



KERNFORSCHUNGSANLAGE JÜLICH GmbH

**Zentralabteilung Brennelement – und
Bestrahlungstechnologie**

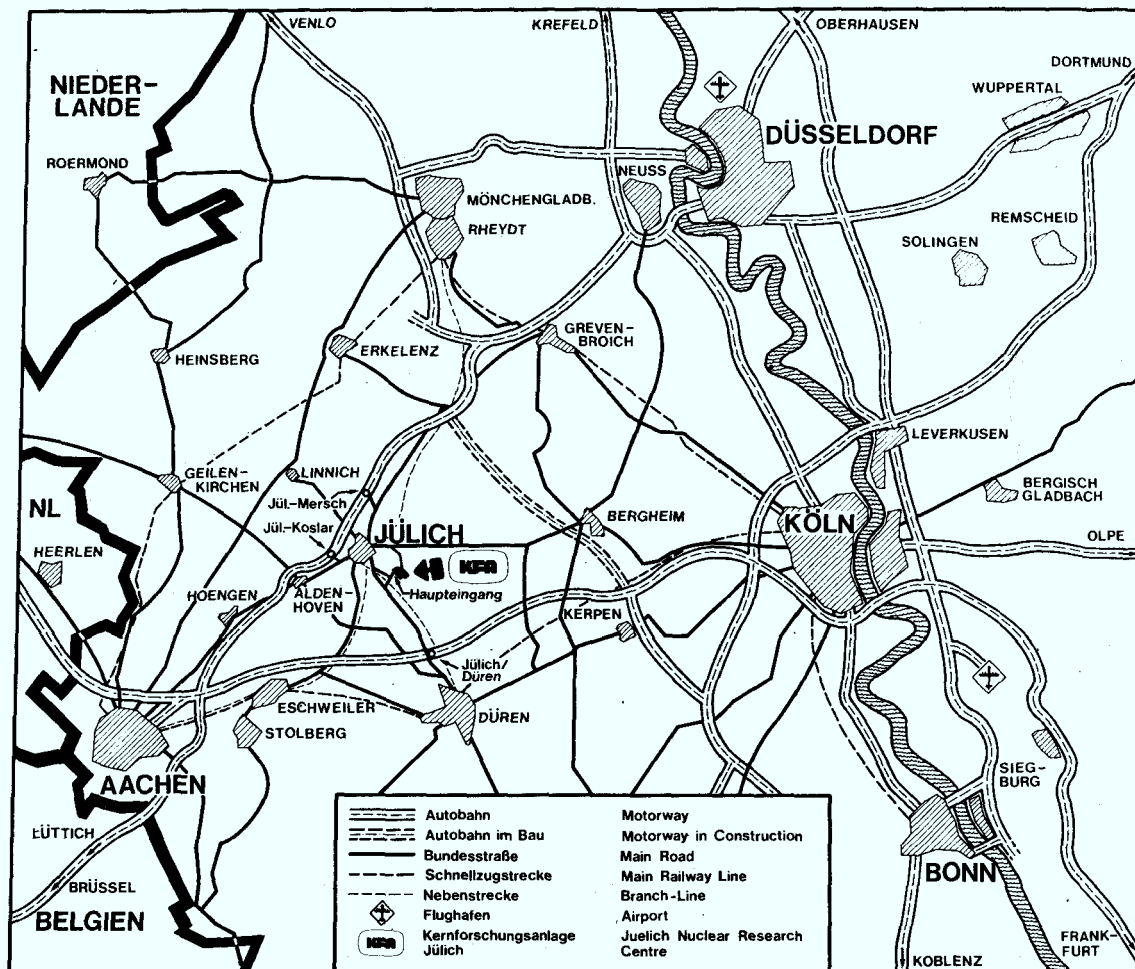
**Neutronenspektrumentfaltungen aus
gemessenen Sondenaktivierungen**

Das FORTRAN-Rechenprogramm SAND-MX2

von

L. Weise

**Jül - 1837
März 1983
ISSN 0366-0885**



Als Manuskript gedruckt

Berichte der Kernforschungsanlage Jülich - Nr. 1837

Zentralabteilung Brennelement- und Bestrahlungstechnologie Jül - 1837

Zu beziehen durch: ZENTRALBIBLIOTHEK der Kernforschungsanlage Jülich GmbH

Postfach 1913 · D-5170 Jülich (Bundesrepublik Deutschland)

Telefon: 02461/610 · Telex: 833556 kfa d

Neutronenspektrumentfaltungen aus gemessenen Sondenaktivierungen

Das FORTRAN-Rechenprogramm SAND - MX 2

von

L. Weise

NEUTRON SPECTRA UNFOLDING FROM MEASURED DETECTOR ACTIVATIONS

THE COMPUTER PROGRAMME SAND-MX2

by

Lothar Weise

ABSTRACT

Our knowledge of the neutron spectrum in irradiation facilities essentially rests on the calculation and on the unfolding resp. adjustment based on measured activations, more generally said reaction rates, since the other direct or indirect experimental methods here frequently are not applicable on account of technical reasons. In this situation the neutronic calculation by no means renders superfluous the unfolding because the measurements can confirm or possibly correct resp. improve the calculational results.

The FORTRAN code SAND-MX2 is a contribution of the KFA to the international repertoire of unfolding codes. With regard to its contents it is one of the newer versions of the original code SAND-II which are presently used as SAND-II also in the laboratories of several countries as especially practice related unfolding calculational methods. This report may serve as an instruction manual for the routinely neutron spectrum unfolding by means of the code SAND-MX2.

It appeared to us not to be superfluous in addition to the above mentioned aim also to give a general view of the present situation in unfolding technique and to touch shortly the other advanced methods because we believed thereby also to give a better understanding of the characteristic features of our programme. In some laboratories several of the here described calculational programmes are alternatively in current use for the purpose of giving a greater confidence to the result of the neutron spectrum unfolding in question.

NEUTRONENSPEKTRUMENTFALTUNGEN AUS GEMESSENEN SONDENAKTIVIERUNGEN

DAS FORTRAN-RECHENPROGRAMM SAND-MX2

von

Lothar Weise

ZUSAMMENFASSUNG

Unsere Kenntnis des Neutronenspektrums in Bestrahlungseinrichtungen beruht im wesentlichen auf der Rechnung und auf der Entfaltung oder Adjustierung gemessener Sondenaktivierungen, allgemeiner Reaktionsraten gesagt, da andere direkte oder indirekte experimentelle Methoden aus technischen Gründen hier häufig nicht anwendbar sind. Dabei macht die neutronische Rechnung nicht etwa die Entfaltung überflüssig, da die Messungen die Rechenergebnisse absichern oder möglicherweise korrigieren bzw. verbessern können.

Das FORTRAN-Rechenprogramm SAND-MX2 ist ein Beitrag der KFA zum internationalen Repertoire von Entfaltungsprogrammen. Inhaltlich handelt es sich dabei um eine der existierenden neueren Versionen des ursprünglichen FORTRAN-Rechenprogramms SAND-II, die wie auch SAND-II gegenwärtig in den Laboratorien verschiedener Länder als besonders praxisbezogene Entfaltungsverfahren Anwendung finden. Der vorliegende Bericht kann als eine Anleitung zur routinemäßigen Neutronenspektrumentfaltung mittels des Rechenprogramms SAND-MX2 dienen.

Es schien uns nicht überflüssig, daneben einen allgemeinen Überblick über die gegenwärtige Situation in der Entfaltungstechnik zu geben und die anderen fortgeschrittenen Verfahren kurz zu streifen, da wir glaubten, dadurch auch die Transparenz unseres Rechenprogrammes fördern zu können. In einigen Laboratorien werden nebeneinander verschiedene der hier beschriebenen Rechenprogramme angewendet, um auf diese Weise das Ergebnis der vorliegenden Neutronenspektrumentfaltung noch besser absichern zu können.

INHALTSVERZEICHNIS

	Seite
1	1
2	3
3	10
3.1	10
3.2	12
3.3	12
3.4	14
3.5	14
4	20
4.1	20
4.2	22
4.3	27
4.4	28
4.5	29
4.6	31
4.7	32
5	38
6	44
6.1	44
6.2	44
6.3	44
7	45
8	49
8.1	49
8.2	49
8.3	49

8.4	Das Unterprogramm RELAKT	51
8.5	Das Unterprogramm SUCRAN	51
8.6	Die Unterprogramme PLOTT, MAXIM, XYLIN, XYLOG, ACHSEX und SHRIFT	52
8.7	Das Unterprogramm RANDN	52
9	EINGABE UND AUSGABE	53
9.1	Eingabe	53
9.2	Ausgabe	56
10	EIN BEISPIEL	58
11	EIN HILFSPROGRAMM ZUR AUFBEREITUNG VON GUESS-SPEKTREN BELIEBIGER GRUPPENSTRUKTUR	67
12	NEUTRONENSPEKTREN UND ABGELEITETE KENNGRÖSSEN	72
13	REFERENZEN	92
14	LITERATUR	93
ANHANG A:		
	Symboltabelle der wichtigsten FORTRAN-Variablen für SAND-MX2	97
ANHANG B:		
	Programmliste für SAND-MX2	103
ANHANG C:		
	Symboltabelle der FORTRAN-Variablen für das Spline-Programm	127
ANHANG D:		
	Programmliste für das Spline-Programm	129
ANHANG E:		
	Betrachtung der Fehler der gemessenen Aktivierungen	133

1 EINLEITUNG UND PROBLEMSTELLUNG

Dieser Bericht verfolgt drei Ziele:

- 1) die Reportierung der bei Neutronenspektrumentfaltungen mit dem titularisch genannten Rechenprogramm gemachten Erfahrungen,
- 2) die Wiedergabe ausgewählter entfalteter Neutronenspektren und daraus abgeleiteter wichtiger integraler Parameter hauptsächlich für die Jülicher Reaktoren FRJ-1 und FRJ-2 in der Annahme, daß diese Informationen für den einen oder den anderen Zweck von Interesse sein könnten, und
- 3) die Publikation des FORTRAN-Rechenprogrammes SAND-MX2 selbst.

Das Problem, das sich uns bei der Entfaltung von Neutronenspektren aus Aktivierungs-sondenmessungen stellt, ist die Auflösung des Systems der sogenannten Aktivierungsgleichungen

$$A_i = \int_0^{\infty} \sigma_{\text{act } i}(E) \phi_E(E) dE \text{ (s}^{-1}\text{)}, \quad i = 1 \text{ bis NDETEC}, \quad (1)$$

E = Neutronenenergie,

nach der spektralen Neutronenflußdichte $\phi_E(E)$, allgemein Neutronenspektrum genannt, auf der Basis der gemessenen Aktivierungen pro Absorberatom A_i , von denen NDETEC Stück vorhanden sein mögen, und der als bekannt vorauszusetzenden differentiellen Aktivierungsquerschnitte $\sigma_{\text{act } i}(E)$. Das Gleichungssystem nach Formel (1) ist rein mathematisch gesehen ein System Fredholmscher Integralgleichungen erster Art. Abgesehen von sehr idealen und meistens unrealistischen Ausnahmefällen ist jedoch eine rein mathematische Lösung wegen der relativ geringen Anzahl der zur Verfügung stehenden Aktivierungsreaktionen, deren Ausbeutefunktionen (response functions) $\sigma_{\text{act } i}(E) \phi_E(E)$ noch dazu möglicherweise in manchen Bereichen der Neutronenenergie "linear abhängig" sind, nicht möglich.

Daraus folgt, daß ein gewisses Maß von physikalischer Apriori-Information über das Neutronenspektrum für dessen Entfaltung bereits vorhanden sein muß. Alle modernen Entfaltungsprogramme machen davon ausgiebigen Gebrauch, so auch unser Rechenprogramm SAND-MX2, das ein Code vom Typ des Rechen-

programmes SAND-II /1/ ist und wovon eine erste Version durch /2/ erstellt worden war.

Damit der Code auch im Vergleich mit den anderen konkurrierenden Entfaltungs-Codes gesehen und beurteilt werden kann, war es notwendig, nach prinzipiellen Bemerkungen über Entfaltungsmethoden (Kapitel 2) die wichtigsten gegenwärtigen Entfaltungsprogramme in der gebotenen Kürze zu beschreiben (Kapitel 3). Es folgen kritische Gedanken über die Auswahl von Aktivierungsreaktionen und Detektoren (Kapitel 4). Die nächsten fünf Kapitel sind im eigentlichen Sinne dem Entfaltungs-Code SAND-MX2 vorbehalten. Es schließt sich in Kapitel 10 ein vollständig durchgerechnetes Beispiel an.

In der Regel stehen die Eingangsspektren nicht in der vom Code verwendeten Energiegruppenstruktur der SAND-II Library zur Verfügung. Zur Umwandlung wird ein Spline-Programm benutzt, welches Gegenstand von Kapitel 11 ist. Zum Schluß folgt die stark gekürzte Wiedergabe von mit SAND-MX2 entfalteten Neutronenspektren und daraus abgeleiteter energieintegraler Kenngrößen (Kapitel 12). Ein Anhang enthält die FORTRAN-Programmlisten für SAND-MX2 und das verwendete Spline-Programm nebst den dazugehörigen Symboltabellen der benutzten FORTRAN-Variablen.

2 PRINZIPIELLE BEMERKUNGEN ÜBER ENTFALTUNGSMETHODEN

In diesem Kapitel möchten wir die existierenden Entfaltungsmethoden in

- 1) die "klassischen" Verfahren und
- 2) die modernen Methoden

einteilen. Die "klassischen" Verfahren seien die in der Frühzeit der Entfaltung mit Aktivierungs-sonden, etwa bis in die Sechziger Jahre, entwickelten Methoden. Einen Überblick über die "klassischen" Verfahren kann man in /3/ und /4/ finden.

Unter den modernen Methoden wollen wir diejenigen verstehen, die in irgendeiner Form Grundlage eines der gegenwärtig bestehenden Entfaltungsprogramme sind.

Eine andere sehr sinnvolle Einteilung /4/ ist diejenige in

- I) rein mathematische Verfahren und
- II) Verfahren unter Verwendung physikalischer Annahmen.

Die rein mathematischen Verfahren wurden schon sehr bald entwickelt, und man knüpfte damals - Ende der Fünfziger und Anfang der Sechziger Jahre - an sie die Hoffnung, ohne irgendwelche Apriori-Information über das physikalische System relevante Aussagen über das Neutronenspektrum erhalten zu können. Wir werden sehen, daß dies im allgemeinen nicht möglich ist, zumindest nicht in einer akzeptablen Energiegruppenanzahl, d.h. für eine hinreichende energetische Auflösung.

Der Grund für das Versagen der rein mathematischen Verfahren liegt natürlich darin, daß für den interessierenden Neutronenenergiebereich von etwa 10 Zehnerpotenzen nur eine sehr beschränkte Anzahl von zwei oder drei Dutzend Aktivierungsreaktionen zur Verfügung steht, die darüber hinaus das ganze Spektrum nicht gleichmäßig abdecken. Während nämlich z.B. im oberen Teil des schnellen Spektrums thermischer Spaltungsreaktoren eine relativ "große" Anzahl von Aktivierungsreaktionen existiert, weshalb hier die rein mathematischen Verfahren noch am ehesten vernünftige Resultate erbringen, gibt es ausgesprochene "Lücken", so zwischen 2 keV und 0,5 MeV, wo keine der zur Verfügung stehenden Aktivierungsreaktionen empfindlich ist und deshalb ein rein mathematisches Verfahren ohne Apriori-Information keine sinnvolle Lösung erbringen kann, während hier eines der modernen

Verfahren lediglich die eingegebene Apriori-Information unverändert wiedergibt.

Der Gebrauch von physikalischer Apriori-Information läuft im allgemeinen auf die Vorgabe einer nullten Näherung für das Neutronenspektrum und eines Rezeptes für die "Verbesserung" dieser Eingangsnäherung in Richtung auf das reale Neutronenspektrum hinaus. Klassische Verfahren benutzen als Eingangsnäherung recht einfache Ansätze, wie z.B. die abschnittsweise Approximation des Neutronenspektrums durch Exponentialfunktionen. Unter idealen Verhältnissen können diese Ansätze zu brauchbaren Resultaten führen, wie der Exponentialansatz für den schnellen Energiebereich in einem mit Wasserstoff moderierten, unendlich ausgedehnten, nicht absorbierenden und homogenen System. Ganz anders ist die Situation bei der Entfaltung realer Neutronenspektren in Bestrahlungseinrichtungen von praktischem Interesse, so etwa für Strukturmaterialbestrahlungen oder in Inpile-Fusionsexperimenten, um nur zwei Beispiele zu geben. Hier ist man einmal im allgemeinen an einem wesentlich ausgedehnteren Energiebereich interessiert, zum anderen führt die Komplexität der Anordnung zu Neutronenspektren, die nicht mit den eben erwähnten einfachen Annahmen beschrieben werden können.

Moderne Verfahren, die die Grundlage der arrivierten Entfaltungs-Codes sind, benutzen deshalb fast ausschließlich transport- oder diffusions-theoretisch gerechnete bzw. durch Monte-Carlo-Rechnung ermittelte Eingangsnäherungen oder doch zumindest gewisse theoretisch nahe gelegte Normspektren im schnellen, im epithermischen und im thermischen Energiebereich mit diversen freien Parametern, die wieder nur durch die Gesamtheit der gemessenen Aktivierungen als die einzigen zur Verfügung stehenden experimentellen Daten festgelegt werden können. Natürlich ist es auch sinnvoll, als Eingangsnäherung eine Spektralverteilung, die durch die sogenannten direkten Methoden der Neutronenspektrometrie - z.B. mit Lithium-Spektrometer - gewonnen wurden, zu verwenden. Allerdings wird diese in dem interessierenden Neutronenenergiebereich oft nicht zur Verfügung stehen.

Man stellt also fest, daß auf dem Gebiet der Verifizierung von Neutronenspektren auf der Basis gemessener Sondenaktivierungen der Optimismus früherer Autoren einer realistischen Einschätzung der Möglichkeiten Platz gemacht hat.

Man wird sicher nicht mehr von einer Neutronenspektrometrie mit Aktivierungs-sonden im strengen Sinne sprechen können, da letztlich bereits eine, auf andere Art und Weise gefundene mehr oder weniger detaillierte Eingangsinformation vorliegen muß. Einige Autoren bevorzugen deshalb heute die Begriffe Spectrum Adjustment und Adjustment Codes, also Spektrum-adjustierung oder Spektrumanpassung bzw. Anpassungsprogramme. In diesem Bericht möchten wir jedoch den Begriff der Entfaltung beibehalten, weil derselbe für die Auflösung der Aktivierungsgleichungen nach der spektralen Neutronenflußdichte $\phi_E(E)$ gebräuchlich ist, auch wenn für dieselbe irgendwelche Näherungsannahmen gemacht werden.

Was können nun die modernen Methoden - unter Berücksichtigung der im Vorgehenden gemachten Einschränkungen - leisten?

Charakteristisch für alle modernen Codes zur Entfaltung von gemessenen Sondenaktivierungen ist es, daß einmal bei nicht zu großem Unterschied zwischen Eingangsnäherung und realem Neutronenspektrum eine Verbesserung unseres apriorischen Wissens über das Neutronenspektrum erzielt werden kann, daß andererseits größere Abweichungen zwischen Rechnung und gemessenen Aktivierungen mit sinnlosen Resultaten vom Code beantwortet werden, die man als solche ohne weiteres erkennen kann, und die z.B. in heftigen Oszillationen des Lösungsspektrums bestehen. Eine Diskrepanz zwischen Rechnung und gemessenen Aktivierungen kann auftreten, wenn entweder die Rechnung oder die gemessenen Aktivierungen oder beides fehlerhaft sind. Wenngleich also die geläufigen Entfaltungs-Codes bei fehlender Apriori-Information es nicht leisten können, die wenigen als konsistent voraussetzenden und daher einwandfrei gemessenen Sondenaktivierungen in einen detaillierten Spektralverlauf über viele Zehnerpotenzen der Neutronenenergie hinweg umzusetzen, so können sie doch durchaus für eine Prüfung des gerechneten Neutronenspektrums auf Konsistenz dienen und somit gestatten, daß die Rechnung durch Messung abgesichert wird, wie es guter experimenteller Brauch ist.

Direkte Methoden der Neutronenspektrometrie können hier im allgemeinen nicht konkurrieren - es sei denn als Zulieferer von Eingangsnäherungen -, da der hierfür erforderliche Platzbedarf in Bestrahlungsexperimenten meist nicht vorhanden ist.

Wir wollen nun die in diesem Kapitel gemachten Feststellungen durch einige Gleichungen verdeutlichen.

Ausgangspunkt ist natürlich das System der Aktivierungsgleichungen nach Gl. (1). Bei den rein mathematischen Verfahren approximiert man zunächst die spektrale Neutronenflußdichte $\phi_E(E)$ durch eine Summe von geeignet zu wählenden Hilfsfunktionen $\psi_i(E)$, $i = 1$ bis N , also

$$\phi_E(E) = \sum_{i=1}^N \phi_i \psi_i(E), \quad (2)$$

wobei die Anzahl der Entwicklungskoeffizienten N häufig aber nicht immer mit der Anzahl der verwendeten Energiegruppen identisch ist. Beispielsweise kann das System der Hilfsfunktionen $\psi_i(E)$, $i = 1$ bis N , die Folge der orthogonalisierten differentiellen Aktivierungsquerschnitte sein. Dann wäre die Anzahl der Entwicklungskoeffizienten gleich der Anzahl der verwendeten Aktivierungsreaktionen, $N = N_{\text{DETEC}}$.

Die Einsetzung von Gl. (2) in Gl. (1) ergibt ein lineares Gleichungssystem

$$A_i = \sum_{j=1}^N a_{ij} \phi_j, \quad i = 1 \text{ bis } N_{\text{DETEC}}, \quad (3)$$

mit

$$a_{ij} = \int_0^{\infty} \sigma_{\text{act } i}(E) \psi_j(E) dE, \quad (4)$$

das nach den Unbekannten ϕ_j , $j = 1$ bis N , aufgelöst werden muß.

Nach diesem Schema verläuft das Polygonverfahren, das Polynomverfahren, die Approximation durch Treppenfunktionen, die Entwicklung nach Orthogonalfunktionen u.dgl., siehe /3/ und /4/.

Der Gang der Lösung des linearen Gleichungssystems nach Gleichung (3) richtet sich ganz danach, welcher der drei im folgenden aufgeführten Fälle vorliegt.

1) $N = N_{DETEC}$

Hier sind genauso viele Gleichungen wie Unbekannte vorhanden, das Gleichungssystem in Gl. (3) ist also eindeutig lösbar. Es resultiert ein Lösungsspektrum in soviel Energiegruppen wieviel Aktivierungsdetektoren vorhanden sind. Da die Anzahl der Aktivierungsdetektoren nur sehr beschränkt ist, haben wir eine nur geringe energetische Auflösung, die im allgemeinen, d.h. von Ausnahmefällen abgesehen, nicht ausreicht.

2) $N < N_{DETEC}$

Hier sind mehr Gleichungen als Unbekannte vorhanden, das Gleichungssystem in Gl. (3) ist also überbestimmt, und es gibt mehrere Lösungen, die sich jedoch, weil die Aktivierungen und die differentiellen Aktivierungsquerschnitte fehlerbehaftet sind, nicht widersprechen. Dieser Fall ist an sich sehr wünschenswert, weil man die Methode der kleinsten Quadrate anwenden kann. Unter den verschiedenen möglichen Lösungen wird diejenige ausgesucht, welche im Sinne des Prinzips der kleinsten Quadrate die Experimentdaten am besten befriedigt, welche also den Ausdruck

$$Q = \sum_{i=1}^{N_{DETEC}} \left(A_i - \int_0^{\infty} \sigma_{act\ i}(E) \phi_E(E) dE \right)^2 \quad (5)$$

zu einem Minimum macht. Es ist dies die Situation, die man allgemein in der Physik durch mehrfache Messung diverser Observabler und Minimalisierung der Fehlerabweichungen anstrebt. Leider ist er in der Spektrumentfaltung noch weniger realisierbar als der unter 1) genannte Fall, da er auf Grund der noch mehr beschränkten Energiegruppenanzahl zu einer noch geringeren energetischen Auflösung führt.

3) $N > N_{DETEC}$

Dieser Fall ist der realistischste und zugleich der problematischste aller drei Fälle. Hier sind mehr Unbekannte als Gleichungen vorhanden. Das Gleichungssystem in Gl. (3) ist also unterbestimmt. Für eine hinreichende Energieauflösung in großen Energiebereichen bzw. für das gesamte Neutronenspektrum muß die Anzahl der Energiegruppen wesentlich grö-

Bei sein als die Anzahl der Aktivierungsreaktionen, $N \gg N_{DETEC}$, das Gleichungssystem in Gl. (3) wird damit extrem unterbestimmt. Hier gibt es also überhaupt keine Lösung ohne zusätzliche Eingangsinformation, für die man - wie wir gesehen haben - früher relativ grobe Annahmen machte und heute detaillierte Spektrumverläufe als sogenannte Guess-Spektren vorgibt.

Wir müssen nun noch eine Schwierigkeit bei der Anwendung der rein mathematischen Verfahren, genauer gesagt bei der Auflösung des linearen Gleichungssystems nach Gl. (3) berühren, die sich einstellt, wenn Aktivierungsreaktionen mit sogenannten "ähnlichen" oder "linear abhängigen" Ausbeutefunktionen (response functions) $\sigma_{act\ i}(E) \phi_E(E)$ verwendet werden. Diese "Ähnlichkeit" der Ausbeutefunktionen kann herrühren von einer entsprechenden "Ähnlichkeit" der zu vergleichenden differentiellen Aktivierungsquerschnitte $\sigma_{act\ i}(E)$, die sich einfach darin äußert, daß diese Aktivierungsquerschnitte einander quasi parallel verlaufen. Unter diesen Umständen werden die entsprechenden Zeilen der Determinante des Gleichungssystems nach Gl. (3) quasi proportional, was zu einer extremen Kleinheit des Wertes dieser Determinante führt. Der Sachverhalt ist in der Praxis der Auflösung linearer Gleichungssysteme bekannt als eine sogenannte "ungünstige Beschaffenheit" (ill-condition), siehe etwa /5/. Infolgedessen wird die Lösung des Gleichungssystems nach Gl. (3) ϕ_j , $j = 1$ bis N , sehr empfindlich gegenüber kleinen Variationen in den Aktivierungen A_i und den differentiellen Aktivierungsquerschnitten $\sigma_{act\ i}(E)$, $i = 1$ bis N_{DETEC} . Da diese Eingangsdaten jedoch häufig nicht sehr genau sind, haben die ermittelten Flußdichtewerte ϕ_j , $j = 1$ bis N , entsprechend große Fehler. Auch physikalisch sinnlose negative Flußdichtewerte können bei schlecht konditionierten Gleichungssystemen (ill-conditioned systems) auftreten.

Was nun die Verfahren unter Verwendung physikalischer Annahmen unter den "klassischen" Methoden anbelangt, so benutzen diese alle in irgendeiner Form den Ansatz

$$\phi_E(E) = g(E) \sum_{i=1}^N \phi_i' \psi_i'(E), \quad (6)$$

der offenbar eine Verallgemeinerung des Ansatzes nach Gl. (2) darstellt. Hierin sind neben den Entwicklungskoeffizienten ϕ_i' die $\psi_i'(E)$, $i = 1$ bis N ,

verallgemeinerte Hilfsfunktionen, die in irgendeiner Form die physikalischen Annahmen enthalten können. Auch die Funktion $g(E)$ verkörpert im allgemeinen einen physikalischen Tatbestand. Sie wird z.B. oft eine Exponentialfunktion oder auch das Spaltspektrum darstellen. Beispielsweise läßt sich die bereits erwähnte und unter idealen Bedingungen im schnellen Neutronenspektrum gute Ergebnisse zeitigende Exponentialmethode /3,4/ aus dem verallgemeinerten Ansatz nach Gl. (6) mit

$$g(E) = \text{const} \quad \text{und} \quad (7)$$

$$\psi_i'(E) = \begin{cases} e^{-k_i E} & \text{für } E_i < E \leq E_{i+1} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (8)$$

ableiten. Ein weiteres Verfahren, das im schnellen Neutronenenergiebereich relativ gute Ergebnisse brachte und zu den bevorzugten unter den "klassischen" Methoden gehörte, ist die Minimalisierungsmethode von DI COLA und ROTA (Relative Deviation Minimization Method, RDMM) /6/. Hier symbolisiert $g(E)$ eine erste Näherung für die spektrale Neutronenflußdichte $\phi_E(E)$ oder wird auch als Exponentialfunktion angesetzt, während die $\psi_i'(E)$, $i = 1$ bis N , voneinander linear unabhängige Funktionen, z.B. einfache Polynome in E , orthogonale Polynome in E , Laguerresche Polynome oder Tschebyscheffsche Polynome sind. Im Extremfall wird auch $g(E) = \text{const}$ verwendet, wodurch die Methode in unserem Sinne in ein rein mathematisches Verfahren entartet. Die Besonderheit dieses Verfahrens liegt darin, daß die Anzahl N der Approximationsfunktionen ψ_i' selbst erst als Ergebnis des Minimalisierungsprozesses bestimmt und vorab lediglich der Bedingung $N \leq \text{NDETEC}$ unterworfen wird.

Als letztes der "klassischen" Verfahren unter Benutzung physikalischer Annahmen, das - wie auch das eben erwähnte - stark in die Gegenwart hineinwirkte, wollen wir das Programm MESCO erwähnen /7/. Der demselben zugrunde liegende Ansatz für die spektrale Neutronenflußdichte $\phi_E(E)$ geht aus dem allgemeinen Ansatz nach Gl. (6) durch die Setzungen $g(E) = 1$, $N = 2$ und $\phi_2' = 1$ hervor. Damit resultiert der Ausdruck

$$\phi_E(E) = \phi_1' \psi_1'(E) + \psi_2'(E). \quad (9)$$

Hierin wird für $\psi_1'(E)$ die Eingangsnäherung der spektralen Neutronenflußdichte $\phi_E(E)$ gesetzt. Die unbekannte "Amplitude" ϕ_1' und die "Abweichungsfunktion" $\psi_2'(E)$ sind zu bestimmen, was nach einem Minimalisierungsprinzip erfolgt.

3 GEGENWÄRTIGE ARRIVIERTE RECHENPROGRAMME FÜR SPEKTRUMENTFALTUNGEN

3.1 Allgemeine Aussagen

Alle modernen Entfaltungs-Codes sind in ihrer Normalfassung Iterations-Codes oder könnten doch zumindest als solche benutzt werden. Dies bedeutet, daß das eingegebene Neutronenspektrum, was man gemeinhin auch als "Guess-Spektrum" bezeichnet, solange variiert bzw. modifiziert wird, bis eine hinlänglich gute Übereinstimmung besteht zwischen sämtlichen gemessenen Aktivierungen und den entsprechenden auf der Basis des Lösungsspektrums nach Gl. (1) berechneten Aktivierungen. Unter einer "hinlänglich guten Übereinstimmung" verstehen wir, daß sämtliche Abweichungen zwischen den gemessenen und den entsprechenden berechneten Aktivierungen kleiner sind als ein bestimmtes Vielfaches der Standardabweichung der gemessenen Aktivierungen, wobei einer statistischen Sicherheit (Signifikanzniveau) von 66,28 % die einfache Standardabweichung und einer statistischen Sicherheit von 95 % die doppelte Standardabweichung entspricht.

Besonderes Merkmal dieses Lösungsschemas ist es offenbar, daß die gewonnene Lösung nicht eindeutig ist, daß man auf diesem Wege im Grunde vielmehr sogar eine unendliche Anzahl von Lösungen erzeugen kann, von denen bestimmte jedoch aus physikalischer Sicht nicht annehmbar sind. Zwei wichtige Auswahlkriterien müssen in allen Codes angewendet werden:

- 1) Die erhaltene spektrale Neutronenflußdichte $\phi_E(E)$ muß im ganzen Energiebereich positiv sein.
- 2) Das Lösungsspektrum $\phi_E(E)$ sollte einen stetigen Verlauf aufweisen. Stark strukturierte Gipfel und Senken, welche nicht einer entsprechenden Struktur in den Wirkungsquerschnittverläufen von Reaktormaterialien, bestrahlten Strukturmaterialien u.dgl. zuzuordnen sind, dürfen nicht auftreten. Unrealistische, d.h. unphysikalische Resonanzen bzw. heftige Oszillationen des Lösungsspektrums traten vor allem bei gewissen früheren rein mathematischen Methoden (Polynome mit zu hohem Grad, forciertes Fitting in einem kleinen Energiebereich u.dgl.) auf /22/. Sie können jedoch auch bei den gegenwärtigen arrivierten Rechenprogrammen vorkommen und sind dann beispielsweise das Ergebnis einer starken Diskrepanz zwischen Guess-Spektrum und gemessenen Aktivierungen, worauf wir schon in Kapitel 2 hingewiesen haben.

Von STALLMANN stammt eine Einteilung der gängigen Entfaltungsverfahren in lineare und nichtlineare Methoden /8/. Lineare Methoden wären demzufolge solche, bei denen sich die Lösungsfunktion $\phi_E(E)$ für die spektrale Neutronenflußdichte als eine Linearkombination einfacher Basisfunktionen $\psi_i(E)$, $i = 1$ bis N , entsprechend dem Ansatz nach Gl. (2) darstellen läßt. Ist die Gesamtanzahl N dieser Basisfunktionen gleich der Anzahl NDETEC der Aktivierungsdetektoren entsprechend Fall 1) in Kapitel 2 auf Seite 7, und ist das resultierende lineare Gleichungssystem von NDETEC Gleichungen mit NDETEC Unbekannten nicht singulär bzw. schlecht konditioniert (ill-conditioned) im Sinne der Diskussion in Kapitel 2, dann ist es eindeutig und vernünftig lösbar, und die Lösungsfunktion $\phi_E(E)$ läßt sich als eine Linearkombination der gemessenen Aktivierungen $A_i, i=1$ bis NDETEC, darstellen:

$$\phi_E(E) = \sum_{i=1}^{NDETEC} c_i(E) \cdot A_i. \quad (10)$$

Nichtlineare Methoden wären sinngemäß diejenigen, für die sich die Lösungsfunktion $\phi_E(E)$ für die spektrale Neutronenflußdichte nicht als eine Linearkombination nach Gl. (2) bzw. nach Gl. (10) darstellen läßt. Nach dieser Definition sind die meisten der gegenwärtig verwendeten Entfaltungsmethoden linear, während dies für den in der Praxis wohl immer noch am häufigsten verwendeten Entfaltungs-Code SAND-II in irgendeiner der bestehenden Versionen nicht der Fall ist. Hierbei handelt es sich vielmehr um eine nichtlineare Adjustierung des Guess-Spektrums bzw. des jeweils in der vorhergehenden Iteration erhaltenen Iterationsspektrums, wie wir im einzelnen noch sehen werden.

Beginnen wir nun mit einer kurzen Beschreibung der gegenwärtigen arrivierten Rechenprogramme.

3.2 Rechenprogramme nach der Art des Codes SAND-II

Der Entfaltungs-Code SAND-II¹⁾ wurde von MC ELROY und Mitarbeitern entwickelt /1/. Seither entstanden mehrere Versionen dieses Codes, wie SAND-50, SANDC, SANDBP, SANDPET und, in Jülich, SAND-MX2. Allen diesen Versionen ist gemeinsam, daß ein Guess-Spektrum durch iterative Adjustierungen solange modifiziert wird, bis eine Spektrumform gefunden ist, die - im Rahmen der Meßfehler - als approximative Lösung der Aktivierungsgleichungen nach Formel (1) angenommen werden kann. Ein Vorzug dieses Codes ist es, daß keine Matrixinversion durchgeführt werden muß und daß die Lösungsfunktion nie negativ ausfällt. Die SAND-Programme zeichnen sich gegenüber manchen anderen Rechenprogrammen durch besondere Praxisnähe aus, wenn auch die physikalische Deutung der erhaltenen Lösungsfunktion und die gegebenenfalls notwendig werdende Variation gewisser Eingangsparameter ein bestimmtes physikalisches Verständnis voraussetzt. Überhaupt kann man die modernen Entfaltungs-Codes nie als eine "black box" (ZIJP) auffassen, in die man auf der einen Seite die Eingabedaten hineinsteckt, um auf der anderen Seite die fertige Lösung bedenkenlos herauszuholen. Die Darstellung des Iterationsalgorithmus "SAND-II-artiger" Programme können wir uns hier sparen, da bei der Beschreibung des Entfaltungs-Codes SAND-MX2 ausführlich davon die Rede sein wird.

Ein ähnliches Prinzip wie die SAND-Codes verwendet NAJZER in dem Entfaltungsprogramm ITER /9/.

3.3 Die Rechenprogramme SPECTRA /10/, RFSP /11/ und RFSP-JÜL /12/

Ohne auf die hinsichtlich des Grundprinzipes nicht so wesentlichen Unterschiede dieser drei Programme einzugehen, stellen wir lediglich fest, daß in allen drei Fällen die quadratische Abweichung

1) Spectrum Analysis by Neutron Detectors II

$$S^{(j)} = \sum_{i=1}^{NDETEC} W_i \left[\frac{A_i - \sum_{k=1}^N \sigma_{ik} \phi_k^{(j)}}{A_i} \right]^2 + \sum_{k=1}^N \left[\frac{\phi_k^{(j)} - \phi_k^{(j-1)}}{\phi_k^{(j-1)}} \right]^2 \quad (11)$$

im Sinne einer Methode der kleinsten Quadrate iterativ minimalisiert wird.
Hierin bedeuten:

j der Iterationsindex,
 $NDETEC$ die Anzahl der Aktivierungsreaktionen,
 $A_i, i=1$ bis $NDETEC$, die gemessenen Aktivierungen,
 $\phi_k^{(j)}, k=1$ bis N , die Gruppenflußdichten in der j -ten Iteration,
 $W_i, i=1$ bis $NDETEC$, geeignet zu wählende Gewichtungsfaktoren und
 σ_{ik} der im k -ten Energieintervall gemittelte Aktivierungsquerschnitt der i -ten Aktivierungsreaktion, also

$$\sigma_{ik} = \frac{1}{\Delta E_k} \int_{\Delta E_k} \sigma_{act i}(E) dE. \quad (12)$$

Die Iterationsrechnung wird begonnen unter Eingabe einer nullten Näherung $\phi_k^{(0)}, k=1$ bis N , die durch das Guess-Spektrum dargestellt ist. Durch die Nullsetzung der Ableitungen des Ausdruckes für $S^{(j)}$ nach Gl. (11) nach den $\phi_k^{(j)}, k=1$ bis N , erhält man das System der N Normalgleichungen für die Unbekannten $\phi_k^{(j)}$. Nach Auflösung dieses Gleichungssystems stellen die erhaltenen Zahlenwerte die Eingabegrößen für den nächsten Iterationsschritt dar.

Die Iterationsrechnung wird beendet, entweder wenn eine spezifizierte Anzahl von Iterationen erreicht ist, oder wenn der geforderte mittlere Aktivitätsfehler

$$ERRE^{(j)} = \frac{1}{NDETEC} \sum_{i=1}^{NDETEC} \left| \frac{A_i - \sum_{k=1}^N \sigma_{ik} \phi_k^{(j)}}{A_i} \right| \quad (13)$$

einen vorgegebenen Grenzwert unterschreitet ¹⁾.

¹⁾ Weitere Kriterien für die Begrenzung des Rechenablaufes sind denkbar und teilweise in Gebrauch.

3.4 Die Rechenprogramme CRYSTAL BALL /13/ und WINDOWS /14/

Die Lösungsfunktion $\phi_E(E)$ resultiert wieder aus der Anwendung einer Methode der kleinsten Quadrate durch Iterationsrechnung. Die Minimalforderung lautet hier

$$S^2 = \int_0^{\infty} \left[\frac{d}{dE} \left(\frac{\phi_E(E)}{\phi_E^0(E)} \right) \right]^2 w(E) dE = \text{Minimum!} \quad (14)$$

mit der Nebenbedingung

$$\sum_{i=1}^{\text{NDETEC}} \frac{(A_i - A_i^{\text{calc}})^2}{s^2(A_i)} < f. \quad (15)$$

Hierin bedeuten, abgesehen von den bereits eingeführten Symbolen:

- $\phi_E^0(E)$ das Guess-Spektrum,
- $W(E)$ eine Gewichtungsfunktion, welche zur Bewertung des Guess-Spektrums in den verschiedenen Energiebereichen dienen kann und also ein spektrales Maß des Vertrauens über das Eingangsspektrum darstellt. In einigen Fällen kann man $W(E) = \text{const}/E$ verwenden.
- $A_i^{\text{calc}}, i=1 \text{ bis NDETEC}$, die auf der Basis der Lösungsfunktion $\phi_E(E)$ berechneten Aktivierungen,
- $s^2(A_i), i=1 \text{ bis NDETEC}$, die Varianzen, d.h. die Quadrate der Standardabweichungen der gemessenen Aktivierungen und
- f eine vorgegebene Toleranzschranke.

Das bei einem bestimmten Iterationsschritt erhaltene Lösungsspektrum $\phi_E(E)$ wird beim nächsten Iterationsschritt als Guess-Spektrum verwendet.

Das Rechenprogramm WINDOWS ist eine Weiterentwicklung des Rechenprogramms CRYSTAL BALL.

3.5 Rechenprogramme nach der verallgemeinerten Methode der kleinsten Quadrate mit Kovarianzen

Diese Programme haben einen doppelten Zweck:

- 1) Die optimale Ausnutzung der in den Eingangswerten (Meßwerten) ein-

schließlich ihrer Varianzen und Kovarianzen enthaltenen Information nach statistischen Gesichtspunkten. Bekanntlich sind die Varianzen die Quadrate der Standardabweichungen, während die Kovarianzen die Korrelationen zwischen den einzelnen Variablen wiedergeben. Eine Definition der Varianz-Kovarianz-Matrix findet man beispielsweise für den Fall der Aktivierungen etwas weiter unten.

- 2) Die Zuordnung von Varianzen und Kovarianzen zu den erhaltenen Werten des Lösungsvektors unter exakter Berücksichtigung der Varianzen und Kovarianzen der Eingangswerte, also sowohl von deren Fehlern als auch von deren wechselseitigen Korrelationen. Damit sind dann auch die Werte des Lösungsvektors einschließlich ihrer Fehler und ihrer gegenseitigen Korrelation gegeben.

Statistisch gesehen ist die hier angewendete Methode eine verallgemeinerte Methode der kleinsten Quadrate, und zwar die sogenannte χ^2 -Minimum-Methode; d.h. es wird die Größe χ^2 minimalisiert, und aus der Minimalisierungsbedingung werden die Unbekannten, die man in diesem Zusammenhang häufig als "Parameter" bezeichnet, errechnet. Die Größe χ^2 stellt in diesen Fällen eine verallgemeinerte quadratische Abweichung unter Einbezug der vollständigen Varianz-Kovarianz-Matrix dar. Ein bestimmter Wert von χ^2 wird im statistischen Sinne als die spezielle Realisation einer Zufallsvariablen aufgefaßt. Die Größe χ^2 stellt also eine solche Zufallsvariable dar, die im übrigen nach der in der Statistik sehr geläufigen χ^2 -Verteilung verteilt ist. Dies ist sehr wichtig, da man für das tatsächlich erreichte Minimum von χ^2 anhand der zu einer bestimmten statistischen Sicherheit S (Signifikanzniveau) und zum aktuellen "Freiheitsgrad" $f = N_{\text{DETEC}}$ gehörigen χ^2 -Fraktilen die statistische Relevanz des Lösungsspektrums und damit der Eingangsdaten bezüglich S und f prüfen kann.

Der Ausdruck für unser hier verwendetes χ^2 lautet

$$\chi^2 = \begin{pmatrix} P & -\bar{P} \\ A^0 & -\bar{A} \end{pmatrix}^+ * \begin{pmatrix} N_P & 0 \\ 0 & N_{A^0} \end{pmatrix}^{-1} * \begin{pmatrix} P & -\bar{P} \\ A^0 & -\bar{A} \end{pmatrix}, \quad (16)$$

ist also - von links nach rechts - das Produkt eines Zeilenvektors, einer symmetrischen Matrix und eines weiteren Spaltenvektors. Hierbei ist die

übliche Konvention angewandt, durch ein Kreuz die Transponierung, d.h. die Zeilen-Spalten-Vertauschung, bei Vektoren und Matrizen zu kennzeichnen. Ferner wird die Inverse zu einer Matrix A mit A^{-1} bezeichnet. Die einzelnen Symbole in Gl. (16) haben die folgende Bedeutung:

P ist der "Parameter"-Vektor $\begin{pmatrix} \Phi \\ \Sigma \end{pmatrix}$, dessen N erste Komponenten die differentiellen Flußdichtwerte $(\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_N) \equiv \Phi$ und dessen N mal NDETEC weitere Komponenten sämtliche Zahlenwerte sämtlicher differentiellen Aktivierungsquerschnitte, von denen ja NDETEC Stück vorhanden sind,

$$(\sigma_{act1}^1 \dots \sigma_{act1}^N, \dots, \sigma_{actNDETEC}^1 \dots \sigma_{actNDETEC}^N) \equiv (\Sigma_1, \dots, \Sigma_{NDETEC}) \equiv \Sigma$$

darstellen. Dabei wurden in sinngemäßer Weise die Abkürzungen Φ und Σ bzw. Σ_1 bis Σ_{NDETEC} eingeführt.

$\bar{P}$ ist der unbekannte Mittel- oder Erwartungswert von P , also

$$\bar{P} = \text{Erw } P = \begin{pmatrix} \text{Erw } \Phi \\ \text{Erw } \Sigma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{\Phi} \\ \bar{\Sigma} \end{pmatrix}.$$

A^0 ist der Aktivierungsvektor, dessen NDETEC Komponenten durch die gemessenen Aktivierungen $(A_1, A_2, \dots, A_{NDETEC})$ dargestellt werden.

$\bar{A}$ ist der Vektor der "wahren" Aktivierungen, dessen NDETEC Komponenten durch die unbekannten Mittel- oder Erwartungswerte der Aktivierungen dargestellt werden.

$\bar{A}$ und $\bar{P}$ stehen durch die Aktivierungsgleichungen (1) in einem eindeutigen Zusammenhang, d.h. aus $\bar{P}$ könnte man - wenn dieses bekannt - vermöge der Aktivierungsgleichungen (1) auch $\bar{A}$ berechnen.

N_{A^0} ist die Kovarianzmatrix des Aktivierungsvektors A^0 , deren Elemente wir als Beispiel hinschreiben wollen. N_{A^0} ist also gegeben durch

$$N_{A^0} = \begin{pmatrix} \text{cov } \{A_1, A_1\} & \dots & \text{cov } \{A_1, A_{NDETEC}\} \\ \vdots & & \vdots \\ \text{cov } \{A_{NDETEC}, A_1\} & \dots & \text{cov } \{A_{NDETEC}, A_{NDETEC}\} \end{pmatrix}$$

mit

$$\text{cov} \{A_i, A_j\} \equiv \text{Erw} \{ (A_i - \text{Erw}(A_i)) (A_j - \text{Erw}(A_j)) \},$$

worin Erw die Erwartungswertbildung symbolisiert.

N_P ist die Kovarianzmatrix des "Parameter"-Vektors P , also - wenn wir keine Korrelation zwischen Φ und Σ voraussetzen, wie dies allgemein geschieht -

$$N_P = \begin{pmatrix} N_\Phi & 0 \\ 0 & N_\Sigma \end{pmatrix},$$

worin N_Φ die Kovarianzmatrix des Flußdichtevektors Φ und N_Σ die Kovarianzmatrix des Aktivierungsquerschnittvektors Σ darstellt.

Das Minimalisierungsprinzip besteht nun darin, daß χ^2 nach Gl. (16) zu einem Minimum für einen Lösungsvektor

$$P_{\text{Result}} = \begin{pmatrix} \Phi_{\text{Result}} \\ \Sigma_{\text{Result}} \end{pmatrix} \text{ wird, der eine möglichst gute Approximation des}$$

unbekannten Erwartungswertes $\bar{P} = \begin{pmatrix} \bar{\Phi} \\ \bar{\Sigma} \end{pmatrix}$ ist. Wir fordern also

$$\chi^2 \Big|_{P_{\text{Result}} = \bar{P}} = \text{Minimum!} \quad (17)$$

Anders ausgedrückt: Wir suchen als Approximation für $\bar{P} = \begin{pmatrix} \bar{\Phi} \\ \bar{\Sigma} \end{pmatrix}$ denjenigen Vektor

$$P_{\text{Result}} = \begin{pmatrix} \Phi_{\text{Result}} \\ \Sigma_{\text{Result}} \end{pmatrix}, \text{ der } \chi^2 \text{ nach Gl. (16) minimalisiert. Hat man den Vek-}$$

tor P_{Result} auf diese Weise gefunden, so wird dessen Kovarianzmatrix $N_{P_{\text{Result}}}$ nach dem Fehlerfortpflanzungsgesetz bestimmt. Damit ergibt sich das Rechenschema wie folgt:

Es werden die Zahlenwerte des Parametervektors $P = \begin{pmatrix} \Phi \\ \Sigma \end{pmatrix}$ und der dazugehörigen Kovarianzmatrix N_P eingegeben. Dies sind die differentiellen Flußdichtewerte des Guess-Spektrums ϕ_k , $k=1$ bis N , einschließlich ihrer Varianzen und Kovarianzen und sämtliche Zahlenwerte sämtlicher differentiellen

Aktivierungsquerschnitte $\sigma_{act\ i}^k$, $i=1$ bis NDETEC, $k=1$ bis N, einschließlich ihrer Varianzen und Kovarianzen. Durch Anwendung des Minimalisierungsprinzips erhält man daraus neue differentielle Flußdichtewerte $\phi_{Result\ k}$, $k=1$ bis N, einschließlich ihrer Varianzen und Kovarianzen und neue Zahlenwerte für die differentiellen Aktivierungsquerschnitte $\sigma_{act\ Result\ i}^k$, $i=1$ bis NDETEC, $k=1$ bis N, einschließlich ihrer Varianzen und Kovarianzen. Diese Rechnung kann man wieder in mehreren Iterationen durchführen. Die neuen Werte werden im allgemeinen von besserer Qualität sein als die ursprünglichen. Bemerkenswert erscheint hier, daß auf diese Weise auch die Aktivierungsquerschnitte und nicht nur das Neutronenspektrum verbessert werden. Demgemäß finden diese Methoden sowohl zur Spektrumentfaltung als auch zur Adjustierung von Aktivierungsquerschnitten, nebenher natürlich auch noch zu interlaboratären Vergleichen u. dgl. Anwendung.

Wir gehen aus Platzmangelgründen nicht auf die Durchführung der Minimalisierungsprozedur nach Gl. (17) ein, so wenig wie bei den in den vorhergehenden Abschnitten beschriebenen Minimalisierungsmethoden, und verweisen dafür auf die zitierte Literatur.

Von den nach dem vorstehenden Prinzip arbeitenden Rechenprogrammen ist STAY'SL das bekannteste und am meisten verwendete /15/. Weitere Programme dieser Art sind DANTE /16/, FERRET /17/ und LSL /18/.

Wir nennen Vorteile und Nachteile der Entfaltungsprogramme nach der verallgemeinerten Methode der kleinsten Quadrate mit Kovarianzen.

Vorteilhaft ist, daß

- 1) die experimentell gegebenen Informationen optimal genutzt und möglicherweise die Fehlerschranken herabgedrückt werden,
- 2) die Varianzen und Kovarianzen des Lösungsspektrums nach einem Fehlerfortpflanzungsgesetz eindeutig bestimmbar sind.

Nachteil ist, daß

- 1) die Rechenprogramme in der Anwendung sehr kompliziert und somit nicht sehr praktisch sind,
- 2) die benötigten Eingabedaten der Varianz-Kovarianz-Matrizen im allgemeinen schwer erhältlich und häufig gar nicht verfügbar sind.

Aus dieser Gegenüberstellung folgt, daß die modernsten und fortschrittlichsten aller Entfaltungs-Codes die alterprobten Rechenprogramme keineswegs

überflüssig machen, eher eine sehr wünschenswerte Erweiterung des bestehenden Repertoires anwendbarer Entfaltungsprogramme darstellen. In manchen Laboratorien werden deswegen neben Programmen vom Typ STAY'SL beispielsweise auch "SAND-II-artige" Programme eingesetzt. Man verzichtet hier entweder auf eine Fehlerangabe oder macht eine Fehlerrechnung mit Hilfe eines Monte-Carlo-Programmes unter Randomisierung der Eingabedaten /19/. Jüngst wurde von der IAEA ein internationaler Vergleich der arrivierten Entfaltungs-Codes, darunter auch SAND-MX2, veranstaltet /20/, der die Entfaltung zweier typischer Reaktorspektren (für den thermischen Reaktor ORR und den schnellen Reaktor YAYOI) unter vergleichbaren Bedingungen zum Gegenstand hatte. Besonders bedeutsam war neben der spektralen Aussage auch die Realisierung gewisser integraler Parameter auf der Grundlage der gefundenen Lösungsspektren, da diese Parameter wichtige Expositionsmaße beispielsweise für Strukturmaterialbestrahlungen darstellen. Wir nennen einige herausragende Ergebnisse dieses Vergleiches, die in /20/ näher diskutiert werden.

- 1) Die spektralen Verläufe der verschiedenen Lösungsspektren zeigen noch beträchtliche Streuungen.
- 2) Die integralen Parameter Gesamte Neutronenflußdichte, Neutronenflußdichte oberhalb 1 MeV und Neutronenflußdichte oberhalb 0,1 MeV zeigen viel weniger Variation, nämlich Streuungen zwischen 2,1 % und 3,5 % in einfacher relativer Standardabweichung.
- 3) Die Verlagerungsrate in Stahl, die den als Expositionsmaß bei Stahlbestrahlungen signifikantesten integralen Parameter darstellt, weist für den ORR-Reaktor eine Streuung von 2,2 % und für den YAYOI-Reaktor eine Streuung von 2,8 % in einfacher relativer Standardabweichung auf, wenn alle eingegangenen Lösungsspektren berücksichtigt werden.

Hinsichtlich der erzielten Werte der integralen Parameter können die meisten der verglichenen Rechenprogramme, insbesondere auch die "SAND-II-artigen" Entfaltungs-Codes, als durchaus zufriedenstellend bezeichnet werden.

4 ÜBERLEGUNGEN ZUR AUSWAHL DER AKTIVIERUNGSREAKTIONEN UND DETEKTOREN FÜR SPEKTRUMENTFALTUNGEN

4.1 Aktivierungen und Ausbeutefunktionen

Die für die im Vorstehenden besprochenen Entfaltungs-Codes erforderlichen Eingabedaten sind die Aktivierungen, die differentiellen Aktivierungsquerschnitte und - da wir nun von den Methoden ohne spektrale Apriori-Information absehen wollen - die Guess-Spektren. Die differentiellen Aktivierungsreaktionen und die Guess-Spektren stehen uns in speziellen Datenbibliotheken zur Verfügung, sofern man für die letzteren nicht problemspezifische gerechnete Energieverteilungen verwendet. Diese für SAND-MX2 benutzten und gewissermaßen für alle Entfaltungsauswertungen gemeinsam verbindlichen Datenbibliotheken sind Gegenstand von Kapitel 6. Spezifisch für jede einzelne Entfaltung dagegen ist der Satz der aktuellen gemessenen Sondenaktivierungen. Bei der Auswahl der Aktivierungsreaktionen und Detektoren sind zur Erzielung eines sinnvollen Entfaltungsergebnisses mannigfaltige Gesichtspunkte zu beachten. Überlegungen hierzu sind Gegenstand des vorliegenden Kapitels.

Die Aktivierungen pro Absorberatom A_i , $i=1$ bis NDETEC, nach Gl. (1) sind aus Aktivitätsmessungen abgeleitete Größen. Die Sondenaktivitäten C_i , $i=1$ bis NDETEC, sind demnach die durch das Experiment zugänglichen Observablen. Die Gamma-Aktivitäten der bestrahlten Aktivierungssonden sind es, die heute allgemein mit Hilfe von Germanium-Lithium-Halbleiter-Gammaspektrometern gemessen werden. Die von uns zur Entfaltung benutzten Aktivierungen wurden auch auf diese Weise erstellt /21/. Es kann nicht Aufgabe dieses Berichtes sein, auf die Thematik der Gamma-Spektrometrie mit Halbleiterdetektoren einzugehen, weshalb auf die einschlägige Literatur verwiesen wird. Da die Unsicherheiten der gemessenen Aktivierungen als Eingabedaten der Entfaltung mitbestimmend für die Qualität des Lösungsspektrums sind, werden sie im Anhang E diskutiert.

Die gemessenen Sondenaktivitäten C_i sind den entsprechenden Aktivierungen pro Absorberatom A_i proportional:

$$C_i = F_i A_i = T_i K_i N_i A_i \text{ (s}^{-1}\text{)}, \quad i = 1 \text{ bis NDETEC.} \quad (18)$$

Die Proportionalitätsfaktoren F_i stellen sich als Produkte entsprechender

Zeitfaktoren T_i , Selbstabschirmungs-Korrekturfaktoren K_i und Nuklidanzahlen N_i dar. Für den einfachen Fall, daß ununterbrochen eine Zeitdauer t_B lang bei konstanter Neutronenflußdichte bestrahlt und anschließend nach einer Wartezeit t_W die Aktivität gemessen wird, erhält man für die Zeitfaktoren

$$T_i = (1 - e^{-\lambda_i t_B}) e^{-\lambda_i t_W}, \quad (19)$$

λ_i = Zerfallskonstante des i -ten Nuklides.

Die Selbstabschirmungs-Korrekturfaktoren K_i haben eine sehr verschiedene Relevanz in den verschiedenen Neutronenenergiebereichen und werden weiter unten an einschlägiger Stelle besprochen. Die Nuklidanzahlen N_i schließlich sind die entsprechenden Anzahlen der Absorberkerne in der Sonde, welche durch die betreffende Reaktion aktiviert werden.

Über die Anforderungen, die man bei der Auswahl der Aktivierungsreaktionen an die Detektormaterialien und die Reaktionsprodukte zu stellen hat, ist schon so viel geschrieben worden, daß wir uns im Interesse der Platzersparnis auf den Literaturhinweis beschränken können (z.B. /3, 4, 22/). Stattdessen wollen wir vermöge des Kriteriums der geeigneten Ausbeutefunktionen (response functions)

$$R_i(E) = \sigma_{\text{act } i}(E) \phi_E(E), \quad i = 1 \text{ bis NDETEC}, \quad (20)$$

der Auswahl der differentiellen Aktivierungsquerschnitte $\sigma_{\text{act } i}(E)$ einige Zeilen widmen. Die Betrachtung der Ausbeutefunktionen $R_i(E)$ setzt offenbar die Kenntnis der spektralen Neutronenflußdichte $\phi_E(E)$ voraus, so daß für diesen Zweck eine nullte Näherung, z.B. eben das Guess-Spektrum, bekannt sein muß.

Galt es - wie wir in Kapitel 2 gesehen haben - bei der Auflösung linearer Gleichungssysteme nach Gl. (3) im Rahmen der Anwendung rein mathematischer Verfahren einander "ähnliche" oder "linear abhängige" Ausbeutefunktionen $R_i(E)$ und damit die entsprechenden quasi parallelen Aktivierungsquerschnitte $\sigma_{\text{act } i}(E)$ wegen der sonst sich einstellenden "ungünstigen Beschaffenheit" (ill-condition) des Gleichungssystems zu vermeiden, so kommt es uns bei der Anwendung des Rechenprogrammes SAND-MX2 ausschließlich darauf an, daß die

Ausbeutefunktionen $R_i(E)$ insgesamt den interessierenden Neutronenenergiebereich "möglichst gut überdecken", da wir ja kein lineares Gleichungssystem nach Gl. (3) zu lösen haben. Der Begriff der "Überdeckung" bezieht sich dabei auf die sogenannten "90%-Ausbeutebereiche" (90 % response ranges) als diejenigen Energiebereiche, deren Neutronen 90 % der Sondenaktivität für die betreffende Aktivierungsreaktion verursachen, wobei am oberen und unteren Ausläufer der Ausbeutefunktion $R_i(E)$ symmetrisch je 5 % der Aktivität ausgeschlossen werden. Bei der Anwendung unseres Codes SAND-MX2 gibt es also - wie bei allen "SAND-II-artigen" Rechenprogrammen - keine rechen-technischen Schwierigkeiten, wenn Aktivierungsreaktionen mit einander "ähnlichen" Ausbeutefunktionen $R_i(E)$ verwendet werden, wenn auch eine von zwei derartigen Aktivierungsreaktionen praktisch keine neue Information liefert, so daß deren Mitverwendung nur aus Gründen der Redundanz sinnvoll sein kann.

Von ZIJP /22/ wird die sogenannte "spektrale Ausbeute eines ganzen Detektorsatzes" definiert, die wir mit $R_{NDETEC}(E)$ bezeichnen wollen. Die Definitionsgleichung lautet:

$$R_{NDETEC}(E) = \frac{\sum_{i=1}^{NDETEC} \sigma_{act\ i}(E) \phi_E(E)}{\sum_{i=1}^{NDETEC} \int_0^{\infty} \sigma_{act\ i}(E) \phi_E(E) dE} \quad . \quad (21)$$

Idealerweise wäre die spektrale Ausbeute $R_{NDETEC}(E)$ eine Funktion der Neutronenenergie, die eine Anzahl NDETEC schmaler, gleichmäßig über die ganze Energieregion verteilter Peaks mit etwa gleichen Höhen enthält. Es ist klar, daß der verwendete Detektorsatz für die Entfaltung umso günstiger ist, je mehr sich seine spektrale Ausbeute diesem Idealbild nähert.

4.2 Verwendete Aktivierungsreaktionen

Die Tabelle 1 enthält die Material- und Reaktions-Codes, die Meßnuklide, die Meßnuklidhalbwertszeiten und die Neutronenenergiebereiche derjenigen

Aktivierungsreaktionen, für die die differentiellen Aktivierungsquerschnitte $\sigma_{\text{act } i}(E)$, $i=1$ bis NSIGMA, in unserer gegenwärtig benutzten Library (siehe Kapitel 6) enthalten sind, wobei NSIGMA gegenwärtig den Wert 33 hat. Bis auf wenige Ausnahmen werden diese Reaktionen von uns routinemäßig verwendet, wobei die Aktivierungssonden im allgemeinen sowohl als Drähte als auch als Scheibensonden vorliegen, jedoch - aus dem Grund der meistens zweckmäßigeren Geometrie - in der Regel eher als Drähte eingesetzt werden. Es fällt auf, daß diese Tabelle bis auf die Reaktion $^{197}\text{Au}(n,2n)$ keine weiteren $(n,2n)$ -Reaktionen enthält, ganz zu schweigen von Aktivierungsreaktionen in noch höheren Energiebereichen. Dies hat seinen Grund in der bisherigen besonderen Akzentuierung der Entfaltung von Neutronenspektren in Spaltungsreaktoren, deren Energiebereich sich bis etwa 10 MeV erstreckt. Natürlich kann unser Code auch auf die Entfaltung von Neutronenspektren in Fusionsreaktoren angewendet werden, wenn Guess-Spektren und Aktivierungsreaktionen im entsprechend höher gelegenen Energiebereich zur Verfügung stehen. Ein Beispiel für die Entfaltung von Neutronenspektren in einem Fusionsblanketmodell mit Hilfe des Codes SAND-II wird in /23/ gegeben.

Die in der letzten Spalte der Tabelle 1 angegebenen energetischen Ansprechbereiche der thermisch-epithermischen Aktivierungsreaktionen beziehen sich entweder auf die Bestrahlung der "nackten", d.h. unabgeschirmten, Sonden (Kurzbezeichnung "therm+epitherm") oder auf die Bestrahlung der Sonden unter einer thermischen Neutronenabsorberfolie mit der Abschneideenergie E_g (Kurzbezeichnung "epitherm"). E_g hat für Gadoliniumfolien, die für thermische Neutronen praktisch "schwarz", d.h. praktisch undurchlässig, sind und dies auch während der Bestrahlung bleiben - danach richtet sich die zu wählende Schichtdicke -, den Wert 0,1 eV. Für die von uns in einigen Fällen ebenfalls verwendeten Cadmiumfolien gilt dagegen $E_g = 0,5$ eV.

Für die thermisch-epithermischen Aktivierungsreaktionen wurde auch stets die energetische Lage der ersten Resonanz E_{R1} angegeben. Die effektiven Energien E_{eff} der aufgeführten (n,f) -, (n,n') -, (n,p) - und (n,α) -Schwellwertreaktionen sind in der üblichen Weise als Schwellenenergien äquivalenter Stufenfunktionen für die Aktivierungsquerschnitte unter Benutzung eines Spaltspektrums als Normspektrum definiert (siehe z.B. /4/).

Ferner haben wir - soweit zugänglich - für alle Aktivierungsreaktionen auch

den im vorangehenden Abschnitt definierten "90%-Ausbeutebereich", hier mit "90 % resp. range" bezeichnet, angegeben. Das hierbei zugrunde gelegte Neutronenspektrum ist ein mit dem Diffusions-Code TEDDI-M für die Position E5 im Core-Zentrum des HFR in Petten gerechnetes Spektrum. Es steht für das Neutronenspektrum eines typischen Materialtestreaktors (MTR). Die Berechnung dieser "90%-Ausbeutebereiche" erfolgte für unabgeschirmte Sonden (siehe Abschnitt 4.7).

Die effektiven Energien sind /4/ und /24/, die Meßnuklidhalbwertszeiten /25/, die energetischen Lagen der ersten Resonanz /26/, die "90%-Ausbeutebereiche" für die Spaltreaktionen /27/ und die "90%-Ausbeutebereiche" für die übrigen Aktivierungsreaktionen /28/ entnommen.

Tabelle 1

Verwendete Aktivierungsreaktionen

Pos.- Nr.	Material- und Reaktions-Code	Meßnuklid	Meßnuklid- Halbwertszeit	Neutronenenergiebereich	
1	$^{45}\text{Sc}(n,\gamma)^{46}\text{Sc}$	^{46}Sc	84,0 d	$E < 0,1$ MeV therm+epitherm $E_g < 0,1$ MeV epitherm $E_{R1} \sim 3200$ eV	90 % resp.range (MeV): 5,0 E-9 bis 1,4 E-6
2	$^{239}\text{Pu}(n,f)$	^{95}Nb , ^{95}Zr , ^{103}Ru , ^{140}Ba , ^{140}La , ^{144}Pr	34,97 d 64,0 d 39,35 d 12,75 d 40,272 h 17,3 min	$E < 0,1$ MeV therm+epitherm $E_g < 0,1$ MeV epitherm $E_{R1} \sim 0,3$ eV	90 % resp.range (MeV): 6,3 E-9 bis 7,2 E-6
3	$^{241}\text{Am}(n,f)$	siehe Pos.2	siehe Pos.2	$E < 0,1$ MeV therm+epitherm $E_g < 0,1$ MeV epitherm $E_{R1} \sim 0,3$ eV	
4	$^{235}\text{U}(n,f)$	siehe Pos.2	siehe Pos.2	$E < 0,1$ MeV therm+epitherm $E_g < 0,1$ MeV epitherm $E_{R1} \sim 0,3$ eV	90 % resp.range (MeV): 4,8 E-9 bis 2,3 E-5
5	$^{115}\text{In}(n,\gamma)^{116m}\text{In}$	^{116m}In	54 min	$E < 0,1$ MeV therm+epitherm $E_g < 0,1$ MeV epitherm $E_{R1} \sim 1,5$ eV	90 % resp.range (MeV): 1,7 E-8 bis 1,6 E-6
6	$^{197}\text{Au}(n,\gamma)^{198}\text{Au}$	^{198}Au	2,695 d	$E < 0,1$ MeV therm+epitherm $E_g < 0,1$ MeV epitherm $E_{R1} \sim 5$ eV	90 % resp.range (MeV): 1,5 E-8 bis 5,8 E-6
7	$^{109}\text{Ag}(n,\gamma)^{110m}\text{Ag}$	^{110m}Ag	250,4 d	$E < 0,1$ MeV therm+epitherm $E_g < 0,1$ MeV epitherm $E_{R1} \sim 5$ eV	90 % resp.range (MeV): 1,5 E-8 bis 4,0 E-5
8	$^{23}\text{Na}(n,\gamma)^{24}\text{Na}$	^{24}Na	14,96 h	$E < 0,1$ MeV therm+epitherm $E_g < 0,1$ MeV epitherm $E_{R1} \sim 2800$ eV	90 % resp.range (MeV): 5,0 E-9 bis 1,2 E-4
9	$^{59}\text{Co}(n,\gamma)^{60}\text{Co}$	^{60}Co	5,272 a	$E < 0,1$ MeV therm+epitherm $E_g < 0,1$ MeV epitherm $E_{R1} \sim 130$ eV	90 % resp.range (MeV): 6,0 E-9 bis 1,4 E-4
10	$^{55}\text{Mn}(n,\gamma)^{56}\text{Mn}$	^{56}Mn	2,58 h	$E < 0,1$ MeV therm+epitherm $E_g < 0,1$ MeV epitherm $E_{R1} \sim 340$ eV	90 % resp.range (MeV): 5,5 E-9 bis 3,4 E-4
11	$^{58}\text{Fe}(n,\gamma)^{59}\text{Fe}$	^{59}Fe	44,6 d	$E < 0,1$ MeV therm+epitherm $E_g < 0,1$ MeV epitherm $E_{R1} \sim 230$ eV	90 % resp.range (MeV): 5,8 E-9 bis 3,4 E-4
12	$^{238}\text{U}(n,\gamma)^{239}\text{U}$	^{239}U	23,5 min	$E < 0,1$ MeV therm+epitherm $E_g < 0,1$ MeV epitherm $E_{R1} \sim 7$ eV	90 % resp.range (MeV): 6,0 E-6 bis 2,0 E-4
13	$^{186}\text{W}(n,\gamma)^{187}\text{W}$	^{187}W	23,8 h	$E < 0,1$ MeV therm+epitherm $E_g < 0,1$ MeV epitherm $E_{R1} \sim 19$ eV	
14	$^{63}\text{Cu}(n,\gamma)^{64}\text{Cu}$	^{64}Cu	12,71 h	$E < 0,1$ MeV therm+epitherm $E_g < 0,1$ MeV epitherm $E_{R1} \sim 580$ eV	90 % resp.range (MeV): 5,5 E-9 bis 1,2 E-3
15	$^{232}\text{Th}(n,\gamma)^{233}\text{Th}$	^{233}Th	22,3 min	$E < 0,1$ MeV therm+epitherm $E_g < 0,1$ MeV epitherm $E_{R1} \sim 8$ eV	90 % resp.range (MeV): 1,2 E-8 bis 1,9 E-3
16	$^{237}\text{Np}(n,f)$	siehe Pos.2	siehe Pos.2	$E > 0,1$ MeV schnell $E_{eff} \sim 0,6$ MeV	90 % resp.range (MeV): 5,0 E-1 bis 5,0 E+0

Tabelle 1
(Fortsetzung)

Verwendete Aktivierungsreaktionen

Pos.- Nr.	Material- und Reaktions-Code	Meßnuklid	Meßnuklid- Halbwertszeit	Neutronenenergiebereich	
17	$^{103}\text{Rh}(n,n')^{103\text{m}}\text{Rh}$	$^{103\text{m}}\text{Rh}$	56,1 min	$E > 0,1$ MeV schnell $E_{\text{eff}} \sim 0,9$ MeV	90 % resp.range (MeV): 5,5 E-1 bis 5,6 E+0
18	$^{115}\text{In}(n,n')^{115\text{m}}\text{In}$	$^{115\text{m}}\text{In}$	4,49 h	$E > 0,1$ MeV schnell $E_{\text{eff}} \sim 1,1$ MeV	90 % resp.range (MeV): 1,0 E+0 bis 5,6 E+0
19	$^{238}\text{U}(n,f)$	siehe Pos.2	siehe Pos.2	$E > 0,1$ MeV schnell $E_{\text{eff}} \sim 1,6$ MeV	90 % resp.range (MeV): 1,4 E+0 bis 6,5 E+0
20	$^{232}\text{Th}(n,f)$	siehe Pos.2	siehe Pos.2	$E > 0,1$ MeV schnell $E_{\text{eff}} \sim 1,9$ MeV	90 % resp.range (MeV): 1,4 E+0 bis 7,1 E+0
21	$^{47}\text{Ti}(n,p)^{47}\text{Sc}$	^{47}Sc	3,35 d	$E > 0,1$ MeV schnell $E_{\text{eff}} \sim 2,2$ MeV	90 % resp.range (MeV): 1,8 E+0 bis 7,6 E+0
22	$^{58}\text{Ni}(n,p)^{58}\text{Co}$	^{58}Co	70,78 d	$E > 0,1$ MeV schnell $E_{\text{eff}} \sim 2,8$ MeV	90 % resp.range (MeV): 1,9 E+0 bis 7,7 E+0
23	$^{54}\text{Fe}(n,p)^{54}\text{Mn}$	^{54}Mn	312,2 d	$E > 0,1$ MeV schnell $E_{\text{eff}} \sim 3,3$ MeV	90 % resp.range (MeV): 2,3 E+0 bis 7,9 E+0
24	$^{27}\text{Al}(n,p)^{27}\text{Mg}$	^{27}Mg	9,46 min	$E > 0,1$ MeV schnell $E_{\text{eff}} \sim 4,2$ MeV	90 % resp.range (MeV): 3,4 E+0 bis 9,6 E+0
25	$^{46}\text{Ti}(n,p)^{46}\text{Sc}$	^{46}Sc	83,82 d	$E > 0,1$ MeV schnell $E_{\text{eff}} \sim 3,8$ MeV	90 % resp.range (MeV): 3,7 E+0 bis 9,7 E+0
26	$^{60}\text{Ni}(n,p)^{60}\text{Co}$	^{60}Co	5,272 a	$E > 0,1$ MeV schnell $E_{\text{eff}} \sim 6,8$ MeV	90 % resp.range (MeV): 4,8 E+0 bis 1,1 E+1
27	$^{56}\text{Fe}(n,p)^{56}\text{Mn}$	^{56}Mn	2,58 h	$E > 0,1$ MeV schnell $E_{\text{eff}} \sim 6,3$ MeV	90 % resp.range (MeV): 5,4 E+0 bis 1,2 E+1
28	$^{59}\text{Co}(n,\alpha)^{56}\text{Mn}$	^{56}Mn	2,58 h	$E > 0,1$ MeV schnell $E_{\text{eff}} \sim 9,9$ MeV	90 % resp.range (MeV): 5,8 E+0 bis 1,2 E+1
29	$^{63}\text{Cu}(n,\alpha)^{60}\text{Co}$	^{60}Co	5,272 a	$E > 0,1$ MeV schnell $E_{\text{eff}} \sim 9,1$ MeV	90 % resp.range (MeV): 6,1 E+0 bis 1,2 E+1
30	$^{24}\text{Mg}(n,p)^{24}\text{Na}$	^{24}Na	14,96 h	$E > 0,1$ MeV schnell $E_{\text{eff}} \sim 7,0$ MeV	90 % resp.range (MeV): 6,5 E+0 bis 1,2 E+1
31	$^{27}\text{Al}(n,\alpha)^{24}\text{Na}$	^{24}Na	14,96	$E > 0,1$ MeV schnell $E_{\text{eff}} \sim 7,4$ MeV	90 % resp.range (MeV): 6,5 E+0 bis 1,2 E+1
32	$^{48}\text{Ti}(n,p)^{48}\text{Sc}$	^{48}Sc	43,67 h	$E > 0,1$ MeV schnell $E_{\text{eff}} \sim 7,2$ MeV	90 % resp.range (MeV): 6,0 E+0 bis 1,3 E+1
33	$^{197}\text{Au}(n,2n)^{196}\text{Au}$	^{196}Au	6,2 d	$E > 0,1$ MeV schnell $E_{\text{eff}} \sim 9,4$ MeV	

4.3 Aktivierungsreaktionen im schnellen Neutronenenergiebereich (Schwellenreaktionen)

Schwellenreaktionen sind oberhalb einer bestimmten Neutronenenergie oder Energieschwelle erst einsetzende Aktivierungsreaktionen, die bekanntlich sowohl endotherm als auch exotherm sein können, in den meisten und in allen der uns interessierenden Fälle sich jedoch endotherm verhalten¹⁾. Für Neutronenspektrumentfaltungen in Spaltungsreaktoren kommen Schwellenreaktionen vom Typ (n,f), (n,n'), (n,p), (n, α) und allenfalls noch (n,2n) in Frage. Ein Blick in die vorangehende Tabelle 1 lehrt uns, daß die "90%-Ausbeutebereiche" der von uns verwendeten Schwellenreaktionen den Neutronenenergiebereich eines Spaltungsreaktors oberhalb von 0,5 MeV (dem unteren Ende des "90%-Ausbeutebereiches" der Schwellenreaktion $^{237}\text{Np}(n,f)$) relativ dicht und gleichmäßig überdecken. Deshalb haben hier sogar verschiedene "klassische" Entfaltungsmethoden, die den Ansatz nach Formel (6) mit einer gewissen Apriori-Information benutzen, schon zu brauchbaren Ergebnissen geführt /4/. Geht man in diesem Neutronenenergiebereich von einer realistischen Eingangs-näherung aus, so lassen sich nach /29/ mit modernen Entfaltungs-Codes wie SAND-II oder SPECTRA in den einzelnen Energiegruppen Unsicherheiten von nur wenigen Prozent - sagen wir 5 % in einfacher Standardabweichung - realisieren. Als Guess-Spektrum kann uns im oberen Teil des schnellen Neutronenenergiebereiches häufig ein Spaltspektrum in einer der geläufigen Formen dienen, überall dort nämlich, wo - wie in zentralen Positionen von Materialtestreaktoren - eben dieses Spaltspektrum eine gute Näherung für das reale Neutronenspektrum darstellt.

Die in Abschnitt 4.1 eingeführten Selbstabschirmungs-Korrekturfaktoren K_i , $i=1$ bis NDETEC, sind in diesem Energiebereich samt und sonders gleich der Einheit. Selbstabschirmungs-Korrekturen sind hier also nicht durchzuführen.

1) Ist die Summe der Massen von Targetkern und einfallendem Neutron größer als die Summe der Massen der Reaktionsprodukte wie bei $^6\text{Li}(n,\alpha)^3\text{H}$, dann ist die Reaktion bekanntlich exotherm, anderenfalls ist sie endotherm.

4.4 Experimentelle Informationslücke zwischen 2 keV und 0,5 MeV für unabgeschirmte Sonden

Wie aus Tabelle 1 hervorgeht, liegt zwischen dem oberen Ende des "90%-Ausbeutebereiches" für $^{232}\text{Th}(n,\gamma)^{233}\text{Th}$ bei 1,9 keV und dem unteren Ende des entsprechenden Bereiches für $^{237}\text{Np}(n,f)$ bei 0,5 MeV eine Informationslücke, innerhalb derselben bei Verwendung unabgeschirmter Sonden keine der aufgeführten Aktivierungsreaktionen empfindlich ist. Gerade dieser Energiebereich hat für Strukturmaterialbestrahlungen neben dem schnellen Energiebereich eine gewisse Bedeutung, da zur Materialschädigung neben den schnellen Neutronen auch die schnelleren unter den epithermischen Neutronen nicht unerheblich beitragen. Man ist hier ausschließlich auf das Guess-Spektrum angewiesen, das vom Entfaltungs-Code praktisch unverändert wiedergegeben wird. Das Guess-Spektrum wird meistens ein transport- oder diffusionstheoretisch oder durch die Monte-Carlo-Methode gerechnetes Neutronenspektrum sein müssen. Manchmal ist es möglich, an repräsentativen Bestrahlungspositionen mit direkten differentiellen Methoden wie Lithium-Spektrometrie die Neutronenverteilung in diesem Energiebereich zu messen und damit einen experimentell gewonnenen Spektralverlauf als Eingangsnäherung zur Verfügung zu stellen. Im allgemeinen jedoch werden sich die in Leerkanälen vorgefundenen Verhältnisse nicht auf die Bestrahlung von beispielsweise Stahlrigs übertragen lassen wegen der durch den Stahl bedingten Spektrumaufweichung und den an Eisen hervorgerufenen Resonanzen im unteren schnellen sowie im oberen epithermischen Energiebereich. Andererseits dürfte es in der Regel konstruktions-technisch unmöglich sein, die für die direkten differentiellen Methoden der Neutronenspektrometrie erforderlichen Meßanordnungen in Bestrahlungsrigs unterzubringen.

Durch die Verwendung von thermisch-epithermischen Aktivierungssonden unter thermischen Neutronenfilterfolien kann man die untere Schranke der hier genannten Informationslücke anheben oder sogar dieselbe - allerdings häufig unter unrealistischen Meßbedingungen - auch ganz schließen. Näheres hierüber ist in Abschnitt 4.7 enthalten.

4.5 Aktivierungsreaktionen im epithermischen Neutronenenergiebereich unterhalb von 2 keV

Wesentlich günstiger liegen die Verhältnisse im epithermischen Bereich zwischen etwa 0,1 eV (Gadolinium-Abschneidegrenze) und etwa 2 keV. Hier gibt es mehrere (n,γ)- und (n,f)-Aktivierungsreaktionen, deren Reaktionsprodukte als Gammastrahler auch meßtechnisch mittels Germanium-Lithium-Halbleiter-Gammaspektrometrie gut erfaßbar sind. Da ihre differentiellen Aktivierungsquerschnitte neben einem allen gemeinsamen 1/v-Anteil eine Reihe von Resonanzen verschiedenster epithermischer Energien besitzen, wird der epithermische Energiebereich zwischen den oben genannten Grenzen von den "90 % Ausbeutebereichen" mehrerer epithermischer Aktivierungsreaktionen insgesamt lückenlos überdeckt. Die einzige und manchmal nicht unbeträchtliche meßtechnische Schwierigkeit sind die teilweise erheblichen Selbstabschirmungs-Korrekturen für die epithermischen Aktivierungen. Die NEPI Stück epithermischer Selbstabschirmungs-Korrekturfaktoren $K_{epi\ i}$, $i=1$ bis NEPI, können rechnerisch oder - unter Annahme eines approximativen 1/E-Spektralverlaufes im epithermischen Gebiet - aus Aktivitätsverhältnismessungen bestimmt werden, wenn man im letzteren Falle von einer Energieabhängigkeit der Korrekturfaktoren absieht und den Korrekturfaktor einer Standardreaktion kennt. Bei der rechnerischen Ermittlung mit dem Rechenprogramm SELFS /30/ geht man umgekehrt von einer Energieabhängigkeit der epithermischen Selbstabschirmungs-Korrekturfaktoren aus. Die gemessenen Sondenaktivitäten nach Formel (18) würden sich demnach in der Form

$$C_i = T_i N_i \int_{0,1\text{eV}}^{\infty} K_i(E) \sigma_{act\ i}(E) \phi_E(E) dE, \quad i = 1 \text{ bis NEPI}, \quad (22)$$

darstellen. Neben den bereits eingeführten Symbolen hat hier $K_i(E)$ die Bedeutung des spektralen Selbstabschirmungs-Korrekturfaktors für die i -te Aktivierungsreaktion. Das Programm SELFS berechnet für die gewählten Energiegruppen mit der Nummer k , $k=1$ bis N , die Gruppenkorrekturfaktoren G_{ik} , $i=1$ bis NEPI, $k=1$ bis N , mit denen die Zahlenwerte der differentiellen Aktivierungsquerschnitte multipliziert werden müssen, um die entsprechenden Zahlenwerte der modifizierten differentiellen Aktivierungsquerschnitte zu erhalten, also

$$\{\sigma_{act\ i}^k\}_{mod} = G_{ik} \cdot \sigma_{act\ i}^k, \quad i=1 \text{ bis NEPI}, \quad k=1 \text{ bis } N. \quad (23)$$

Für die experimentelle Bestimmung der epithermischen Selbstabschirmungs-Korrekturfaktoren aus Aktivitätsverhältnissen werde ein $1/E$ -Verlauf der spektralen Neutronenflußdichte $\phi_E(E)$ und eine quasi Energieunabhängigkeit dieser Korrekturfaktoren vorausgesetzt. Die Gl. (22) geht dann über in

$$C_i = T_i N_i K_{\text{epi } i} \phi_{\text{epi}} I_i, \quad i=1 \text{ bis } NEPI, \quad (24)$$

worin $K_{\text{epi } i}$ den energieunabhängigen epithermischen Selbstabschirmungs-Korrekturfaktor, ϕ_{epi} die epithermische Neutronenflußdichte pro Lethargieintervall und

$$I_i = \int_{0,1\text{eV}}^{\infty} \frac{\sigma_{\text{act } i}(E)}{E} dE, \quad i=1 \text{ bis } NEPI, \quad (25)$$

das Resonanzintegral der i -ten epithermischen Aktivierungsreaktion bedeuten. Unter Verwendung der Sättigungsaktivität pro Absorberatom $C_i^{\text{sätt}} = C_i / (T_i \cdot N_i)$ erhält man aus Gl. (24) für das Verhältnis der epithermischen Selbstabschirmungs-Korrekturfaktoren der i -ten und j -ten epithermischen Aktivierungssonde bei konstantem ϕ_{epi} den Quotienten

$$\frac{K_{\text{epi } i}}{K_{\text{epi } j}} = \frac{C_i^{\text{sätt}} I_j}{C_j^{\text{sätt}} I_i}. \quad (26)$$

Aus den gemessenen Sättigungsaktivitäten $C_i^{\text{sätt}}$ und $C_j^{\text{sätt}}$, den der Literatur zu entnehmenden Resonanzintegralen I_i und I_j und dem bekannten epithermischen Selbstabschirmungs-Korrekturfaktor $K_{\text{epi } j}$ einer epithermischen Standardsonde erhält man also nach Gl. (26) den gesuchten Selbstabschirmungs-Korrekturfaktor der i -ten epithermischen Aktivierungssonde $K_{\text{epi } i}$. Nach diesem Verfahren bestimmte epithermische Selbstabschirmungs-Korrekturfaktoren erwiesen sich bei der Applikation auf die vorliegenden Neutronenspektrum-entfaltungen als sehr konsistent hinsichtlich der erhaltenen Lösungsspektren. Dabei gingen wir in der Regel von den experimentell bestimmten Standardwerten $K_{\text{epi Au}} = 0,1284$ für 0,5 mm dicke und 10 mm lange Golddrähte bzw. $K_{\text{epi Co}} = 0,600$ für 0,1 mm dicke und 10 mm lange Kobaltdrähte aus /47/. Die Konsistenz der Resultate führen wir darauf zurück, daß die eingangs erwähnten beiden Voraussetzungen für dieses Verfahren hinreichend gut erfüllt sind. Ein $1/E$ -Verlauf der epithermischen spektralen Neutronenflußdichte $\phi_E^{\text{epi}}(E)$ sollte bei dem auf den Spektrumplots in Kapitel 12 gewählten Maßstab zu einer horizontal verlaufenden geraden Linie im epithermischen Gebiet führen - gegebenenfalls abgesehen von einer gewissen durch Reaktorwerkstoffe

oder bestrahlte Materialien bedingten Resonanzstruktur -, was wir auch näherungsweise in allen Fällen beobachten. Die quasi Energieunabhängigkeit des epithermischen Selbstabschirmungs-Korrekturfaktors ist offenbar dann gesichert, wenn die epithermische Aktivierung überwiegend von der Hauptresonanz des epithermischen differentiellen Aktivierungsquerschnittes herührt, was bei allen der von uns verwendeten epithermischen Aktivierungsreaktionen zutrifft. Diese Energieunabhängigkeit der Selbstabschirmung liegt nicht mehr vor, wenn die epithermische Aktivierung insgesamt von mehreren verschiedenen Aktivierungsquerschnittresonanzen von ähnlicher Intensität stammt. In diesem Fall oder, wenn etwa die spektrale Neutronenflußdichte vom $1/E$ -Verlauf wesentlich abweicht - etwa in der Form $1/E^\alpha$ mit einem erheblich von der Einheit verschiedenem α -, müßte man dann doch den epithermischen Selbstabschirmungs-Korrekturfaktor berechnen, was beispielsweise mit dem zitierten Rechenprogramm SELFS geschehen kann.

4.6 Aktivierungsreaktionen im thermischen Neutronenenergiebereich

Im thermischen Neutronenenergiebereich unterhalb der bei 0,1 eV gelegenen Gadolinium-Abschneidegrenze stehen ebenfalls mehrere (n,γ) - und (n,f) -Aktivierungsreaktionen zur Verfügung, nämlich diejenigen, die wir auch im epithermischen Bereich nutzen. Während jedoch im epithermischen Gebiet durch die verschiedene Lage der Resonanzen des differentiellen Aktivierungsquerschnittes von Reaktion zu Reaktion die einzelnen Aktivierungen real verschiedene Aussagen über gewissen Teilbereiche des Neutronenspektrums erlauben, geben im thermischen Energiebereich sämtliche Reaktionen im Grunde die gleiche Auskunft über das Neutronenspektrum, da unterhalb von 0,1 eV sämtliche Aktivierungsreaktionen einen einheitlichen $1/v$ -Anteil des differentiellen Aktivierungsquerschnittes, jedoch keine ausgeprägten Resonanzen besitzen. Demnach haben sämtliche thermischen differentiellen Aktivierungsquerschnitte die gleiche Energieabhängigkeit. Sie sind - mit anderen Worten - einander streng parallel. Für uns gibt es keinen Grund, bei der Anwendung von SAND-MX2 derartige vollständig linear abhängige Aktivierungsquerschnitte zu vermeiden, die bei den rein mathematischen Verfahren mit Matrixinversion nach Kapitel 2 zu singulären Gleichungssystemen führen würden. Aus Gründen der Redundanz bzw. zum Ausgleich der experimentellen Fehler werden wir nach Möglichkeit mehrere thermische Aktivierungsreaktionen ver-

wenden, auch wenn dadurch kein spektraler Informationsgewinn gegenüber der Anwendung nur einer einzigen Reaktion gegeben ist.

In Leerkanälen eines gut moderierten thermischen Spaltungsreaktors wird es häufig genügen, als Guess-Spektrum im thermischen Energiebereich eine Maxwell-Verteilung zu verwenden, deren Neutronentemperatur z.B. durch Messungen mit Tantalsonden experimentell bestimmt /31/ und die stetig an das Guess-Spektrum im epithermischen Bereich angeschlossen wird. In Bestrahlungsrigs - z.B. solchen für Stahlbestrahlungen - wird diese Methode dagegen im allgemeinen nicht anwendbar sein, so daß man hier auf ein gerechnetes Guess-Spektrum angewiesen ist.

4.7 Verwendete Neutronenfilter

Allgemein sind für Aktivierungsmessungen zur Neutronenspektrumentfaltung als Neutronenfiltermaterialien entweder Gadolinium oder Cadmium in Gebrauch. Beide Materialien fanden auch bei unseren Entfaltungen Anwendung, vorwiegend Gadolinium. Bei der Entscheidung zwischen diesen beiden Neutronenfiltern für den jeweiligen Verwendungszweck muß man sich von den relevanten Eigenschaften derselben, die nachstehend aufgeführt sind, leiten lassen.

- 1) Gadolinium hat einen relativ hohen Schmelzpunkt von 1312°C , ist teuer und mechanisch schwierig zu verarbeiten. Es besitzt einen extrem hohen thermischen Absorptionsquerschnitt ($254\,000$ barn für $^{157}_{64}\text{Gd}$ mit einer Isotopenhäufigkeit von 15,65 %), der etwa 10 mal so hoch ist wie derjenige von Cadmium. Die Gadolinium-Abschneidegrenze liegt bei 0,1 eV.
- 2) Cadmium hat einen relativ niedrigen Schmelzpunkt von 321°C , ist billig und mechanisch leicht zu verarbeiten. Der thermische Absorptionsquerschnitt beträgt für das mit einer Isotopenhäufigkeit von 12,22 % vorhandene Isotop $^{113}_{48}\text{Cd}$ nur 20 000 barn. Die Cadmium-Abschneidegrenze liegt bei 0,5 eV.

Die einzige wirklich ernst zu nehmende Beschränkung ist der niedrige Schmelzpunkt von Cadmium, der oft dazu zwingt, Gadolinium zu verwenden, da andererseits für Sondenkapselfn aus dem letzteren Material weder Kosten noch Ferti-

gungsschwierigkeiten noch Reaktivitätsprobleme wirklich gravierend sind. Es bürgert sich deshalb heute immer mehr - insbesondere bei Strukturmaterialbestrahlungen - der Gebrauch von Gadolinium als Neutronenfilter ein.

Nächst der Besprechung der möglichen Neutronenfilter muß die Frage geklärt werden, unter welchen Umständen diese sinnvollerweise einzusetzen sind. Grundsätzlich ist die größtmögliche Information über das Neutronenspektrum durch je eine Bestrahlung eines abgeschirmten und eines "nackten" Spektralsondenpaketes zu erhalten, wobei diese keineswegs jene Vorgehensweise überflüssig macht. Der Sachverhalt ist in einer durch die Abschirmung bedingten Verschiebung der "90%-Ausbeutebereiche" nach höheren Energien zu begründet, wie aus Bild 1 und Bild 2 (aus /32/) auf den folgenden Seiten hervorgeht. Demzufolge kann man also durch eine Abschirmung mit Cadmium die untere Grenze der in Abschnitt 4.4 genannten Informationslücke für unabgeschirmte Sonden um etwa eine Zehnerpotenz der Energie erhöhen und damit diese Informationslücke entsprechend verkleinern. Wie ein Blick auf Bild 3 (aus /32/) lehrt, könnte man diese Informationslücke durch die Verwendung von Bor als thermisches Neutronenfilter ganz schließen, wenn es gelänge, die erforderlichen großen Abschirmdicken technisch zu realisieren, die hierbei für die Erhaltung der thermischen "Schwärze" des Neutronenfilters über die ganze Bestrahlungszeit hinweg nötig sind. In Bestrahlungseinsätzen wird hierfür im allgemeinen zu wenig Platz sein. Möglicherweise kann man unter bestimmten Voraussetzungen und für bestimmte Zwecke in Leerkanälen solche Messungen durchführen.

Der Grund des Platzmangels ist es häufig auch, wenn der oben genannten Forderung nach einer simultanen Bestrahlung sowohl abgeschirmter als auch "nackter" Spektralsondenpakete nicht entsprochen werden kann. Schließlich muß ein hinreichend großer Abstand von einigen Zentimetern - je nach Medium - zur Verhinderung unzulässig hoher Depressionen der thermischen Neutronenflußdichte durch das Neutronenfiltermaterial am Ort des "nackten" Spektralsondenpaketes gewährleistet sein. Andererseits ist man bei Strukturmaterialbestrahlungen, die heute eines der Hauptanwendungsgebiete für Neutronenspektrumentfaltungen darstellen, hauptsächlich am schnellen und am oberen Teil des epithermischen Neutronenspektrums interessiert, da Neutronen aus diesen Energiebereichen vergleichsweise viel stärker schädigen als die thermischen Neutronen. Berücksichtigt man ferner, daß die besonders schädigungsrelevante Spaltreaktion $^{237}\text{Np}(n,f)$ in einem nicht

zu vernachlässigenden Ausmaß durch langsame Neutronen hervorgerufen wird, die demnach zu eliminieren wären, so ist die überwiegende Verwendung von abgeschirmten Spektralsondenpaketen bei Strukturmaterialbestrahlungen verständlich.

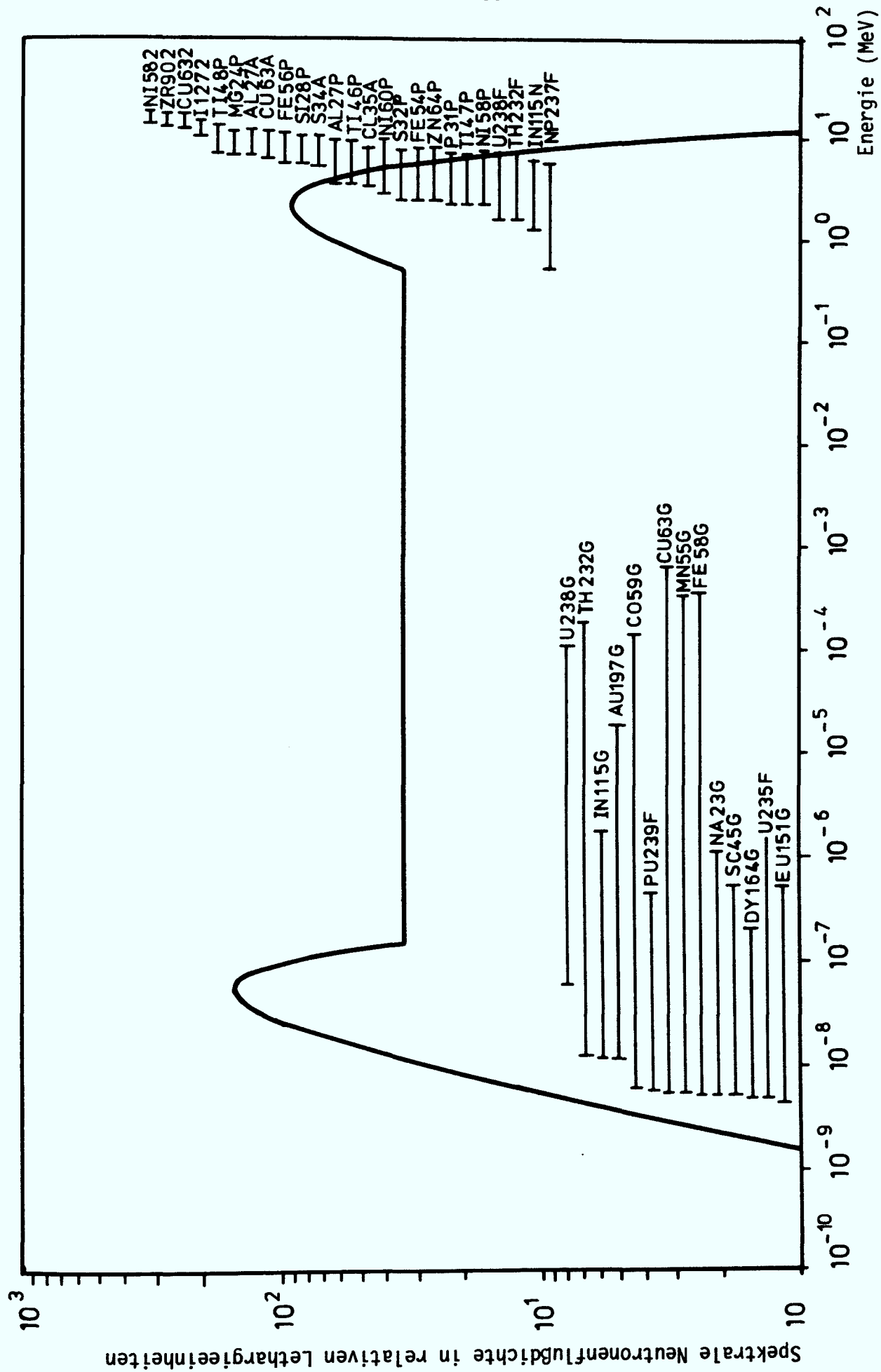


Bild 1: "90-%-Ausbeutebereiche" unabgeschirmter Spektralsonden in einem Normspektrum:
 MAXWELL-Spektrum von 20 °C angeschlossen bei 0,14 eV an 1/E-Spektrum,
 1/E-Spektrum angeschlossen bei 0,5 MeV an Spaltspektrum nach WATT (aus /32/).

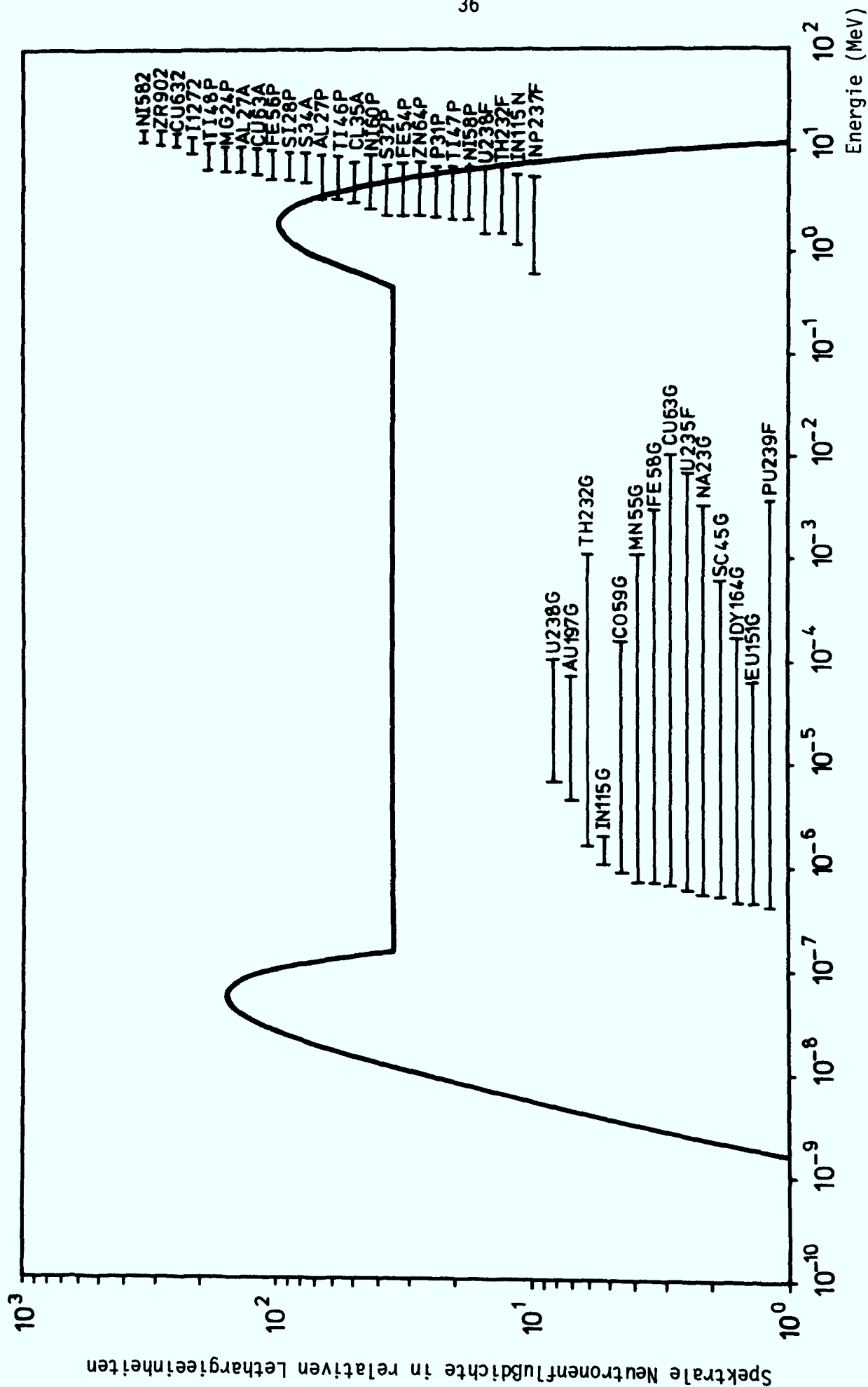


Bild 2: "90%-Ausbeutebereiche" mit Cadmium abgeschirmter Sonden in einem Normspektrum:
 MAXWELL-Spektrum von 20 °C abgeschlossen bei 0,14 eV an 1/E-Spektrum,
 1/E-Spektrum abgeschlossen bei 0,5 MeV an Spaltspektrum nach WATT (aus [32/]).

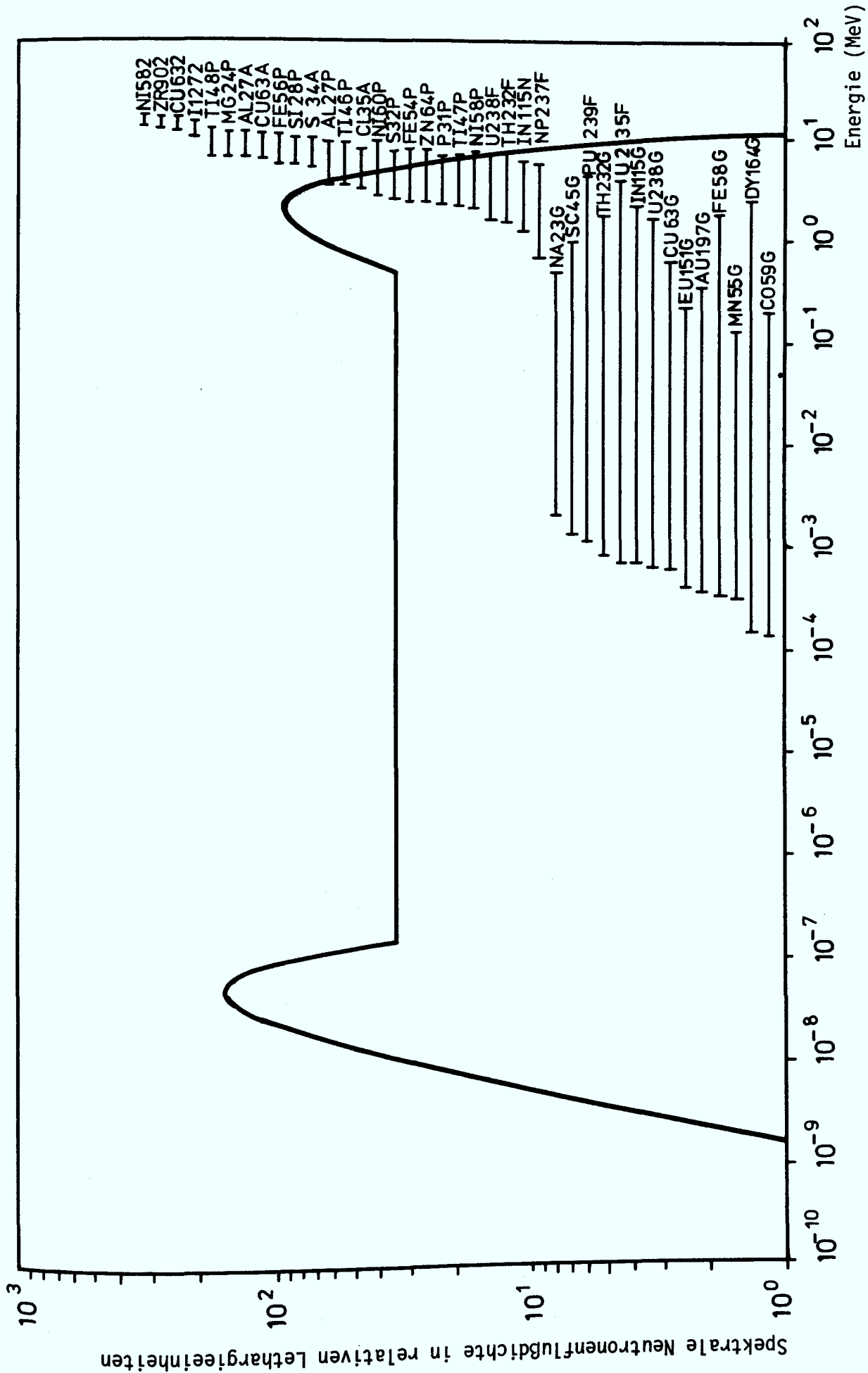


Bild 3: "90%-Ausbeutebereiche" mit Bor abgeschirmter Sonden in einem Normspektrum:
 MAXWELL-Spektrum von 20 °C abgeschlossen bei 0,14 eV an 1/E-Spektrum,
 1/E-Spektrum abgeschlossen bei 0,5 MeV an Spaltspektrum nach WATT,
 Bor-Schichtdicke 8 mm, 90 % 10B + 10 % 9B (aus /32/).

5 DER ALGORITHMUS DES RECHENPROGRAMMS SAND-MX2

Das Rechenprogramm SAND-MX2 ist einerseits ein Iterations-Code, andererseits ein Monte-Carlo-Code. Ein wesentlicher Zug "SAND-II-artiger" Entfaltungsprogramme ist nämlich die praktische Undurchführbarkeit einer exakten analytischen Fehlerrechnung nach dem Fehlerfortpflanzungsgesetz. Das Rechenprogramm SAND-MX2 ist deshalb als ein Monte-Carlo-Programm ausgelegt, wobei man durch Randomisierung der Eingabedaten einen Aufschluß über den Fehler des Resultatspektrums erhalten kann. Dieses Programm läuft also in einer Anzahl von Monte-Carlo-Rechenschritten, wobei ersichtlich der Fall eines einzigen Rechenschrittes ein Ergebnis ohne Fehlerangabe zeitigt. Die hierbei gewählte Vorgehensweise unterscheidet sich von der klassischen SAND-II-Fehleranalyse mit dem Monte-Carlo-Programm MONTE /19/ im wesentlichen in dem folgenden Punkt:

- 1) In der ursprünglichen Version mit MONTE wird zunächst nach dem normalen SAND-II-Rechenprinzip, welches in diesem Kapitel darzulegen ist, eine sogenannte Basislösung (base solution) ermittelt. Diese Basislösung dient als Guess-Spektrum für eine Monte-Carlo-Rechnung nach dem SAND-II-Prinzip, wobei nunmehr die Eingabedaten Aktivierungen, Aktivierungsquerschnitte und Guess-Spektrum randomisiert werden. Man beachte, daß auf diesem Wege die Ermittlung der Basislösung und die SAND-II-Fehleranalyse zwei vollkommen voneinander getrennte Rechengänge darstellen.
- 2) Im Rechenprogramm SAND-MX2 wird sogleich die Randomisierung der Eingabedaten Aktivierungen, Aktivierungsquerschnitte und Guess-Spektrum auf der Basis einer ausgewählten Eingangsnäherung für das Neutronenspektrum vorgenommen. Die Aufteilung in die Ermittlung der Basislösung und die anschließende Randomisierung entfällt also hier.

Kommen wir nun zu dem Iterationsprinzip, das gewissermaßen das Kernstück des Rechenprogrammes SAND-MX2 darstellt, und das in allen "SAND-II-artigen" Rechenprogrammen in gleicher Weise angewendet wird.

Es besteht in der Multiplikation der in der j -ten Iteration gefundenen Gruppenflußdichten ϕ_k^j , $k=1$ bis N , mit einem Gewichtungsfaktor W_j , wodurch die ent-

sprechenden Gruppenflußdichten der (j+1)-ten Iteration ϕ_k^{j+1} , $k=1$ bis N , gefunden werden, beginnend mit einer nullten Näherung der Gruppenflußdichten ϕ_k^0 , die durch das Guess-Spektrum dargestellt wird:

$$\phi_k^{j+1} = W_j(E_k; A_i, A_i^j) \cdot \phi_k^j,$$

$$\phi_k^0 \text{ als Guess-Spektrum gegeben,} \quad (27)$$

$$i = 1 \text{ bis NDETEC, } j = 0 \text{ bis } J-1, k = 1 \text{ bis } N.$$

Der Index J stellt die Gesamtanzahl der durchzuführenden Iterationen dar, die wir sogleich aus einer sinnvollen Forderung bestimmen werden. Der Gewichtungsfaktor W_j hängt von der Energiegruppengrenze E_k , sämtlichen gemessenen Aktivierungen A_i und sämtlichen auf der Basis des j -ten Iterationspektrums $\phi_E^j(E)$ berechneten Aktivierungen

$$A_i^j = \int_0^\infty \sigma_{\text{act } i}(E) \phi_E^j(E) dE \approx \sum_{k=1}^{620} \sigma_{ik} \phi_k^j, \quad i = 1 \text{ bis NDETEC,} \quad (28)$$

ab. Dabei ist σ_{ik} nach Gl. (12) der über das k -te Energieintervall gemittelte differentielle Aktivierungsquerschnitt der i -ten Aktivierungsreaktion. In Gl. (28) haben wir davon Gebrauch gemacht, daß die benutzte SAND-II-Library 620 Energiegruppen aufweist (siehe Kapitel 6). Die Abhängigkeit des Gewichtungsfaktors W_j von der Energiegruppengrenze E_k ist implizit über die gemittelten Aktivierungsquerschnitte σ_{ik} , $i=1$ bis NDETEC, $k=1$ bis 620, und über die in der j -ten Iteration gefundenen Gruppenflußdichten ϕ_k^j , $j=0$ bis $J-1$, $k=1$ bis N , gegeben. Der Gewichtungsfaktor W_j muß bei jedem Iterationsschritt neu berechnet werden. Er lautet im Detail

$$W_j(E_k; A_i, A_i^j) = e^{R(E_k; A_i, A_i^j)} \quad (29)$$

mit

$$R(E_k; A_i, A_i^j) = \frac{\sum_{i=1}^{\text{NDETEC}} \frac{\sigma_{i, k-1} \phi_{k-1}^j + \sigma_{ik} \phi_k^j}{2 A_i^j} \ln \left(\frac{A_i^{\text{rand}}}{A_i^j} \right)}{\sum_{i=1}^{\text{NDETEC}} \frac{\sigma_{i, k-1} \phi_{k-1}^j + \sigma_{ik} \phi_k^j}{2 A_i^j}}. \quad (30)$$

Die in Gl. (30) neben den bereits eingeführten Symbolen neu erscheinenden Ausdrücke A_i^{rand} , $i=1$ bis NDETEC, bezeichnen die nach Gl. (32) randomisierten Aktivierungen.

Die Gesamtanzahl J der durchzuführenden Iterationen resultiert aus der Forderung, die Rechnung zu beenden, wenn für sämtliche verwendeten Aktivierungsreaktionen der absolute Betrag der Differenz zwischen der nach Gl. (32) randomisierten Aktivierung A_i^{rand} und der nach Gl. (28) berechneten Aktivierung A_i^j kleiner ist als eine vorgegebene Schranke, die wir zweckmäßigerweise als ein Multiples der Standardabweichung S_i der gemessenen Aktivierung A_i ansetzen:

$$|A_i^{\text{rand}} - A_i^j| < C \cdot S_i \quad \text{für } j=J \text{ und alle } i=1 \text{ bis NDETEC.} \quad (31)$$

In unserem FORTRAN-Rechenprogramm wird die vorstehend beschriebene Iterationsrechnung durch eine ganzzahlige Variable ITER gesteuert, die dem Iterationsindex j in den Gleichungen (27) bis (31) zugeordnet ist, wobei $\max \{ \text{ITER} \} = J$ gilt. Im Sinne der Bemerkungen zu Anfang dieses Kapitels wollen wir einen konvergierenden Iterationszyklus ein "Monte-Carlo-Ereignis" nennen, weil er - von randomisierten Eingabedaten ausgehend - auf eine Realisation des Lösungsspektrums im statistischen Sinne führt. Die einzelnen Monte-Carlo-Ereignisse werden durch den ganzzahligen Zeiger MONTCA gezählt.

Wird das Konvergenzkriterium nach Gl. (31) erfüllt, dann interpretieren wir die errechneten Gruppenflußdichten ϕ_k^J , $k=1$ bis N , als eine spezielle Realisation einer N -dimensionalen Zufallsvariablen, deren Erwartungswerte die prinzipiell unbekannten wahren Gruppenflußdichten des Neutronenspektrums darstellen. Aus einer größeren Anzahl derartiger Realisationen als Ergebnis entsprechender Monte-Carlo-Rechenschritte erhält man nach den Regeln der Statistik die Schätzwerte der Gruppenflußdichten des Lösungsspektrums einschließlich der Schätzwerte ihrer statistischen Fehler, d.h. ihrer Standardabweichungen. Damit hat man neben dem Resultatspektrum auch eine Fehlerangabe für dasselbe in Abhängigkeit von der Neutronenenergie gefunden. Einzelheiten dieser Rechnung können dem Kapitel 7 entnommen werden.

Üblicherweise setzt man bei der Randomisierung physikalischer Observablen Gaußsche Normalverteilungen der Meßfehler an. Diesem Brauche folgend er-

halten wir für die randomisierten Aktivierungen

$$A_i^{\text{rand}} = A_i \left(1 + \frac{R \Delta A_i}{100} \right), \quad i = 1 \text{ bis NDETEC}, \quad (32)$$

für die randomisierten Zahlenwerte der differentiellen Aktivierungsquerschnitte

$$\sigma_{\text{act } i}^k \text{ rand} = \sigma_{\text{act } i}^k \left(1 + \frac{R \Delta \sigma_{\text{act } i}^k}{100} \right), \quad (33)$$

$$i = 1 \text{ bis NDETEC}, \quad k = 1 \text{ bis } N,$$

und für die randomisierten Gruppenflußdichten des Guess-Spektrums

$$\phi_k^{\text{rand}} = \phi_k^{\text{o}} \left(1 + \frac{R \Delta \phi_k^{\text{o}}}{100} \right), \quad k = 1 \text{ bis } N. \quad (34)$$

Hierin bedeuten die A_i , $\sigma_{\text{act } i}^k$ und ϕ_k^{o} die in das Rechenprogramm SAND-MX2 einzugebenden Zahlenwerte für die gemessenen Aktivierungen, die differentiellen Aktivierungsquerschnitte und die Gruppenflußdichten des Guess-Spektrums, ferner die ΔA_i , $\Delta \sigma_{\text{act } i}^k$ und $\Delta \phi_k^{\text{o}}$ die entsprechenden ebenfalls in das Programm SAND-MX2 einzuspeisenden relativen einfachen Standardabweichungen der vorerwähnten Größen in Prozent, während die Variable R die spezielle Realisation einer Gaußschen Normalverteilung mit Mittelwert 0 und Standardabweichung 1 darstellt.

Die A_i^{rand} , $\sigma_{\text{act } i}^k \text{ rand}$ und ϕ_k^{rand} nach den Gleichungen (32), (33) und (34) sind die Eingabedaten für einen bestimmten Monte-Carlo-Rechenschritt, dessen Ergebnis als die zugeordnete Realisation des Lösungsspektrums aufzufassen ist.

Wir betonen, daß bei dieser Randomisierung im Rechenprogramm SAND-MX2 keine Kovarianzen der Eingabedaten berücksichtigt werden. Es wird also der Einfluß irgendwelcher Autokorrelationen innerhalb der Aktivierungen, der differentiellen Aktivierungsquerschnitte und der Gruppenflußdichten des Guess-Spektrums wie auch der Einfluß von Kreuzkorrelationen zwischen diesen Größen auf die Fehlerrechnung vernachlässigt. Dies ist auch der Standpunkt des weiter oben erwähnten Monte-Carlo-Programmes MONTE /19/ zur klassischen SAND-II-Fehleranalyse.

Es ist klar, daß der erhebliche Rechenzeitbedarf für die Monte-Carlo-Rechnung die Neutronenspektrumentfaltung bei gleichzeitiger Ermittlung der Fehlerschranken relativ kostspielig macht. Wesentlich billiger wird es, wenn man auf die Bestimmung der Fehlerschranken verzichtet, also im Programm den Zeiger MONTCA auf Eins beschränkt, wie es in der Praxis zuweilen sinnvoll sein kann. Untersuchungen haben ergeben, daß kein wesentlicher weiterer Gewinn an Genauigkeit des Lösungsspektrums mehr eintritt, wenn die Anzahl der Monte-Carlo-Rechenschritte den Betrag 100 übersteigt. Die Rechenzeit dafür liegt normalerweise zwischen einer halben Stunde und einer Stunde, je nachdem, wie scharf wir die Forderung nach Gl. (31) machen, was auf die spezielle Wahl der Konstanten C hinausläuft. Die Konstante C wiederum sollte Werte zwischen 1, entsprechend einer statistischen Sicherheit von 68,27 %, und 2, entsprechend einer statistischen Sicherheit von 95,45 %, aufweisen. Es ist jedoch sinnlos, die Konstante C wesentlich kleiner als Eins zu machen, weil dann entweder überhaupt kein Lösungsspektrum, für das die Aktivierungen die Bedingung in Gl. (31) erfüllen, gefunden werden kann oder noch vor dem Eintritt dieses Falles die Abweichungen zwischen den randomisierten Aktivierungen A_i^{rand} und den berechneten Aktivierungen A_i^j im Mittel über sämtliche Aktivierungswerte erfahrungsgemäß wieder größer werden.

Ende der Sechziger Jahre kam die Idee auf, eine Vielzahl repräsentativer gerechneter Neutronenspektren sowie gewisse theoretisch nahe gelegte Normspektren, wie z.B. Spaltspektrum, $1/E$ -Spektrum, Maxwell-Spektrum oder eine sinnvolle Kombination derselben, in einer Bibliothek zu vereinigen, aus der sich der Entfaltungs-Code nach einem bestimmten Auswahlkriterium das "beste" dieser Spektren aussucht und der Iterationsrechnung als Guess-Spektrum zugrunde legt. Ausnahmsweise kann dieses Verfahren durchaus sinnvoll sein, wenn die alternativ angebotenen Spektren in irgendeiner Weise eine Relevanz für das bearbeitete Problem haben oder haben könnten. Beispielsweise wäre es vernünftig, das Rechenprogramm zwischen mehreren auf verschiedene Arten berechneten Guess-Spektren einer vorgegebenen Konfiguration oder zwischen Reaktorspektren mit verschiedenen relativen Anteilen von schnellen, epithermischen und thermischen Neutronen wählen zu lassen.

Das Rechenprogramm SAND-MX2 wählt aus einer Bibliothek von Guess-Spektren dasjenige Guess-Spektrum aus, wofür der Ausdruck

$$Q = \frac{\sqrt{\frac{1}{(NDETEC-1)} \sum_{i=1}^{NDETEC} \left(\frac{A_i^{rand}}{A_i^{Guess}} - \frac{1}{NDETEC} \sum_{i=1}^{NDETEC} \frac{A_i^{rand}}{A_i^{Guess}} \right)^2}}{\frac{1}{NDETEC} \sum_{i=1}^{NDETEC} \frac{A_i^{rand}}{A_i^{Guess}}} \quad (35)$$

für $NDETEC \geq 2$

zu einem Minimum wird. Hierin bedeuten neben den bereits eingeführten Symbolen

$$A_i^{Guess} = \int_0^{\infty} \sigma_{act i}(E) \phi_E^{Guess}(E) dE, \quad i = 1 \text{ bis } NDETEC, \quad (36)$$

die mit der spektralen Neutronenflußdichte $\phi_E^{Guess}(E)$ eines der vorhandenen Guess-Spektren berechneten Aktivierungen pro Absorberatom. Da bei dieser Auswahlprozedur jeweils die randomisierten Aktivierungen A_i^{rand} , $i=1$ bis $NDETEC$, zu den auf der Grundlage des Guess-Spektrums berechneten Aktivierungen A_i^{Guess} , $i=1$ bis $NDETEC$, ins Verhältnis gesetzt werden, ist es möglich, daß das Programm in aufeinander folgenden Monte-Carlo-Rechenschritten jeweils verschiedene Guess-Spektren als optimal ansieht und dementsprechend auswählt, hinreichende Ähnlichkeit derselben vorausgesetzt. Möglicherweise ergeben sich also definierte Häufigkeiten, mit denen verschiedene gegebene Guess-Spektren während eines Laufes des Rechenprogrammes SAND-MX2 ausgewählt wurden. Da diese Häufigkeiten eine Bedeutung für die Beurteilung des Entfaltungsresultates haben können, werden sie auf der Ergebnisliste mit ausgegeben (siehe Punkt 8 in Tabelle 4).

6 BIBLIOTHEKEN DER EINGABEDATEN

6.1 Energiegruppenstruktur

Bei Neutronenspektrumentfaltungen mit dem Rechenprogramm SAND-MX2 wird die Energiegruppenstruktur der SAND-II-Library /1/ verwendet. Sie enthält 620 Gruppen, also - einschließlich des ersten und des letzten Rasterpunktes - 621 Gruppengrenzen. Die unteren Gruppengrenzen der ersten und letzten Gruppe liegen bei resp. $1,0 \cdot 10^{-10}$ MeV und 17,9 MeV, die obere Gruppengrenze der letzten Gruppe bei 18,0 MeV. Im Bereich zwischen $1,0 \cdot 10^{-10}$ MeV und 1,0 MeV entfallen auf die Energiedekade je 45 Gruppen variabler Breite. Das Gebiet zwischen 1,0 MeV und 18,0 MeV wird von insgesamt 170 Gruppen einheitlicher Breite abgedeckt, die alsdann 0,1 MeV beträgt.

6.2 Bibliothek der differentiellen Aktivierungsquerschnitte

Die zur Berechnung der Aktivierungen pro Absorberatom A_i nach Gl. (1) erforderlichen differentiellen Aktivierungsquerschnitte $\sigma_{\text{act } i}(E)$, $i=1$ bis NDETEC, werden einer Cross-Section-Library von insgesamt NSIGMA verschiedenen differentiellen Wirkungsquerschnitten entnommen, wobei offenbar $\text{NSIGMA} \geq \text{NDETEC}$ sein muß. Diese Bibliothek ist gemischten Ursprunges, d.h. sie enthält differentielle Aktivierungsquerschnitte aus den Libraries CCC 112 B /33/ und ENDF/B-IV /34/. Gegenwärtig hat NSIGMA den Wert 33.

6.3 Bibliothek der Guess-Spektren

Grundstein dieser Bibliothek war die ursprüngliche SAND-II-Spectrum-Library in Band 4 von /1/. Dieselbe enthält 59 Guess-Spektren verschiedenster Provenienz: Spaltspektren, Fusionsspektren, Normspektren definierter Zusammensetzung im schnellen, epithermischen und thermischen Energiebereich, gerechnete Reaktorspektren in diesen Bereichen u.a.m. Weitere Guess-Spektren wurden von uns hinzugefügt. Gegenwärtig umfaßt die Sammlung NSPEK = 119 verschiedene Guess-Spektren.

7 PROGRAMMABLAUF

In Bild 4 ist das Flußschema des Rechenprogrammes SAND-MX2 dargestellt. Wir geben dazu einige Erläuterungen.

Der ganzzahlige Parameter MONTCA steuert die Monte-Carlo-Rechnung und zählt gleichzeitig die einzelnen Monte-Carlo-Ereignisse. Nach dem Ablauf eines bestimmten Monte-Carlo-Ereignisses, d.h. des zugehörigen konvergenten Iterationszyklus, werden die neuen Partialsummen der Gruppenflußdichten, der Gruppenflußdichtenquadrate und der auf der Basis des Lösungsspektrums gerechneten Aktivierungen durch Hinzufügen der gerade erhaltenen Ergebniswerte zu den alten Partialsummen berechnet, wie dies im rechten oberen Kasten angedeutet ist. Nach der Terminierung der Monte-Carlo-Rechnung durch die Rechenzeitbegrenzung¹⁾ werden die Partialsummen der Gruppenflußdichten und der gerechneten Aktivierungen durch den aktuellen Wert von MONTCA dividiert und die resultierenden Mittelwerte der Gruppenflußdichten

$$\bar{\phi}_k = \frac{1}{\text{MONTCA}} \sum_{j=1}^{\text{MONTCA}} \phi_k^j, \quad k = 1 \text{ bis } N, \quad (37)$$

und der gerechneten Aktivierungen

$$\bar{A}_i = \frac{1}{\text{MONTCA}} \sum_{j=1}^{\text{MONTCA}} A_i^j, \quad i = 1 \text{ bis } \text{NDETEC}, \quad (38)$$

sowie die Schätzwerte der einfachen Standardabweichungen der Gruppenflußdichten

¹⁾ Diese Option für die Job-Beendigung ist regulär vorgesehen. Es kann unter Umständen sinnvoll sein, statt dessen durch eine geeignete Programmanweisung die Anzahl der durchgerechneten Monte-Carlo-Ereignisse MONTCA zu begrenzen.

$$\Delta\phi_k = \sqrt{\frac{\sum_{j=1}^{\text{MONTCA}} (\phi_k^j)^2 - \frac{1}{\text{MONTCA}} \left(\sum_{j=1}^{\text{MONTCA}} \phi_k^j \right)^2}{\text{MONTCA}-1}}, \quad (39)$$

$k = 1 \text{ bis } N,$

berechnet und ausgegeben. Man beachte, daß in den Gleichungen (37) bis (39) der Index j die verschiedenen Monte-Carlo-Ereignisse numeriert, abweichend vom Kapitel 5, wo er die verschiedenen Iterationen kennzeichnete. Der Iterationsindex tritt im Ergebnis nach den Gleichungen (37) bis (39) nicht mehr in Erscheinung.

Der ganzzahlige Parameter ITER steuert die Iterationsrechnung mit der essentiellen Operation $\phi^{\text{neu}} = \text{Gewichtsfaktor } W * \phi^{\text{alt}}$ nach Gl. (27) und zählt gleichzeitig die einzelnen Iterationsschritte. ITER wird jeweils um Eins solange erhöht, bis entweder die Konvergenz der Lösung im Sinne der Formel (31) erreicht ist, worauf nach der oben genannten Bildung der neuen Partialsummen der Gruppenflußdichten, der Gruppenflußdichtenquadrate und der gerechneten Aktivierungen zum nächsten Monte-Carlo-Ereignis übergegangen wird, oder bis ITER einen begrenzenden Wert IAUS, der im Rechenprogramm SAND-MX2 zwischen 40 und 60 liegt, überschritten hat. Im letzteren Fall wird der nicht konvergierende Iterationszyklus verworfen.

Der ganzzahlige Parameter NSPEK hat eine Steuerfunktion für die Wahl des Guess-Spektrums. NSPEK=1 ist zu setzen, wenn für die Entfaltung ein apriori definiertes Guess-Spektrum benutzt werden soll. Die erstmalige Berechnung der Aktivierungen nach Gl. (1) erfolgt dann mit Hilfe dieses spezifizierten Guess-Spektrums. Für NSPEK>1 gibt dieser Parameter die Anzahl der in einer Bibliothek vorhandenen Guess-Spektren an, unter denen das Rechenprogramm das beste nach dem in Kapitel 5 (S. 43) genannten Kriterium aussucht und der erstmaligen Aktivierungsrechnung zugrundelegt.

Der reelle Parameter ENDE steuert die in programmtechnischer Hinsicht ordnungsgemäße Beendigung des Rechenablaufes innerhalb der zur Verfügung stehenden Rechenzeit. Die Zeitspanne ENDE wird durch den Aufruf des Bibliotheksprogrammes FRIST (ENDE) abgefragt und stellt die Differenz zwischen der für den Rechen-Job vorgegebenen Gesamt-Rechenzeit und der seit Rechenstart bis zum Aufruf dieses Programmes verstrichenen Zeitdauer in

Tausendstel Sekunden dar. ENDE ist also die zum Zeitpunkt des Aufrufes von FRIST noch zur Verfügung stehende Rechenzeit. Ist ENDE größer als eine definierte Zeitspanne ITIME, die sich als Summe der für einen Iterationszyklus maximal gebrauchten Rechenzeit und der für die Ausgabe der Rechenergebnisse benötigten Zeitdauer ergibt, so wird mit der Setzung $ITER = 0$ ein weiterer Iterationszyklus gestartet, anderenfalls erfolgt nach konsequenter Verminderung von MONTCA um Eins (Rückgängigmachen der noch vor dem Beginn des Iterationszyklus vorgenommenen MONTCA-Erhöhung) die Ausgabe des bisher erarbeiteten Resultates in Gestalt des Lösungsspektrums einschließlich seiner Fehlerschranken und der auf der Grundlage desselben berechneten Aktivierungen. Gegenwärtig wird mit einem aus der Erfahrung abgeleiteten Wert für ITIME von 60 Sekunden gearbeitet.

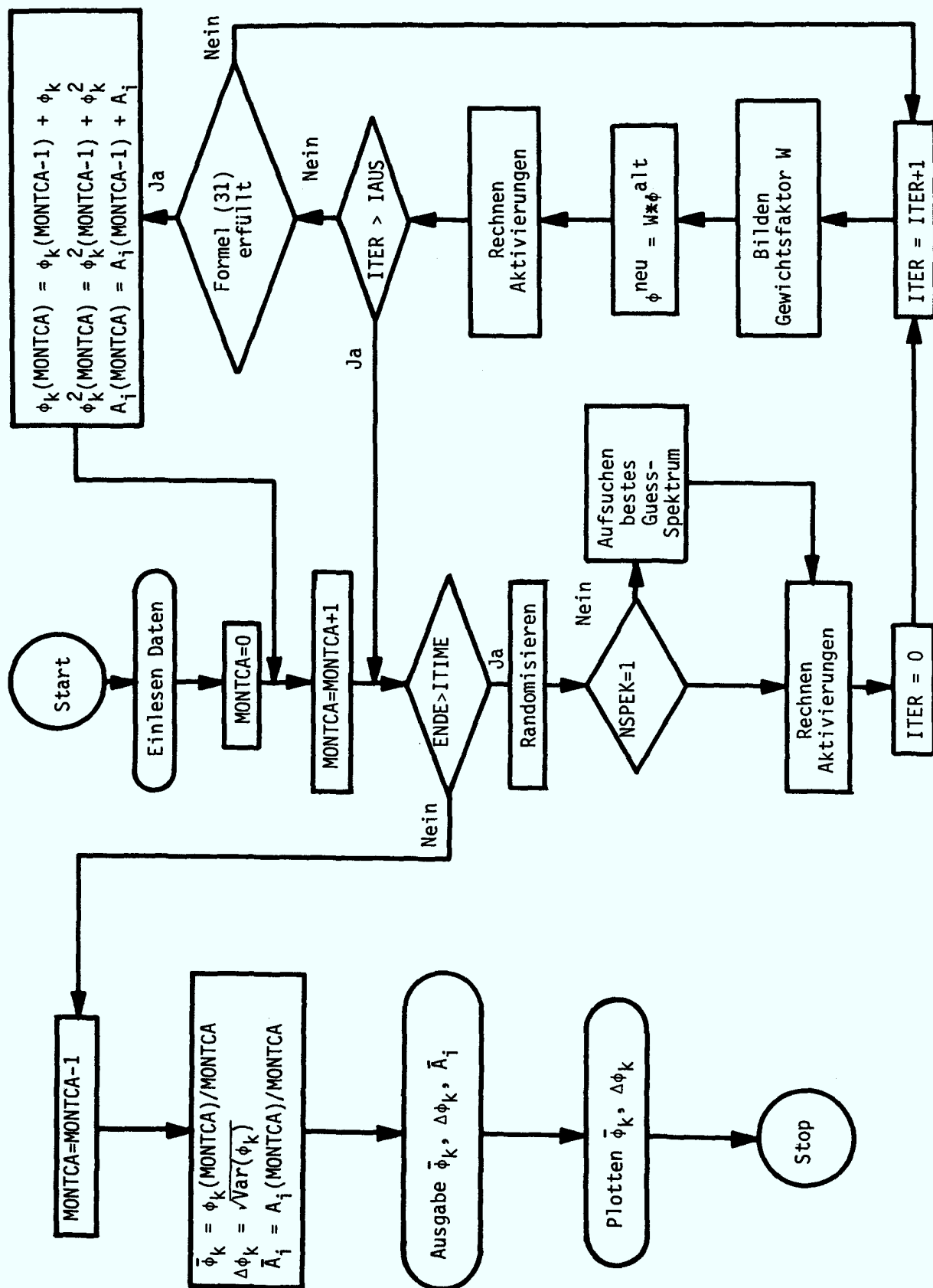


Bild 4: Flußschema des Rechenprogrammes SAND-MX2

8 BESCHREIBUNG DES HAUPTPROGRAMMS UND DER UNTERPROGRAMME

8.1 Das Hauptprogramm

Das Hauptprogramm steuert den Programmablauf nach dem Flußschema in Bild 4 und bewirkt nacheinander die folgenden Operationen:

- 1) Einlesen der Eingabedaten durch den Aufruf von INPUT,
- 2) Setzen der Anfangswerte für die Randomisierung der Eingabedaten,
- 3) Steuerung des zeitlichen Ablaufes durch den Aufruf von FRIST,
- 4) Suchen des besten Guess-Spektrums und Randomisieren durch den Aufruf von SUCRAN,
- 5) Berechnung der Aktivierungen durch den Aufruf von AKTIV,
- 6) Berechnung des Gewichtungsfaktors W nach Formel (29) im Anschluß an den Aufruf von RELAKT,
- 7) Durchführung der Iterationsrechnung nach Kapitel 5,
- 8) Datenausgabe auf Liste und Lochkarten und
- 9) Plotten des Lösungsspektrums und seiner Fehlerschranken durch den Aufruf von PLOTT.

8.2 Das Unterprogramm INPUT

Im Unterprogramm INPUT werden in der Regel die erforderlichen Datenbibliotheken von Magnetband und die entfaltungsspezifischen Meßwerte über Lochkarten eingelesen. Häufig erweist es sich als günstig oder notwendig, fehlende Guess-Spektren oder differentielle Aktivierungsquerschnitte ebenfalls über Lochkarten einzulesen. Die benötigten Eingabeformate sind dem Kapitel 9 zu entnehmen.

8.3 Das Unterprogramm AKTIV

Das Unterprogramm AKTIV berechnet in der gewählten Energiegruppenstruktur der SAND-II-Library auf der Grundlage der Gruppenflußdichten des Guess-Spektrums ϕ_k^0 bzw. des j -ten Iterationsspektrums ϕ_k^j , $j=1$ bis J (J = Gesamtanzahl der Iterationen) die aus dem Energieintervall ΔE_k stammenden Aktivierungen

$$\Delta A_{ik}^j = \sigma_{ik} \phi_k^j, \quad (40)$$

ferner die Gesamtaktivierungen

$$A_i^j = \sum_{k=1}^{620} \Delta A_{ik}^j = \sum_{k=1}^{620} \sigma_{ik} \phi_k^j, \quad (41)$$

$i = 1$ bis NDETEC, $j = 0$ bis J , $k = 1$ bis 620.

Diese Größen sind die Eingabedaten für das Unterprogramm RELAKT, die A_i^j werden außerdem direkt für die Berechnung der Gewichtungsfaktoren $W_j(E_k; A_i, A_i^j)$ nach Gl. (29), ferner zur Realisierung des Konvergenzkriteriums nach Gl. (31) und zur Bildung der gemittelten Aktivierungen nach Gl. (38) benötigt.

Die σ_{ik} in Gl. (41) sind durch Gl. (12) definiert. Zur Berechnung der Integrale in Gl. (12) wird der Integrand $\sigma_{act\ i}(E)$ in den einzelnen Energiegruppen der SAND-II-Library ΔE_k , $k=1$ bis 620, als ein Newtonsches Interpolationspolynom mit vier Stützstellen E_1, E_2, E_3 und E_4 dargestellt,

$$\sigma_{act\ i}(E) = G_0 + G_1(E-E_1) + G_2(E-E_1)(E-E_2) + G_3(E-E_1)(E-E_2)(E-E_3), \quad (42)$$

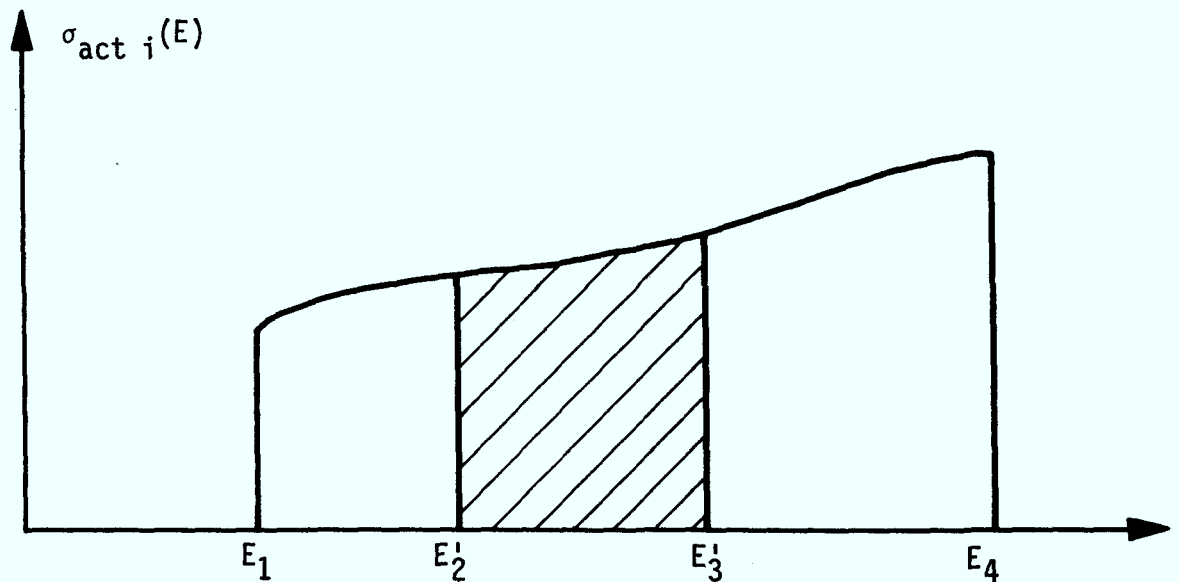


Bild 5: Schema für die abschnittsweise Integration von $\sigma_{act\ i}(E)$ nach einem Newtonschen Interpolationspolynom mit 4 Stützstellen

wobei die abschnittsweise Integration, wie in Bild 5 gezeigt ist, jeweils zwischen zwei im Bereichsinneren liegenden Grenzen E_2^j und E_3^j ausgeführt wird, die in der Nähe der Stützstellen E_2 bzw. E_3 liegen¹⁾. Eine besondere Behandlung müssen die absoluten rechten und linken Endpunkte des Energierasters erfahren. Die Ausdrücke für die Koeffizienten G_0 , G_1 , G_2 und G_3 kann man z.B. bei /35/ finden.

8.4 Das Unterprogramm RELAKT

Das Unterprogramm RELAKT berechnet aus den durch AKTIV ermittelten Größen ΔA_{ik}^j und A_i^j die relativen Aktivierungen

$$A_{rel\ i1}^j = \frac{\Delta A_{i1}^j}{A_i^j} \text{ und } A_{rel\ ik}^j = \frac{\Delta A_{ik}^j}{2 \cdot A_i^j}, \quad (43)$$

$i = 1$ bis NDETEC, $j = 0$ bis J-1, $k = 2$ bis 620.

Diese Größen werden für die Berechnung der Gewichtungsfaktoren $W_j(E_k; A_i, A_i^j)$ nach Gl. (29) benötigt. Dem Aufruf des Unterprogrammes RELAKT muß der Aufruf des Unterprogrammes AKTIV vorangehen.

8.5 Das Unterprogramm SUCRAN

Dem Unterprogramm SUCRAN (Suchen und Randomisieren) fallen zwei Aufgaben zu,

- 1) für NSPEK>1 die Auswahl des besten Guess-Spektrums, d.h. desjenigen Guess-Spektrums, für das der Ausdruck Q nach Gl. (35) zu einem Minimum wird, und
- 2) die Randomisierung der Eingabedaten nach den Gleichungen (32) bis (34).

Die für Punkt 2 erforderlichen Unsicherheitsbeträge werden mit einer einzigen Ausnahme über das Unterprogramm INPUT eingelesen. Die Ausnahme sind die Fehler der Gruppenflußdichten des Guess-Spektrums, für die in der Regel keine Angaben vorliegen. Wir haben deshalb programm-intern die relativen Standardabweichungen der Gruppenflußdichten des Guess-Spektrums konstant über den ganzen Energiebereich mit 10 % festgesetzt. Sind ausnahmsweise die Feh-

¹⁾ Näheres siehe Programmliste für SAND-MX2 im Anhang B dieses Berichtes.

ler des Guess-Spektrums bekannt, so können sie durch geeignete Anweisungen im Unterprogramm INPUT eingelesen werden.

Im Unterprogramm SUCRAN wird einmal das Unterprogramm AKTIV zur Berechnung der für die Bildung des Ausdruckes Q nach Gl. (35) benötigten Aktivierungen und je einmal das Unterprogramm RANDN zur Bereitstellung einer Realisation R der $(0,1)$ -Normalverteilung für die Randomisierung der Aktivierungen, der differentiellen Aktivierungsquerschnitte und der Gruppenflußdichten des Guess-Spektrums nach den Gleichungen (32) bis (34) aufgerufen.

8.6 Die Unterprogramme PLOTT, MAXIM, XYLIN, XYLOG, ACHSEX und SHRIFT

Das Unterprogramm PLOTT bewirkt die graphische Darstellung des Lösungsspektrums einschließlich seiner Fehlerschranken durch den CALCOMP-Plotter. Dazu muß es im Hauptprogramm mehrfach aufgerufen werden. Das erste von zwei dadurch erzeugten Bildern zeigt die Gruppenflußdichten und ihre eingezeichneten einfachen Standardabweichungen in Abhängigkeit von der Neutronenenergie. Im zweiten Bild sind die differentiellen Flußdichtewerte, die aus den Gruppenflußdichten vermöge Division durch die Intervallbreiten hervorgehen, gegen die Neutronenenergie aufgetragen.

Die weiteren hier genannten Unterprogramme werden von PLOTT aufgerufen. Die zahlreichen Kommentare in der Programmliste im Anhang dieses Berichtes ersparen uns hier weitere Erklärungen.

8.7 Das Unterprogramm RANDN

Das Unterprogramm RANDN ($I, S1, S0, R$) liefert bei seinem Aufruf für einen Anfangswert I eine Realisation R der Normalverteilung mit Mittelwert $S0$ und Standardabweichung $S1$ zwischen den Schranken $S0 - 6,0 \cdot S1$ und $S0 + 6,0 \cdot S1$. Im Programm wird $S0$ gleich Null und $S1$ gleich Eins gesetzt, während I grundsätzlich eine ungerade ganze Zahl sein muß. R variiert also dann zwischen $-6,0$ und $+6,0$. Das Unterprogramm RANDN ruft das Bibliotheksprogramm RANDUX zur Erzeugung gleichverteilter Gleitkommazahlen zwischen Null und Eins auf. Das Bibliotheksprogramm RANDUX wird anstelle des früher üblichen, jedoch heute nicht mehr empfohlenen Bibliotheksprogrammes RANDU verwendet.

9 EINGABE UND AUSGABE

Das Programm SAND-MX2 hat zwei Dateneingangskanäle,

- E1) Datei-Nummer 14: Magnetbandeinheit,
 - E2) Datei-Nummer 5: Lochkartenleser,
- und drei Datenausgangskanäle,
- A1) Datei-Nummer 6: Schnelldrucker,
 - A2) Datei-Nummer 7: Lochkartenstanze,
 - A3) Datei-Nummer 8: CALCOMP-Plotter.

9.1 Eingabe

Über die Magnetbandeinheit wird ein Magnetband eingelesen, dessen Datenbelegung aus Tabelle 2 hervorgeht. Auf der rechten Seite ist in Klammern das Format angegeben.

Während dieses Magnetband nur in größeren Zeitabständen durch Neubeschreibung aktualisiert wird, stehen die eine spezielle Entfaltung charakterisierenden Meßwerte auf Lochkarten. In Tabelle 3 werden diese Daten aufgelistet, wobei die verwendeten Variablennamen ihre Erklärung in der Symboltabelle im Anhang A finden. Jede Zeile stellt den Inhalt einer Lochkarte dar. Die angegebene Reihenfolge entspricht der Einleseprozedur im Unterprogramm INPUT. In Klammern ist das Format angegeben.

Abweichend von dem vorstehend beschriebenen Schema der Dateneingabe kann es sinnvoll oder notwendig sein, benötigte differentielle Aktivierungsquerschnitte oder Guess-Spektren über Lochkarten durch geeignete Anweisungen im Unterprogramm INPUT einzulesen.

Tabelle 2
Daten auf Magnetband

Energiegruppengrenzen in MeV	(7E10.3)
Erster Material- und Reaktions-Code ¹⁾	(2A8)
.	.
.	.
NSIGMA-ter Material- und Reaktions-Code ^{1),2)}	(2A8)
Erster Material- und Reaktions-Code ¹⁾	(2A8)
Erster Aktivierungsquerschnitt, Zahlenwerte in Barn	(7E10.4)
Oberschrift Standardabweichung erste Reaktion	(2A8)
Standardabweichung erste Reaktion, Zahlenwerte in % ³⁾	(20F4.1)
.	.
.	.
NSIGMA-ter Material- und Reaktions-Code ^{1),2)}	(2A8)
NSIGMA-ter Aktivierungsquerschn., Zahlenwerte in Barn ²⁾	(7E10.4)
Oberschrift Standardabweichung NSIGMA-te Reaktion ²⁾	(2A8)
Standardabw. NSIGMA-te Reaktion, Zahlenwerte in % ^{2),3)}	(20F4.1)
Name des ersten Guess-Spektrums	(10A8)
Erstes Guess-Spektrum, Zahlenw. in bel. Einheiten ⁴⁾	('FLUX',7E10.3)
.	.
.	.
Name des NSPEK-ten Guess-Spektrums ⁵⁾	(10A8)
NSPEK-tes Spektrum, Zahlenw. in bel. Einheiten ^{4),5)}	('FLUX',7E10.3)

1) *FORTTRANisierter Name entsprechend Spalte 1 in Tabelle 1,*
z.B. *CO_b59_b(N,G)*

2) *Gegenwärtig NSIGMA=33*

3) *Nach SAND-II-Evaluated Error File /36/*

4) *Differentielle Flußdichtewerte, keine Gruppenflußdichten!*

5) *Gegenwärtig NSPEK=119*

Tabelle 3
Daten auf Lochkarten

```

SIGN,MCARD,MLIST (F6.1,2(2X,I2))
NGUESS,NPHI3)(I3,3X,I3)
XTEXT (10A8)
YTEXT (10A8)
ZTEXT (10A8)
NDETEC (I2)
A(1,1),A(1,2),KZ(1)1),KABS(1),COVER(1)2)
(F3.0,E12.5,2X,I2,2X,E12.5,2X,A2)
REKA(1,1),REKA(1,2) (2A8)
      .
A(NDETEC,1)A(NDETEC,2),KZ(NDETEC)1),KABS(NDETEC),COVER(NDETEC)2)
(F3.0,E12.5,2X,I2,2X,E12.5,2X,A2)
REKA(NDETEC,1),REKA(NDETEC,2) (2A8)
NEG (I3)
EG(1) (E8.2)
      .
      .
      .
EG(NEG) (E8.2)

```

1) Bereichszeiger KZ=1:

Sonde unter thermischer Absorberfolie, Nullsetzung des differentiellen Aktivierungsquerschnittes unterhalb der Abschneideenergie E_g (für Gadolinium 0,1 eV resp. 136.Energiegruppe, für Cadmium 0,5 eV resp. 166.Energiegruppe).

Bereichszeiger KZ≠1:

Sonde nackt, keine Nullsetzung des differentiellen Aktivierungsquerschnittes unterhalb von E_g .

2) COVER(I)='NO','GD' bzw. 'CD' bedeuten Detektor nackt, unter Gadolinium bzw. unter Cadmium.

3) NPHI > 0:

Vorgabe eines definierten Guess-Spektrums mit der Nummer NPHI.

NPHI ≤ 0:

Programm wählt „bestes“ Guess-Spektrum der Bibliothek.

9.2 Ausgabe

Konnte innerhalb einer gegebenen Recheniteration wegen der Überschreitung der maximalen Iterationsanzahl IAUS keine Lösung gefunden werden, so erscheint als Erstes auf der Schnelldruckerliste eine entsprechende Meldung unter Angabe der vorhergehenden Monte-Carlo-Ereignisnummer. Anschließend wird das aus den konvergierenden Iterationszyklen gewonnene Resultat gemäß der folgenden Tabelle 4 auf Schnelldruckerliste ausgedruckt.

Die Ausgabe der differentiellen Flußdichtewerte des Lösungsspektrums auf Lochkarten erfolgt im Format 'FLUX',1P7E10.3. Jede ausgestanzte Lochkarte trägt damit in den ersten Stellen die Kennzeichnung "FLUX" und sieben konsekutiv aufeinander folgende Flußdichtewerte. Das gesamte Neutronenspektrum in der Energiegruppenstruktur der SAND-II-Library mit seinen 620 Zahlenwerten steht also auf 89 Lochkarten, wobei die letzte Lochkarte nur vier Zahlenwerte enthält. Die Lochkarten sind damit im klassischen Format der SAND-II-Spectrum-Library beschrieben.

Die CALCOMP-Plotts des Lösungsspektrums werden in bilogarithmischer Achsen-einteilung erstellt. Abweichend von der Darstellung der Gruppenflußdichten mit Standardabweichungen ist bei der Darstellung der differentiellen Flußdichtewerte das Produkt $E \cdot \phi_E(E) = \phi_u(u)$ von Neutronenenergie und Lösungsfunktion aufgetragen. Diese Repräsentation in Einheiten der Lethargie u läßt besonders augenfällig die relativen Anteile der thermischen, epithermischen und schnellen Neutronen erkennen.

Tabelle 4

Resultat der Neutronenspektrumentfaltung
auf Schnelldruckerliste

- 1) Ein die Entfaltung charakterisierender Text
- 2) Gemessene und berechnete Aktivierungen sowie die prozentualen relativen Abweichungen der berechneten von den gemessenen Aktivierungen, bezogen auf die gemessenen Aktivierungen, ferner die einfachen relativen Standardabweichungen der gemessenen Aktivierungen in Prozent.
- 3) Die Größe DELTA nach Gl. (57) in Kapitel 12
- 4) Benutzte Selbstabschirmungs-Korrekturfaktoren
- 5) Maximale Iterationsanzahl IAUS
- 6) Multiplizitätsfaktor C in Gl. (31)
- 7) Anzahl der gerechneten "Monte-Carlo-Ereignisse"
- 8) Das mit "EINGANGSNÄHERUNGEN" gekennzeichnete Feld START(I), dessen I-te Komponente angibt, wie oft das I-te Guess-Spektrum verwendet wurde. Für NSPEK = 1 ist nur START(1) $\neq$ 0.
- 9) Nummer NGUESS des verwendeten Bezugsspektrums
- 10) Nummer NPHI des verwendeten Guess-Spektrums, nur für NSPEK = 1
- 11) Absolute Werte ($\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1} \text{MeV}^{-1}$) (Kennzeichnung: "PHI") und auf das Bezugsspektrum mit der Nummer NGUESS bezogene relative Werte der differentiellen Neutronenflußdichte des Lösungsspektrums (Kennzeichnung: "PHI/PHIO")¹⁾ sowie deren einfache relative Standardabweichungen in Prozent (Kennzeichnung: "SIGMA")
- 12) Energieintegrale Neutronenflußdichten ($\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$) im Lösungsspektrum oberhalb definierter Energieschwellen (MeV) (Kennzeichnung: "INT.FLUSS")
- 13) Verhältnis zwischen den energieintegralen Neutronenflußdichten oberhalb 0,1 MeV und 1 MeV im Lösungsspektrum
- 14) Mittelwert der Neutronenenergie über das Lösungsspektrum (MeV)

1) Gegebenenfalls ist in gewissen Energiebereichen das Bezugsspektrum identisch Null, bei verschwindendem oder nicht verschwindendem Lösungsspektrum. Der Quotient PHI/PHIO verliert dann seinen Sinn. Das Programm bewirkt in diesem Fall den Ausdruck von Sternen für diese Größe, wie in den letzten 15 Energiegruppen des gewählten Beispiels in Kapitel 10 (S.63) des Berichtes.

10 EIN BEISPIEL

Die folgenden Seiten enthalten die Liste und die Plotts eines SAND-MX2-Lösungsspektrums unter Gadolinium in aufgebohrten Charpy-V-Notch-Proben einer simulierten Druckbehälterwand (Pressure Vessel Mockup) in der Pool Side Facility des Oak Ridge Research Reactors (ORR). Die mit Sonden beladenen Charpy-Dummies lagen am Rande der in einer Überwachungsposition (Surveillance Position SSC-1) befindlichen metallurgischen Kapsel. Die Entfaltung erfolgte im Rahmen der KFA-ZBB-Beteiligung an Bestrahlungen des Internationalen Stahl-Dosimetrie-Programmes (LWR Pressure Vessel Surveillance Dosimetry Improvement Program, LWR-PVSDIP) der US NRC /37/. Als Guess-Spektrum wurde eine mit dem eindimensionalen Transport-Code ANISN gerechnete Spektralverteilung verwendet /38/. Die Resonanzen im unteren schnellen und oberen epithermischen Energiebereich rühren von der inelastischen Neutronenstreuung am Eisen her. Sie sind das Ergebnis der Rechnung und werden wegen der ungenügenden Energieauflösung des Entfaltungsverfahrens kaum modifiziert. Die für die Akkumulierung der 131 Monte-Carlo-Ereignisse auf der IBM 3033 U08 des Zentralinstitutes für Angewandte Mathematik der KFA benötigte Rechenzeit betrug 22 Minuten und liegt damit an der unteren Grenze des nach der Erfahrung gegebenen Bereiches möglicher benötigter Rechenzeiten, was auf eine gute Verträglichkeit zwischen Guess-Spektrum und gemessenen Aktivierungen in diesem Beispiel hindeutet.

JUELICH.DEN 6. 1.1983

*** SAND-MX2 ***

WEGEN UEBERSCHREITUNG DER MAXIMALEN ITERATIONSZAHL KEINE LOESUNG GEFUNDEN
VORHERGEHENDE ERZEIGNISNUMMER = 2

WEGEN UEBERSCHREITUNG DER MAXIMALEN ITERATIONSZAHL KEINE LOESUNG GEFUNDEN
VORHERGEHENDE ERZEIGNISNUMMER = 6

WEGEN UEBERSCHREITUNG DER MAXIMALEN ITERATIONSZAHL KEINE LOESUNG GEFUNDEN
VORHERGEHENDE ERZEIGNISNUMMER = 30

WEGEN UEBERSCHREITUNG DER MAXIMALEN ITERATIONSZAHL KEINE LOESUNG GEFUNDEN
VORHERGEHENDE ERZEIGNISNUMMER = 32

WEGEN UEBERSCHREITUNG DER MAXIMALEN ITERATIONSZAHL KEINE LOESUNG GEFUNDEN
VORHERGEHENDE ERZEIGNISNUMMER = 32

WEGEN UEBERSCHREITUNG DER MAXIMALEN ITERATIONSZAHL KEINE LOESUNG GEFUNDEN
VORHERGEHENDE ERZEIGNISNUMMER = 52

WEGEN UEBERSCHREITUNG DER MAXIMALEN ITERATIONSZAHL KEINE LOESUNG GEFUNDEN
VORHERGEHENDE ERZEIGNISNUMMER = 62

WEGEN UEBERSCHREITUNG DER MAXIMALEN ITERATIONSZAHL KEINE LOESUNG GEFUNDEN
VORHERGEHENDE ERZEIGNISNUMMER = 62

WEGEN UEBERSCHREITUNG DER MAXIMALEN ITERATIONSZAHL KEINE LOESUNG GEFUNDEN
VORHERGEHENDE ERZEIGNISNUMMER = 62

WEGEN UEBERSCHREITUNG DER MAXIMALEN ITERATIONSZAHL KEINE LOESUNG GEFUNDEN
VORHERGEHENDE ERZEIGNISNUMMER = 83

WEGEN UEBERSCHREITUNG DER MAXIMALEN ITERATIONSZAHL KEINE LOESUNG GEFUNDEN
VORHERGEHENDE ERZEIGNISNUMMER = 91

WEGEN UEBERSCHREITUNG DER MAXIMALEN ITERATIONSZAHL KEINE LOESUNG GEFUNDEN
VORHERGEHENDE ERZEIGNISNUMMER = 109

WEGEN UEBERSCHREITUNG DER MAXIMALEN ITERATIONSZAHL KEINE LOESUNG GEFUNDEN
VORHERGEHENDE ERZEIGNISNUMMER = 129

MIT ABWEICHUNGEN VOM GUESS-SPEKTRUM NR. 115
VERWENDETES GUESS-SPEKTRUM NR. 115

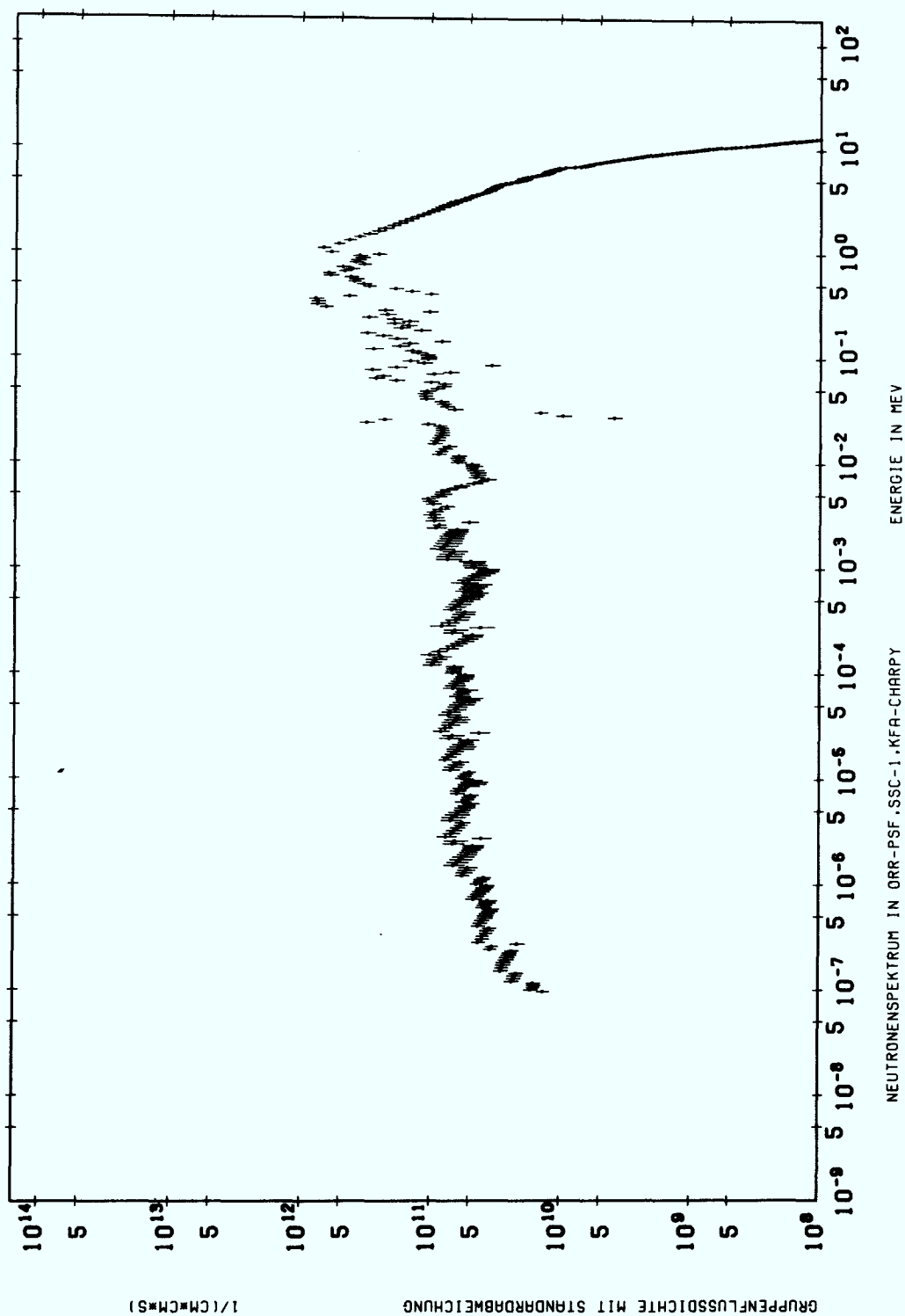
E (MEV)	PHI	SIGMA	PHI/PHIO	E (MEV)	PHI	SIGMA	PHI/PHIO	E (MEV)	PHI	SIGMA	PHI/PHIO
1.0000-10	0.0	0.0	0.0	4.2500-06	2.7060+17	21.8	9.9740-01	1.6000-01	2.3500+13	15.2	9.1820-01
1.0500-10	0.0	0.0	0.0	4.5000-06	2.5280+17	21.9	9.8040-01	1.7000-01	3.1120+13	14.5	9.0810-01
1.1000-10	0.0	0.0	0.0	4.7500-06	2.4520+17	18.1	9.9900-01	1.8000-01	1.1900+13	15.9	9.1210-01
1.1500-10	0.0	0.0	0.0	5.0000-06	2.2820+17	15.3	9.7400-01	1.9000-01	1.7020+13	15.1	9.1820-01
1.2000-10	0.0	0.0	0.0	5.2500-06	2.2010+17	18.4	9.8220-01	2.0000-01	1.5020+13	14.3	9.2640-01
1.2500-10	0.0	0.0	0.0	5.5000-06	2.1110+17	15.9	9.8220-01	2.1000-01	1.9140+13	16.3	9.2770-01
1.3000-10	0.0	0.0	0.0	5.7500-06	1.9520+17	15.1	9.4610-01	2.2000-01	1.4740+13	15.3	9.3890-01
1.3500-10	0.0	0.0	0.0	6.0000-06	1.8730+17	14.2	9.4380-01	2.3000-01	1.9400+13	14.2	9.3450-01
1.4000-10	0.0	0.0	0.0	6.3000-06	1.7280+17	12.4	9.1050-01	2.4000-01	2.0110+13	14.5	9.4510-01
1.4500-10	0.0	0.0	0.0	6.6000-06	1.6880+17	12.8	9.2840-01	2.5500-01	1.4530+13	14.7	9.3730-01
1.5000-10	0.0	0.0	0.0	6.9000-06	1.6230+17	13.4	9.2920-01	2.7000-01	1.0250+13	14.1	9.3070-01
1.5500-10	0.0	0.0	0.0	7.2000-06	1.5560+17	12.7	9.2680-01	2.8000-01	1.1330+13	13.8	9.7000-01
1.6000-10	0.0	0.0	0.0	7.5000-06	1.5280+17	14.3	9.5710-01	3.0000-01	3.2730+13	12.1	9.6570-01
1.6500-10	0.0	0.0	0.0	7.8000-06	1.4810+17	13.1	9.7220-01	3.2000-01	3.8660+13	13.4	1.0010+00
1.7000-10	0.0	0.0	0.0	8.1000-06	1.2760+17	13.3	8.7720-01	3.4000-01	3.8270+13	12.7	9.9090-01
1.7500-10	0.0	0.0	0.0	8.4000-06	1.2230+17	25.1	8.7760-01	3.6000-01	3.9670+13	13.6	1.0270+00
1.8000-10	0.0	0.0	0.0	8.7000-06	1.1710+17	24.1	8.7620-01	3.8000-01	2.1700+13	12.6	1.0530+00
1.8500-10	0.0	0.0	0.0	9.0000-06	1.1740+17	16.7	9.1420-01	4.0000-01	4.0450+12	12.2	1.0690+00
1.9000-10	0.0	0.0	0.0	9.3000-06	1.1290+17	13.6	9.1340-01	4.2500-01	5.7010+12	13.2	1.1070+00
1.9500-10	0.0	0.0	0.0	1.0000-05	1.0930+17	12.6	9.2510-01	4.5000-01	7.5600+12	12.9	1.1270+00
2.0000-10	0.0	0.0	0.0	1.0500-05	1.0560+17	11.7	9.3340-01	4.7500-01	1.2110+13	11.8	1.1330+00
2.0500-10	0.0	0.0	0.0	1.1000-05	9.9640+16	11.7	9.1790-01	5.0000-01	1.3430+13	15.4	1.1360+00
2.1000-10	0.0	0.0	0.0	1.1500-05	9.3030+16	15.6	8.9180-01	5.2500-01	1.5860+13	11.6	1.1570+00
2.1500-10	0.0	0.0	0.0	1.2000-05	8.9390+16	16.3	9.0730-01	5.5000-01	1.5410+13	12.8	1.1470+00
2.2000-10	0.0	0.0	0.0	1.2500-05	8.4510+16	14.7	9.0610-01	5.7500-01	1.6830+13	13.5	1.1570+00
2.2500-10	0.0	0.0	0.0	1.3000-05	7.8290+16	15.3	8.8410-01	6.0000-01	2.0240+13	14.3	1.1810+00
2.3000-10	0.0	0.0	0.0	1.3500-05	7.6970+16	11.9	9.1320-01	6.3000-01	2.0960+13	11.4	1.1740+00
2.3500-10	0.0	0.0	0.0	1.4000-05	7.2290+16	13.8	9.1330-01	6.6000-01	1.5670+13	11.4	1.1710+00
2.4000-10	0.0	0.0	0.0	1.4500-05	6.7320+16	14.7	9.0170-01	6.9000-01	1.3730+13	12.6	1.2140+00
2.4500-10	0.0	0.0	0.0	1.5000-05	6.4250+16	14.6	9.0410-01	7.2000-01	1.2150+13	13.2	1.2140+00
2.5000-10	0.0	0.0	0.0	1.5500-05	5.9720+16	23.9	8.7830-01	7.5000-01	8.3030+12	12.2	1.1950+00
2.5500-10	0.0	0.0	0.0	1.6000-05	5.7180+16	24.1	8.7640-01	8.0000-01	9.6620+12	12.4	1.2010+00
2.6000-10	0.0	0.0	0.0	1.6500-05	5.3710+16	19.2	8.9950-01	8.5000-01	9.2640+12	14.4	1.2050+00
2.6500-10	0.0	0.0	0.0	1.7000-05	5.0870+16	13.9	8.9670-01	9.0000-01	8.5870+12	13.9	1.2030+00
2.7000-10	0.0	0.0	0.0	1.7500-05	4.7420+16	18.7	8.8800-01	9.2000-01	8.9800+12	13.4	1.1950+00
2.7500-10	0.0	0.0	0.0	1.8000-05	4.4940+16	19.6	8.6800-01	9.4000-01	6.3590+12	13.2	1.2110+00
2.8000-10	0.0	0.0	0.0	1.8500-05	4.2030+16	18.1	8.8600-01	1.0000+00	5.9700+12	13.2	1.1790+00
2.8500-10	0.0	0.0	0.0	1.9000-05	4.1670+16	14.7	8.8870-01	1.1000+00	6.8770+12	11.9	1.1820+00
2.9000-10	0.0	0.0	0.0	1.9500-05	3.8600+16	13.1	9.1900-01	1.2000+00	5.2090+12	10.4	1.1910+00
2.9500-10	0.0	0.0	0.0	2.0000-05	3.5410+16	16.8	8.9010-01	1.3000+00	4.3030+12	11.2	1.1890+00
3.0000-10	0.0	0.0	0.0	2.0500-05	3.3300+16	23.1	8.8040-01	1.4000+00	3.5970+12	10.5	1.1670+00
3.0500-10	0.0	0.0	0.0	2.1000-05	3.1830+16	22.9	8.8190-01	1.5000+00	3.0380+12	13.5	1.1520+00
3.1000-10	0.0	0.0	0.0	2.1500-05	3.1020+16	17.6	9.0110-01	1.6000+00	2.5750+12	13.3	1.1310+00
3.1500-10	0.0	0.0	0.0	2.2000-05	2.9060+16	20.3	8.8560-01	1.7000+00	2.3020+12	14.8	1.1610+00
3.2000-10	0.0	0.0	0.0	2.2500-05	2.8160+16	16.8	9.1100-01	1.8000+00	1.9870+12	12.0	1.1400+00
3.2500-10	0.0	0.0	0.0	2.3000-05	2.5800+16	18.0	8.8430-01	1.9000+00	1.7730+12	13.4	1.1510+00
3.3000-10	0.0	0.0	0.0	2.3500-05	2.5040+16	17.3	9.0690-01	2.0000+00	1.6030+12	13.7	1.1680+00
3.3500-10	0.0	0.0	0.0	2.4000-05	2.3370+16	22.1	8.9130-01	2.1000+00	1.4450+12	11.7	1.1770+00
3.4000-10	0.0	0.0	0.0	2.4500-05	2.2210+16	20.6	8.8430-01	2.2000+00	1.2980+12	11.7	1.1750+00
3.4500-10	0.0	0.0	0.0	2.5000-05	2.0870+16	21.9	8.7520-01	2.3000+00	1.1670+12	12.9	1.1690+00
3.5000-10	0.0	0.0	0.0	2.5500-05	2.0570+16	24.2	9.0990-01	2.4000+00	1.0680+12	11.4	1.1790+00
3.5500-10	0.0	0.0	0.0	2.6000-05	2.0030+16	19.0	9.1490-01	2.5000+00	9.7850+11	11.7	1.1840+00
3.6000-10	0.0	0.0	0.0	2.6500-05	1.9350+16	14.4	9.2730-01	2.6000+00	9.0770+11	12.4	1.2010+00
3.6500-10	0.0	0.0	0.0	2.7000-05	1.8770+16	14.1	9.4280-01	2.7000+00	9.3100+11	14.2	1.1980+00
3.7000-10	0.0	0.0	0.0	2.7500-05	1.7470+16	19.1	9.1730-01	2.8000+00	7.8150+11	15.0	1.2230+00
3.7500-10	0.0	0.0	0.0	2.8000-05	1.6710+16	19.5	9.1580-01	2.9000+00	7.2790+11	15.4	1.2340+00
3.8000-10	0.0	0.0	0.0	2.8500-05	1.6290+16	18.1	9.4270-01	3.0000+00	6.7930+11	14.7	1.2440+00
3.8500-10	0.0	0.0	0.0	2.9000-05	1.5840+16	14.5	9.6530-01	3.1000+00	6.3550+11	16.2	1.2540+00
3.9000-10	0.0	0.0	0.0	2.9500-05	1.4900+16	16.6	9.5320-01	3.2000+00	5.8870+11	15.0	1.2480+00
3.9500-10	0.0	0.0	0.0	3.0000-05	1.4040+16	17.5	9.4050-01	3.3000+00	5.4350+11	12.3	1.2360+00
4.0000-10	0.0	0.0	0.0	3.0500-05	1.3670+16	15.9	9.5760-01	3.4000+00	5.1050+11	12.2	1.2280+00
4.0500-10	0.0	0.0	0.0	3.1000-05	1.3410+16	15.4	9.5080-01	3.5000+00	4.7260+11	11.0	1.2280+00
4.1000-10	0.0	0.0	0.0	3.1500-05	1.3440+16	14.9	1.0230+00	3.6000+00	4.4620+11	12.1	1.2820+00
4.1500-10	0.0	0.0	0.0	3.2000-04	1.3440+16	14.9	1.0230+00	3.7000+00	4.0170+11	11.1	1.2520+00

1.0500-07	3.1970+18	11.5	9.2870-01	4.5000-03	4.2250+14	12.5	1.0880+00	1.1000+01	3.7750+09	16.6	1.7230+00
1.1000-07	3.1610+18	12.5	9.3230-01	4.7500-03	3.5300+14	14.5	9.0450-01	1.1100+01	3.3890+09	15.3	1.6900+00
1.1500-07	3.1880+18	12.4	9.5430-01	5.0000-03	3.2520+14	15.9	8.5580-01	1.1200+01	3.1160+09	15.0	1.6880+00
1.2000-07	3.1140+18	12.8	9.4690-01	5.2500-03	3.2790+14	13.4	9.1560-01	1.1300+01	2.9410+09	15.4	1.7220+00
1.2500-07	3.0150+18	12.4	9.3540-01	5.5000-03	2.9740+14	13.5	9.2710-01	1.1400+01	2.6690+09	15.1	1.6840+00
1.3000-07	2.9770+18	13.0	9.4310-01	5.7500-03	2.8140+14	15.9	8.4650-01	1.1500+01	2.5220+09	14.5	1.7060+00
1.4250-07	2.8700+18	13.1	9.2820-01	6.0000-03	1.9580+14	14.7	8.5580-01	1.1600+01	2.3230+09	14.5	1.6830+00
1.5000-07	2.8330+18	13.1	9.3490-01	6.3000-03	1.5880+14	14.3	8.6080-01	1.1700+01	2.2130+09	14.5	1.7080+00
1.6000-07	2.7880+18	13.1	9.4440-01	6.6000-03	1.3220+14	15.3	8.6080-01	1.1800+01	2.0930+09	13.7	1.7260+00
1.7000-07	2.7220+18	13.1	9.4560-01	6.9000-03	1.2010+14	13.4	9.5510-01	1.1900+01	1.9370+09	12.6	1.6940+00
1.8000-07	2.6930+18	13.2	9.5920-01	7.2000-03	1.1160+14	13.4	9.7750-01	1.2000+01	1.8350+09	13.8	1.7030+00
1.9000-07	2.5740+18	13.7	9.3970-01	7.6000-03	1.0870+14	13.8	9.8500-01	1.2100+01	1.7150+09	14.5	1.6870+00
2.0000-07	2.5360+18	13.3	9.4780-01	8.0000-03	1.0950+14	15.1	9.6140-01	1.2200+01	1.6440+09	14.8	1.7050+00
2.1000-07	2.4630+18	13.2	9.4200-01	8.4000-03	1.1410+14	15.6	9.3940-01	1.2300+01	1.5490+09	15.3	1.7310+00
2.2000-07	2.4290+18	12.8	9.5060-01	8.8000-03	1.2070+14	11.6	9.2880-01	1.2400+01	1.4890+09	15.7	1.6890+00
2.3000-07	2.3300+18	12.2	9.3220-01	9.2000-03	1.1120+14	15.5	8.5600-01	1.2500+01	1.4160+09	15.3	1.7380+00
2.4000-07	2.3010+18	11.4	9.4070-01	9.6000-03	1.1900+14	13.8	8.5330-01	1.2600+01	1.3000+09	14.7	1.6890+00
2.5000-07	2.2180+18	11.4	9.3600-01	1.0000-02	1.2350+14	13.9	8.7450-01	1.2700+01	1.2490+09	16.5	1.7210+00
2.6000-07	2.1250+18	13.4	9.2480-01	1.0500-02	1.2360+14	12.0	8.6700-01	1.2800+01	1.1750+09	15.0	1.7230+00
2.7000-07	2.1210+18	12.0	9.4210-01	1.1000-02	1.2550+14	13.6	9.2550-01	1.2900+01	1.0660+09	14.9	1.7030+00
2.8000-07	1.9880+18	12.2	9.1830-01	1.1500-02	1.1780+14	13.6	9.3070-01	1.3000+01	1.0100+09	14.6	1.6990+00
2.9000-07	1.9670+18	11.2	9.4380-01	1.2000-02	1.1200+14	11.8	9.3410-01	1.3100+01	9.4030+08	14.1	1.7010+00
3.0000-07	1.8470+18	11.3	9.1970-01	1.2750-02	1.1220+14	13.5	9.4130-01	1.3200+01	8.8060+08	15.0	1.7180+00
3.1000-07	1.8220+18	13.1	9.4030-01	1.3500-02	1.0510+14	13.0	9.2920-01	1.3300+01	8.2010+08	16.8	1.7040+00
3.2000-07	1.7350+18	12.1	9.2690-01	1.4250-02	9.7310+13	13.5	9.0400-01	1.3400+01	7.4870+08	14.5	1.6980+00
3.3000-07	1.7010+18	12.8	9.4000-01	1.5000-02	9.4980+13	13.1	9.2230-01	1.3500+01	6.9070+08	13.5	1.7050+00
3.4000-07	1.6400+18	13.2	9.4430-01	1.6000-02	9.0640+13	13.4	9.2550-01	1.3600+01	6.4170+08	14.5	1.6760+00
3.5000-07	1.5890+18	13.2	9.5110-01	1.7000-02	8.9130+13	12.6	9.3560-01	1.3700+01	5.8230+08	16.5	1.7140+00
3.6000-07	1.5080+18	13.9	9.3850-01	1.8000-02	8.3760+13	12.9	9.1430-01	1.3800+01	5.0490+08	14.2	1.7320+00
3.7000-07	1.4900+18	14.2	9.6190-01	1.9000-02	8.2650+13	12.9	9.1630-01	1.3900+01	4.5140+08	15.7	1.6990+00
3.8000-07	1.4510+18	13.7	9.6940-01	2.0000-02	8.2280+13	11.8	9.1550-01	1.4000+01	4.1730+08	15.5	1.7060+00
3.9000-07	1.3820+18	14.1	9.5440-01	2.1000-02	8.3260+13	12.0	9.1310-01	1.4100+01	3.9530+08	15.6	1.7120+00
4.0000-07	1.3550+18	14.5	9.6690-01	2.2000-02	8.6500+13	12.3	9.1170-01	1.4200+01	3.7750+08	14.7	1.7120+00
4.1000-07	1.2910+18	13.1	9.5030-01	2.3000-02	2.0610+14	12.8	9.2220-01	1.4300+01	3.5270+08	16.4	1.6810+00
4.2000-07	1.2550+18	13.1	9.5730-01	2.4000-02	2.1060+14	13.4	9.0300-01	1.4400+01	3.2560+08	15.9	1.7010+00
4.3000-07	1.2060+18	15.2	9.5190-01	2.5500-02	1.5240+14	12.6	9.1800-01	1.4500+01	2.7370+08	13.5	1.6880+00
4.4000-07	1.1890+18	16.0	9.6930-01	2.7000-02	3.8900+12	13.4	9.2260-01	1.4600+01	2.1570+08	14.4	1.6540+00
4.5000-07	1.1470+18	15.1	9.6540-01	2.8000-02	4.8000+12	12.2	9.1580-01	1.4700+01	1.6880+08	15.7	1.6660+00
4.6000-07	1.1070+18	15.1	9.7080-01	3.0000-02	7.1480+12	13.8	9.1680-01	1.4800+01	1.3330+08	13.9	1.7370+00
4.7000-07	1.0590+18	15.0	9.5900-01	3.2000-02	3.2870+13	13.3	9.1680-01	1.4900+01	1.1830+08	15.5	1.6990+00
4.8000-07	1.0110+18	15.0	9.5710-01	3.4000-02	3.7940+13	13.2	9.1440-01	1.5000+01	1.0490+08	16.3	1.7020+00
4.9000-07	9.7460+17	14.4	9.5610-01	3.6000-02	4.0090+13	12.4	9.2420-01	1.5100+01	9.9550+07	13.3	1.7020+00
5.0000-07	9.4820+17	15.0	9.6320-01	3.8000-02	4.1860+13	12.9	9.3490-01	1.5200+01	8.4610+07	14.4	1.7010+00
5.1000-06	9.0330+17	13.5	9.4880-01	4.0000-02	4.3570+13	12.3	9.1250-01	1.5300+01	8.9520+07	14.4	1.7090+00
5.2000-06	8.6950+17	12.2	9.4320-01	4.2500-02	4.4420+13	13.9	9.1230-01	1.5400+01	8.5450+07	12.9	1.7180+00
5.3000-06	8.1660+17	12.1	9.2050-01	4.5000-02	4.4890+13	14.2	9.1420-01	1.5500+01	7.6900+07	15.6	1.6730+00
5.4000-06	7.9700+17	14.2	9.3170-01	4.7500-02	4.2930+13	13.0	9.1440-01	1.5600+01	7.1030+07	14.5	1.6830+00
5.5000-06	7.6090+17	12.3	9.2090-01	5.0000-02	3.5900+13	13.1	9.2340-01	1.5700+01	6.7750+07	15.6	1.6740+00
5.6000-06	7.5670+17	12.4	9.4670-01	5.2500-02	3.2010+13	12.9	9.2730-01	1.5800+01	6.3930+07	15.0	1.6840+00
5.7000-06	7.3370+17	14.8	9.6270-01	5.5000-02	3.1510+13	13.9	9.2730-01	1.5900+01	6.1040+07	14.9	1.6970+00
5.8000-06	7.3530+17	16.0	9.6910-01	5.7500-02	4.0010+13	14.5	9.2060-01	1.6000+01	5.8400+07	13.8	1.6620+00
5.9000-06	6.8400+17	17.1	9.8420-01	6.0000-02	6.1740+13	14.1	9.1060-01	1.6100+01	5.4330+07	16.2	1.6970+00
6.0000-06	6.8230+17	18.5	9.7800-01	6.3000-02	8.9370+13	13.7	9.1440-01	1.6200+01	5.2680+07	0.0	*****
6.1000-06	6.2090+17	19.3	9.9350-01	6.6000-02	7.8800+13	15.2	8.9140-01	1.6300+01	0.0	0.0	*****
6.2000-06	5.8790+17	19.3	9.9480-01	7.0000-02	3.1930+13	14.9	8.9140-01	1.6400+01	0.0	0.0	*****
6.3000-06	5.6040+17	19.7	9.9670-01	7.2000-02	1.7890+13	15.0	9.0940-01	1.6500+01	0.0	0.0	*****
6.4000-06	5.2400+17	17.7	9.7900-01	7.5000-02	7.1570+13	16.9	9.0320-01	1.6600+01	0.0	0.0	*****
6.5000-06	5.0820+17	16.5	9.7900-01	8.0000-02	4.6490+13	14.2	9.1140-01	1.6700+01	0.0	0.0	*****
6.6000-06	4.8480+17	17.2	9.6550-01	8.4000-02	8.4950+12	14.4	9.0770-01	1.6800+01	0.0	0.0	*****
6.7000-06	4.6820+17	19.0	9.7030-01	8.8000-02	2.8580+13	15.1	9.0650-01	1.6900+01	0.0	0.0	*****
6.8000-06	4.6630+17	18.9	9.7780-01	9.2000-02	3.6420+13	14.1	8.9920-01	1.7000+01	0.0	0.0	*****
6.9000-06	4.4570+17	19.0	9.7780-01	9.6000-02	2.6580+13	13.9	9.1480-01	1.7100+01	0.0	0.0	*****
7.0000-06	4.2320+17	21.3	9.9310-01	1.0000-01	2.1220+13	13.3	8.9980-01	1.7200+01	0.0	0.0	*****
7.1000-06	4.0120+17	17.4	9.7940-01	1.0500-01	2.1570+13	14.4	9.0510-01	1.7300+01	0.0	0.0	*****
7.2000-06	3.8120+17	17.5	9.6390-01	1.1000-01	2.5310+13	15.0	9.0200-01	1.7400+01	0.0	0.0	*****
7.3000-06	3.4780+17	15.3	9.4030-01	1.1500-01	2.3100+13	16.1	9.0980-01	1.7500+01	0.0	0.0	*****
7.4000-06	3.3020+17	14.3	9.4820-01	1.2000-01	3.7220+13	15.8	9.0060-01	1.7600+01	0.0	0.0	*****
7.5000-06	3.1070+17	13.1	9.4190-01	1.2750-01	2.3370+13	15.3	9.0060-01	1.7700+01	0.0	0.0	*****
7.6000-06	2.9200+17	12.0	9.3030-01	1.3500-01	1.9650+13	14.8	8.9940-01	1.7800+01	0.0	0.0	*****
7.7000-06	2.8340+17	13.7	9.4610-01	1.4250-01	1.1080+13	17.0	9.1970-01	1.7900+01	0.0	0.0	*****
7.8000-06	2.8090+17	18.4	9.8060-01	1.5000-01	1.8360+13						

E (MEV)	INT.FLUSS	E (MEV)	INT.FLUSS	E (MEV)	INT.FLUSS	E (MEV)	INT.FLUSS	E (MEV)	INT.FLUSS
1.00D-07	3.736D+13	1.00D-04	3.066D+13	1.00D-01	2.005D+13	6.90D-01	8.936D+12	4.00D+00	6.470D+11
5.00D-07	3.649D+13	5.00D-04	2.861D+13	2.00D-01	1.787D+13	8.00D-01	7.707D+12	5.00D+00	3.612D+11
1.00D-06	3.591D+13	1.00D-03	2.791D+13	3.00D-01	1.634D+13	8.80D-01	6.950D+12	6.00D+00	1.993D+11
5.00D-06	3.422D+13	5.00D-03	2.582D+13	4.00D-01	1.292D+13	1.00D+00	5.992D+12	7.00D+00	1.005D+11
1.00D-05	3.343D+13	1.00D-02	2.482D+13	5.00D-01	1.218D+13	2.00D+00	2.229D+12	8.00D+00	5.047D+10
5.00D-05	3.152D+13	5.00D-02	2.213D+13	6.00D-01	1.064D+13	3.00D+00	1.149D+12	9.00D+00	2.459D+10

PHI GROESSER 0.1MEV / PHI GRUESSE 1.0MEV = 3.347D+00
UEBER DAS GESAMTE LOESUNGSSPEKTRUM GEMITTELTE NEUTRONENENERGIE = 5.231D-01 MEV

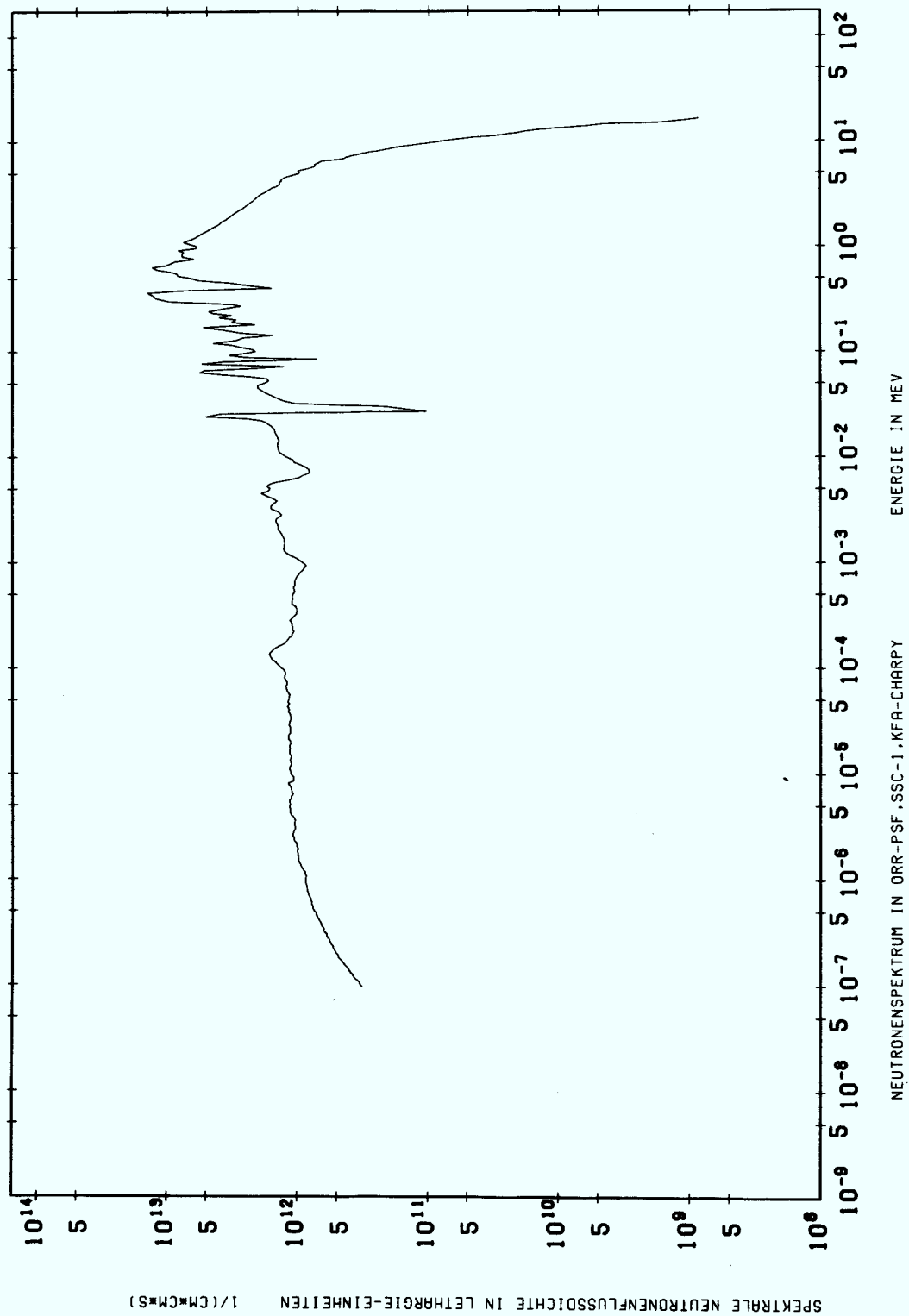
KFA JUELICH GMBH, ZBB-SMT



JOB: ZBB007S2 BILD: 1
 DATUM: 6. 1. 83 UHRZEIT: 13.14.0.

Bild 6: Gruppenflußdichten mit einfachen Standardabweichungen
 im gewählten Beispiel

KFA JUELICH GMBH, ZBB-SMT



JOB: ZBB007S2 BILD: 2
 DATUM: 6. 1. 83 UHRZEIT: 13.14.0.

Bild 7: Differentielle Flußdichtewerte im gewählten Beispiel

11 EIN HILFSPROGRAMM ZUR AUFBEREITUNG VON GUESS-SPEKTREN BELIEBIGER GRUPPENSTRUKTUR

Die Eingangsnäherungen für die Entfaltung mit dem Rechenprogramm SAND-MX2 liegen in der Regel in einer gröberen Energiegruppenstruktur vor als sie die SAND-II-Library aufweist. Im allgemeinen werden maximal etwa 100 Gruppen - häufig weniger - bei einer Transport- oder Diffusionsrechnung benutzt. Es stellt sich also die Aufgabe, energetische Neutronenverteilungen beliebiger Struktur mit geringerer Energiegruppenanzahl in entsprechende Verteilungen in den 620 Gruppen der SAND-II-Library zu transformieren, die unmittelbar von unserem Entfaltungsprogramm als Guess-Spektren verarbeitet werden können.

Zur Lösung dieser Aufgabe benutzen wir ein auf kubischen Spline-Funktionen basierendes FORTRAN-Rechenprogramm. Wir betonen sogleich, daß differentielle Flußdichtewerte und nicht Gruppenflußdichten die Eingabedaten dieses Programmes sind. Falls die gerechneten Neutronenspektren als Gesamtheiten von Gruppenflußdichten vorliegen, so sind dieselben vermöge der Division durch die jeweiligen Energiegruppenbreiten in die entsprechenden Gesamtheiten von differentiellen Flußdichtewerten zu transformieren, bevor unser Spline-Programm Anwendung finden kann.

Unter einem interpolierenden kubischen Spline versteht man eine Funktion $s(x)$, die durch N vorgegebene Punkte mit den Ordinaten x_k, y_k , $k=1$ bis N , hindurchgeht, so daß also $s(x_k) = y_k$, $k=1$ bis N , gilt, und die zwischen diesen Punkten aus kubischen Polynomen mit zu bestimmenden Koeffizienten besteht, die in den Intervallendpunkten zweimal stetig differenzierbar aneinander angesetzt sind. Es ist klar, daß in unserer Anwendung die den Spline definierenden Stützstellen $\{x_k, y_k\}$ durch die Wertepaare $\{E_k, \phi_k\}$, $k=1$ bis N , von Neutronenenergie E_k und zugehöriger differentieller Neutronenflußdichte ϕ_k für das "zu splinende" Neutronenspektrum gegeben sind. Durch die Forderung der zweimaligen stetigen Differenzierbarkeit in den Intervallendpunkten können bei Anwendung des interpolierenden kubischen Splines im Falle stark strukturierter Funktionsverläufe physikalisch unzulässige Oberschwinger auftreten, die möglicherweise bei Anwendung eines verallgemeinerten kubischen Splines, besonders eines sogenannten rationalen kubischen Splines, vermieden werden können /39/. Dies kommt häufiger bei differentiellen Wirkungsquerschnitten im Resonanzgebiet als bei Reaktorspektren in Betracht.

Nach der oben gegebenen Definition des interpolierenden kubischen Splines wird für N vorgegebene Punkte $\{E_k, \phi_k\}$, $k=1$ bis N , das Neutronenspektrum im k -ten Energieintervall in der Form

$$f_k(E) = A_k + B_k(E-E_k) + C_k(E-E_k)^2 + D_k(E-E_k)^3, \quad (44)$$

$$k=1 \text{ bis } N-1, E_k < E < E_{k+1},$$

dargestellt. Die Werte ϕ_k der gesuchten Neutronenspektrumfunktion $\phi(E) \equiv s(E)$ (Spline-Funktion) sowie ihrer zweiten Ableitungen ϕ_k'' in den Stützstellen E_k - die ersten Ableitungen werden hier nicht benötigt - müssen zu den in Gl. (44) definierten Funktionswerten $f_k(E)$ in den folgenden Beziehungen stehen:

$$\phi_k = f_k(E_k) = A_k, \quad (45)$$

$$\phi_{k+1} = f_k(E_{k+1}) = A_k + B_k \Delta E_k + C_k \Delta E_k^2 + D_k \Delta E_k^3, \quad (46)$$

$$\phi_k'' = f_k''(E_k) = 2 C_k \text{ und} \quad (47)$$

$$\phi_{k+1}'' = f_k''(E_{k+1}) = 2 C_k + 6 D_k \Delta E_k, \quad (48)$$

$$k=1 \text{ bis } N-1, \Delta E_k = E_{k+1} - E_k.$$

Aus den Gleichungen (45) bis (48) erhält man die $4(N-1)$ Polynomkoeffizienten A_k, B_k, C_k und D_k in Abhängigkeit von den Funktionswerten ϕ_k und den zweiten Ableitungen ϕ_k'' :

$$A_k = \phi_k, \quad (49)$$

$$B_k = \frac{\Delta \phi_k}{\Delta E_k} - \frac{\Delta E_k}{6} (\phi_{k+1}'' + 2 \phi_k''), \quad (50)$$

$$C_k = \frac{1}{2} \phi_k'' \text{ und} \quad (51)$$

$$D_k = \frac{1}{6 \Delta E_k} (\phi_{k+1}'' - \phi_k''), \quad (52)$$

$$k=1 \text{ bis } N-1, \Delta E_k = E_{k+1} - E_k, \Delta \phi_k = \phi_{k+1} - \phi_k.$$

Um nun die Unbekannten ϕ_k'' zu berechnen, benutzen wir die Forderung nach der Stetigkeit der ersten Ableitungen in den Intervallendpunkten

$$f'_{k-1}(E_k) = f'_k(E_k), \quad k=2 \text{ bis } N-1, \quad (53)$$

die sogenannten "Spline-Bedingungen". Dies ergibt ein lineares Gleichungssystem von $N-2$ Gleichungen für die N Unbekannten ϕ_k'' , $k=1$ bis N . Gibt man ϕ_1'' und ϕ_N'' vor, so erhält man ein eindeutig bestimmtes quadratisches lineares Gleichungssystem für die $N-2$ Unbekannten ϕ_k'' , $k=2$ bis $N-1$, das nach dem Gaußschen Eliminationsverfahren gelöst werden kann. Wir geben vor

$$\begin{aligned} \phi_1'' &= 0, \\ \phi_N'' &= 0, \end{aligned} \quad (54)$$

und nennen das einen "natürlichen kubischen Spline".

Methodisch hätten wir unseren natürlichen kubischen Spline statt durch Zahlentripel (E_k, ϕ_k, ϕ_k'') , $k=1$ bis N , mit den Spline-Bedingungen nach Gl. (53) und den Randbedingungen nach Gl. (54) auch durch Zahlentripel (E_k, ϕ_k, ϕ_k') , $k=1$ bis N , mit den Spline-Bedingungen

$$f''_{k-1}(E_k) = f''_k(E_k), \quad k=2 \text{ bis } N-1, \quad (55)$$

und den Randbedingungen

$$\begin{aligned} \phi_1' &= 0, \\ \phi_N' &= 0 \end{aligned} \quad (56)$$

charakterisieren können. Bei etwa gleichem Rechenaufwand führt dieser Weg auf das gleiche Ergebnis.

Unser FORTRAN-Rechenprogramm - eine unseren Zwecken entsprechend abgewandelte Version eines Rechenprogrammes von /40/ - wandelt zunächst die eingegebenen Gesamtheiten $\{E_k, \phi_k\}$, $k=1$ bis N , von Neutronenenergie E_k und zugehöriger differentieller Neutronenflußdichte ϕ_k in eine Darstellung um, in der die auf die Lethargie u bezogenen Flußdichtewerte $\phi(u) = E \phi(E)$ gegen die

Neutronenenergien E in bilogarithmischem Maßstab aufgetragen sind. Am Ende des Programmes wird dann diese Transformation wieder rückgängig gemacht.

Als nächster Schritt wird im Programm die Berechnung der $N-2$ Unbekannten ϕ_k'' , $k=2$ bis $N-1$, nach dem Gaußschen Eliminationsverfahren nebst der Setzung $\phi_1'' = \phi_N'' = 0$ durchgeführt. Sodann erfolgt die Berechnung der Polynomkoeffizienten B_k , C_k und D_k , $k=1$ bis $N-1$, nach den Gleichungen (50), (51) und (52), während die Polynomkoeffizienten A_k , $k=1$ bis $N-1$, nach Gl. (49) einfach durch die entsprechenden eingegebenen Flußdichtewerte ϕ_k dargestellt sind. Schließlich wird die vollständige Neutronenspektrumfunktion $\phi(E)$ (Spline-Funktion) unter Benutzung der berechneten Polynomkoeffizienten in den 621 Rasterpunkten der SAND-II-Library realisiert und - nach Durchführung der oben erwähnten Rücktransformation von der Lethargiedarstellung in die gebräuchliche Energiedarstellung - vom Programm ausgegeben.

Das Einleseformat muß im konkreten Fall den auf Datenträger vorliegenden Eingabedaten angepaßt werden. Erforderlichenfalls kann die Datenausgabe durch Anwendung einer Schleife mehrfach erfolgen.

In Bild 8 ist das Beispiel eines kubischen Splines aufgezeigt. Das "zu splinende" Neutronenspektrum entstammte einer Rechnung mit dem eindimensionalen Transport-Code DTF-IV in einer 40-Energiegruppenstruktur /41/. Das in den 621 Rasterpunkten der SAND-II-Library "gesplinte" Neutronenspektrum, also die Spline-Funktion $\phi(E)$, ist als glatter Kurvenzug gezeichnet.

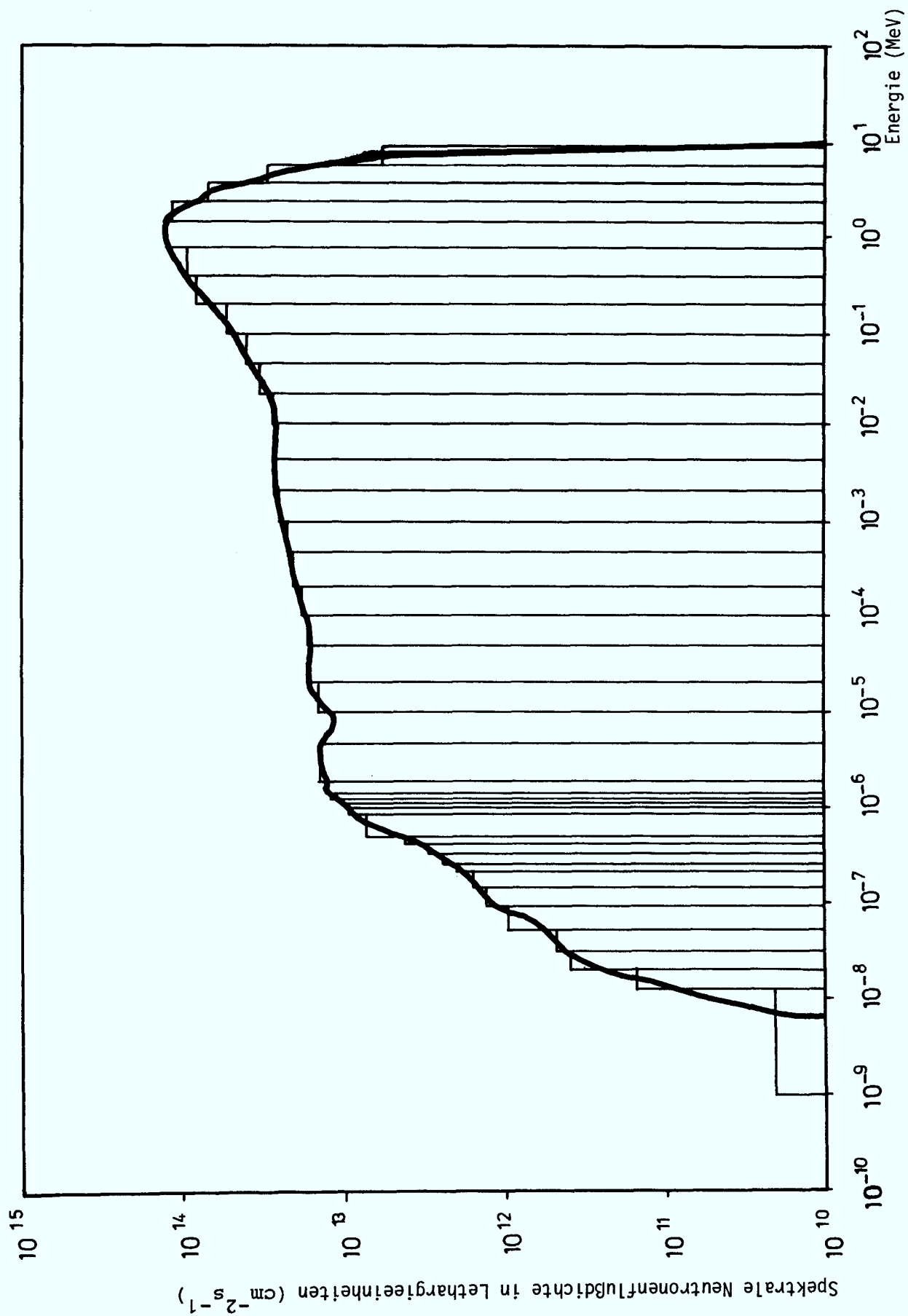


Bild 8: Beispiel eines kubischen Splines: Neutronenspektrum in BR2 Kanal H4.
GSB-Testelement unter Cd-Schirm; 2,5 mm dick. Transportrechnung nach /41/.

12 NEUTRONENSPEKTREN UND ABGELEITETE KENNGRÖSSEN

Dieses Kapitel enthält auf speziellen Datenblättern digitale und analoge Informationen über ausgewählte mit dem Rechenprogramm SAND-MX2 entfaltete Neutronenspektren in Reaktorpositionen. In Tabelle 5 ist der Inhalt dieser Datenblätter aufgelistet.

Tabelle 5

Berichtete Daten von Neutronenspektrumentfaltungen
mit dem Rechenprogramm SAND-MX2

- 1) Ein das Neutronenspektrum charakterisierender Text¹⁾
- 2) Reaktorleistung (MW)
- 3) Gemessene und auf der Grundlage des Lösungsspektrums berechnete Aktivierungen (s^{-1}) sowie die prozentualen relativen Abweichungen DELTAI der letztgenannten von den erstgenannten, bezogen auf die erstgenannten Größen, ferner die einfachen relativen Standardabweichungen der gemessenen Aktivierungen in Prozent
- 4) Abweichungsparameter DELTA nach Gl. (57) (%)
- 5) Maximale Iterationsanzahl IAUS
- 6) Anzahl der gerechneten Monte-Carlo-Ereignisse MONTCA
- 7) Integrale Neutronenflußdichten INTPHI ($cm^{-2}s^{-1}$) oberhalb definierter SAND-II-Grenzenergien EGRENZ (MeV)
- 8) Gesamte Neutronenflußdichte PHITOT ($cm^{-2}s^{-1}$)
- 9) Neutronenflußdichte oberhalb 1 MeV PHIG1 ($cm^{-2}s^{-1}$)
- 10) Neutronenflußdichte oberhalb 0,1 MeV PHIG.1 ($cm^{-2}s^{-1}$)
- 11) Gesamte Verlagerungsrate DAMAGE nach Gl. (58) (s^{-1})
- 12) Effektiver Schädigungsquerschnitt DAMSIG = DAMAGE/PHIG1 nach Gl. (59) (cm^2)

1) Die Positionsangabe in cm kennzeichnet den vertikalen Abstand des Sondenpaketaufpunktes von der Kernmittelebene, mit positivem Vorzeichen nach oben, mit negativem Vorzeichen nach unten gemessen.

Die angegebenen Unsicherheiten der gemessenen Aktivierungen sind als Eingabedaten der Entfaltung mitbestimmend für die Qualität des Lösungsspektrums und werden deshalb in Anhang E diskutiert.

Der "Abweichungsparameter Δ "

$$\Delta = \sqrt{\frac{1}{(N_{\text{DETEC}}-1)} \sum_{i=1}^{N_{\text{DETEC}}} \Delta_i^2} \quad \% , \quad N_{\text{DETEC}} = \text{Detektoranzahl}, \quad (57)$$

ist ein quadratischer Mittelwert der prozentualen relativen Abweichungen Δ_i , $i=1$ bis N_{DETEC} , der berechneten von den gemessenen Aktivierungen, bezogen auf die gemessenen Aktivierungen, und entspricht dem "Deviation Parameter DEV" der jüngeren Entfaltungsliteratur, siehe z.B. /20/. Die gesamte Verlagerungsrate

$$d = \int_0^{\infty} w_{\text{Fe,Lott}}(E) \phi_E(E) dE \quad (\text{s}^{-1}) \quad (58)$$

wurde aus dem Lösungsspektrum $\phi_E(E)$ und dem Lottischen Damage Cross Section für Eisen $w_{\text{Fe,Lott}}(E)$ /42/, der durch die EURATOM-Empfehlung /43/ nahegelegt ist, durch Integration mit einem Newtonschen Interpolationspolynom, wie in Abschnitt 8.3 beschrieben, gewonnen. In Bild 9 ist die "Schädigungsfunktion" $w_{\text{Fe,Lott}}(E)$ gegen die Energie aufgetragen. Der "effektive Schädigungsquerschnitt" /44/ - auch "Schädigungsvermögen" genannt -

$$\sigma_{\text{Damage}}^{\text{eff}} = \frac{\int_0^{\infty} w(E) \phi_E(E) dE}{\int_{1\text{MeV}}^{\infty} \phi_E(E) dE} \quad (\text{cm}^2) \quad (59)$$

für den differentiellen Verlagerungsquerschnitt $w(E)$ im Neutronenspektrum $\phi_E(E)$ ist ein Maß der spezifischen, d.h. auf die Flußdichteeinheit bezogenen Schädigung und wird in den ASTM-Standards /45/ angewendet. Jedem Datenblatt folgt die vom Rechenprogramm SAND-MX2 erstellte graphische Darstellung der differentiellen Flußdichtewerte des Lösungsspektrums in Einheiten der Lethargie u (siehe Abschnitt 9.2).

Interessierte Leser können auf Anfrage jedes der hier reportierten SAND-MX2-Lösungsspektren auf Lochkarten in dem in Abschnitt 9.2 beschriebenen Format erhalten.

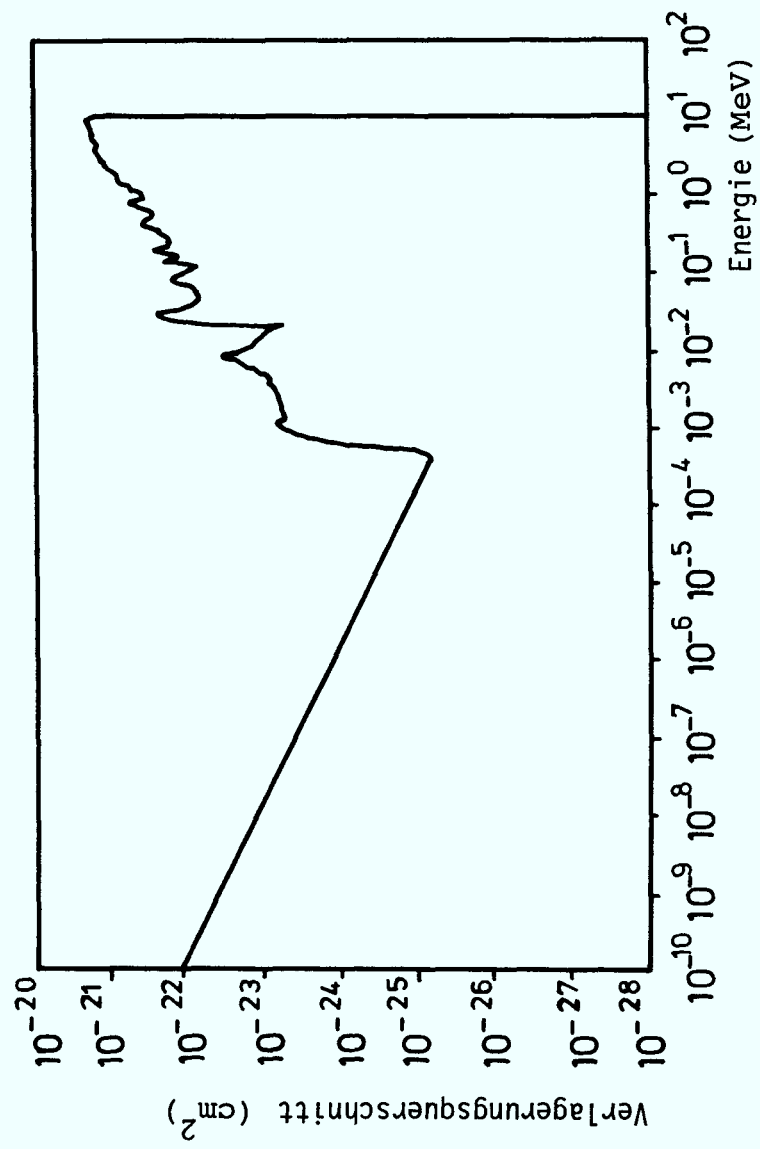


Bild 9: Schädigungsquerschnitt $w_{\text{Fe,Lott}}(E)$ für Eisen nach /42/

MERLIN-Spektrum in G7 bei -1 cm, Sonden unter Cadmium
Reaktorleistung: 10 MW

Verw.Reaktion	Gemess. Aktivierung (1/S)		Berechnete Aktivierung (1/S)	DELTA I (%)
Au 197 (N,G)	4.532D-10	± 4.%	4.452D-10	1.8
Co 59 (N,G)	1.460D-10	±10.%	1.452D-10	0.6
Cu 63 (N,G)	8.520D-12	±10.%	8.382D-12	1.6
Np 237 (N,F)	2.979D-11	± 4.%	3.041D-11	-2.1
Ni 58 (N,P)	2.336D-12	± 4.%	2.357D-12	-0.9
Fe 54 (N,P)	1.817D-12	± 4.%	1.749D-12	3.8
Ti 46 (N,P)	2.624D-13	± 4.%	2.641D-13	-0.6
Al 27 (N,A)	1.722D-14	± 4.%	1.728D-14	-0.3

DELTA = 1.928 % IAUS = 40 MONTCA = 94

EGRENZ (MeV)	INTPHI (cm ⁻² s ⁻¹)	EGRENZ (MeV)	INTPHI (cm ⁻² s ⁻¹)	EGRENZ (MeV)	INTPHI (cm ⁻² s ⁻¹)
1.00D-06	5.587D+13	1.00D-01	2.791D+13	2.00D+00	8.770D+12
5.00D-06	5.227D+13	2.00D-01	2.499D+13	3.00D+00	4.850D+12
1.00D-05	5.079D+13	3.00D-01	2.294D+13	4.00D+00	2.532D+12
5.00D-05	4.726D+13	4.00D-01	2.132D+13	5.00D+00	1.268D+12
1.00D-04	4.576D+13	5.00D-01	1.998D+13	6.00D+00	6.223D+11
5.00D-04	4.218D+13	6.00D-01	1.881D+13	7.00D+00	3.073D+11
1.00D-03	4.057D+13	6.90D-01	1.785D+13	8.00D+00	1.484D+11
5.00D-03	3.675D+13	8.00D-01	1.678D+13	9.00D+00	6.886D+10
1.00D-02	3.495D+13	8.80D-01	1.607D+13	1.00D+01	3.139D+10
5.00D-02	3.036D+13	1.00D+00	1.506D+13		

$$\text{PHITOT} = 5.771 \text{ D+13 cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$$

$$\text{PHIG1} = 1.506 \text{ D+13 cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$$

$$\text{PHIG.1} = 2.791 \text{ D+13 cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$$

$$\text{DAMAGE} = 2.007 \text{ D-08 s}^{-1}$$

$$\text{DAMSIG} = 1.333 \text{ D-21 cm}^2$$

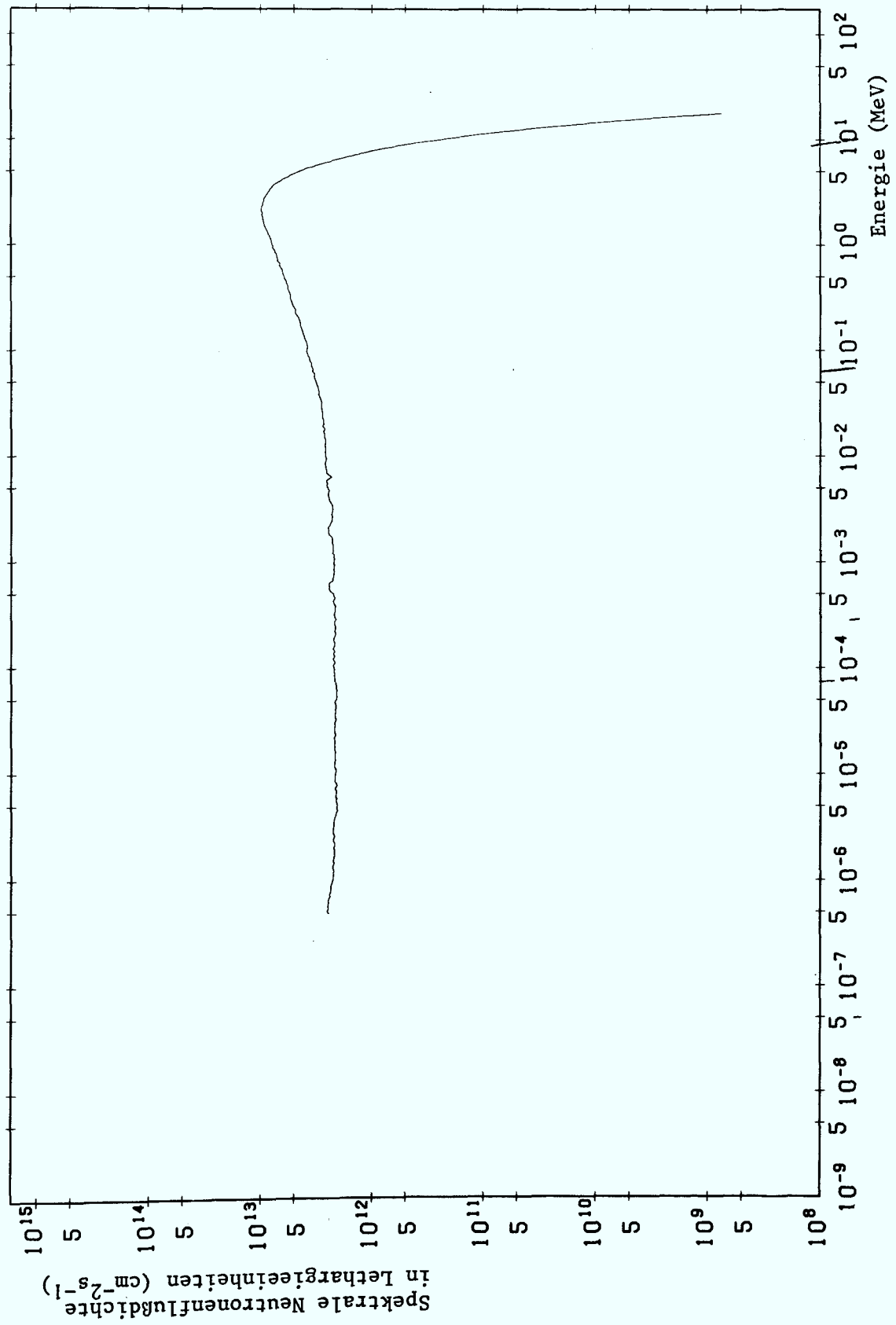


Bild 10: MERLIN-Spektrum in G7 bei -1 cm, Sonden unter Cadmium

MERLIN-Spektrum oberhalb 0,1 MeV bei -11 cm, Sonden unter Gadolinium
im Zentrum einer CT100-Stahlprobe bestrahlt am Core-Rand
(Stahl-Großproben-Vorversuch)¹⁾

Reaktorleistung: 4,7 MW

Verw.Reaktion	Gemess.Aktivierung (1/S)	Berechnete Aktivierung (1/S)	DELTA I (%)
Np 237 (N,F)	4.196D-12 ±4.%	4.282D-12	-2.0
In 115 (N,N')	4.122D-13 ±4.%	4.030D-13	2.2
Ti 47 (N,P)	2.608D-14 ±4.%	2.659D-14	-2.0
Ni 58 (N,P)	1.496D-13 ±4.%	1.504D-13	-0.5
Fe 54 (N,P)	1.051D-13 ±4.%	1.022D-13	2.7
Ti 46 (N,P)	1.311D-14 ±4.%	1.344D-14	-2.5
Al 27 (N,A)	9.123D-16 ±4.%	9.379D-16	-2.8
Ti 48 (N,P)	3.618D-16 ±4.%	3.496D-16	3.4

DELTA = 2.577 % IAUS = 40 MONTCA = 30

EGRENZ (MeV)	INTPHI (cm ⁻² s ⁻¹)	EGRENZ (MeV)	INTPHI (cm ⁻² s ⁻¹)	EGRENZ (MeV)	INTPHI (cm ⁻² s ⁻¹)
1.00D-01	5.281D+12	6.90D-01	2.305D+12	4.00D+00	1.232D+11
2.00D-01	4.320D+12	8.00D-01	2.067D+12	5.00D+00	6.019D+10
3.00D-01	3.699D+12	8.80D-01	1.916D+12	6.00D+00	3.029D+10
4.00D-01	3.230D+12	1.00D+00	1.717D+12	7.00D+00	1.577D+10
5.00D-01	2.845D+12	2.00D+00	6.519D+11	8.00D+00	8.305D+09
6.00D-01	2.539D+12	3.00D+00	2.696D+11	9.00D+00	4.424D+09
				1.00D+01	2.343D+09

$$\text{PHITOT} = 5.281 \text{ D+12 cm}^{-2} \text{ s}^{-1} \quad 2)$$

$$\text{PHIG1} = 1.717 \text{ D+12 cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$$

$$\text{PHIG.1} = 5.281 \text{ D+12 cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$$

$$\text{DAMAGE} = 2.432 \text{ D-09 s}^{-1} \quad 2)$$

$$\text{DAMSIG} = 1.416 \text{ D-21 cm}^2$$

1) Über die Eisenresonanzen gemittelter Spektralverlauf

2) Oberhalb 0,1 MeV

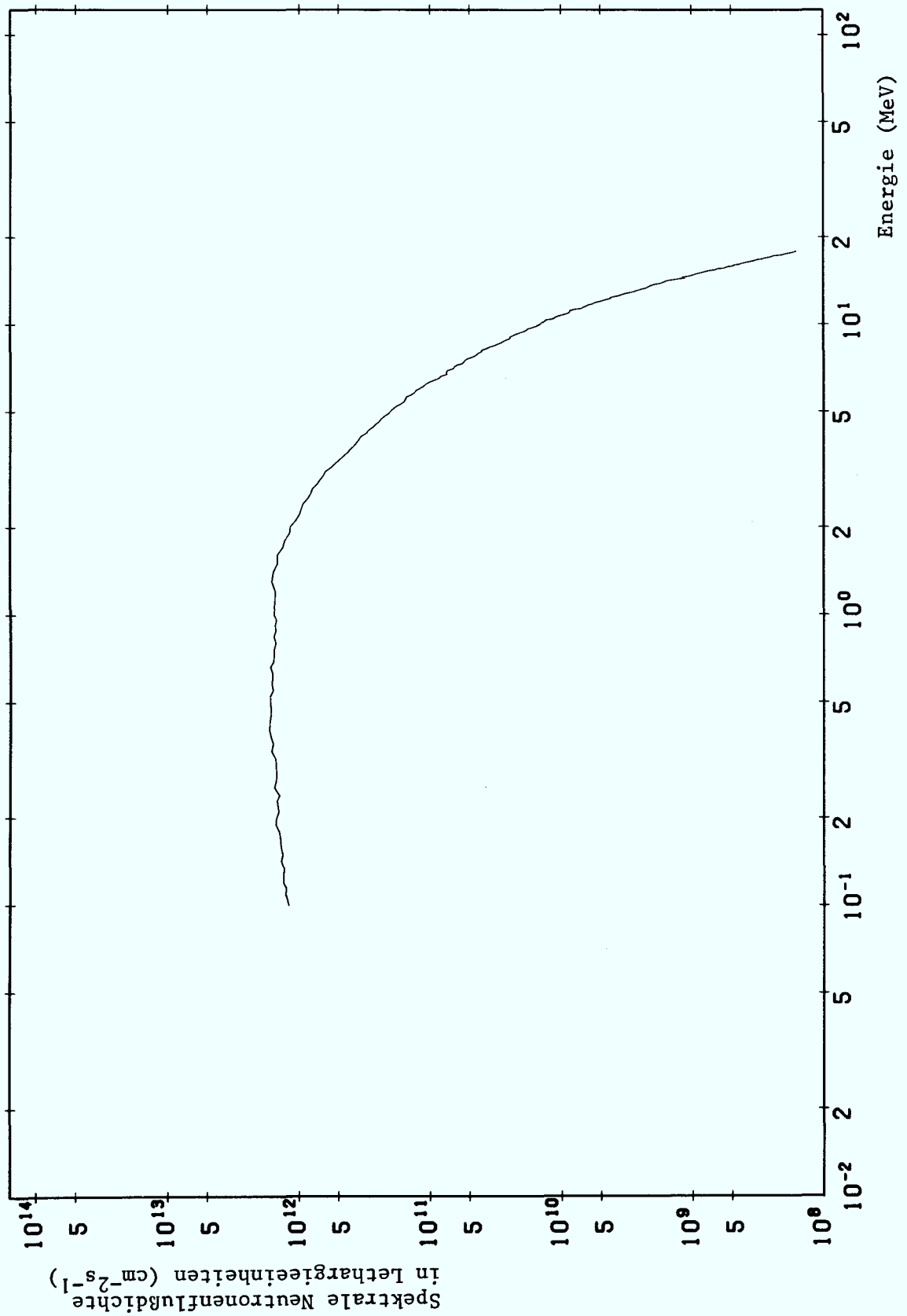


Bild 11: MERLIN-Spektrum oberhalb 0,1 MeV bei -11 cm, Sonden unter Gadolinium im Zentrum einer CT100-Stahlprobe bestrahlt am Core-Rand (Stahl-Großproben-Vorversuch)

DIDO-Spektrum in B3 auf Kernmittelebene, Sonden unter Gadolinium

Reaktorleistung: 23 MW

Verw.Reaktion	Gemess.Aktivierung (1/S)		Berechnete Aktivierung (1/S)	DELTA I (%)
Au 197 (N,G)	7.576D-09	± 4. %	7.642D-09	-0.9
Co 59 (N,G)	2.119D-09	±10. %	2.100D-09	0.9
Cu 63 (N,G)	1.647D-10	±10. %	1.661D-10	-0.8
Np 237 (N,F)	1.195D-10	± 4. %	1.194D-10	0.1
Ti 47 (N,P)	1.338D-12	± 4. %	1.330D-12	0.6
Ni 58 (N,P)	8.053D-12	± 4. %	8.003D-12	0.6
Fe 54 (N,P)	5.900D-12	± 4. %	5.781D-12	2.0
Ti 46 (N,P)	8.340D-13	± 4. %	8.584D-13	-2.9
Ti 48 (N,P)	2.258D-14	± 4. %	2.246D-14	0.5

DELTA = 1.408 % IAUS = 40 MONTCA = 74

EGRENZ (MeV)	INTPHI (cm ⁻² s ⁻¹)	EGRENZ (MeV)	INTPHI (cm ⁻² s ⁻¹)	EGRENZ (MeV)	INTPHI (cm ⁻² s ⁻¹)
1.00D-06	4.719D+14	1.00D-01	1.218D+14	2.00D+00	3.103D+13
5.00D-06	4.221D+14	2.00D-01	1.012D+14	3.00D+00	1.594D+13
1.00D-05	4.003D+14	3.00D-01	8.944D+13	4.00D+00	8.023D+12
5.00D-05	3.522D+14	4.00D-01	8.139D+13	5.00D+00	4.107D+12
1.00D-04	3.306D+14	5.00D-01	7.518D+13	6.00D+00	2.155D+12
5.00D-04	2.814D+14	6.00D-01	7.017D+13	7.00D+00	1.132D+12
1.00D-03	2.598D+14	6.90D-01	6.630D+13	8.00D+00	5.666D+11
5.00D-03	2.107D+14	8.00D-01	6.216D+13	9.00D+00	2.717D+11
1.00D-02	1.896D+14	8.80D-01	5.939D+13	1.00D+01	1.268D+11
5.00D-02	1.418D+14	1.00D+00	5.559D+13		

PHITOT = 5.391 D+14 cm⁻²s⁻¹

PHIG1 = 5.559 D+13 cm⁻²s⁻¹

PHIG.1 = 1.218 D+14 cm⁻²s⁻¹

DAMAGE = 8.033 D-08 s⁻¹

DAMSIG = 1.445 D-21 cm²

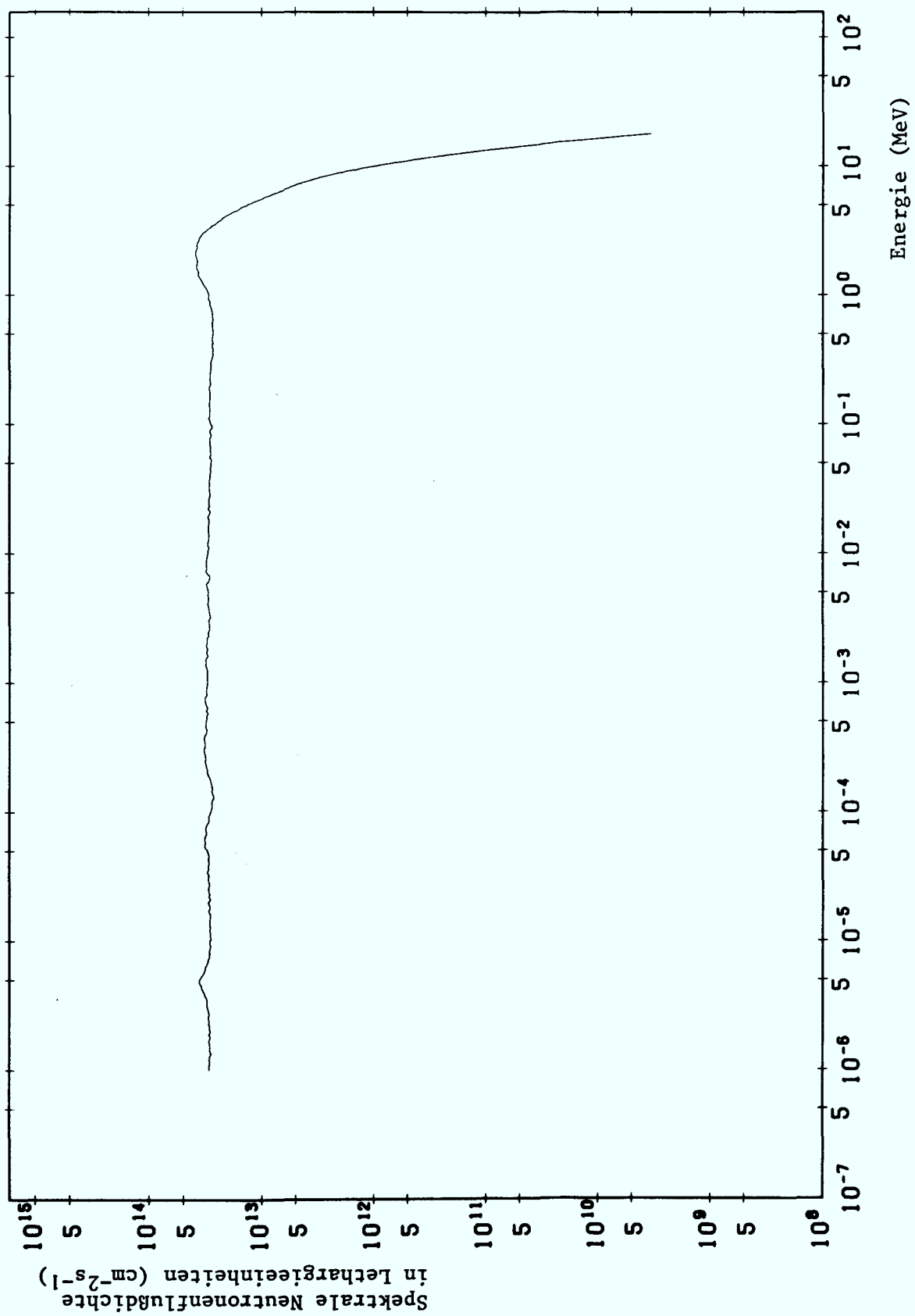


Bild 12: DIDO-Spektrum in B3 auf Kernmittelebene,
Sonden unter Gadolinium

DIDO-Spektrum in B3 auf Kernmittelebene, Sonden ohne thermischen Absorber
Reaktorleistung: 23 MW

Verw.Reaktion	Gemess.Aktivierung (1/S)		Berechnete Aktivierung (1/S)	DELTAI (%)
SC 45 (N,G)	5.075D-09	± 5 .%	4.840D-09	4.6 .
Au 197 (N,G)	2.087D-08	± 3 .%	2.080D-08	0.3
Co 59 (N,G)	8.276D-09	± 3 .%	8.131D-09	1.8
Cu 63 (N,G)	8.217D-10	± 5 .%	8.728D-10	-6.2
In 115 (N,N')	1.500D-11	± 4 .%	1.503D-11	-0.2
Ti 47 (N,P)	1.412D-12	± 4 .%	1.303D-12	1.3
Ni 58 (N,P)	8.464D-12	± 4 .%	8.480D-12	-0.2
Fe 54 (N,P)	6.061D-12	± 4 .%	6.213D-12	-2.5
Ti 46 (N,P)	9.099D-13	± 4 .%	9.346D-13	-2.7
Ti 48 (N,P)	2.395D-14	± 4 .%	2.297D-14	4.1

DELTA = 3.256 % IAUS = 40 MONTCA = 491

EGRENZ (MeV)	INTPHI (cm ⁻² s ⁻¹)	EGRENZ (MeV)	INTPHI (cm ⁻² s ⁻¹)	EGRENZ (MeV)	INTPHI (cm ⁻² s ⁻¹)
1.00D-06	4.425D+14	1.00D-01	1.195D+14	2.00D+00	3.215D+13
5.00D-06	3.960D+14	2.00D-01	1.004D+14	3.00D+00	1.716D+13
1.00D-05	3.761D+14	3.00D-01	8.912D+13	4.00D+00	8.830D+12
5.00D-05	3.290D+14	4.00D-01	8.126D+13	5.00D+00	4.500D+12
1.00D-04	3.089D+14	5.00D-01	7.525D+13	6.00D+00	2.303D+12
5.00D-04	2.614D+14	6.00D-01	7.036D+13	7.00D+00	1.174D+12
1.00D-03	2.425D+14	6.90D-01	6.662D+13	8.00D+00	5.735D+11
5.00D-03	1.976D+14	8.00D-01	6.258D+13	9.00D+00	2.714D+11
1.00D-02	1.799D+14	8.80D-01	5.990D+13	1.00D+01	1.256D+11
5.00D-02	1.378D+14	1.00D+00	5.621D+13		

PHITOT = 7.438 D+14 cm⁻²s⁻¹

PHIG1 = 5.621 D+13 cm⁻²s⁻¹

PHIG.1 = 1.195 D+14 cm⁻²s⁻¹

DAMAGE = 8.186 D-08 s⁻¹

DAMSIG = 1.456 D-21 cm²

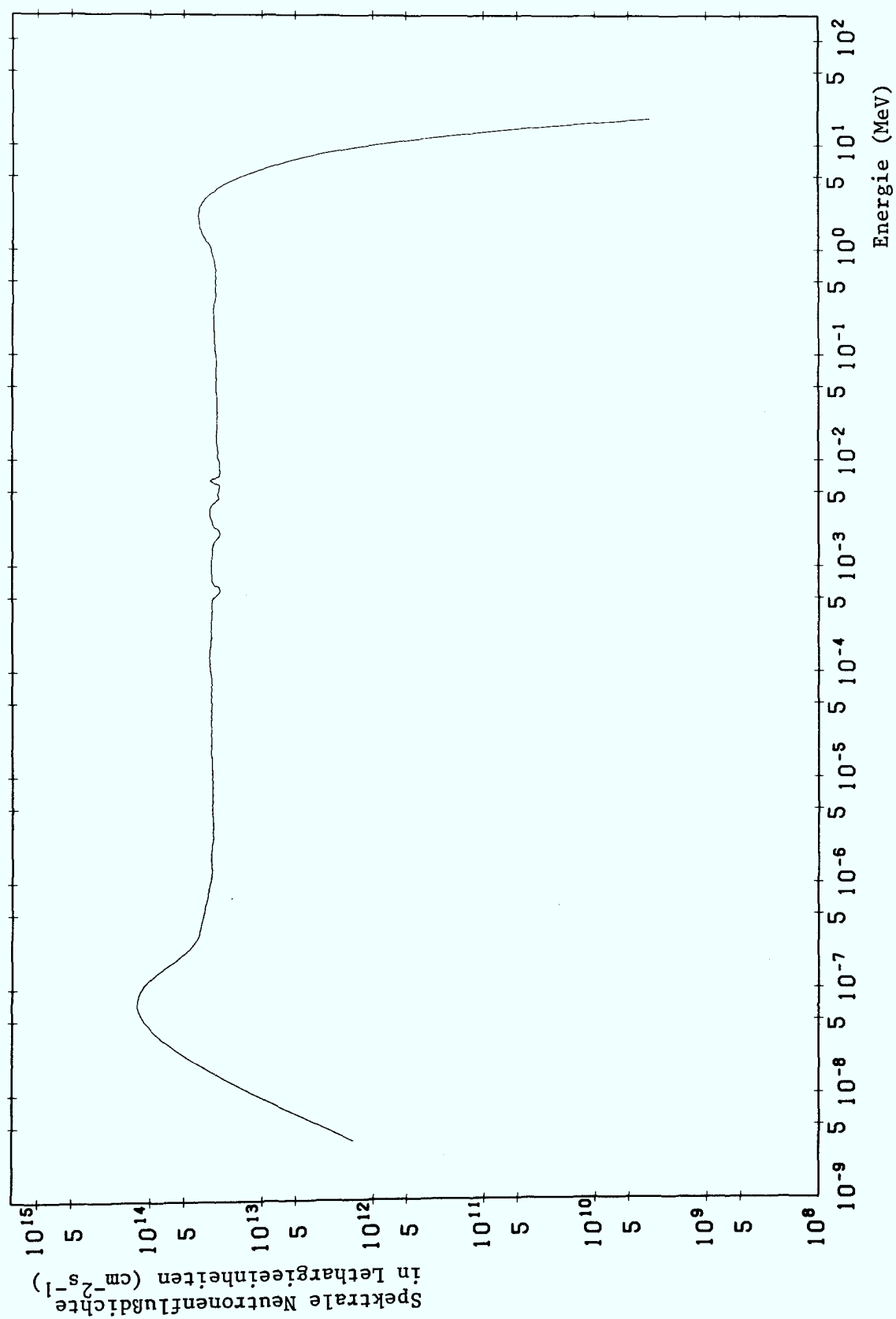


Bild 13: DIDO-Spektrum in B3 auf Kernmittelebene,
Sonden ohne thermischen Absorber

DIDO-Spektrum in B5 bei +8 cm, Sonden unter Gadolinium
in Charpy-Dummies eines beladenen BE9-Bestrahlungsrigs
Reaktorleistung: 22 MW

Verw.Reaktion	Gemess.Aktivierung (1/S)		Berechnete Aktivierung (1/S)	DELTAI (%)
Au 197 (N,G)	4.437D-09	± 4.%	4.392D-09	1.0
Co 59 (N,G)	1.032D-09	±10.%	1.039D-09	-0.7
Fe 58 (N,G)	2.571D-11	±10.%	2.577D-11	-0.2
NP 237 (N,F)	1.089D-10	± 4.%	1.084D-10	0.5
U 238 (N,F)	1.990D-11	± 4.%	1.986D-11	0.2
Ti 47 (N,P)	1.057D-12	± 4.%	1.019D-12	3.6
Ni 58 (N,P)	5.820D-12	± 4.%	5.944D-12	-2.1
Fe 54 (N,P)	4.202D-12	± 4.%	4.221D-12	-0.5
Ti 46 (N,P)	6.121D-13	± 4.%	6.122D-13	-0.0
Ti 48 (N,P)	1.579D-14	± 4.%	1.577D-14	0.2

DELTA = 1.461 % IAUS = 40 MONTCA = 39

EGRENZ (MeV)	INTPHI (cm ⁻² s ⁻¹)	EGRENZ (MeV)	INTPHI (cm ⁻² s ⁻¹)	EGRENZ (MeV)	INTPHI (cm ⁻² s ⁻¹)
1.00D-06	3.689D+14	1.00D-01	1.160D+14	2.00D+00	2.443D+13
5.00D-06	3.418D+14	2.00D-01	9.635D+13	3.00D+00	1.112D+13
1.00D-05	3.283D+14	3.00D-01	8.470D+13	4.00D+00	5.689D+12
5.00D-05	2.966D+14	4.00D-01	7.616D+13	5.00D+00	2.900D+12
1.00D-04	2.809D+14	5.00D-01	7.081D+13	6.00D+00	1.611D+12
5.00D-04	2.462D+14	6.00D-01	6.513D+13	7.00D+00	8.401D+11
1.00D-03	2.290D+14	6.90D-01	6.005D+13	8.00D+00	4.108D+11
5.00D-03	1.904D+14	8.00D-01	5.457D+13	9.00D+00	1.909D+11
1.00D-02	1.748D+14	8.80D-01	5.139D+13	1.00D+01	8.173D+10
5.00D-02	1.346D+14	1.00D+00	4.749D+13		

$$\text{PHITOT} = 4.046 \text{ D+14 cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$$

$$\text{PHIG1} = 4.749 \text{ D+13 cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$$

$$\text{PHIG.1} = 1.160 \text{ D+14 cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$$

$$\text{DAMAGE} = 6.952 \text{ D-08 s}^{-1}$$

$$\text{DAMSIG} = 1.464 \text{ D-21 cm}^2$$

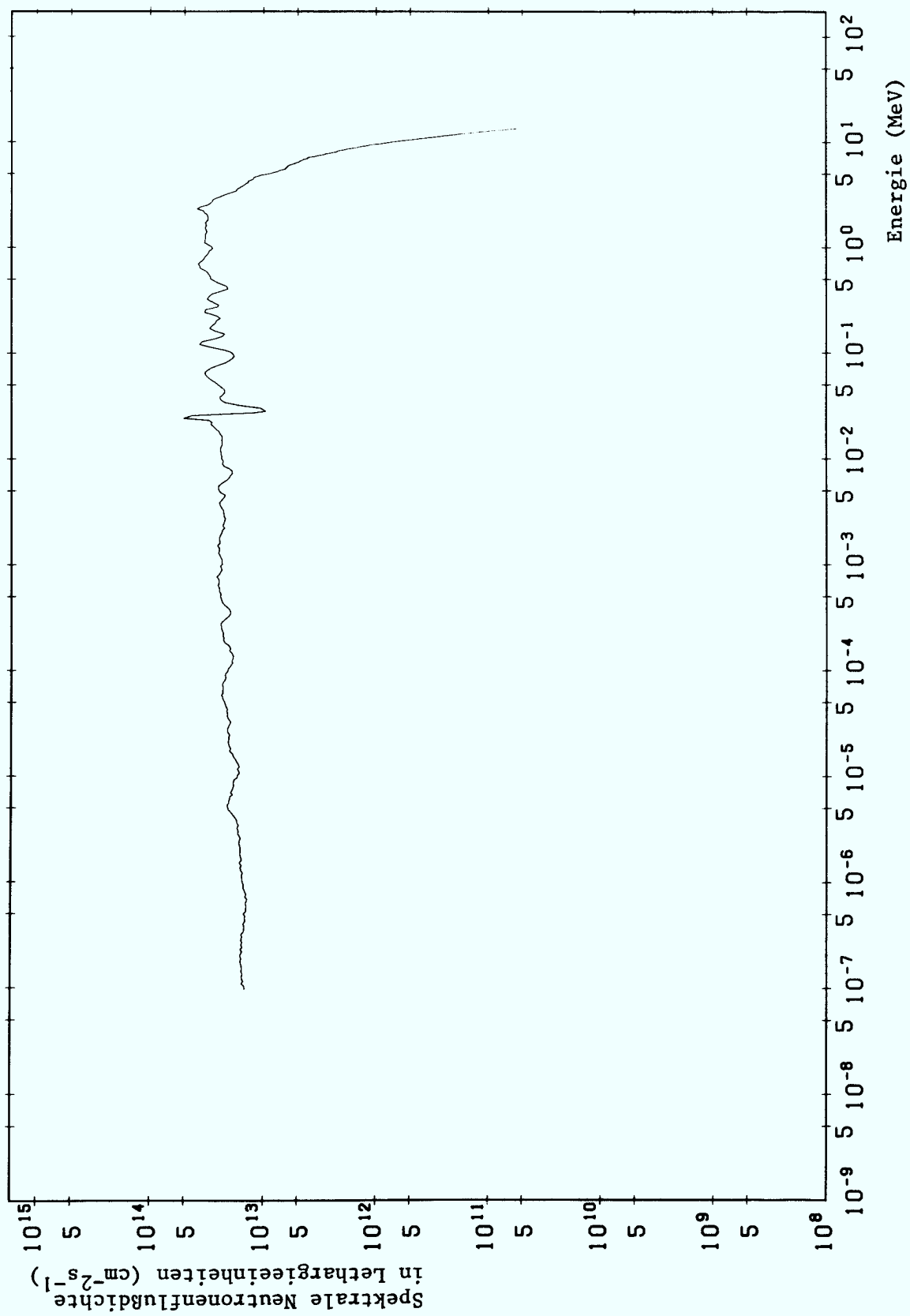


Bild 14: DIDO-Spektrum in B5 bei +8 cm, Sonden unter Gadolinium in Charpy-Dummies eines beladenen BE9-Bestrahlungsrigs

BR2-Spektrum in H4 bei -5 cm, Sonden unter Gadolinium

GSB-Testelement, Leitrohraußenseite

Reaktorleistung: 84,5 MW

Verw.Reaktion	Gemess.Aktivierung (1/S)			Berechnete Aktivierung (1/S)	DELTA I (%)
Sc 45 (N,G)	1.166D-10	±10.%		1.163D-10	0.2
Co 59 (N,G)	6.554D-10	±10.%		6.474D-10	1.2
Np 237 (N,F)	3.052D-10	± 4.%		3.058D-10	-0.2
Ni 58 (N,P)	1.393D-11	± 4.%		1.449D-11	-4.0
Fe 54 (N,P)	1.089D-11	± 4.%		1.053D-11	3.3
Ti 46 (N,P)	1.468D-12	± 4.%		1.466D-12	0.2

DELTA = 2.388 % IAUS = 40 MONTCA = 56

EGRENZ (MeV)	INTPHI (cm ⁻² s ⁻¹)	EGRENZ (MeV)	INTPHI (cm ⁻² s ⁻¹)	EGRENZ (MeV)	INTPHI (cm ⁻² s ⁻¹)
1.00D-06	5.670D+14	1.00D-01	3.148D+14	2.00D+00	5.638D+13
5.00D-06	5.451D+14	2.00D-01	2.771D+14	3.00D+00	2.820D+13
1.00D-05	5.363D+14	3.00D-01	2.475D+14	4.00D+00	1.460D+13
5.00D-05	5.110D+14	4.00D-01	2.236D+14	5.00D+00	7.151D+12
1.00D-04	5.006D+14	5.00D-01	2.038D+14	6.00D+00	3.296D+12
5.00D-04	4.714D+14	6.00D-01	1.868D+14	7.00D+00	1.370D+12
1.00D-03	4.560D+14	6.90D-01	1.730D+14	8.00D+00	3.654D+11
5.00D-03	4.154D+14	8.00D-01	1.577D+14		
1.00D-02	3.966D+14	8.80D-01	1.473D+14		
5.00D-02	3.441D+14	1.00D+00	1.330D+14		

PHITOT = 5.760 D+14 cm⁻²s⁻¹PHIG1 = 1.330 D+14 cm⁻²s⁻¹PHIG.1 = 3.148 D+14 cm⁻²s⁻¹DAMAGE = 1.818 D-07 s⁻¹DAMSIG = 1.367 D-21 cm²

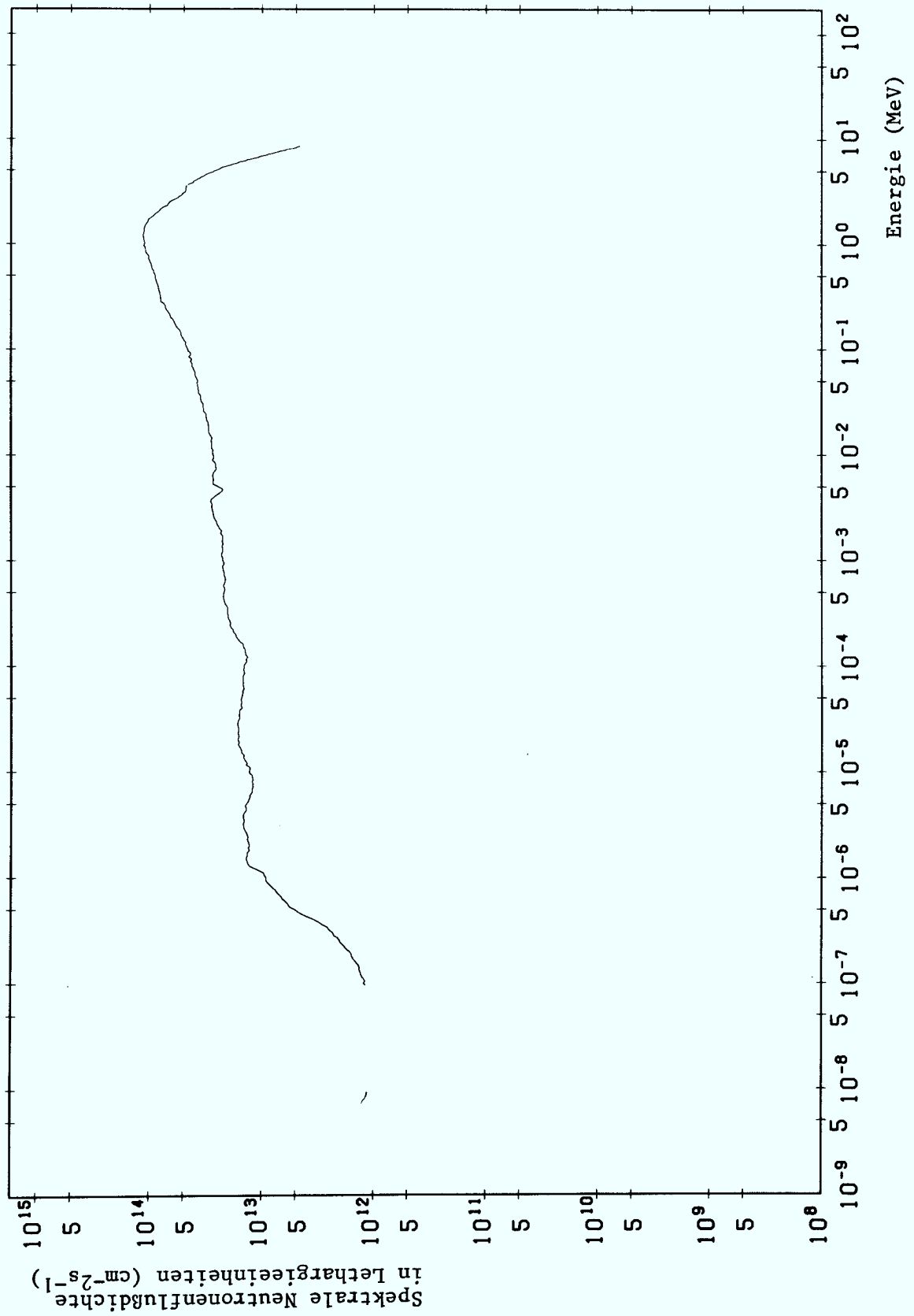


Bild 15: BR2-Spektrum in H4 bei -5 cm, Sonden unter Gadolinium
GSB-Testelement, Leitrohraußenseite

ORR-Spektrum in Pool Side Facility, Pressure Vessel Mockup,
Überwachungsposition, am Rand der metallurgischen Kapsel,
Sonden unter Gadolinium in Charpy-Dummies
Reaktorleistung: 30 MW

Verw.Reaktion	Gemess.Aktivierung (1/S)	Berechnete Aktivierung (1/S)	DELTA I (%)
Sc 45 (N,G)	1.659D-11 ±10.%	1.625D-11	2.0
U 235 (N,F)	3.832D-10 ±10.%	3.941D-10	-2.8
Co 59 (N,G)	7.332D-11 ±10.%	7.256D-11	1.0
Fe 58 (N,G)	1.544D-12 ±10.%	1.557D-12	-0.9
Np 237 (N,F)	1.701D-11 ± 4.%	1.689D-11	0.7
U 238 (N,F)	2.033D-12 ± 4.%	2.069D-12	-1.7
Ni 58 (N,P)	6.131D-13 ± 3.%	6.104D-13	0.4
Fe 54 (N,P)	4.415D-13 ± 3.%	4.418D-13	-0.1
Cu 63 (N,A)	2.919D-15 ± 3.%	2.849D-15	2.4

DELTA = 1.713 % IAUS = 40 MONTCA = 131

EGRENZ (MeV)	INTPHI (cm ⁻² s ⁻¹)	EGRENZ (MeV)	INTPHI (cm ⁻² s ⁻¹)	EGRENZ (MeV)	INTPHI (cm ⁻² s ⁻¹)
1.00D-07	3.736D+13	5.00D-02	2.213D+13	1.00D+00	5.992D+12
1.00D-06	3.591D+13	1.00D-01	2.005D+13	2.00D+00	2.229D+12
5.00D-06	3.422D+13	2.00D-01	1.787D+13	3.00D+00	1.149D+12
1.00D-05	3.343D+13	3.00D-01	1.634D+13	4.00D+00	6.470D+11
5.00D-05	3.152D+13	4.00D-01	1.292D+13	5.00D+00	3.612D+11
1.00D-04	3.066D+13	5.00D-01	1.218D+13	6.00D+00	1.993D+11
5.00D-04	2.861D+13	6.00D-01	1.064D+13	7.00D+00	1.005D+11
1.00D-03	2.791D+13	6.90D-01	8.936D+12	8.00D+00	5.047D+10
5.00D-03	2.562D+13	8.00D-01	7.707D+12	9.00D+00	2.459D+10
1.00D-02	2.482D+13	8.80D-01	6.950D+12	1.00D+01	1.153D+10

$$\text{PHITOT} = 3.736 \text{ D+13 cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$$

$$\text{PHIG1} = 5.992 \text{ D+12 cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$$

$$\text{PHIG.1} = 2.005 \text{ D+13 cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$$

$$\text{DAMAGE} = 9.604 \text{ D-09 s}^{-1}$$

$$\text{DAMSIG} = 1.603 \text{ D-21 cm}^2$$

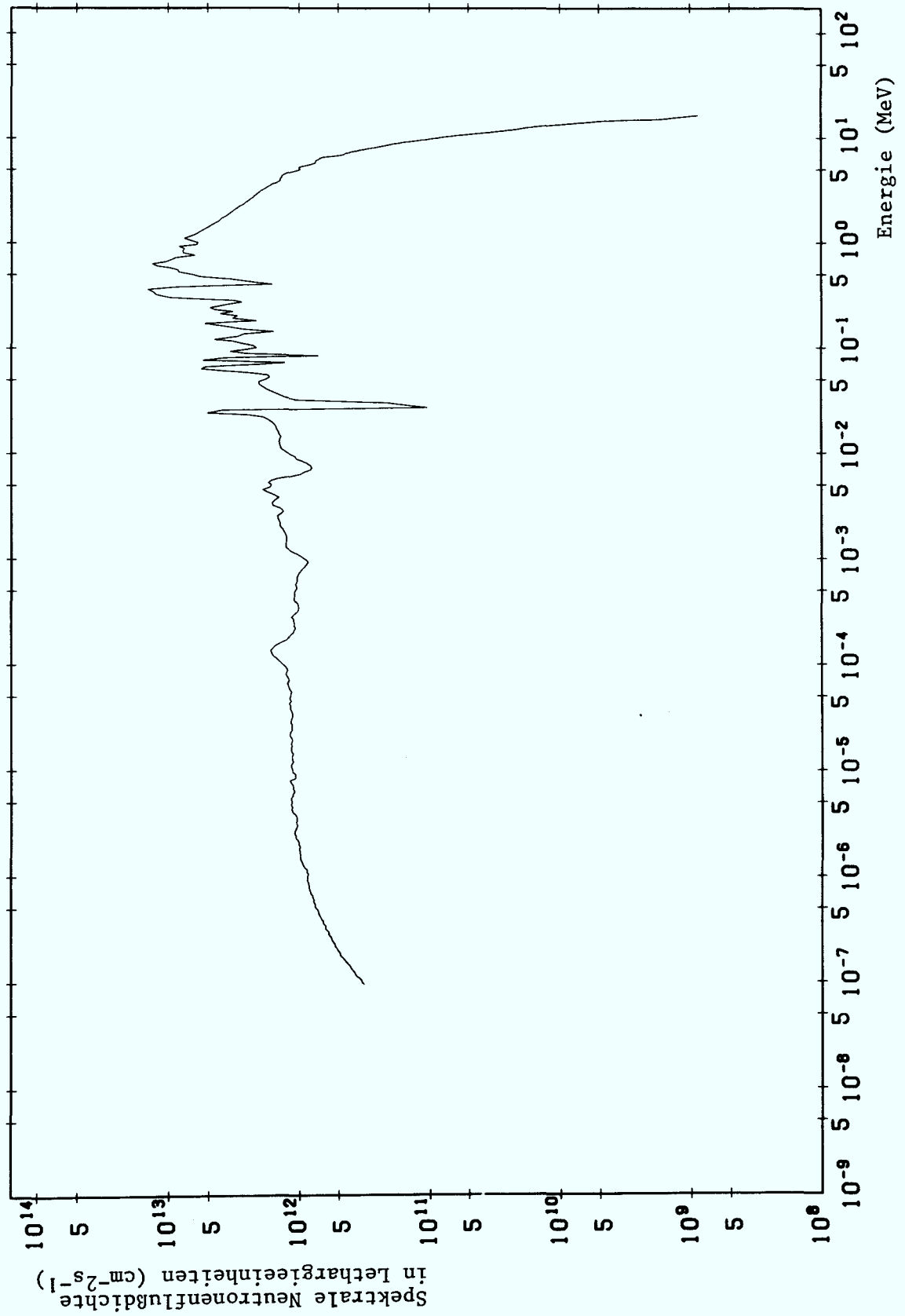


Bild 16: ORR-Spektrum in Pool Side Facility, PV Mockup, Überwachungsposition, am Rand der metallurgischen Kapsel, Sonden unter Gadolinium in Charpy-Dummies

L 54-Spektrum im Core-Zentrum (Politecnico di Milano, CESNEF),
 Sonden unter Cadmium¹⁾
 Reaktorleistung: 0.05 MW

Verw.Reaktion	Gemess.Aktivierung (1/S)		Berechnete Aktivierung (1/S)	DELTA I (%)
Am 241 (N,F)	2.731D-24	± 4.%	2.711D-24	0.7
U 235 (N,F)	2.904D-23	± 4.%	2.902D-23	0.1
Rh 103 (N,N')	7.807D-25	± 1.%	7.736D-25	0.9
In 115 (N,N')	1.837D-25	± 1.%	1.820D-25	0.9
U 238 (N,F)	2.881D-25	± 1.%	2.926D-25	-1.5
Th 232 (N,F)	7.256D-26	± 4.%	7.180D-26	1.0
Ti 47 (N,P)	1.595D-26	± 1.%	1.593D-26	0.1
Ni 58 (N,P)	9.788D-26	± 1.%	9.593D-26	2.0
Fe 54 (N,P)	6.775D-26	± 1.%	6.812D-26	-0.5
Ti 46 (N,P)	9.821D-27	± 1.%	9.882D-27	-0.6
Mg 24 (N,P)	1.232D-27	± 1.%	1.222D-27	0.8
Al 27 (N,A)	5.813D-28	± 1.%	5.854D-28	-0.7

DELTA = 1.020 % IAUS = 40 MONTCA = 42

EGRENZ (MeV)	INTPHI (cm ⁻² s ⁻¹)	EGRENZ (MeV)	INTPHI (cm ⁻² s ⁻¹)	EGRENZ (MeV)	INTPHI (cm ⁻² s ⁻¹)
1.00D-06	2.720D+00	1.00D-01	1.353D+00	2.00D+00	3.718D-01
5.00D-06	2.590D+00	2.00D-01	1.215D+00	3.00D+00	1.926D-01
1.00D-05	2.531D+00	3.00D-01	1.117D+00	4.00D+00	9.387D-02
5.00D-05	2.382D+00	4.00D-01	1.043D+00	5.00D+00	4.583D-02
1.00D-04	2.313D+00	5.00D-01	9.819D-01	6.00D+00	2.180D-02
5.00D-04	2.139D+00	6.00D-01	9.257D-01	7.00D+00	1.031D-02
1.00D-03	2.055D+00	6.90D-01	8.740D-01	8.00D+00	4.927D-03
5.00D-03	1.841D+00	8.00D-01	8.126D-01	9.00D+00	2.336D-03
1.00D-02	1.739D+00	8.80D-01	7.687D-01	1.00D+01	1.120D-03
5.00D-02	1.483D+00	1.00D+00	7.075D-01		

$$\text{PHITOT} = 2.780 \text{ D+00 cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$$

$$\text{PHIG1} = 7.075 \text{ D-01 cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$$

$$\text{PHIG.1} = 1.353 \text{ D+00 cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$$

$$\text{DAMAGE} = 9.262 \text{ D-22 s}^{-1}$$

$$\text{DAMSIG} = 1.309 \text{ D-21 cm}^2$$

1) Neutronenspektrum und Aktivierungen in relativen Einheiten nach /46/

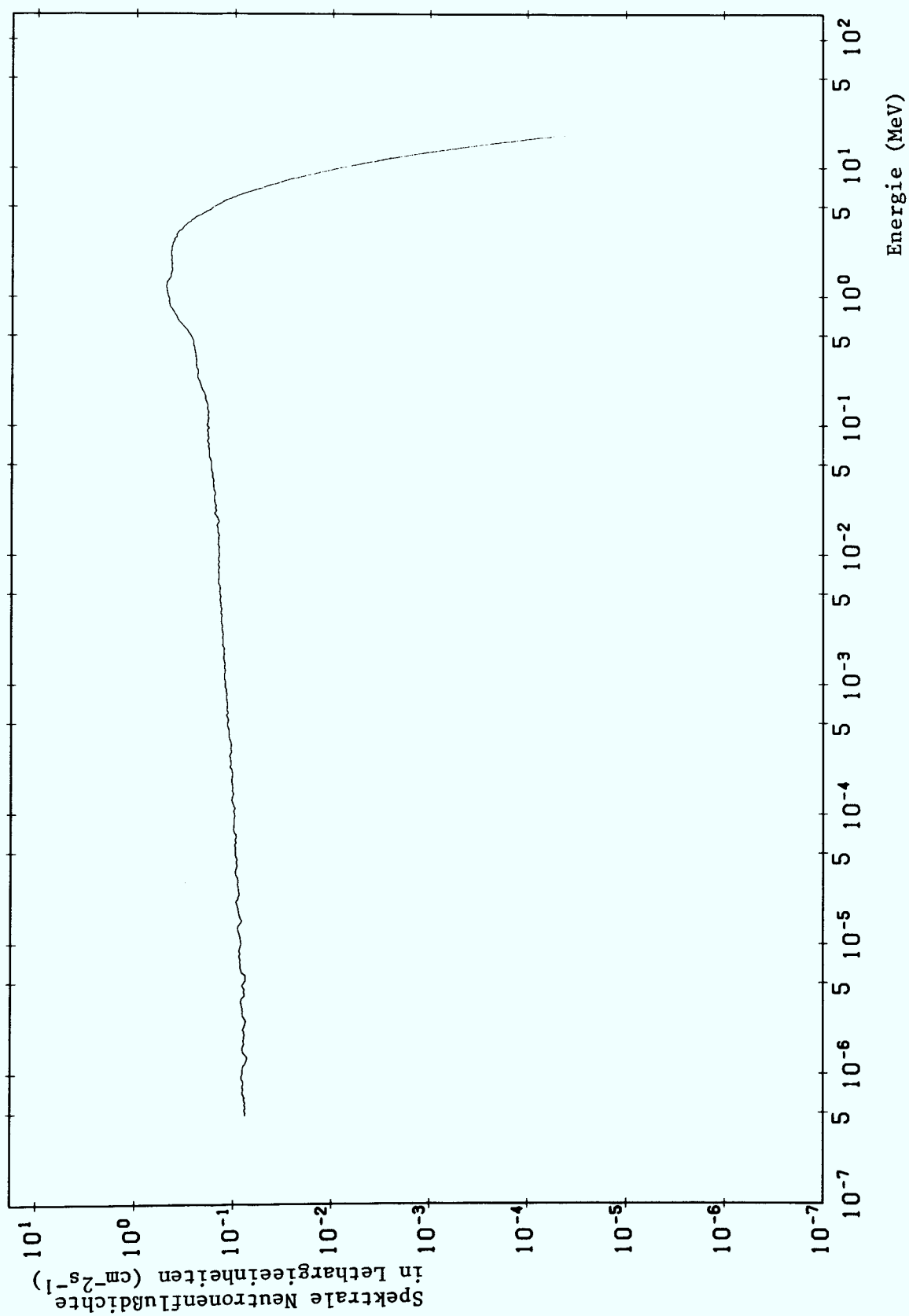


Bild 17: L-54-Spektrum im Core-Zentrum (Politecnico di Milano, CESNEF),
Sonden unter Cadmium

13 REFERENZEN

Eine erste Version des Rechenprogramms SAND-MX2 wurde von Chr. Meixner, Zentralabteilung Brennelement- und Bestrahlungstechnologie (ZBB) der Kernforschungsanlage Jülich, erstellt. Zum Zwecke der Erzeugung von Guess-Spektren in der Energiegruppenstruktur der SAND-II-Library aus gegebenen energetischen Neutronenverteilungen beliebiger Gruppenstruktur haben wir ein von H.D. Talarek, Institut für Kernphysik (IKP) der KFA, erhaltenes Spline-Programm zweckdienlich umgewandelt. Sonden- und Bestrahlungstechnologie sowie die Aktivierungsbestimmung lagen bei G. Borchardt (ZBB), G. Segelhorst (ZBB) und W. Schneider (ZBB). Zur Verwendung als Guess-Spektren stellten H.D. Talarek (IKP), K. Almalah, Institut für Kernenergetik und Energiesysteme (IKE) der Universität Stuttgart, A. Fischer (IKE), G. Prillinger (IKE), R. Wartmann (IKE), H. Tourwé und L. Fouarge, letzte beide vom C.E.N./S.C.K. in Mol, Belgien, gerechnete energetische Neutronenverteilungen zur Verfügung. Wertvolle Diskussionsbeiträge steuerten G. Borchardt (ZBB) und W. Schneider (ZBB) bei. Allen Beteiligten wird hiermit gedankt.

14. LITERATUR

- 1 McElroy, W.N., S. Berg, T. Crocket und R.G. Hawkins:
A Computer-Automated Iterative Method for Neutron Flux Spectra Determination by Foil Activation.
AFWL-TR-67, Vol.I-IV, 1967.
- 2 Meixner, Chr.:
Persönliche Mitteilung, 1973.
- 3 Zijp, W.L.:
Review of Activation Methods for the Determination of Fast Neutron Spectra.
RCN-37, 1965.
- 4 Weise, L.:
Gegenwärtige Verfahren zur Spektroskopie schneller Neutronen mit Hilfe von Schwellwertsonden.
Jül-414-RX, 1966.
- 5 Bodewig, E.:
Matrix Calculus.
Amsterdam, North-Holland Publishing Company, 1959.
- 6 DiCola, G., und A. Rota:
RDMM - A Code for Fast Neutron Spectra Determination by Activation Analysis.
EUR 2985 e, 1966.
- 7 Ebersold, F.:
A Method of Determining Neutron Spectra from Reaction Rates and a Hypothetical Spectrum.
J. Nucl. Energy 22 (1968), p. 665 ff.
- 8 Stallmann, F.W., und F.B.K. Kam:
Review of Unfolding Methods for Neutron Flux Dosimetry. Proceedings of the First ASTM-EURATOM Symposium on Reactor Dosimetry at Petten (Holland), September 22-26, 1975.
EUR 5667 e/f, Vol.I (1977),p.221 ff.
- 9 Najžer, M., B. Glumac und M. Pauko:
Many Channel Spectrum Unfolding. Proceedings of the Third ASTM-EURATOM Symposium on Reactor Dosimetry at Ispra (Italy), October 1-5, 1979.
EUR 6813 en-fr, Vol. II (1980), p. 743 ff.
- 10 Greer, C.R., J.A. Halbleib und J.V. Walker:
A Technique for Unfolding Neutron Spectra from Activation Measurements.
SC-RR-67-746 (1967).
- 11 Fischer, A., und L. Turi:
The RFSP Programme for Unfolding Neutron Spectra from Activation Data.
INDC (HUN)-8/U, IAEA, Wien (1972).
- 12 Fischer, A.:
RFSP-JÜL: A Programme for Unfolding Neutron Spectra from Activation Data.
Jül-1475 (1977).

- 13 Kam, F.B.K., und F.W. Stallmann:
CRYSTAL BALL - A Computer Program for Determining Neutron Spectra
from Activation Measurements.
ORNL-TM-4601 (1974).
- 14 Stallmann, F.W., J.F. Eastham und F.B.K. Kam:
WINDOWS - A Program for the Analysis of Spectral Data Foil Activation
Measurements.
ORNL-TM-6656 (1978).
- 15 Perey, F.G.:
Least-Squares Dosimetry Unfolding: The Program STAY'SL.
ORNL-TM-6062, ENDF-254 (1977).
- 16 Petilli, M.:
The Unfolding Code DANTE and its Applications.
ORNL-RSRC-40 (1976), p. 79 ff.
- 17 Schmittroth, F.:
FERRET Data Analysis Code.
HEDL-TME 79-40 (1979).
- 18 Stallmann, F.W.:
LSL - A Logarithmic Least Squares Adjustment Method. Proceedings of
the Fourth ASTM-EURATOM Symposium on Reactor Dosimetry at Gaithers-
burg (Maryland), March 22-26, 1982.
NUREG/CP-0029, Vol. II (1982), p. 1123 ff.
- 19 Oster, C.A., W.N. McElroy und J.M. Marr:
A Monte Carlo Program for SAND-II Error Analysis.
HEDL-TME-73-20, UC-79b (1973).
- 20 Zijp, W.L., É.M. Zsolnay, H.J. Nolthenius, E.J. Szondi, G.C.H.M.
Verhaag, D.E. Cullen und C. Ertek:
Final Report on the Real-80 Exercise.
ECN-128 (Februar 1983).
- 21 Borchardt, G., W. Schneider und G. Segelhorst:
Persönliche Mitteilung (1975-1982).
- 22 Zijp, W.L.:
Review of Activation Methods for the Determination of Neutron Flux
Density Spectra.
RCN-241 (1976).
- 23 Kuijpers, L.J.M.:
Experimental Model Studies for a Fusion Reactor Blanket.
Dissertationsschrift, Eindhoven (1976).
- 24 Calamand, A.:
Cross-Sections for Fission Neutron Spectrum Induced Reactions. Hand-
book on Nuclear Activation Cross-Sections.
IAEA Technical Reports Series Nr. 156, IAEA, Wien (1974), p. 273-324.

- 25 Seelmann-Eggebert, W., G. Pfennig, H. Münzel und H. Klewe-Nebenius:
Karlsruher Nuklidkarte, 5. Aufl. (1981).
- 26 Mughabghab, S.F., und D.I. Garber:
Neutron Cross Sections.
BNL-325, Third Edition, Vol. I (1973).
- 27 Zijp, W.L., und J.H. Baard:
Nuclear Data Guide for Reactor Neutron Metrology. Part 2: Fission Reactions.
ECN-71 (1979).
- 28 Zijp, W.L., und J.H. Baard:
Nuclear Data Guide for Reactor Neutron Metrology. Part 1: Activation Reactions.
ECN-70 (1979).
- 29 Dierckx, R.:
Critical Comparison of Spectrum Unfolding Codes.
INDC(NDS)-56/U, IAEA, Wien (1973), p. 55ff.
- 30 Kondo, I.:
SELS - A Program for Determining Selfshielding Corrections for Foil Detectors.
RCN-74-105 (1974).
- 31 Borchardt, G., und Chr. Meixner:
Bestimmung des Neutronenspektrums im thermischen Energiebereich.
Atomkernenergie 20 (1972), p. 102 ff.
- 32 Zijp, W.L.:
Remarks on Response Ranges of Activation Detectors.
INDC(NDS)-56/U, IAEA, Wien (1973), p. 37ff.
- 33 Keller, J.M., und W.P. Voorbraak:
Cross Section Library (CCC 112B) of SAND-II.
R.M.G. Note 73/11 (1973).
- 34a Rieffe, H.Ch., und H.J. Nolthenius:
Cross Section Library ENDF/B-IV BNL (in the SAND-II Format).
RCN-75-157 (1975).
- 34b Zijp, W.L., H.J. Nolthenius und N.J.C.M. van der Borg:
Cross Section Library DOSCROSS77 (in the SAND-II Format).
ECN-25 (1977).
- 35 Zurmühl, R.:
Praktische Mathematik für Ingenieure und Physiker.
Berlin-Göttingen-Heidelberg, Springer-Verlag (1965), p. 195 f.
- 36 McElroy, W.N., und L.S. Kellogg:
Fuels and Materials Fast Reactor Dosimetry Data Development and Testing.
Nuclear Technology 25 (1975), p. 180 ff.
- 37 McElroy, W.N., et al.: *Annual Reports for the LWR Pressure Vessel Surveillance Dosimetry Improvement Program. Zuletzt für 1981 in Proceedings of the Fourth ASTM-EURATOM Symposium on Reactor Dosimetry at Gaithersburg (Maryland), March 22-26 (1982)*.
NUREG/CP-0029, Vol. I (1982), p. 3ff.

- 38 *Tourwé, H.:*
Persönliche Mitteilung (1981).
- 39 *Späth, F.:*
Spline-Algorithmen zur Konstruktion glatter Kurven und Flächen.
München-Wien, R. Oldenbourg Verlag (1978).
- 40 *Talarek, H.D.:*
Persönliche Mitteilung (1975).
- 41 *Fouarge, L.:*
Persönliche Mitteilung (1975).
- 42a *Lott, M., J.P. Genthon, F. Gervaise, P. Mas, J.C. Mougnot und*
Nguyen van Doan:
Sections Efficaces de Création de Dommages.
Nuclear Data in Science and Technology, Vol. I, IAEA-SM-170/65,
IAEA, Vienna (1973), p. 89 ff.
- 42b *Zijp, W.L., H.J. Nolthenius und H.Ch. Rieffe:*
Damage Cross-Section Library DAMSIG81.
ECN-104 (1981).
- 43 *Genthon, J.P., B.W. Hasenclever, P. Mas, W. Schneider, S.B. Wright*
und W.L. Zijp:
Recommendations on the Measurement of Irradiation Received by the
Structural Materials of Reactors.
EUR 5274 d, e, f, n (1975).
- 44 *Alberts, W.G.:*
Verschiedene Konzepte spektrumsgemittelter Wirkungsquerschnitte zur
Interpretation von Reaktionsraten in Neutronenfeldern.
PTB-Mitteilungen 90 (1980), p. 265 ff.
- 45 *ASTM-Standard E 706-81a. 1982 Annual Book of ASTM Standards, Vol. 45:*
Nuclear Standards. ASTM, Philadelphia, Pa., USA.
- 46 *Dierckx, R., und V. Sangiust:*
Unfolding Codes for Neutron Spectra Evaluation - Possibilities and
Limitations. Proceedings of the First ASTM-EURATOM Symposium on Reactor
Dosimetry at Petten (Holland), September 22-26 (1975).
EUR 5667 e/f, Vol. I (1977), p. 322 ff.
- 47 *Borchardt, G.:*
Persönliche Mitteilung, Dezember 1973.
- 48 *Dierckx, R.:*
Role of Standard Neutron Spectra in Differential Flux Determination.
INDC(NDS)-56/U, IAEA, Wien (1973), p. 79 ff.
- 49 *Dierckx, R., D. Guidetti, M. Nimis, V. Sangiust und M. Terrani:*
Determination of the Fast Neutron Spectrum at the L 54 Reactor Core
Centre.
Energia Nucleare 20 (1973), p. 49ff.

ANHANG A:

Symboltabelle der wichtigsten
FORTRAN-Variablen für SAND-MX2

- $A(I,1)$, $I=1$ bis NDETEC, relative einfache Standardabweichungen der gemessenen Aktivierungen in Prozent.
- $A(I,2)$, $I=1$ bis NDETEC, gemessene Aktivierungen.
- $AIJ(I,K)$, $I=1$ bis NDETEC, $K=NANF$ bis NEND, spektrale Ausbeute (spectral response) nach Gl. (40).
- $AIO(I)$, $I=1$ bis NDETEC, berechnete Aktivierungen nach Gl. (41).
- $AM(I)$, $I=1$ bis NDETEC, Mittelwerte der berechneten Aktivierungen $AIO(I)$ über alle "Monte-Carlo-Ereignisse" nach Gl. (38).
- $AO(I)$, $I=1$ bis NDETEC, für die Entfaltung benutzte, d.h. randomisierte Aktivierungen nach Gl. (32).
- $C(K)$, $K=NANF$ bis NEND, Korrekturfaktoren nach Gl. (30).
- $COV(I)$, $I=1$ bis 3, Literal constants 'NO', 'GD' und 'CD'
- $COVER(I)$, $I=1$ bis NDETEC, Namen der Detektorabschirmungsmaterialien
- CUTOFF Gruppennummer der Abschneideenergie entsprechend der SAND-II-Library
- $DSIGMA(I,K)$, $I=1$ bis NSIGMA, $K=NANF$ bis NEND, relative einfache Standardabweichungen der differentiellen Aktivierungsquerschnitte auf dem Magnetband in Prozent.
- $E(K)$, $K=NANF$ bis NEND, untere Gruppengrenzen der SAND-II-Library in MeV.
- $EG(K)$, $K=1$ bis NEG, Energiegrenzen für Ausgabe der energieintegralen Flußdichte oberhalb $EG(K)$ in beliebiger Reihenfolge in MeV.
- $E1, E2, E3, E4$ Energiestützstellen des Newtonschen Interpolationspolynoms.
- ENDE noch verfügbare Rechenzeit in Tausendstel Sekunden, Parameter des Bibliotheksprogrammes FRIST
- $FISS(K)$, $K=NANF$ bis NEND, differentielle Flußdichten des verwendeten Bezugsspektrums.
- $G0, G1, G2, G3$ Koeffizienten des Newtonschen Interpolationspolynoms nach Gl. (42).
- $HILFE(I,K)$, $I=1$ bis NDETEC, $K=NANF$ bis NEND, Hilfsfeld für die Randomisierung der benötigten differentiellen Aktivierungsquerschnitte $SIGMA(I,K)$, $I=1$ bis NDETEC, $K=NANF$ bis NEND
- IAUS maximale Anzahl der Iterationen
- $I\beta(I)$, $I=1$ bis NDETEC, Eingabeparameter des Unterprogramms RANDN für unabhängige Randomisierung der gemessenen Aktivierungen = Anfangswert beim ersten RANDN-Aufruf, ungerade ganze Zahl.
- $IS1(I)$, $I=1$ bis $15 * NDETEC$, Eingabeparameter des Unterprogramms RANDN für unabhängige Randomisierung der benötigten differentiellen Aktivierungsquerschnitte $SIGMA(I,K)$, $I=1$ bis NDETEC, $K=NANF$ bis NEND, = Anfangswert beim ersten Aufruf, ungerade ganze Zahl.
- $IS2(I)$, $I=1$ bis 620, Eingabeparameter des Unterprogramms RANDN für unabhängige Randomisierung der Gruppenflußdichten des Guess-Spektrums = Anfangswert beim ersten Aufruf, ungerade ganze Zahl.

ITAG	Kalendertag des laufenden Jahres der Auswertung, Parameter des Bibliotheksprogramms DATUM
ITER	ganzzahliger Laufindex, der die Iterationen zählt.
JAHR	letzte zwei Stellen der Bezeichnung des laufenden Kalenderjahres der Auswertung, Parameter des Bibliotheksprogramms DATUM
KABS(I), I=1 bis NDETEC	Selbstabschirmungs-Korrekturfaktoren der gemessenen Aktivierungen
KZ(I), I=1 bis NDETEC	Bereichszeiger der gemessenen Aktivierungen, siehe Fußnote zu Tabelle 3: KZ(I)=1 für Sonde unter thermischer Absorberfolie KZ(I)≠1 für Sonde nackt.
LIMIT(I), I=1 bis 16	Energiebereichsgrenzen für gruppenweise unabhängige Randomisierung der benötigten differentiellen Aktivierungsquerschnitte SIGMA(I,K), I=1 bis NDETEC, K=NANF bis NEND, nach dem SAND-II Cross Section Error Assignment /36/.
MCARD	Multiplizitätsindex für mehrfache Ausgabe auf Lochkarten.
MLIST	Multiplizitätsindex für mehrfache Ausgabe auf Schnelldruckerliste.
MONAT(I), I=1 bis 12	Anzahlen der Tage des ersten bis zwölften Kalendermonats.
MONTCA	ganzzahliger Laufindex, der die "Monte-Carlo-Ereignisse" zählt.
MPOSIT	Positionszeiger der eingelesenen gemessenen Aktivierungen. Wird zur Um- bzw. Zuordnung derselben zu den entsprechenden differentiellen Aktivierungsquerschnitten und ihrer Standardabweichungen auf dem Magnetband benötigt.
NANF	Nummer der ersten verwendeten Energiegruppe, im Programm gleich 1 gesetzt.
NDETEC	Anzahl der gemessenen Aktivierungen.
NEG	Anzahl der Energiegrenzen EG(I), oberhalb derselben die energieintegralen Flußdichten ausgegeben werden.
NEND	Nummer der letzten verwendeten Energiegrenze, im Programm gleich 620 gesetzt.
NGUESS	Nummer des verwendeten Bezugsspektrums in der Spektrumbibliothek.
NPFI	Nummer des verwendeten Guess-Spektrums in der Spektrumbibliothek.
NSIGMA	Anzahl der differentiellen Aktivierungsquerschnitte auf dem Magnetband, im Programm gleich 33 gesetzt.
NSPEK	Anzahl der verschiedenen Guess-Spektren auf dem Magnetband. Wird gleich Eins gesetzt, wenn ein definiertes Guess-Spektrum der Auswertung zugrunde gelegt werden soll, ansonsten im Programm gleich 119 gesetzt.
NSTART	Dimensionszahl des Feldes START(I), I=1 bis NSTART.
NUEG(K), K=1 bis NEG	Nummer der eingelesenen Energiegrenze EG(K) entsprechend der SAND-II-Library.

- PHI(K), K=NANF bis NEND, Gruppenflußdichten des aktuellen, der Rechnung zugrunde gelegten Guess-Spektrums resp. eines Iterations-spektrums.
- PHIO(I,K), I=1 bis NSPEK, K=NANF bis NEND, differentielle Flußdichten resp. Gruppenflußdichten der auf dem Magnetband stehenden Guess-Spektren.
- PHIM(I,K), I=1 bis 2, K=NANF bis NEND, Gruppenflußdichten und deren Fehler für das Lösungsspektrum:
 PHIM(1,K) Gruppenflußdichten
 PHIM(2,K) Standardabweichung der Gruppenflußdichten.
- PHIX(K), K=NANF bis NEND, differentielle Flußdichten für das Lösungsspektrum.
- R Ausgabeparameter des Unterprogramms RANDN, (0,1)-normal verteilte Zufallszahl.
- Q relative Abweichung nach Gl. (57).
- Q(I), I=1 bis NSPEK, mit dem Guess-Spektrum der Nummer I gebildete Testgröße nach Gl. (35) für Spektrumauswahl.
- R(I), I=1 bis NDETEC, natürlicher Logarithmus des Verhältnisses zwischen randomisiertem Aktivierungsmeßwert nach Gl. (32) und berechneter Aktivierung nach Gl. (41).
- REAKA(I,J), I=1 bis NDETEC, J=1 bis 2, erster und zweiter Teil des Material- und Reaktions-Codes für die gemessenen Aktivierungen.
- REAKS(I,J), I=1 bis NSIGMA, J=1 bis 2, erster und zweiter Teil des Material- und Reaktions-Codes für die auf dem Magnetband stehenden differentiellen Aktivierungsquerschnitte.
- SIGMA(I,K), I=1 bis NSIGMA, K=NANF bis NEND, differentielle Aktivierungsquerschnitte auf dem Magnetband.
- SIGN Multiplizitätsfaktor der Standardabweichungen C in Gl. (31).
- SFISS Energieintegral des verwendeten Bezugsspektrums im gesamten Energiebereich.
- SPHIM Energieintegral des Lösungsspektrums im gesamten Energiebereich.
- START(I), I=1 bis NSTART, wobei NSTART > NSPEK ist. Die I-te Komponente des Feldes START gibt am Ende der Rechnung an, wie oft das I-te Spektrum der Guess-Spektrum-Bibliothek verwendet wurde. Der Vektor START ist bedeutungslos, wenn ein definiertes Spektrum der Auswertung zugrunde gelegt, NSPEK also gleich Eins gesetzt wird. In diesem Fall steht in der ersten Komponente von START, wie oft dieses Spektrum verwendet wurde.
- SO Eingabeparameter des Unterprogramms RANDN, Mittelwert der Normalverteilung, im Programm gleich Null gesetzt.

- S1 Eingabeparameter des Unterprogrammes RANDN, Standardabweichung der Normalverteilung, im Programm gleich Eins gesetzt.
- S1, S2, S3, S4 Koeffizienten in dem nach Potenzen der Energie umgeordneten Newtonschen Interpolationspolynom nach Gl. (42).
- WIJ(I,K), I=1 bis NDETEC, K=NANF bis NEND, relative Aktivierungen nach Gl. (43)
- XTEXT(I), I=1 bis 10, Textvariable für die Abszissenbeschriftung beider Plotts.
- YTEXT(I), I=1 bis 10, Textvariable für die Ordinatenbeschriftung des Plotts der differentiellen Neutronenflußdichten.
- ZEILE(I), I=1 bis 12, Hilfsfeld für Ausgabe des Lösungsspektrums auf Liste.
- ZEILE(I), I=1 bis 10, Hilfsfeld für Ausgabe der energieintegralen Flußdichte oberhalb der Energiegrenzen EG(K), K=1 bis NEG, auf Liste.
- ZTEXT(I), I=1 bis 10, Textvariable für die Ordinatenbeschriftung des Plotts der Gruppenflußdichten mit Standardabweichungen.

ANHANG B:

PROGRAMMLISTE FÜR SAND-MX2


```

DO 205 I=1,NDETEC
  IF(AIO(I).LE.0.DO)WRITE(6,4)MONTCA,ITER,I,AO(I),AIO(I)
4  FORMAT(1X,'AIO(I) KLEINER GLEICH 0; MONTCA=',I3,' ITER=',
&I3,' REAKTION I=',I3,' AO(I)=' ,1PE12.5,' AIO(I)=' ,E12.5)
  IF(DABS(AIO(I)).GT.1.DO)AIO(I)=1.DO
  IF(AO(I).GT.1.D+75*AO(I))GOTO 203
  AHILF=AO(I)/AIO(I)
  GOTO 204
203 WRITE(6,5)MONTCA,ITER,I,AO(I),AIO(I)
  5  FORMAT(1X,'AO(I)/AIO(I) GROESSER 1.E75; MONTCA=',I3,' ITER=',
&I3,' REAKTION I=',I3,' AO(I)=' ,1PE12.5,' AIO(I)=' ,E12.5)
  AHILF=1.D+75
204 IF(AHILF.GT.0.DO)GOTO 205
  WRITE(6,1)MONTCA,ITER,I,AO(I),AIO(I)
  1  FORMAT(1X,'AO(I)/AIO(I) KLEINER GLEICH 0; MONTCA=',I3,' ITER=',
&I3,' REAKTION I=',I3,' AO(I)=' ,1PE12.5,' AIO(I)=' ,E12.5)
  AHILF=1.D-75
205 R(I)=DLOG(AHILF)
  DO 220 J=NANF,NEND
  SUMZAE=0.DO
  SUMNEN=0.DO
  C(J)=-1.D+75
  DO 215 I=1,NDETEC
  SUMZAE=SUMZAE+WIJ(I,J)*R(I)
  SUMNEN=SUMNEN+WIJ(I,J)
215 CONTINUE
  IF(SUMNEN.EQ.0.DO)GOTO 220
  IF(SUMNEN.GT.1.D+75/100.)GOTO 220
  IF(SUMZAE.GT.100.*SUMNEN)GOTO 218
  C(J)=SUMZAE/SUMNEN
  GOTO 220
218 WRITE(6,2)MONTCA,ITER,J,SUMZAE,SUMNEN
  2  FORMAT(1X,'C(K) IN PHI1(K)=PHI0(K)*EXP C(K) GROESSER 100; ',
&' MONTCA=',I3,' ITER=',I3,' EN.-GRUPPE K=',I3,' SUMZAE(K)=' ,
&1PE12.5,' SUMNEN(K)=' ,E12.5)
220 CONTINUE
  DO 230 I=NANF,NEND
230 PHI(I)=PHI(I)*DEXP(C(I))
C
  CALL AKTIV
C
  IF(ITER.GT.IAUS)GOTO 10000
  I1=0
  DO 240 I=1,NDETEC
  IF(100*DABS(AO(I)-AIO(I))/AO(I).GT.1.D+2)GOTO 239
  IF(100*DABS(AO(I)-AIO(I))/AO(I).GT. SIGN*A(I,1))I1=I1+1
  GOTO 240
239 WRITE(6,3)MONTCA,ITER,I,AO(I),AIO(I)
  3  FORMAT(1X,'ABS(AO(I)-AIO(I))/AO(I) GROESSER 100%; MONTCA=',
&I3,' ITER=',I3,' REAKTION I=',I3,' AO(I)=' ,1PE12.5,
&' AIO(I)=' ,E12.5)
  I1=I1+1
240 CONTINUE
  IF(I1.NE.0)GOTO 22222
C
250 DO 255 I=NANF,NEND
  PHIM(1,I)=PHIM(1,I)+PHI(I)
255 PHIM(2,I)=PHIM(2,I)+PHI(I)**2
  DO 256 I=1,NDETEC
256 AM(I)=AM(I)+AIO(I)
  GOTO 11111
C
C
C
C  DATENAUSGABE

```

C		MAIN
C		MAIN
C		MAIN
77777	MONTCA=MONTCA-1	MAIN
	IF(MONTCA.NE.0)GOTO 300	MAIN
	WRITE(6,9022)	MAIN
	STOP	MAIN
300	IF(MONTCA.EQ.1)GOTO 310	MAIN
	DO 304 I=1,NDETEC	MAIN
304	AM(I)=AM(I)/MONTCA	MAIN
	DO 305 I=NANF,NEND	MAIN
	PHIM(1,I)=PHIM(1,I)/MONTCA	MAIN
	PHIM(2,I)=DSQRT(DABS	MAIN
	&((PHIM(2,I)-MONTCA*PHIM(1,I)**2)/(MONTCA-1)))	MAIN
305	CONTINUE	MAIN
310	E(621)=1.8D+1	MAIN
	IF(MCARD.LT.1)GOTO 3335	MAIN
	DO 3334 J=1,MCARD	MAIN
	DO 3333 I=1,620	MAIN
3333	PHIX(I)=PHIM(1,I)/(E(I+1)-E(I))	MAIN
3334	WRITE(7,444)(PHIX(I),I=1,620)	MAIN
	444 FORMAT('FLUX',1P7E10.3)	MAIN
3335	DO 9000 JAUS=1,MLIST	MAIN
		MAIN
	WRITE(6,9013)XTEXT	MAIN
9013	FORMAT(1H1,13X,10A8,//)	MAIN
	WRITE(6,9014)	MAIN
9014	FORMAT(10X,'VERW.REAKTION GEMESS.AKTIVIERUNG BERECHNETE AKT',	MAIN
	&'IVIERUNG DIFFERENZ DELTAI IN %',/,32X,'(1/S)',17X,'(1/S)')//	MAIN
	XSUM=0.D0	MAIN
	DO 311 I=1,NDETEC	MAIN
	SUMZAE=100*(A(I,2)-AM(I))/A(I,2)	MAIN
	XSUM=XSUM+SUMZAE**2	MAIN
	WRITE(6,9010)REKA(I,1),REKA(I,2),A(I,2),A(I,1),AM(I),SUMZAE	MAIN
311	CONTINUE	MAIN
	XSUM=XSUM/(NDETEC-1)	MAIN
	Q=DSQRT(XSUM)	MAIN
	WRITE(6,312)Q	MAIN
312	FORMAT(/,10X,'QUADRATWURZEL AUS SUMME DELTAI ZUM QUADRAT',	MAIN
	&' DURCH (NDETEC-1) =' ,F6.3,' %')	MAIN
	WRITE(6,400)	MAIN
400	FORMAT(////,10X,'SELBSTABSCHIRMUNGS-KORREKTURFAKTOREN KABS:')	MAIN
	DO 401 I=1,NDETEC	MAIN
401	WRITE(6,402)REKA(I,1),REKA(I,2),KABS(I)	MAIN
402	FORMAT(10X,'FUER',2X,2A8,2X,'KABS=',1PE12.5)	MAIN
	WRITE(6,7013)IAUS	MAIN
7013	FORMAT(////' MAXIMALE ANZAHL DER ITERATIONEN IAUS = ',I3)	MAIN
	WRITE(6,7014)SIGN	MAIN
7014	FORMAT(/' MULTIPLES DER GEMESSENEN STANDARDABWEICHUNGEN C =' ,F6.1)	MAIN
	WRITE(6,9011)MONTCA	MAIN
	WRITE(6,9012)START	MAIN
	WRITE(6,7015)NGUESS	MAIN
7015	FORMAT(1H1,'MIT ABWEICHUNGEN VOM GUESS-SPEKTRUM NR. ',I3)	MAIN
	IF(NSPEK.EQ.1)WRITE(6,7016)NPHI	MAIN
7016	FORMAT(' VERWENDETES GUESS-SPEKTRUM NR. ',I3)	MAIN
	DO 555 I=NANF,NEND	MAIN
	E\$(I)=E(I)	MAIN
555	C(I)=PHIM(1,I)	MAIN
	E(NEND+1)=E(NEND)**2/E(NEND-1)	MAIN
	E\$(NEND+1)=E(NEND+1)	MAIN
	WRITE(6,9004)	MAIN
	IS=(NEND-NANF+1)/3	MAIN
	II=1	MAIN
	IF(MONTCA.EQ.1)II=0	MAIN

```

IF(NEND.GT.IS*3+NANF-1)IS=IS+1
SPHIM=0.
SFISS=0.
DO 9999 I=1,620
SPHIM=SPHIM+PHIM(1,I)
9999 SFISS=SFISS+(E(I+1)-E(I))*FIISS(I)
DO 320 I=1,IS
I1=I
I2=IS+I
I3=IS+IS+I
ZEILE(1)=E(I1)
ZEILE(2)=PHIM(1,I1)/(E(I1+1)-E(I1))
IF(PHIM(1,I1).EQ.0.)GOTO 3121
ZEILE(3)=I1*100*PHIM(2,I1)/PHIM(1,I1)
3121 ZEILE(4)=(PHIM(1,I1)*SFISS)/((E(I1+1)-E(I1))*FIISS(I1)*SPHIM)
ZEILE(5)=E(I2)
ZEILE(6)=PHIM(1,I2)/(E(I2+1)-E(I2))
IF(PHIM(1,I2).EQ.0.)GOTO 3122
ZEILE(7)=I2*100*PHIM(2,I2)/PHIM(1,I2)
3122 ZEILE(8)=(PHIM(1,I2)*SFISS)/((E(I2+1)-E(I2))*FIISS(I2)*SPHIM)
IF(I3.GT.NEND)GOTO 315
ZEILE(9)=E(I3)
ZEILE(10)=PHIM(1,I3)/(E(I3+1)-E(I3))
IF(PHIM(1,I3).EQ.0.)GOTO 3123
ZEILE(11)=I3*100*PHIM(2,I3)/PHIM(1,I3)
3123 ZEILE(12)=(PHIM(1,I3)*SFISS)/((E(I3+1)-E(I3))*FIISS(I3)*SPHIM)
315 IF(FIISS(I1).LE.1.D-75)ZEILE(4)=-1.
IF(FIISS(I2).LE.1.D-75)ZEILE(8)=-1.
IF(FIISS(I3).LE.1.D-75)ZEILE(12)=-1.
WRITE(6,9003) ZEILE
DO 320 I1=1,12
320 ZEILE(I1)=0.D0
I=NEND
321 I=I-1
C(I)=C(I+1)+C(I)
IF(I.GT.NANF)GOTO 321
QUOT=C(406)/C(451)
NEND$=NEND
NANF$=NANF
IF(NEG.EQ.0)GOTO 33309
NANF$=1
NEND$=NEG
DO 33308 I=1,NEG
J=NUEG(I)
C(I)=C(J)
33308 E$(I)=E(J)
33309 WRITE(6,9005)
IS=(NEND$-NANF$+1)/5
IF(NEND$.GT.IS*5+NANF$-1)IS=IS+1
DO 325 I=1,IS
DO 322 J=1,5
I1=NANF$+I-1+IS*(J-1)
IF(I1.GT.NEND$)GOTO 323
ZEILE(2*J-1)=E$(I1)
ZEILE(2*J)=C(I1)
322 CONTINUE
323 WRITE(6,9006)(ZEILE(L),L=1,10)
DO 324 J=1,12
324 ZEILE(J)=0.D0
325 CONTINUE
WRITE(6,511)QUOT
511 FORMAT(////,' PHI GROESSER 0.1MEV / PHI GROESSER 1.0MEV = ',
&1PE11.3)
ZSUM=0.D0
NSUM=0.D0

```



```

      DO 512 I=1,620
      ZSUM=ZSUM+PHIM(1,I)*E(I)
512  NSUM=NSUM+PHIM(1,1)
      QUOT=ZSUM/NSUM
      WRITE(6,513)QUOT
513  FORMAT('          UEBER DAS GESAMTE LOESUNGSSPEKTRUM GEMITTELTE',
      &' NEUTRONENENERGIE = ',1PE11.3,' MEV')
      WRITE(6,514)
514  FORMAT(1H1)
9000 CONTINUE
C
C
      YMAX=1.E15
      YMIN=1.E8
      YL=2.5E1
      XL=3.5E1
      XMAX=1.E2
      XMIN=1.E-09
      DO 330 I=NaNf,NEND
      XAXE(I-NANF+1)=E(I)
330  YAXE(I-NANF+1)=PHIM(1,I)
C
      N=NEND-NANF+1
C
      CALL PLOTT(NKUR,N,1,1,XAXE,YAXE,1,1,1,1,XMIN,XMAX,1,
      &YMIN,YMAX,40,XTEXT,ZTEXT,0,UEB,0)
      NKUR=1
      DO 335 I=NaNf,NEND
      IF(PHIM(2,I).EQ.0.DO)GOTO 335
      XAXE(1)=E(I)
      XAXE(2)=E(I)
      DW=PHIM(2,I)
      YAXE(1)=PHIM(1,I)+DW
      YAXE(2)=PHIM(1,I)-DW
      CALL PLOTT
      &(NKUR,2,1,1,XAXE,YAXE,2,0,14,1,XMIN,XMAX,1,YMIN,YMAX,2,
      &0,0,0,UEB,0)
335  CONTINUE
      DO 340 I=NaNf,NEND
      XAXE(I-NANF+1)=E(I)
340  YAXE(I-NANF+1)=(PHIM(1,I)*E(I))/(E(I+1)-E(I))
      CALL PLOTT(NKUR,N,1,1,XAXE,YAXE,1,0,14,1,XMIN,XMAX,1,
      &YMIN,YMAX,40,XTEXT,YTEXT,0,UEB,0)
      CALL CALEND
C
C
      STOP
9001 FORMAT('1  JUELICH,DEN',I3,1H.,I2,1H.,2H19,I2)
9002 FORMAT(10X,'WEGEN UEBERSCHREITUNG DER MAXIMALEN ITERATIONS',
      &'ZAHL KEINE LOESUNG GEFUNDEN',/,10X,'VORHERGEHENDE EREIGNIS',
      &'NUMMER = ',I3,/)
9022 FORMAT(////,10X,'KEIN KONVERGIERENDER ITERATIONSZYKLUS IM GE',
      &'SAMTEN JOB',/,10X,'DESWEGEN WAR KEINE ENTFALTUNG MOEGlich')
9003 FORMAT(3(2X,1P2E11.3,0PF6.1,2X,1PE9.3))
9004 FORMAT(///,3(2X,' E (MEV)      PHI      SIGMA PHI/PHI0'))
9005 FORMAT(1H1,5(6X,'E (MEV)      INT.FLUSS '))
9006 FORMAT(5(1PE15.2,E11.3))
9010 FORMAT(10X,2A8,1PE11.4,2X,2H+-,0PF4.0,1HZ,6X,1PE11.4,13X,0PF6.1)
9011 FORMAT('/' ANZAHL DER EREIGNISSE',15,/)
9012 FORMAT(' EINGANGSNAEHERUNGEN',20I4)
      DEBUG SUBCHK
      END

```

```

BLOCK DATA
COMMON /INPT/ FISS,XTEXT,YTEXT,ZTEXT,DSIGMA,REAKA,KABS,NEG,NUEG,
& SIGN,NGUESS,NPHI,MCARD,MLIST
COMMON /SU / A0,HILFE,START,I$,IS1,IS2
REAL*8 XTEXT(10)/10*' '//,YTEXT(10)/10*' //'
REAL*8 ZTEXT(10)/10*' //'
REAL*8 FISS(630),REAKA(40,2),KABS(40),A0(40),DSIGMA(40,630)
REAL*8 HILFE(40,630)
INTEGER START(120)/120*0/,NUEG(50),IS1(1000),IS2(630),I$(40)
END

```

	SUBROUTINE INPUT	INPUT
C	REAL*8 E(630),SIGMA(40,630),A(40,2),PHIO(120,630),EG(50),	INPUT
	&FISS(630),KABS(40),DSIGMA(40,630)	INPUT
	INTEGER*4 NNEG(50)	INPUT
	REAL*8 XTEXT(10),YTEXT(10),ZTEXT(10)	INPUT
	INTEGER*2 KZ(40),COVER(40),COV(3)/'NO','GD','CD'//,CUTOFF	INPUT
	REAL*8 REAKS(40,2),REAKA(40,2),HILF	INPUT
	COMMON /ISAW/ NANF,NEND,NDETEC	INPUT
	COMMON /ISA / E,SIGMA	INPUT
	COMMON /INS / A,PHIO,NSPEK	INPUT
	COMMON /INPT/ FISS,XTEXT,YTEXT,ZTEXT,DSIGMA,REAKA,KABS,NEG,NNEG,	INPUT
	& SIGN,NGUESS,NPHI,MCARD,MLIST	INPUT
	DO 50 I=1,630	INPUT
	E(I)=0.D0	INPUT
	DO 50 J=1,40	INPUT
	SIGMA(J,I)=0.D0	INPUT
50	PHIO(K,I)=0.D0	INPUT
	NANF=1	INPUT
	NEND=620	INPUT
	DO 4 I=1,14	INPUT
4	READ(14,5)	INPUT
5	FORMAT(1X)	INPUT
	READ(14,1)(E(I),I=1,620)	INPUT
1	FORMAT(7E10.3)	INPUT
	E(621)=1.8D+1	INPUT
	NSIGMA=33	INPUT
	READ(14,8003)((REAKS(I,J),J=1,2),I=1,NSIGMA)	INPUT
	DO 100 I=1,NSIGMA	INPUT
	READ(14,5)	INPUT
	READ(14,3)(SIGMA(I,J),J=1,620)	INPUT
3	FORMAT(7E10.4)	INPUT
	READ(14,5)	INPUT
	READ(14,10)(DSIGMA(I,J),J=1,620)	INPUT
10	FORMAT(20F4.1)	INPUT
	READ(14,5)	INPUT
100	CONTINUE	INPUT
	DO 102 I=1,NSIGMA	INPUT
	DO 102 J=1,620	INPUT
102	SIGMA(I,J)=1.D-24*SIGMA(I,J)	INPUT
	NSPEK=119	INPUT
	DO 150 I=1,NSPEK	INPUT
	READ(14,5)	INPUT
	READ(14,6)(PHIO(I,J),J=1,620)	INPUT
6	FORMAT(4X,7E10.3)	INPUT
150	CONTINUE	INPUT
	READ(5,1111)SIGN,MCARD,MLIST	INPUT
1111	FORMAT(F6.1,2(2X,I2))	INPUT
	READ(5,1112)NGUESS,NPHI	INPUT
1112	FORMAT(I3,3X,I3)	INPUT
	READ(5,8010)XTEXT	INPUT
	READ(5,8010)YTEXT	INPUT
	READ(5,8010)ZTEXT	INPUT
	READ(5,8011)NDETEC	INPUT
	READ(5,8012)(A(I,1),A(I,2),KZ(I),KABS(I),COVER(I),REAKA(I,1),	INPUT
	&REAKA(I,2),I=1,NDETEC)	INPUT
	READ(5,8001)NEG	INPUT
	IF(NEG.LT.1)GOTO 1113	INPUT
	READ(5,8013)(EG(I),I=1,NEG)	INPUT
1113	DO 111 J=1,620	INPUT
111	FISS(J)=PHIO(NGUESS,J)	INPUT
	DO 222 I=1,620	INPUT
	IF(FISS(I).EQ.O.D0)FISS(I)=1.D-50	INPUT
222	CONTINUE	INPUT

```

      IF(NPHI.GT.0)GOTO 146
      GOTO 148
146 DO 147 I=1,620
147 PHIO(1,I)=PHIO(NPHI,I)
      NSPEK=1
148 DO 999 I=1,NSPEK
      DO 999 J=1,620
999 PHIO(I,J)=(E(J+1)-E(J))*PHIO(I,J)
      IF(NEG.EQ.0)GOTO 159
      M=NANF
      DO 154 I=1,NEG
153 IF(EG(I).GE.E(M).AND.EG(I).LT.E(M+1))GOTO 154
      M=M+1
      IF(M.GT.NEND)GOTO 155
      GOTO 153
154 NUEG(I)=M
      GOTO 159
155 NUEG(I)=M
      NEG=I
159 WRITE(6,8050)
      DO 200 INDEX=1,NDETEC
      MPOSIT=INDEX
160 IF(REAKA(INDEX,1).EQ.REAKS(MPOSIT,1).AND.
&REAKA(INDEX,2).EQ.REAKS(MPOSIT,2))GOTO 170
      MPOSIT=MPOSIT+1
      GOTO 160
170 IF(INDEX.EQ.MPOSIT)GOTO 200
      DO 180 I=1,2
      HILF=REAKS(INDEX,I)
      REAKS(INDEX,I)=REAKS(MPOSIT,I)
180 REAKS(MPOSIT,I)=HILF
      DO 190 I=NANF,NEND
      HILF=SIGMA(INDEX,I)
      SIGMA(INDEX,I)=SIGMA(MPOSIT,I)
190 SIGMA(MPOSIT,I)=HILF
200 CONTINUE
      DO 201 INDEX=1,NDETEC
      MPOSIT=INDEX
202 IF(REAKA(INDEX,1).EQ.REAKS(MPOSIT,1).AND.
&REAKA(INDEX,2).EQ.REAKS(MPOSIT,2))GOTO 203
      MPOSIT=MPOSIT+1
      GOTO 202
203 IF(INDEX.EQ.MPOSIT)GOTO 201
      DO 204 I=1,2
      HILF=REAKS(INDEX,I)
      REAKS(INDEX,I)=REAKS(MPOSIT,I)
204 REAKS(MPOSIT,I)=HILF
      DO 205 I=NANF,NEND
      HILF=DSIGMA(INDEX,I)
      DSIGMA(INDEX,I)=DSIGMA(MPOSIT,I)
205 DSIGMA(MPOSIT,I)=HILF
201 CONTINUE

      DO 110 I=1,NDETEC
      IF(COVER(I).EQ.COV(1))CUTOFF=136
      IF(COVER(I).EQ.COV(2))CUTOFF=136
      IF(COVER(I).EQ.COV(3))CUTOFF=166
      IF(KZ(I).EQ.1)GOTO 112
      GOTO 116
112 DO 113 J=1,CUTOFF
113 SIGMA(I,J)=0.DO
116 CUTOFF=CUTOFF+1
      DO 114 J=CUTOFF,406
114 SIGMA(I,J)=SIGMA(I,J)*KABS(I)

```

[illegible]

110	CONTINUE	INPUT
8001	FORMAT(I3)	INPUT
8003	FORMAT(2A8)	INPUT
8010	FORMAT(10A8)	INPUT
8011	FORMAT(I2)	INPUT
8012	FORMAT(F3.0,E12.5,2X,I2,2X,E12.5,2X,A2/2A8)	INPUT
8013	FORMAT(E8.2)	INPUT
8050	FORMAT(1H+,40X,'*** SAND-MX2 ***'///)	INPUT
	RETURN	INPUT
	DEBUG SUBCHK	INPUT
	END	INPUT

```

SUBROUTINE AKTIV
C
REAL*8 E(630),SIGMA(40,630),PHI(630),AIO(40),AIJ(40,630)
REAL*8 S1,S2,S3,S4,E1,E2,E3,E4,G0,G1,G2,G3,SG
COMMON /ISAW/ NANF,NEND,NDETEC
COMMON /ISA / E,SIGMA
COMMON /SAW / AIO,AIJ
COMMON /SA / PHI
C
DO 11111 INDEX=1,NDETEC
AIO(INDEX)=0.DO
NA=NANF+1
NE=NEND-3
DO 1000 J=NA,NE
I=J-1
S1=SIGMA(INDEX,I)
E1=(E(I)+E(I+1))/2.
S2=SIGMA(INDEX,I+1)
E2=(E(I+1)+E(I+2))/2.
S3=SIGMA(INDEX,I+2)
E3=(E(I+2)+E(I+3))/2.
S4=SIGMA(INDEX,I+3)
E4=(E(I+3)+E(I+4))/2.
G0=S1
G1=(S2-S1)/(E2-E1)
G2=((S3-S2)/(E3-E2)-G1)/(E3-E1)
G3=((S4-S3)/(E4-E3)-(S3-S2)/(E3-E2))/(E4-E2)
G3=(G3-G2)/(E4-E1)
S1=G0+E1*(-G1+G2*E2-G3*E2*E3)
S2=G1-G2*(E1+E2)+G3*(E2*E3+E1*E3+E1*E2)
S3=G2-G3*(E1+E2+E3)
S4=G3
E2=E(I+1)
E3=E(I+2)
SG=S1
& +S2*(E2+E3)*0.5
& +S3*(E2*E2+E3*E2+E3*E3)/3.
& +S4*(E2**3+E2**2*E3+E2*E3**2+E3**3)/4.
SG=SG*PHI(J)
AIO(INDEX)=AIO(INDEX)+SG
AIJ(INDEX,J)=SG
1000 CONTINUE
SG=(SIGMA(INDEX,NA)+SIGMA(INDEX,NANF))/2.
SG=SG*PHI(NANF)
AIO(INDEX)=AIO(INDEX)+SG
AIJ(INDEX,NANF)=SG
NA=NEND-2
NE=NA+1
DO 2000 J=NA,NE
SG=(SIGMA(INDEX,J)+SIGMA(INDEX,J+1))/2.
SG=SG*PHI(J)
AIO(INDEX)=AIO(INDEX)+SG
AIJ(INDEX,J)=SG
2000 CONTINUE
SG=SIGMA(INDEX,NEND)*PHI(NEND)
AIO(INDEX)=AIO(INDEX)+SG
AIJ(INDEX,NEND)=SG
C
11111 CONTINUE
RETURN
DEBUG SUBCHK
END

```

	SUBROUTINE RELAKT	RELAKT
	REAL*8 AIJ(40,630),AIO(40),WIJ(40,630)	RELAKT
	COMMON /ISAW/ NANF,NEND,NDETEC	RELAKT
	COMMON /SAW / AIO,AIJ	RELAKT
	COMMON /WEI / WIJ	RELAKT
C		RELAKT
C		RELAKT
	DO 11111 INDEX=1,NDETEC	RELAKT
	IF(AIJ(INDEX,NANF).LT.0.DO.OR.AIO(INDEX).LE.0.DO)GOTO 1	RELAKT
	WIJ(INDEX,NANF)=AIJ(INDEX,NANF)/AIO(INDEX)	RELAKT
	GOTO 2	RELAKT
	1 WIJ(INDEX,NANF)=0.DO	RELAKT
	2 NA=NANF+1	RELAKT
	DO 11111J=NA,NEND	RELAKT
	IF(AIJ(INDEX,J)+AIJ(INDEX,J-1).LT.0.DO.OR.AIO(INDEX).LE.0.DO)	RELAKT
	&GOTO 3	RELAKT
	WIJ(INDEX,J)=(AIJ(INDEX,J)+AIJ(INDEX,J-1))*0.5/AIO(INDEX)	RELAKT
	GOTO 11111	RELAKT
	3 WIJ(INDEX,J)=0.DO	RELAKT
11111	CONTINUE	RELAKT
	RETURN	RELAKT
	DEBUG SUBCHK	RELAKT
	END	RELAKT

	IF(SUM1.EQ.0.DO.OR.SUM2.EQ.0.DO.OR.MDETEC.LT.2)GOTO 11111	SUCRAN
	SUM1=SUM1/MDETEC	SUCRAN
	Q(INDEX)=DSQRT((SUM2-MDETEC*SUM1**2)/(MDETEC-1))/SUM1	SUCRAN
11111	CONTINUE	SUCRAN
	XMIN=Q(1)	SUCRAN
	INDEX=1	SUCRAN
	DO 120 I=1,NSPEK	SUCRAN
	XMIN=DMIN1(XMIN,Q(I))	SUCRAN
	IF(XMIN.EQ.Q(I))INDEX=I	SUCRAN
120	CONTINUE	SUCRAN
C		SUCRAN
	DO 130 I=1,NANF,NEND	SUCRAN
130	PHI(I)=PHI0(INDEX,I)	SUCRAN
	DO 140 I=1,620	SUCRAN
150	CALL RANDN(IS2(I),S1,S0,R)	SUCRAN
	IF(R*0.01*10..LT.-1.DO)GOTO 150	SUCRAN
140	PHI(I)=PHI(I)*(1.+R*0.01*10.)	SUCRAN
C		SUCRAN
	START(INDEX)=START(INDEX)+1	SUCRAN
	RETURN	SUCRAN
	DEBUG SUBCHK	SUCRAN
	END	SUCRAN

```

SUBROUTINE PLOTT(NR,NZAHL,LINLO1,LINLO2,X,Y,NK,NDU,NZ,KSX,XMIN,      PLOTT
&XMAX,KSX,YMIN,YMAX,NTEXT,XTEXT,YTEXT,IP,UEB,NUE)                PLOTT
REAL*8 XZ(10)                                                    PLOTT
REAL*8 XTEXT(10),YTEXT(10),UEB(10,7),ZBB(3)/'KFA JUEL',          PLOTT
&'ICH GMBH','ZBB-SMT'/                                           PLOTT
REAL*4 X(NZAHL),Y(NZAHL)                                         PLOTT
IF(IP.EQ.0)IF=15                                                  PLOTT
IF(NR.NE.0)GOTO 100                                              PLOTT
CALL CALIN(0.,7,4)                                              PLOTT
500 XL=23.                                                        PLOTT
YL=15.5                                                          PLOTT
LINLOX=LINLO1                                                    PLOTT
LINLOY=LINLO2                                                    PLOTT
XMI=XMIN                                                         PLOTT
XMA=XMAX                                                         PLOTT
YMI=YMIN                                                         PLOTT
YMA=YMAX                                                         PLOTT
CALL CALCMP(0.,0.,0,3)                                           PLOTT
CALL CALCMP(0.,0.,0,1)                                           PLOTT
C                                                                    PLOTT
C      ** BESTIMMUNG DER EXTREMWERTE **                            PLOTT
C                                                                    PLOTT
1 IF(KSX.EQ.0)CALL MAXIM(NZAHL,X,XMA,XMI)                        PLOTT
IF(KSY.EQ.0)CALL MAXIM(NZAHL,Y,YMA,YMI)                        PLOTT
C                                                                    PLOTT
C      ** AUSGABE VON TEXT AN DEN ACHSEN **                       PLOTT
C                                                                    PLOTT
5 IF(NTEXT.EQ.1)GOTO 22                                          PLOTT
21 CALL SYMBL(4.5,0.4,0.2,XTEXT,0.,80)                          PLOTT
CALL SYMBL(0.5,2.,0.2,YTEXT,90.,80)                            PLOTT
C                                                                    PLOTT
C      ** UEBERSCHRIFT **                                         PLOTT
C                                                                    PLOTT
22 IF(NUE.EQ.0)GOTO 7                                            PLOTT
DO 30 J=1,7                                                      PLOTT
YZ=19.45-FLOAT(J)*0.45                                          PLOTT
DO 31 I=1,10                                                     PLOTT
31 XZ(I)=UEB(I,J)                                                PLOTT
CALL SYMBL(9.9,YZ+2.,0.2,XZ,0.,80)                              PLOTT
30 CONTINUE                                                      PLOTT
7 CALL CALCMP(99,99,29,7)                                        PLOTT
CALL SYMBL(26.8,14.9,0.4,ZBB,270.,24)                          PLOTT
C                                                                    PLOTT
C      ** ZEICHNEN DER ACHSEN **                                  PLOTT
C                                                                    PLOTT
SHWX=0                                                           PLOTT
SHWY=0                                                           PLOTT
NX=0                                                             PLOTT
NY=0                                                             PLOTT
K=0                                                             PLOTT
IF(XMI.LT.0..AND.XMA.GT.0..OR.YMI.LT.0..AND.YMA.GT.0.)GOTO 300 PLOTT
CALL CALCMP(2.5,2.0,0,3)                                         PLOTT
CALL CALCMP(0.,0.,0,1)                                         PLOTT
CALL CALCMP(23.5,0.,25,1)                                       PLOTT
CALL CALCMP(23.5,16.,25,1)                                       PLOTT
CALL CALCMP(0.,16.,25,1)                                       PLOTT
CALL CALCMP(0.,0.,25,1)                                       PLOTT
K=1                                                             PLOTT
C                                                                    PLOTT
C      ** EINTEILUNG DER ACHSEN **                                PLOTT
C                                                                    PLOTT
300 IF(LINLOX.EQ.0)CALL XYLIN(XMA,XMI,L1,VFKX,SHWX,XL)          PLOTT
IF(LINLOY.EQ.0)CALL XYLIN(YMA,YMI,L2,VFKY,SHWY,YL)            PLOTT
IF(K.EQ.1)GOTO 2001                                              PLOTT
CALL ACHSEX(XMI,XL,VFKX,SHWX,L1,XNULL,KENU,ZF,XN,NZAHL,NX)      PLOTT

```


	SUBROUTINE XYLIN(YMAX,YMIN,L2,VFKY,SHWY,YLIN)	XYLIN
C		XYLIN
C	** TRANSFORMATION UND VERKUEZUNGSFAKTOR **	XYLIN
C	** FUER LINEARE EINTEILUNG DER ACHSEN **	XYLIN
C		XYLIN
	YABS=YMAX-AMOD(YMAX,1.)-(YMIN-AMOD(YMIN,1.))	XYLIN
	IF(YABS.LE.1)YABS=YMAX-YMIN	XYLIN
	L2=0	XYLIN
11	IF(YABS.LT.20.)GOTO 12	XYLIN
	YABS=YABS/10.	XYLIN
	L2=L2+1	XYLIN
	GOTO 11	XYLIN
12	IF(YABS.GE.2.)GOTO 13	XYLIN
	YABS=YABS*10.	XYLIN
	L2=L2-1	XYLIN
	GOTO 12	XYLIN
C		XYLIN
C	** BERECHNUNG DER SCHRITTWEITE **	XYLIN
C		XYLIN
13	IF(YABS.NE.AINT(YABS).OR.L2.EQ.0.AND.YABS.NE.YMAX-YMIN)YABS=YABS+1	XYLIN
	YABS=AIN(T(YABS)	XYLIN
	VFKY=YLIN/YABS	XYLIN
	SHWY=VFKY	XYLIN
	IF(VFKY.LT.2.)GOTO 15	XYLIN
	SHWY=VFKY/2.	XYLIN
	IF(VFKY.LT.4.)GOTO 15	XYLIN
	SHWY=VFKY/10.	XYLIN
15	RETURN	XYLIN
	END	XYLIN

SUBROUTINE ACHSEX(XMIN,XLIN,VFKX,SHWX,L1,XNULL,KENU,ZFAK,XN,N,NX)	ACHSEX
XMI=XMIN/10.**L1	ACHSEX
ZAHL=AIN(T(XMI))	ACHSEX
IF(ZAHL.GE.0.,.AND.XMI,NE,ZAHL)ZAHL=ZAHL+1.	ACHSEX
DX=ABS(ZAHL*VFKX-XMI*VFKX)	ACHSEX
ZFAK=0.	ACHSEX
IF(ABS(ZAHL).LE.10.)GOTO 1	ACHSEX
ZFAK=AIN(T(ZAHL/10.))	ACHSEX
ZAHL=ZAHL-ZFAK*10.	ACHSEX
ZFAK=ZFAK*10.**(L1+1)	ACHSEX
1 XNULL=ZAHL*VFKX-DX	ACHSEX
11 NMAL=AIN(T(DX/SHWX))	ACHSEX
IF(NMAL.EQ.0)NMAL=1	ACHSEX
LL=1	ACHSEX
IF(SHWX.GE.DX)GOTO 12	ACHSEX
LL=0	ACHSEX
DX=DX-SHWX*NMAL	ACHSEX
12 IF(NMAL,NE,LL)GOTO 8	ACHSEX
LL=0	ACHSEX
NMAL=1	ACHSEX
IF(VFKX.LT.2.)GOTO 5	ACHSEX
NMAL=2	ACHSEX
IF(VFKX.LT.4.)GOTO 5	ACHSEX
NMAL=10	ACHSEX
5 ZAHL=ZAHL+1.	ACHSEX
8 LL=LL+1	ACHSEX
DX=DX+SHWX	ACHSEX
NX=NX+1	ACHSEX
IF(ZAHL.LT.0.)GOTO 12	ACHSEX
RETURN	ACHSEX
END	ACHSEX

	SUBROUTINE SHRIFT(XMIN,XLIN,VFKX,SHWX,L1,XNULL,KENU,ZFAK,XN,N,NX)	SHRIFT
C		SHRIFT
C	** BESCHRIFTUNG DER ACHSEN **	SHRIFT
C		SHRIFT
	XMI=XMIN/10.**L1	SHRIFT
	ZAHL=AIN(T(XMI))	SHRIFT
	IF(ZAHL.GE.0..AND.XMI.NE.ZAHL)ZAHL=ZAHL+1.	SHRIFT
	DX=ABS(ZAHL*VFKX-XMI*VFKX)	SHRIFT
C		SHRIFT
	KEN2=0	SHRIFT
	ZFAK=0.	SHRIFT
	IF(ABS(ZAHL).LE.10.)GOTO 1	SHRIFT
	ZFAK=AIN(T(ZAHL/10.))	SHRIFT
	ZAHL=ZAHL-ZFAK*10.	SHRIFT
	ZFAK=ZFAK*10.**(L1+1)	SHRIFT
	KEN2=1	SHRIFT
C		SHRIFT
	1 XNULL=ZAHL*VFKX-DX+XN	SHRIFT
	NZ=ZAHL-ZAHL*SHWX	SHRIFT
	IF(NZ.NE.0)ZAHL=ZAHL+1	SHRIFT
C		SHRIFT
C		SHRIFT
C		SHRIFT
	11 NMAL=AIN(T(DX/SHWX))	SHRIFT
	IF(NMAL.EQ.0)NMAL=1	SHRIFT
	LL=1	SHRIFT
	IF(SHWX.GE.DX)GOTO 12	SHRIFT
	LL=0	SHRIFT
	DX=DX-SHWX*NMAL	SHRIFT
	12 DX=DX-XN	SHRIFT
	2 IF(KENU.EQ.0)GOTO 3	SHRIFT
	DZ=DX	SHRIFT
	CALL CALCMP(0.1,DZ,0,1)	SHRIFT
	CALL CALCMP(-0.1,DZ,15,1)	SHRIFT
	IF(NX.NE.0.OR.N.NE.0)GOTO 4	SHRIFT
	CALL CALCMP(23.6,DZ,0,1)	SHRIFT
	CALL CALCMP(23.4,DZ,15,1)	SHRIFT
	GOTO 4	SHRIFT
	3 CALL CALCMP(DX,0.1,0,1)	SHRIFT
	CALL CALCMP(DX,-0.1,15,1)	SHRIFT
	IF(NX.NE.0.OR.N.NE.0)GOTO 4	SHRIFT
	CALL CALCMP(DX,16.1,0,1)	SHRIFT
	CALL CALCMP(DX,15.9,15,1)	SHRIFT
	4 IF(NMAL.NE.LL)GOTO 8	SHRIFT
	LL=0	SHRIFT
	NMAL=1	SHRIFT
	IF(VFKX.LT.2.)GOTO 5	SHRIFT
	NMAL=2	SHRIFT
	IF(VFKX.LT.4.)GOTO 5	SHRIFT
	NMAL=10	SHRIFT
	5 IF(ZAHL.NE.0.)GOTO 13	SHRIFT
	IF(NX.NE.0)CALL NUMBR(-0.3,-0.5,0.2,ZAHL,0.,-1)	SHRIFT
	GOTO 7	SHRIFT
	13 IF(KENU.EQ.0)GOTO 6	SHRIFT
	CALL NUMBR(-0.7,DZ-0.15,0.2,ZAHL,0.,-1)	SHRIFT
	GOTO 7	SHRIFT
	6 CALL NUMBR(DX-0.4,-0.5,0.2,ZAHL,0.,-1)	SHRIFT
	7 ZAHL=ZAHL+1.	SHRIFT
	8 LL=LL+1	SHRIFT
	DX=DX+SHWX	SHRIFT
	IF(DX.LE.XLIN-XN)GOTO 2	SHRIFT
	IF(KENU.EQ.0)GOTO 10	SHRIFT
	CALL SYMBL(-1.5,16.-XN,0.2,'10**',0.,4)	SHRIFT
	CALL NUMBR(999.0,999.0,0.2,FLOAT(L1),0.,-1)	SHRIFT
	GOTO 9	SHRIFT

```
10 CALL SYMBL(23.-XN,-1.2,0.2,'10**',0.,4)
   CALL NUMBR(999.0,999.0,0.2,FLOAT(L1),0.,-1)
9  RETURN
   END
```

```
SHRIFT
SHRIFT
SHRIFT
SHRIFT
```



```

SUBROUTINE XYLOG(XMAX,XMIN,XLIN,KENU,XNULL,VKF,LINLOX,*)
** LOGARITHMISCHE EINTEILUNG DER AXSEN **
IF(XMIN.GE.1.E-50)GOTO 1
LINLOX=0
RETURN
1 DY=ALOG10(XMIN)
EXMI=AIN(T(DY+SIGN(0.0001,DY)))
IF(EXMI.LE.0..AND.EXMI-DY.GT.0.0001)EXMI=EXMI-1.
DY=ALOG10(XMAX)
EXMA=AIN(T(DY+SIGN(0.0001,DY)))
IF(EXMA.GE.0..AND.DY-EXMA.GT.0.0001)EXMA=EXMA+1.
SCHRI=EXMA-EXMI
VKF=XLIN/SCHRI
XNULL=EXMI*VKF
DX=0.
DZ=DX
2 IF(KENU.EQ.0)GOTO 3
CALL SYMBL(-1.,DZ-0.1,0.3,'10',0.,2)
CALL NUMBR(999.0,DZ+0.1,0.2,EXMI,0.,-1)
GOTO 4
3 CALL SYMBL(DX-0.3,-0.7,0.3,'10',0.,2)
CALL NUMBR(999.0,-0.5,0.2,EXMI,0.,-1)
4 I=0
IF(VKF.LE.2..OR.EXMI.EQ.EXMA)GOTO 7
DO 6 I=2,9
IF(VKF.LE.4..AND.I.NE.5)GOTO 6
IF(VKF.LT.12.AND.I.NE.2.AND.I.NE.5)GOTO 6
DY=ALOG10(FLOAT(I))*VKF
IF(KENU.EQ.0)GOTO 5
CALL CALCMP(0.1,DZ+DY,0,1)
CALL CALCMP(-0.1,DZ+DY,15,1)
CALL CALCMP(23.6,DZ+DY,0,1)
CALL CALCMP(23.4,DZ+DY,15,1)
CALL NUMBR(-0.7,DZ+DY-0.2,0.3,FLOAT(I),0.,-1)
GOTO 6
5 CALL CALCMP(DX+DY,0.1,0,1)
CALL CALCMP(DX+DY,-0.1,15,1)
CALL CALCMP(DX+DY,16.1,0,1)
CALL CALCMP(DX+DY,15.9,15,1)
CALL NUMBR(DX+DY-0.2,-0.5,0.3,FLOAT(I),0.,-1)
6 CONTINUE
7 EXMI=EXMI+1.
DX=DX+VKF
I=I+1
IF(VKF*I.LT.1.)GOTO 7
IF(DX.GT.XLIN)GOTO 9
IF(KENU.EQ.0)GOTO 8
DZ=DX
CALL CALCMP(0.1,DZ,0,1)
CALL CALCMP(-0.1,DZ,15,1)
CALL CALCMP(23.6,DZ,0,1)
CALL CALCMP(23.4,DZ,15,1)
GOTO 2
8 CALL CALCMP(DX,0.1,0,1)
CALL CALCMP(DX,-0.1,15,1)
CALL CALCMP(DX,16.1,0,1)
CALL CALCMP(DX,15.9,15,1)
GOTO 2
9 RETURN 1
END

```

```
SUBROUTINE RANDN(IX,S,AM,V)
REAL*4 Y(1)
A=0.0
DO 50 I=1,12
CALL RANDUX(IX,IY,Y,1)
IX=IY
50 A=A+Y(1)
V=(A-6.0)*S+AM
RETURN
END
```

```
RANDN
RANDN
RANDN
RANDN
RANDN
RANDN
RANDN
RANDN
RANDN
RANDN
RANDN
```


ANHANG C:

SYMBOLTABELLE DER FORTRAN-VARIABLEN
FÜR DAS SPLINE-PROGRAMM

$A(K)$, $K=1$ bis $N-1$, Koeffizienten des absoluten Polynomgliedes nach Gl. (49).

ARG Argumentdifferenzen der abschnittsweise angesetzten kubischen Ausgleichspolynome für die I -te Energie der SAND-II-Library im K -ten Spline-Intervall $D(K)$, $I=1$ bis 621, $K=1$ bis $N-1$.

$B(K)$, $K=1$ bis $N-1$, Koeffizienten des linearen Polynomgliedes nach Gl. (50).

$C(K)$, $K=1$ bis $N-1$, Koeffizienten des quadratischen Polynomgliedes nach Gl. (51).

$C(K)$, $K=1$ bis N , zweite Ableitungen der Spline-Funktion in den Stützstellen, dividiert durch den Faktor 6.

$D(K)$, $K=1$ bis $N-1$, Koeffizienten des kubischen Polynomgliedes nach Gl. (52).

$D(K)$, $K=1$ bis $N-1$, Inkremente (= Intervallbreiten) $X(K+1)-X(K)$ der unabhängigen Spline-Variablen, Hilfsgrößen für die Ermittlung der Polynomkoeffizienten.

$E(I)$, $I=1$ bis N , Energiegruppengrenzen des Neutronenspektrums, auf das das Spline-Programm angewendet werden soll, in MeV.

ESAND(I), $I=1$ bis 621, Energiegruppengrenzen der SAND-II-Library in MeV.

M ganzzahliger Multiplizitätsindex für mehrfache Ausgabe des "gesplinten" Neutronenspektrums auf Lochkarten und Schnelldruckerliste.

N Anzahl der Wertepaare von Neutronenenergie und zugehöriger differentieller Neutronenflußdichte des "zu splinenden" Spektrums.

PHI(I), $I=1$ bis N , differentielle Flußdichtewerte des Neutronenspektrums, auf das das Spline-Programm angewendet werden soll.

PHSAND(I), $I=1$ bis 621, differentielle Flußdichtewerte des Neutronenspektrums in der SAND-II-Gruppenstruktur als Ergebnis der durchgeführten Spline-Operation.

R Hilfsgröße für die Ermittlung der Polynomkoeffizienten.

S Hilfsgröße für die Ermittlung der Polynomkoeffizienten.

TEXT(I), $I=1$ bis 10, Textvariable für die Charakterisierung des "zu splinenden" Neutronenspektrums.

$X(I)$, $I=1$ bis N , Stützwerte der unabhängigen Spline-Variablen, in unserem Falle natürliche Logarithmen der entsprechenden Werte $E(I)$, $I=1$ bis N .

$Y(I)$, $I=1$ bis N , Stützwerte der abhängigen Spline-Variablen, in unserem Falle natürliche Logarithmen der entsprechenden Werte $E(I)*PHI(I)$, $I=1$ bis N .

$Z(I)$, $I=1$ bis 621, natürliche Logarithmen der entsprechenden Energiegruppengrenzen ESAND(I), $I=1$ bis 621, der SAND-II-Library.

ANHANG D:

PROGRAMMLISTE FÜR DAS SPLINE-PROGRAMM

```

      IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
      REAL*8 E(300),PHI(300),X(300),Y(300),Z(630),TEXT(10)
      REAL*8 ESAND(630),PHSAND(630),A(300),B(300),C(300),D(300)
      CALL MASKE
      CALL ERRSET(207,999,-1,1)
      CALL ERRSET(209,999,-1,1)
      READ(5,1)N
      READ(5,1)M
      1 FORMAT(I3)
C
C **  EINLESEN DER ENERGIEGRUPPENGRENZEN DER SAND-II-LIBRARY  **
C
      READ(5,2)(ESAND(I),I=1,621)
      2 FORMAT(7E10,3)
C
C **  EINLESEN DES CHARAKTERISIERENDEN TEXTES UND DER  **
C **  KOORDINATENDUPEL E(I),PHI(I) DER 'ZU SPLINENDEN'  **
C **  NEUTRONENSPEKTREN  **
C
      100 READ(5,3,END=1000)TEXT
      3 FORMAT(10A8)
      READ(5,4)(E(I),PHI(I),I=1,N)
      4 FORMAT(6E12,5)
C
C **  LOG-LOG-TRANSFORMATION DER KOORDINATEN  **
C **  IN DIE LETHARGIEDARSTELLUNG  **
C
      DO 5 I=1,N
      X(I)=DLOG(E(I))
      Y(I)=E(I)*PHI(I)
      5 Y(I)=DLOG(Y(I))
C
C **  BERECHNUNG DER ZWEITEN ABLEITUNGEN DER SPLINE-FUNKTION  **
C **  IN DEN STUETZSTELLEN NACH DEM GAUSS'SCHEN ELIMINATIONS-  **
C **  VERFAHREN  **
C
      S=0.
      MM=N-1
      DO 6 K=1,MM
      D(K)=X(K+1)-X(K)
      R=(Y(K+1)-Y(K))/D(K)
      C(K)=R-S
      6 S=R
      S=0.
      R=S
      C(1)=0.
      C(N)=0.
      DO 7 K=2,MM
      C(K)=C(K)+R*C(K-1)
      B(K)=(X(K-1)-X(K+1))*2.-R*S
      S=D(K)
      7 R=S/B(K)
      DO 8 K=2,MM
      I=N+1-K
      8 C(I)=(D(I)*C(I+1)-C(I))/B(I)
C
C **  BERECHNUNG DER POLYNOMKOEFFIZIENTEN A(K),B(K),C(K),D(K)  **
C
      DO 9 K=1,MM
      S=D(K)
      R=C(K+1)-C(K)
      D(K)=R/S
      C(K)=C(K)*3.
      B(K)=(Y(K+1)-Y(K))/S-(C(K)+R)*S
      9 A(K)=Y(K)

```

C			SPLINE
C	**	BERECHNUNG DER VOLLSTAENDIGEN SPLINE-FUNKTION IN DER	**
C	**	SAND-II-GRUPPENSTRUKTUR UND RUECKTRANSFORMATION DER OR-	**
C	**	DINATEN IN DIE FLUSSDICHTEWERTE DER ENERGIEDARSTELLUNG	**
C			SPLINE
		K=1	SPLINE
		DO 11 I=1,621	SPLINE
		Z(I)=DLOG(ESAND(I))	SPLINE
		PHSAND(I)=0.	SPLINE
		IF(Z(I).LT.X(1).OR.Z(I).GT.X(N))GOTO 11	SPLINE
		IF(Z(I).LE.X(K+1))GOTO 10	SPLINE
		K=K+1	SPLINE
	10	ARG=Z(I)-X(K)	SPLINE
		PHSAND(I)=DEXP(A(K)+B(K)*ARG+C(K)*ARG**2+D(K)*ARG**3)	SPLINE
		&/ESAND(I)	SPLINE
	11	CONTINUE	SPLINE
C			SPLINE
C	**	AUSGABE DER 'GESPLINTEN' NEUTRONENSPEKTREN AUF	**
C	**	SCHNELLDRUCKERLISTE UND LOCHKARTEN	**
C			SPLINE
		DO 14 J=1,M	SPLINE
		WRITE(6,12)TEXT	SPLINE
	12	FORMAT(1H1,1X,10A8)	SPLINE
		WRITE(6,13)(ESAND(I),PHSAND(I),I=1,621)	SPLINE
	13	FORMAT(1X,1P10E12.5)	SPLINE
		WRITE(7,3)TEXT	SPLINE
	14	WRITE(7,15)(PHSAND(I),I=1,621)	SPLINE
	15	FORMAT('FLUX',1P7E10.3)	SPLINE
		GOTO 100	SPLINE
1000		STOP	SPLINE
		DEBUG SUBCHK	SPLINE
		END	SPLINE

ANHANG E:

BETRACHTUNG DER FEHLER DER
GEMESSENEN AKTIVIERUNGEN

Abschließend sollen die in den Datenblättern des Kapitels 12 angegebenen Unsicherheitsbeträge der gemessenen Aktivierungen diskutiert werden.

Bis auf die Entfaltung des L 54-Spektrums auf Seite 90 dieses Berichtes, die einen separat zu erörternden Sonderfall darstellt, weisen sämtliche Beispiele die in der folgenden Tabelle 6 zusammengestellten Unsicherheitsbeträge gemessener Aktivierungen auf.

Tabelle 6
Fehler der gemessenen Sondenaktivierungen

Verwendete Aktivierungsreaktion	Einfache relative Standardabweichung der gemessenen Aktivierung einschließlich Bestimmung der Selbstabschirmungs-Korrektur
Schwellenreaktionen mit $E_{\text{eff}} \approx 0,5 \text{ MeV}$	2 % bis 5 %
Epitherm. Reaktion $^{197}\text{Au}(n,\gamma)^{198}\text{Au epi}$	4 %
Epitherm. Reaktionen mit Ausnahme von $^{197}\text{Au}(n,\gamma)^{198}\text{Au epi}$	10 %
Thermische Reaktionen	2 % - 10 %

Die genannten Fehlerbeträge enthalten nach Gl. (18) sowohl die Unsicherheiten der gemessenen Sondenaktivitäten C_i als auch die Unsicherheiten der Selbstabschirmungs-Korrekturfaktoren K_i , während demgegenüber die Fehler der Zeitfaktoren T_i und der Nuklidanzahlen N_i , $i = 1$ bis NDETEC, hier zu vernachlässigen sind.

Bei den Schwellenreaktionen sind die Selbstabschirmungs-Korrekturfaktoren gleich der Einheit und damit nicht fehlerbehaftet. Es verbleiben die Fehler der gemessenen Sondenaktivitäten zwischen 2 % und 5 % /21/.

Die epithermische Aktivierungsreaktion $^{197}\text{Au}(n,\gamma)^{198}\text{Au epi}$ kann als eine Standardreaktion mit gut meßbarem Reaktionsprodukt ^{198}Au angesehen werden. Die einfache relative Standardabweichung der Aktivitätsmessung liegt bei 3 % /21/. Wegen ihrer überragenden Bedeutung wurden für diese Aktivierungsreak-

tion in der Literatur sehr früh experimentelle Bestimmungen des energieintegralen epithermischen Selbstabschirmungs-Korrekturfaktors $K_{\text{epi Au}}$ bekannt. Für unsere Golddrähte von 10 mm Länge und 0,5 mm Durchmesser wurde ein $K_{\text{epi Au}}$ von 0,1284 mit einer relativen Standardabweichung von 2,3 % gefunden /47/. Den Gesamtfehler der gemessenen epithermischen Sondenaktivierung von $^{197}\text{Au}(n,\gamma)^{198}\text{Au}$ werden wir gemäß Tabelle 6 mit 4 % festsetzen.

Ungünstiger liegen die Verhältnisse im Fall der übrigen epithermischen Aktivierungsreaktionen. Da wir in der Regel die energieintegralen epithermischen Selbstabschirmungs-Korrekturfaktoren nach dem in Abschnitt 4.5 beschriebenen Relativmeßverfahren unter Verwendung der Standardreaktion $^{197}\text{Au}(n,\gamma)^{198}\text{Au}$ bestimmt haben, muß die Unsicherheit der beiden dort gemachten Annahmen - der 1/E-Verlauf der epithermischen spektralen Neutronenflußdichte und die Energieunabhängigkeit des epithermischen Selbstabschirmungs-Korrekturfaktors - irgendwie in Rechnung gestellt werden. Eine exakte Fehlerrechnung ist nicht möglich. Wie behelfen uns mit einer pauschalen Angabe von 10 % für den Gesamtfehler der gemessenen epithermischen Sondenaktivierungen, der aus dem Meßfehler der Aktivitätsbestimmung nach /21/ und der Ungewißheit über die genannten Voraussetzungen der experimentellen relativen K_{epi} -Bestimmung resultiert. Beachtet man, daß in sämtlichen hier durchgeführten Entfaltungen die epithermischen Sondenaktivierungen weit innerhalb des hier gesetzten Unsicherheitsbereiches reproduziert werden konnten, dann erscheint uns die gewählte Fehlerschranke eher zu konservativ als zu optimistisch.

Bei den thermischen Aktivierungsreaktionen liegen die Selbstabschirmungs-Korrekturfaktoren nahe der Einheit und sind mit vernachlässigbarem Fehler behaftet. Als Gesamtfehler der thermischen Sondenaktivierungen ist nur die einfache relative Standardabweichung der Aktivitätsmessung mit 2 % /21/ anzusetzen.

Die Entfaltung des L-54-Spektrums erfolgte auf der Grundlage von Aktivierungen nach /46/ mit sehr geringen Fehlerbeträgen als Ergebnis einer Interkalibration der im unbekannten Spektrum gemessenen Sondenzählraten durch Messungen entsprechender Zählraten in einem Standardspektrum nach einer von DIERCKX propagierten Methode (/48/, /49/). Eine solche Interkalibration in einem Standardspektrum minimalisiert sowohl den Fehler der Aktivierungsbestimmung als auch den Einfluß des Fehlers der differentiellen Aktivierungsquerschnitte $\sigma_{\text{act } i}(E)$, $i=1$ bis NDETEC, auf die Entfaltung des Neutronenspektrums.

Nach dieser Methode werden die der Entfaltung zugrunde zu legenden Aktivierungen pro Absorberatom A_i in der Form

$$A_i = \int_0^{\infty} \sigma_{\text{act } i}(E) \phi_E(E) dE = \frac{Z_i}{Z_i^{\text{Standard}}} \int_0^{\infty} \sigma_{\text{act } i}(E) \phi_E^{\text{Standard}}(E) dE, \quad (60)$$

$i = 1 \text{ bis NDETEC},$

dargestellt. Hierin bedeuten:

$\phi_E(E)$ das unbekannte zu entfaltende Neutronenspektrum,

$\phi_E^{\text{Standard}}(E)$ das Standardspektrum,

$Z_i, i=1 \text{ bis NDETEC}$, die Zählrate der i -ten Aktivierungs-sonde im unbekannten Neutronenspektrum $\phi_E(E)$ und

$Z_i^{\text{Standard}}, i=1 \text{ bis NDETEC}$, die Zählrate der i -ten Aktivierungs-sonde im Standardspektrum $\phi_E^{\text{Standard}}(E)$.

Das Standardspektrum $\phi_E^{\text{Standard}}(E)$ muß so gut bekannt sein, daß das in Gl. (60) stehende Aktivierungsintegral mit hinreichender Genauigkeit berechnet werden kann. Unter dieser Voraussetzung können die für die Entfaltung zu benutzenden Aktivierungen $A_i, i=1 \text{ bis NDETEC}$, nach Gl. (60) sehr genau erhalten werden, da die Zählraten Z_i und $Z_i^{\text{Standard}}, i=1 \text{ bis NDETEC}$, nur mit dem statistischen Meßfehler behaftet sind, der bei hinreichender Länge der Zählzeit unter eine bestimmte minimale Grenze, sagen wir unter ein Promille, gedrückt werden kann.

Zur Beurteilung der durch die Interkalibration ermöglichten Reduktion des Einflusses der Aktivierungsquerschnittfehler auf die Neutronenspektrumentfaltung stellt man die Aktivierungsquerschnittfunktion $\sigma_{\text{act } i}(E)$ als die Summe ihres prinzipiell unbekannten wahren Wertes oder Erwartungswertes $\text{Erw}\{\sigma_{\text{act } i}(E)\}$ und ihres Fehlerbetrages $\Delta\sigma_{\text{act } i}(E)$ dar:

$$\sigma_{\text{act } i}(E) = \text{Erw}\{\sigma_{\text{act } i}(E)\} + \Delta\sigma_{\text{act } i}(E), \quad i = 1 \text{ bis NDETEC}. \quad (61)$$

Die Einsetzung dieser Beziehung in die Aktivierungsgleichungen nach Gl. (60) und eine zweckdienliche Umordnung der resultierenden Terme führt, wie im einzelnen in /48/ oder /49/ dargelegt wird, zu der Erkenntnis, daß der Einfluß der Aktivierungsquerschnittfehler auf die Neutronenspektrumentfaltung mit zunehmendem Betrag der Differenz

$$\text{Diff} = \phi_E(E) - \frac{Z_i}{Z_i^{\text{Standard}}} \phi_E^{\text{Standard}}(E) \quad (62)$$

gleichfalls zunimmt und mit abnehmendem Betrag dieser Differenz entsprechend vermindert wird. Je kleiner der Betrag von Diff nach Gl. (62) bzw. je ähnlicher das unbekannte Neutronenspektrum $\phi_E(E)$ dem Standardspektrum $\phi_E^{\text{Standard}}(E)$ ist, destoweniger Auswirkung haben also die Aktivierungsquerschnittfehler auf das Entfaltungsergebnis. In dem hypothetischen Grenzfall völliger Identität der beiden Spektren, also für $\phi_E(E) \equiv \phi_E^{\text{Standard}}(E)$, spielen bei der Wahl $Z_i = Z_i^{\text{Standard}}$ die Aktivierungsquerschnittfehler überhaupt keine Rolle mehr.

Im Falle unseres gewählten Beispiels - bei der Entfaltung des L 54-Spektrums am Ende von Kapitel 12 - wurden neun durch Interkalibration bestimmte Schwellenaktivierungen mit einer einfachen relativen Standardabweichung von 1 % und drei weitere durch Absolutmessung ermittelte (n,f)-Aktivierungen mit einer einfachen relativen Standardabweichung von 4 % verwendet. Für diese Entfaltung hat der Abweichungsparameter DELTA nach Gl. (57) den extrem niedrigen Wert von 1,02 %.

