten für alle Eckpunkte im Uhrzeigersinn, beginnend mit dem Punkt, der auf den schon in diesem Fall durch aa1, bb1 (siehe 4. Und 5.) gegebenen Punkt folgt.

Der letzte eingelesene Punkt muß dann also wieder mit aa1, bb1 korrespondieren.

Danach werden alle Zonen des Körpers nochmals dahingehend untersucht, ob Zonen mit komplizierterer oberer Grenzfläche vorhanden sind ($iupf > 0$ bzw. $iupf < 0$).

Für solche Zonen folgt in der Zonenreihenfolge die Eingabe 14.-16.

14. **aste** ==> entspricht der in 2.2.1 gegebenen Konstante bzw. für $iupf < 0$ der Größe a1.

15. **raf** ==> entspricht dem in 2.2.1 gegebenen Radius bzw. für $iupf < 0$ der Größe a2.

16. **iopf** ==> Größe zur näheren Kennzeichnung der Zone.

iopf=-1 irreguläre vertikale Grenze nur unten.

iopf=1 irreguläre vertikale Grenze nur oben.

iopf=2 irreguläre Grenzen oben und unten.

Damit sind die Eingaben der Daten für den entsprechenden Körper beendet und müssen für den nächsten Körper wiederholt werden. Nach Beendigung der Eingabe für die untere Schicht wird die die Eingabe für die nächste Schicht mit anderer Körperstruktur wiederholt usw.

4.2.3 Sonstige Daten

Nach der Eingabe der geometrischen Daten sind folgende Daten von der entsprechenden Bibliothek einzulesen:

1. **ikoeo1, ikkoeu1** ==>

Anzahl der Körper mit teilweise gemeinsamen Fläche für die obere und untere Schicht relativ zur betrachteten Körper der laufenden Schicht.

2. **ikkoe2(1: ikkoeo1), ikkoeu2(1: ikkoeu1)** ==> entsprechende Körpernummern für diese Körper.

Das unter 1. und 2. vorgesehene Einlesen ist nur für $nvar=1$ notwendig (siehe Punkt 5 unter 4.2.1).

3. **Feld der Brennstabwerte** (nur für $igreen=2$) für die ausgewählte Zone (nro Zahlen,

siehe Nr. 40 in 4.2.1 und Bemerkung unter Nr. 31)

3. **Gruppenabhängige Gewichte** zur Berechnung eines gewichteten Flusses (nog Zahlen).

4. **Feld von bias-Größen en(i)** für biasing des Quellspektrums (nur für it6>0) für alle Quellgruppen (isp Zahlen). Das für die Quellauswahl benutzte Spektrum sp(i) ergibt sich aus dem gegebenen Spektrum fsp(i) dann durch die Beziehung (a ist die Summe über alle en(i))

$$sp(i)=(en(i)*(1-a)*en(i))/fsp(i).$$

4.3 Eingabedaten aus anderen Files

Daten aus anderen Files (die gewählten Namen entsprechen den in 4.1 angegebenen Beispielen) werden in folgender Reihenfolge abgefordert:

1. Vom File **xabdf** : Eingabe des Quellspektrums der Neutronen, isp Zahlen. (nur für isp>0, im anderen Fall wird das Quellspektrum gleich dem Standardspaltspektrum genommen und isp gleich der Länge dieses Standardspektrums gesetzt).

2. Vom File **mdata** werden die mit dem Programm MODAJ berechneten Gruppenquerschnitte bzw. Wahrscheinlichkeiten für alle Materialzusammensetzungen eingelesen.

3. Vom File **spab** (nur für igreen=3) die speziellen Kennzahlen für die Brennstäbe für alle Zonen mit Brennstäben (nro*katego Zahlen).

4. Vom File **wabf** (nur für igreen=3) die Verteilungsfunktionen über die Brennstäbe für alle Zonen (nro*katego Zahlen).

5. Vom File **qbias** (nur für kbias>0) wird entweder eine "bias"- Quellverteilung (kbias=1) oder Zahlen eingelesen, durch die die ursprüngliche Quellverteilung zu teilen ist (kbias=2), um aus der richtigen Quellverteilung eine "bias"- Quellverteilung zu erzeugen. (für alle Zonen, angefangen von der in 4.2.2 (siehe Punkt 9) bestimmten ersten Zone mit einer Quelle>0).

6. Vom File **xabdf** wird die Quellverteilung über alle Zonen, angefangen von der in 4.2.2 bestimmten ersten Zone mit einer Quelle>0, eingelesen.

7. Vom File **dawei** werden für alle Gruppen und Zonen die mit dem Programm TRAWEL berechneten Gewichte eingelesen.

5. Eingabegrößen und ihre Bedeutung für das Programm TRAWEI

5.1 Angaben zum allgemeinen Ablauf

Generell sind wahlweise 2 verschiedene Vorgehensweisen für die Gestaltung der rekursiven Rechnung vorgesehen (zur Steuerung dieser Möglichkeiten siehe Punkt 3. unter 5.2.1). Für den ersten Fall (im Folgenden als Variante a) bezeichnet) wird das Schicksal eines Teilchens schon dann beendet, wenn es in eine Zone eindringt, in der für die entsprechende Energiegruppe das Ergebnis schon vorliegt. Dies Ergebnis wird dann für den Mittelwert des Beitrages der weiteren, weggelassenen Historie festgelegt. Bei Variante b) wird auf das Ergebnis des Stoßpunktes gewartet. Wenn in der entsprechenden Zone der mittlere Beitrag für die Energiegruppe nach dem Stoß schon berechnet wurde, wird das Teilchenschicksal beendet und dies Ergebnis für die nachfolgende, weggelassene Historie festgesetzt.

Zunächst werden (ähnlich wie beim Programm TRAMO) die Namen der wichtigen Eingabebibliotheken und einige Grundgrößen eingelesen:

1. Name des Standard-Eingabefiles (z.B. **abcdef**).
2. Name des Files der Anfangsgewichtsfunktionen (z.B. **dawei**).

Hier reicht es gewöhnlich aus, alle Gewichtsfunktionen am Anfang auf 1 zu fixieren.

3. Name des Files der Neutronengruppendaten (z.B. **mdata**).
4. Text zur näheren Angabe der Variante (bis zu 50 Zeichen).
5. Weitere Angaben zur Variante (bis zu 50 Zeichen).
6. 7-stellige Integer-Zahl zur Festlegung der 1. Zufallszahl.

Aus dem unter 1 und 2. gegebenen Namen (siehe Beispiel) werden (ähnlich wie bei TRAMO) weitere Namen von Bibliotheken abgeleitet.

- a) **rabcd**==> Name des ausführlichen Ausgabefiles
- b) **rdawei**==> Name der Resultatsbibliothek für die Gewichte.

5.2 Eingabegrößen für den in 5.1 unter 1. genannten File

5.2.1 Grundgrößen und Steuergrößen

Zunächst wird die allgemeine Reihenfolge angegeben. Soweit die Bedeutung identisch mit der in 4.2.1 ist, wird auf eine nochmalige Erläuterung verzichtet. Eine nähere Beschreibung wird für die Größen, deren Bedeutung sich ändert, oder für neu auftauchende Größen gegeben. Allgemein werden zunächst folgende Größen benötigt, von denen die meisten die identische Bedeutung haben wie unter 4.2.1 beschrieben. Insgesamt benötigte Größen:

lpl,tim,nvar,isch,i1,i2,ikoes,kzons,nog,hhg,ismh,ismw,alpha,non,iasam,ifl,ifk,nog7,

kkn,nogn,istand,wgrenz,ipol,ipols,in2,kkrum,kaus,kersi2,abschluss,irefo,irefu,
Z1,Z2(1:isch) ==> obereren Höhenbegrenzung und Anzahl der Körper der Schichten
mit verschiedener Struktur (nur für isch >1),klaus(1:kaus)
Größen mit veränderter Bedeutung:

1. **ifl,ifk** ==> spezielle Steuergrößen für die Art des Ergebnisgebietes, für welches
optimale Einflußfunktionen berechnet werden sollen (Gewicht=konst./Einflußfunktion).

ifl=0 ==> gesamte Außenfläche des Systems unabhängig von ifk

ifl=1 ==> Volumen der Zone ifk

ifl=2 ==> Seitenfläche der Zone ifk

ifl=3 ==> Deckfläche der Zone ifk

ifl=4 ==> untere Fläche des Körpers ifk

ifl=-1 ==> Seitenfläche des äußersten Körpers

ifl=-2 ==> gesamte obere Fläche

ifl=-3 ==> gesamte untere Fläche

ifl=-4 gesamte untere und obere Fläche des äußersten Körpers

2. **kkn**(Zonenummer), **nogn**(Energiegruppe), für welche die berechneten Gewichte auf
1 normiert werden.

3. **istand** ==> Steuergröße

istand<0 ==> Variante a) der Berechnung wird gewählt (sonst Variante b)), danach wird
istand durch -istand ersetzt.

istand=1 ==> Einlesen der Gewichte, Einlesen der Reihenfolge der Zonen für die
rekursive Berechnung.

istand=2 ==> Anfangsgewichte alle 1.0, Einlesen der Reihenfolge der Zonen.

istand=3 ==> Einlesen der Gewichte, Zonenreihenfolge 1,2,3 ...,usw.

istand=4 ==> Anfangsgewichte alle 1.0, Reihenfolge der Zonen 1,2,3, ...usw.

istand=5 ==> Anfangsgewichte alle 1.0, automatische Berechnung einer optimalen
Reihenfolge. Hier muß man anmerken, daß der Fall istand=5 momentan nur für Varianten
mit einer Schichtstruktur (isch=1) realisiert ist.

istand=6 ==> Einlesen der Anfangsgewichte, automatische Berechnung einer optimalen
Reihenfolge der Zonen.

4. **in2** ==> Zahl von Zonen für die spätere Rechenvariante in TRAMO

5. **kaus** ==> Zahl der Zonen, in denen keine Quellteilchen gestartet werden, sondern lediglich die Beiträge aus anderen Startpunkten für die Berechnung der Ergebnisse für diese Zonen genommen werden.

6. **kersi2** ==> Anzahl von Zonen in TRAWEL, für welche generell Einflußfunktionen und damit Gewichte bestimmt werden. Für die nicht berechneten Zonen bzw. für zusätzliche Zonen, welche im Programm TRAMO benötigt werden, kann man am Schluß der Rechnung andere Ergebnisse zuordnen (siehe Punkt 3. im Abschnitt 5.2.3). Dies ist dann sinnvoll, wenn aus Symmetrieüberlegungen klar ist, daß die Beiträge mancher Zonen gleich sein müssen.

7. **klaus(1:kaus)** ==> nur für $kaus > 0$, entsprechende Zonennummern der unter 5. beschriebenen Zonen.

5.2.2 Geometriedaten

Wie beim Programm TRAMO gilt für die Eingabe die allgemeine Regel, daß die Eingabe für die äußeren Körper Vorrang vor der Eingabe der inneren Körper hat. Die Körpernummer für einen umgebenden Körper muß kleiner sein als die Körpernummern von in diesem Körper befindlichen Körpern.

Als zweite wichtige Regel muß man beachten, daß alle Körper, die sich in einem gegebenen Körper befinden, aufeinanderfolgende Nummern haben müssen. Dabei muß man außerdem beachten, daß von diesen inneren Körpern diejenigen an den Schluß gesetzt werden, welche von anderen Körpern vollständig eingeschlossen sind, also etwa Hexagone bzw. Körper mit Vieleckgrundflächen, deren sämtliche Seitenflächen direkt an andere derartige Körper grenzen (siehe auch Beispiel für die Reihenfolge der Körper, Abb. 5).

Alle Eingabedaten (mit folgenden Ausnahmen) entsprechen den in 4.2.2 beschriebenen:

Die unter 9. in 4.2.2 angeführte Möglichkeit $h < 0.0$ ist nicht erlaubt. Daher entfällt auch generell die Eingabe unter 10. Die in 9. beschriebene *irei*-Bedeutung ändert sich ebenfalls. Nur der Fall $irei < 0$ hat die entsprechende Bedeutung wie in 4.2.2. Alle anderen Steuermöglichkeiten mit *irei* sind irrelevant.

5.2.3 Sonstige Daten

Nach der Eingabe der geometrischen Daten sind folgende Daten von der entsprechenden Bibliothek einzulesen:

1. **kistar(1:i1)** ==> Eingabe der zu berechnenden Zonenreihenfolge. Nur notwendig, wenn durch die Steuergröße *istand* gefordert (siehe Punkt 3. In 5.2.1)

2. Eingabe der Dosiswerte (entspricht Punkt 2. In 4.2.3)

3. **iz,n,n4** ==> für $iz < i1+1$ werden die Gewichtsfunktionen der Zone *iz* *n* anderen, unter 4. bezeichneten Zonennummern für alle Gruppen zugeordnet. Für $n4 < 0$ erhalten unabhängig von den Ergebnissen der Zone *iz* die unter 4. angegebenen Zonen die Gewichte 10^{**7} (schwarze Körper).

4. **lzah(1:n)** ==> die unter 3. avisierten Zonennummern.

Die Eingabe 3. und 4. wird so lange wiederholt, bis i_2 einen Wert größer i_1 aufweist. Für diesen Fall wird die Wirkung der letzten Eingabe unterdrückt und keine Nummer i_{zah} mehr angefordert.

Diese Eingabe unter 3. und 4. wird, falls $i_2 \leq i_1$ und $i_2 \leq kers_i2$ ist, völlig unterdrückt.

5.3 Eingabedaten aus anderen Files

Daten aus anderen Files werden nur vom File `dawei` (siehe Punkt 2 in 5.1) abgefordert:

1. **weig(1:i2,1:nog)** ==> Anfangsgewichtsfunktionen, wenn durch die Steuergröße `istand` (siehe Punkt 3. in 5.2.1) gefordert.

6. Programme zur Neutronendatenaufbereitung

Die unter 6.1 beschriebenen Programme bereiten geeignete Eingabegrößen für NJOY auf, verarbeiten Ausgabegrößen von NJOY und bringen sie in eine Form, welche weiter mit dem Programm MODAJ verarbeitet werden können. D.h. es werden Gruppensätze in einem Schema abgespeichert, welches ähnlich dem für die Bibliothek FL-27 ist und diesem für den Fall fehlender Legendresche Entwicklung entspricht.

6.1 Die Programmumgebung von NJOY

6.1.1 Das Programm INCHANGE

Mit dem Programm INCHANGE ist es möglich, einen an das Aufgabenspektrum angepassten Eingabe-File für NJOY zu erstellen. Unter Berücksichtigung der benötigten Daten und Optionen, wie z.B. verschiedener Temperaturen und Verdünnungen, wird ein Script erzeugt, in welchem die NJOY-Module `moder`, `reconr`, `broadr`, `unresr` und `group` mit dem erforderlichen Eingabeschema aufgerufen werden. In `group` werden die Reaktionquerschnitte σ_t , σ_e , σ_{in} , Q_e , und wenn vorhanden φ , σ_{2n} , σ_{3n} erzeugt. Neben diesen Größen werden noch für jede Energiegruppe die mittleren elastischen Streukosinus μ_e , die mittlere Anzahl der Spaltneutronen ν , die elastischen und inelastischen Streumatrizen und ein Spaltspektrum bestimmt. Der erzeugte File wird ergänzt durch UNIX-Befehle, welche Bibliotheksdateien kopieren bzw. wieder löschen und weiter unten erläuterte zusätzliche Programme aufrufen. Diese Befehle sind zum Teil nutzer- und maschinenspezifisch und müssen deshalb für andere Nutzer im Sourcefile modifiziert werden. Alle notwendigen Eingabedaten für INCHANGE werden von dem File `INCHANGE.DAT` gelesen.

`INCHANGE.DAT` hat dabei folgende Struktur:

1) Zu Beginn der Datei werden allgemeine Angaben bzw. Optionen aufgeführt (siehe Tab. 1). Dabei sind bei der automatischen Erzeugung des Scripts folgende Einschränkungen zu beachten:

a. Die Gewichtsfunktionsoption ist in der gegenwärtigen Programmversion gleich 4 gesetzt (siehe Beschreibung des Programms NJOY, dies entspricht der Mittelung Spaltspektrum im oberen Energiegebiet, 1/E-Spektrum im mittleren und Maxwellspektrum im thermischen Gebiet, der Übergang vom Spalt- zum 1/E-Spektrum wurde bei 0.8208 MeV und vom 1/E- zum Maxwellspektrum bei 0.1 eV festgelegt, die mittlere Spalttemperatur zur Charakterisierung des Spaltspektrums wird eingelesen. Der benutzte Wert ist 1.4 MeV.

Wenn andere Mittelungsfunktionen benutzt werden sollen bzw. die Spalttemperatur einen

anderen Wert haben soll, muß man den Ausgabefile von INCHANGE per Hand verändern.

b. Die Anzahl der Temperaturen sowie der Verdünnungsfaktoren ist maximal jeweils 9.

2. Es folgt eine Tabelle mit den gewünschten Isotopen. Neben dem Isotopennamen (immer 8 Zeichen) und der Materialnummer (END-Format) muß angegeben werden, ob n2n und n3n Reaktionen für das Element in der Basisbibliothek vorhanden sind. Eine zusätzliche Angabe über die Spaltung ist nicht erforderlich. Sie wird automatisch für die entsprechenden Isotope aus der Bibliothek entnommen. Der Isotopename setzt sich aus dem Elementsymbol (2 Zeichen), die Atommassennummer (3 Zeichen) und der Bibliotheksbezeichnung (die letzten 2 Zeichen, z.B. b6 für ENDF/B-6 und J2 für JEF2.2) zusammen. Der Isotopename bildet auch die Grundlage für alle Isotopendateien und Scriptdateien. In der ersten Spalte werden die benötigten Isotope markiert. Das Programm ist so gestaltet, daß die Tabelle uneingeschränkt mit zusätzlichen Isotopen ergänzt werden kann. Eine Reihenfolge der Isotope ist nicht vorgeschrieben. Das Eingabeschema muß der oben beschriebenen Gliederung entsprechen und wird im Beispiel (Tab.1) noch einmal dargestellt.

```

neutron group structure option (ign) : 17
number of neutron groups (ngn)      : 175
weight function option (only 4)     : 4
legendre order                       : 5
number of temperatures (max.9)      : 3
output save (0) or not (1)         : 1

final temperatures :
  300.  900.  2100.

number of sigma zero values (max. 9) : 6
standard of sigma zero (infinity)    : 1.0e+10

standard sigma zero values :
0.0  1.  10.  100.  1000.  10000.

```

on/out	isotope/element	material number	n2n	n3n
X	H---1-b6	125	0	0
0	B--11-b6	528	X	0
X	B--11-J2	528	X	0
0	C--00-B6	600	X	0
X	O--16-b6	825	0	0
0	SI-00-b6	1400	X	0
X	TI-00-b6	2200	X	X
X	V--00-b6	2300	X	0

Tab.1: Basisdatei INCHANGE.DAT mit einer Auswahl von Isotopen.

Da, wie bereits oben beschrieben, für die Streuung am Wasserstoff kein P_1 -Polynom verwendet wird und auch keine f-Faktoren existieren, wird für dieses Isotop ein vereinfachter Script erzeugt. Der NJOY-Script umfaßt auch den Aufruf des Programms TRANSDAT und für die Spaltisotope zusätzlich den Aufruf des Programms FSPECTRUM. Der gesamte Script besteht aus Teilscripthen für jedes Isotop, welche alle einen Namen bekommen. Der gesamte Sript enthält dann alle diese Namen und heißt "scriptnjoy". Der Name jedes Teil-Scriptes wird immer aus der Vorsilbe "in", dem

Isotopennamen (laut Tabelle) und der Gruppenanzahl gebildet (in NI-61-b6175). Das Programm prüft außerdem, ob für ein Isotop schon eine entsprechende Bibliothek in der Gruppenstruktur existiert. Dieses ist besonders günstig, wenn schon viele entsprechende Isotopendaten vorhanden sind. Es werden nur für die neuen Isotope NJOY-Rechnungen durchgeführt und mit den existierenden Isotopenbibliotheken ein neuer File zusammengestellt, der dem vorher erwähnten FL-Format für ABBN-Bibliotheken weitgehend entspricht. Dabei muß aber gewährleistet sein, daß alle Optionen der Zwischenbibliotheken (z.B. Anzahl der Temperaturen und Verdünnungen) identisch sind, sonst müssen neue Bibliotheken erzeugt werden (im File INCHANGE.DAT kann eine Option gesetzt werden).

6.1.2 Die Programme TRANSDAT, FL und FSPECTRUM

Das Programm TRANSDAT transformiert die von NJOY für ein Isotop erzeugten Daten derart, daß sie mit Hilfe des Programms FL in eine vom Programm MODAJ verarbeitbare Form überführt werden können. Das Programm FL erzeugt dabei nur aus den einzelnen von TRANSDAT angelegten Isotopendateien eine gemeinsame Bibliothek. TRANSDAT benötigt außer den von NJOY bereitgestellten Daten keine zusätzliche Eingabe. Alle weiter benötigten Angaben werden aus dem OUTPUT-File bzw. aus dem TAPE-File von NJOY herausgezogen. Innerhalb von TRANSDAT wird nur σ_a als Absorptionsquerschnitt neu berechnet der alle Absorptionsreaktionen umfaßt, und aus der Differenz zwischen dem totalen und den anderen Querschnitten $\sigma_f, \sigma_e, \sigma_{in}, \sigma_{n2n}$ und σ_{n3n} bestimmt wird. Die anderen Größen sind entweder direkt oder indirekt im Ausgabefile von NJOY vorhanden. Der Name des Ausgabefiles von TRANSDAT setzt sich immer aus der Vorsilbe 'micdat', der Gruppenanzahl und 'g' (4 Zeichen), dem Isotopennamen und dem Kürzel der Basisbibliothek zusammen (z.B. micdat027gC-00-B6). Jeder File enthält einen Kommentarteil für die wichtigsten Informationen und anschließend den Datenteil.

Das Format der vom Programm FL gebildeten Bibliothek entspricht nahezu der im FZR verwendeten FL-27 Datenbibliothek [7]. Es fehlen die Größen σ_r, μ_r und ϕ_∞ , die für Diffusionsprogramme notwendig sind. An ihre Stelle wurden zwei neue Querschnitte σ_{n2n} , σ_{n3n} und eine Dummygröße eingefügt. Die höheren Momente der P_r -Entwicklung wurden am Ende als Rekord 3 aufgenommen. Im Anhang befindet sich eine Kurzbeschreibung des Formates.

Das Programm FSPECTRUM liefert für das jeweilige Spaltisotop ein auf 1 normiertes Spaltspektrum auf der Grundlage eines eingelesenen Flußspektrums. Der erzeugte File-name setzt sich zusammen aus der Vorsilbe 'spect', der Gruppenanzahl und dem Isotopennamen.

6.2 Das Programm MODAJ

Dieses Programm berechnet aus den in der notwendigen Form (in beiden möglichen Darstellungsformen, siehe 1.1 und 1.2) erzeugten mikroskopischen Gruppendatenbibliotheken alle für das Programm TRAMO benötigten Größen, die mit Neutronendaten zusammenhängen. Nachfolgend wird eine kurze Beschreibung der notwendigen Eingabegrößen für dieses Programm gegeben. Für sehr große Gruppenzahlen kann es zu Schwierigkeiten bei $pn=5$ (siehe unter 8.) kommen. Deshalb wurde für diesen Fall das Pausweichprogramm **dodaj** entwickelt, welches die identischen Eingabegrößen benötigt, jedoch ist für $pn=5$ (bzw. -5) vorgeschrieben.

Die ersten drei Eingabegrößen werden zunächst für die Bildschirmeingabe benötigt:

1. Name der Eingangsdatenbibliothek (z.B. **dado1**)

2. **nog** - Gruppenanzahl in der Gruppendatenbibliothek

3. Name der Gruppendatenbibliothek

Die weiteren Daten müssen auf der Eingabebibliothek mit dem unter 1. gegebenen Namen bereitgestellt sein.

4. **nois** - Anzahl der in dieser Bibliothek vorhandenen Isotope

5. **nomas** - Anzahl der zu berechnenden Materialzusammensetzungen

6. **lun** - logische Nummer, unter der die Gruppendatenbibliothek gespeichert ist

7. **lib** - Steuergröße, für $lib > 10$ werden über die Temperaturen der Materialzusammensetzungen hinaus Temperaturen für jedes einzelne Isotop als Eingabegrößen verlangt.

8. **pn** - Steuergröße, für $pn=4$ handelt es sich um eine Bibliothek mit Legendrescher Entwicklung, für $pn=2$ wird generell Isotropie im Schwerpunktsystem bei der elastischen Streuung vorausgesetzt, und für $pn=3$ wird von der berechneten Winkelbibliothek im Schwerpunktsystem [6] ausgegangen. Im Fall $pn=5$ wird der in 1.2.3 geschilderte Formalismus für die Anisotropie der elastischen Streuung gewählt und die dafür benötigten Daten berechnet. Da diese berechneten Daten sich auf Energiepunkte für jedes Isotop beziehen, benötigt man bei anderer Gruppenzahl keine neuen Daten. Deshalb wird für $pn=-5$ auf diese Datenberechnung verzichtet.

9. **befac** - Steuergröße, bei $befac > 0$ werden b- Faktoren zur Verbesserung der Bremsquerschnitte für alle Materialzusammensetzungen und Energiegruppen verlangt.

10. **lpl** - Grad der Legendreschen Entwicklung. Dieser Wert kann offenbar nur bei $pn=4$ größer Null sein.

11. Ausdruckparameter **datout** (integer). Für $datout > 0$ wird zusätzlich ein Ausdruck der Ergebnisse mit Kommentaren erstellt.

12. Steuerparameter **kumul** (integer). Für $kumul=1$ werden die ausgegebenen Matrizen für das erste Moment in kumulativer Form ausgegeben.

13. Steuerparameter **kform**. Für $kform=1$ werden alle Daten formatiert ausgegeben, für $kform=0$ erfolgt unformatierte Ausgabe. Generell muß man anmerken, daß alle für die spätere Monte-Carlo Rechnung wichtigen Informationen aus der Datenbibliothek übernommen werden und automatisch die entsprechende Monte-Carlo Behandlung gewährleistet ist. Empfohlene Werte für große Varianten sind $kform=0$ und $kumul=1$.

Nach diesen grundlegenden Zahlen folgt die Eingabe der einzelnen Materialzusammensetzungen.

Jedes Isotop, das mindestens einmal in einer Materialzusammensetzung auftritt, muß berücksichtigt werden. Anschließend an den Namen des Isotops (dieser muß mit den vorhandenen Namen in der Gruppendatenbibliothek korrespondieren) werden die Kerndichten (in Einheiten von 10^{24}) angegeben, mit denen das Isotop in jeder Materialzusammensetzung vertreten ist.

13. **Name des Isotops i, Kerndichten des Isotops i** in allen Materialzusammenset-

zungen, (nacheinander für alle auftretende Isotope i).

14. **Temperaturen** für alle Zusammensetzungen in K.

Die erste Temperatur hat außerdem eine Steuerfunktion. Die zweite Stelle nach dem Komma dieser Zahl gibt die Zahl der sog. σ_0 - Iterationen zur Berechnung der f-Faktoren an.

15. Eingabe der sog. **Kordlängen** für alle Zusammensetzungen. Mit Hilfe dieser Kordlängen können zusätzliche Verdünnungsquerschnitte zur Berechnung der f-Faktoren definiert werden. Wenn diese Größen als Nullen eingegeben werden, gibt es keine derartigen zusätzlichen Verdünnungen.

16. Nur für **befac>0** => Eingabe der Bremskorrekturfaktoren für alle Zusammensetzungen und Energiegruppen (der Gruppenindex läuft zuletzt).

17. Nur für **lib>10** => für alle auftretenden Isotope und Zusammensetzungen werden Temperaturen für die Isotope eingegeben (der Index der Zusammensetzungen läuft zuletzt).

Die Ausgabe der Ergebnisse erfolgt in 2 verschiedenen Bibliotheken, deren Namen durch den unter 1 eingegebenen Dateinamen bestimmt werden. Für das angegebene Beispiel **dado1** werden in **rdado1** die ausführlichen Ergebnisse mit Kommentaren gespeichert, in **mdado1** die reinen Ergebnisse, die direkt für TRAMO genutzt werden können.

7. Hilfsprogramm SUMMA zur Verarbeitung der Resultate bei Parallelberechnung

Das Programm SUMMA verarbeitet die aus Parallelrechnungen gewonnenen Resultate zu einem Gesamtergebnis, wobei aus den gegebenen Werten für die Fehler der Einzelresultate der Fehler der Gesamtrechnung bestimmt wird. Zusätzlich zu den bei der Einzelrechnung bestimmten Ergebnissen werden (entsprechend Programmeingabe bei SUMMA) verschiedene kumulativen Flüsse berechnet. SUMMA hat auch dann Bedeutung wenn einzelne Ergebnisfiles für verschiedene Anteile des Spaltspektrums (U-5, U-8, Pu-9 Spaltungen) zusammengefaßt werden. In SUMMA werden die einzelnen Resultatsbibliotheken verarbeitet. Im unter Punkt 4.1 unter 8b angeführten Berechnungsbeispiel ist eine solche mit **rabcd** bezeichnet.

Eingabebeispiel für SUMMA:

1. Name der Variante z.B. **abcdef** (die Ergebnisdatei steht dann auf **sabcdef**)

2. Anzahl der Resultatsbibliotheken, die zusammengefaßt werden sollen (z.B. 10)

3. Anzahl der verwendeten Energiegruppen in den Einzelrechnungen für die Ergebnisdarstellung (z.B. 29)

4. Hilfsgröße zur Kennzeichnung der Bibliothek mit Gruppengrenzen (ganze Zahl).

5. Anzahl **n11** der zu berechnenden kumulativen Flüsse

Für **n11=0** werden keine kumulativen Flüsse berechnet. Die ersten beiden kumulativen Flüsse sind sonst automatisch durch $E > 1.0$ MeV und $E > 0.5$ MeV vorgegeben.

Für **n11>2** müssen im Anschluß an **n11** die zusätzlichen Energien zur Bestimmung

weiterer kumulativen Flüsse eingelesen werden. Zur Berechnung dieser kumulativen Flüsse wird zwischen den Gruppengrenzen interpoliert.

6. Namen der einzelnen Resultatsbibliotheken (für das gewählte Beispiel 10 Namen).

7. Faktoren für die Beiträge der einzelnen Bibliotheken zum Gesamtergebnis, i.a. $1/\text{Anzahl der Einzelbeiträge}$, jedoch können diese Werte auch abweichen, wenn man Beiträge mit verschiedenen Spaltspektren (und damit verschiedenen Quellanteilen) zusammensetzen will.

Zusätzlich muß eine Bibliothek mit folgenden Größen vorhanden sein: Kenngröße (muß mit der unter 4. angegebenen Größe übereinstimmen), obere Gruppengrenze der 1. Gruppe, alle unteren Gruppengrenzen in der benötigten Struktur, in welcher die Darstellung der Ergebnisse für die einzelnen Rechnungen vorlag.

An dieser Stelle soll noch auf eine wichtige Möglichkeit aufmerksam gemacht werden. Um die häufig sehr kleinen Ergebnisse der oberen Energiegruppen mit ausreichender statistischer Genauigkeit berechnen zu können, kann man sich bei der Eingabe für die Anzahl der Gruppen (siehe 4.2.1 unter 9.) auf eine kleine Zahl beschränken. Dadurch werden sämtliche Quellneutronen renormiert auf diese wenigen Gruppen, die Teilchengeschichte wird außerdem sehr kurz und man erhält für diese ausgewählten wenigen Gruppen wesentlich genauere Ergebnisse. Mit Hilfsprogrammen kann man diese Gruppenergebnisse in die allgemeine Ergebnisbibliothek überführen.

Literaturangaben

- [1] H.-U. Barz
Grundlagen der Monte-Carlo-Programme SMO und EMO zur Neutronenfluß bzw. Abschirmberechnung, ZfK-547, Rossendorf 1985
- [2] H.-U. Barz
TRAMO - a Flexible Multigroup Neutron Transport Code on the Basis of the Monte Carlo Method for Flux Calculations, ZfK- 705, Rossendorf 1990
- [3] H.-U. Barz, W. Bertram, Calculation of neutron fluence in the region of the pressure vessel for the history of different reactors by using the Monte-Carlo-method, Nuclear Engineering and Design 137(1992)71-75
- [4] H.-U. Barz, J. Konheiser
Fluenzberechnungen für das Bestrahlungsprogramm Rheinsberg von Materialproben im Rheinsberger Reaktor im Zeitraum 1984 - 1988, FZR-51, August 1994
- [5] H.-U. Barz, B. Böhmer, J. Konheiser, I. Stephan
Ermittlung der Neutronendosis von bestrahlten WWER-Reaktordruckbehältermaterialien, FZR-87, 1995
- [6] B. Böhmer
MCANG - eine Bibliothek mit Gruppendaten kumulativer Winkelverteilungen elastisch gestreuter Neutronen für Monte-Carlo-Rechnungen, ZfK-531, Rossendorf 1984
- [7] Chr. Reiche, H.-U. Barz, B. Kunzmann, E. Seifert, H. Wand
Reaktor-Code-System RHEIN für ESER-Computer, ZfK-668, 1989
- [8] M.N. Nikolaew, A.M. Tsiboulya, G.N. Manturow,
New Russian Group constants set ABBN-93/MULTIK with CONSYST2 data code retrieval system and applying these data to the TRAMO Monte Carlo code Institut of Physics and Power Engineering (IPPE), Obninsk, Internal report
- [9] H.-U. Barz
Problems of Weight Determination for the Multigroup Monte Carlo Code TRAMO for Neutron Flux Calculation, Progress in Nuclear Energy, Vol.24, pp. 69-75, 1990