

Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ
Обнинский институт атомной энергетики (ИАТЭ)

SERPENT - THE MONTE-CARLO NEUTRON TRANSPORT CODE

Обнинск 2017

SERPENT OVERVIEW

Программный комплекс **Serpent** написан на стандартном языке C. В основном комплекс предназначен для операционной системы Linux, но он также был собран и испытан в MAC OS X и некоторых машинах UNIX. Метод Монте-Карло является ресурсоемким методом расчета, и чистая вычислительная мощность напрямую влияет на общее время расчета. Следует принимать во внимание, что объединенная энергетическая сетка (см. ниже), используемая в **Serpent**, требует больше компьютерной памяти по сравнению с другими комплексами Монте-Карло, использующими непрерывную зависимость сечений от энергии. Одного гигабайта оперативной памяти достаточно для стационарных расчетов, как минимум 3 Гб рекомендуется для расчетов выгорания. Для учета большого количества осколков может потребоваться больше 10 Гб оперативной памяти.

SERPENT RUN

Программный комплекс **Serpent** запускается из интерфейса командной строки. Общий синтаксис:

/SERPENT/sss / <путь к управляющему файлу> [<опции>]

([...] - необязательное действие)

Опции:

- version печать информации о версии и выходе;
- replay запустить моделирование с использованием случайных чисел от предыдущего расчета;
- testgeom <N> проверить геометрию, используя <N> случайных выборок нейтронных треков;
- checkvolumes <N> оценка расчета методом Монте-Карло материальных объемов путем отбора <N> случайных точек;
- mpi <N> запуск моделирования в параллельном режиме;
- disperse генерация случайных чисел или pebble distribution (PDM) для расчетов ВТГР.

Пример:

/SERPENT/sss /SERPENT/VVER-1000/VVER-1000.txt

SERPENT RUN

Опция `-replay` вынуждает комплекс использовать тот же самый источник случайных чисел, что и в предыдущем запуске. Без этой опции выбор источника берется из системного времени и записывается в отдельном файле-источнике (названный `<имя файла>.seed`) для дальнейшего использования. Источник может также быть установлен вручную во входном файле, используя опцию `“set seed”`.

Опция `-testgeom` может быть использована для отладки геометрии в дополнение к геометрии плоттера.

Опцию `checkvolumes` можно использовать для проверки того, что объемы, используемые при расчете правильны. Комплекс может вычислить объемы ячеек для простой геометрии решетки, но объемы некоторых ячеек с более сложной геометрией должны быть рассчитаны пользователем вручную.

SERPENT. LIBRARIES

Программный комплекс **Serpent** считывает данные взаимодействия нейтронов с ядрами из библиотек в формате ACE (непрерывная зависимость сечений от энергии). В настоящее время установочный пакет содержит библиотеки в ACE формате, основанные на библиотеках оцененных нейтронных данных JEF-2.2, JEFF-3.1, ENDF/B-VI.8 и ENDF/B-VII для нескольких температур. Есть также несколько библиотек данных формата ACE на основе различных оценок, открыто доступных через OECD / NEA Data Bank. Новые библиотеки могут быть получены из исходных данных формата ENDF с использованием системы обработки ядерных данных NJOY (модули RECONR, BROADR, PURR, ACER).

Установочная версия ПК Serpent содержит библиотеку сечений ENDF / B-VII, в которой представлены 435 нуклидов при температурах 300, 600, 900, 1200, 1500 и 1800 К.

SERPENT. LIBRARIES



Программный комплекс позволяет непосредственно в программе производить перерасчет температур нейтронных сечений с использованием встроенной процедуры доплеровского уширения резонансов с помощью команды, задаваемой в управляющем файле:

```
mat <name> <dens> tmp <T>
```

```
<iso 1> <frac 1>
```

```
<iso 2> <frac 2>
```

где

<name> - имя материала;

<dens> - его плотность (массовая или атомная);

T - доплеровская температура в °K;

<iso 1> <iso 2> ... имена нуклидов, из которых состоит материал;

<frac 1> <frac 2> ... соответствующие ядерные концентрации или массовые доли.

Новые температуры должны быть больше температур сечений, взятых из библиотек. Сечения в библиотеках при этом должны выбираться при температурах максимально близких к рассчитываемым.

SERPENT. IPNUT FILE

Входной файл разбивается на отдельные блоки данных и команды.

Структура входного файла условно состоит из нескольких блоков:

1. Строки, описывающие геометрические объемы реактора.
2. Строки, описывающие поверхности, необходимые для задания всех геометрических объемов.
3. Строки, описывающие все материалы, их массы и концентрации.
4. Строки, содержащие инструкции для работы программы и команды выходных данных.

SERPENT. UNITS



Расстояние	см
Площадь	см ²
Объем	см ³
Время	сек (зависит от случая)
Энергия	МэВ
Микроскопическое сечение	б (барн =)
Макроскопическое сечение	1/см
Масса	г
Массовая плотность	г/
Атомная плотность	(= 1/барн*см)
Мощность	Вт
Нейтронный поток	1/с
Скорость реакции	1/*с (плотность скорости реакции)
Выгорание	МВт сут/кгU
Время выгорания	сут
Выгорание	МВт сут/кгU
Время выгорания	сут

SERPENT. IPNUT FILE

ПК **Serpent** использует геометрию областей для описания сложных систем очень схожую с MCNP с использованием понятия **universe**. Это означает, что геометрия делится на отдельные уровни, которые строятся независимо и могут быть вложены друг в друга. Такой подход позволяет разделить сложную геометрию на более простые части, которые значительно легче для построения. Это позволяет использовать простые геометрические структуры, такие как, например, квадратные или гексагональные решетки, часто встречающиеся в конструкциях реактора и заполнять их более простыми элементами, такими как, например, твэлы, стержни СУЗ и т.д.

Основным строительным блоком геометрии является ячейка, которая представляет собой область пространства, определяемую с помощью простых ограничивающих ее поверхностей. Каждая ячейка заполнена однородным составом материала, пустотой или другой областью.

SERPENT. SURFACES

ПК **Serpent** предусматривает различные "элементарные" и "специальные" типы поверхностей для описания геометрии конструкции. "Специальные" типы поверхности состоят из двух или более элементарных поверхностей. Например, куб может быть изготовлен из шести плоскостей. В командах входного файла нет никакой разницы между элементарными и специальными поверхностями, и описание относится ко всем типам.

Синтаксис для задания поверхностей:

```
surf <id> <type> <param 1> <param 2>
```

где

<id> идентификатор поверхности;

<type> тип поверхности;

<param 1> <param 2> параметры поверхности.

Идентификатор поверхности - произвольно выбранный номер, определяющий поверхность в соответствующей ячейке. Типы поверхностей и параметры рассматриваются ниже.

SERPENT. SURFACES

ПК **Serpent** содержит 14 типов поверхностей (табл. 2). Число параметров, описывающих поверхности фиксировано и зависит от типа. Некоторые типы поверхностей имеют параметры, которые не являются обязательными.

Если параметр скругления углов отсутствует, то предполагается, что углы острые.

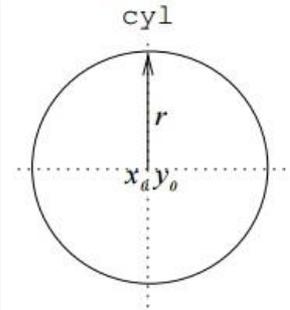
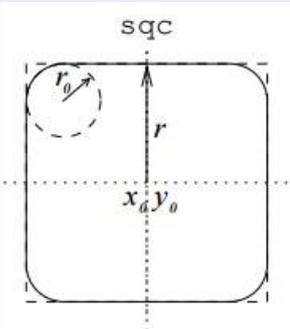
Отражение и другие периодические граничные условия могут быть использованы только в геометрии, где наружная граница определяется с помощью квадратного или шестиугольного цилиндра или куба.

SERPENT. SURFACES

№	Тип	Описание	Параметр	Пояснения
1	inf	все пространство		
2	px	плоскость, перпендикулярная к оси x	X_0	Плоскость проходит на расстоянии X_0 от центра координат
3	py	плоскость, перпендикулярная к оси y	Y_0	Плоскость проходит на расстоянии Y_0 от центра координат
4	pz	плоскость, перпендикулярная к оси z	Z_0	Плоскость проходит на расстоянии Z_0 от центра координат
5	sph	сфера	X_0, Y_0, Z_0, r	Сфера с центром в точке X_0, Y_0, Z_0 и радиусом r

SERPENT. SURFACES



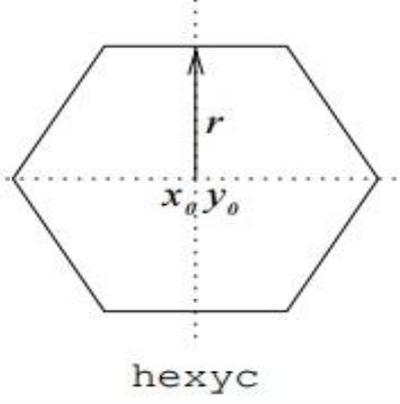
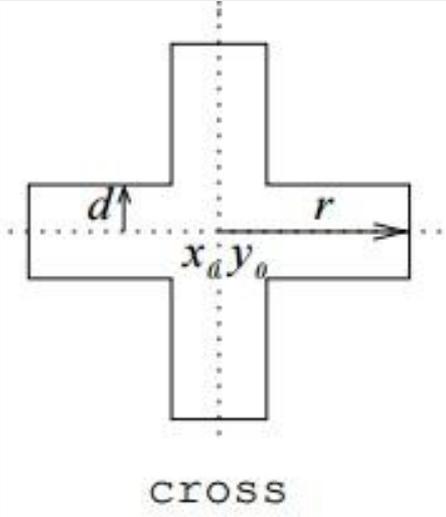
№	Тип	Описание	Параметр	Пояснения
6	cyl	цилиндрическая поверхность, параллельная оси z	X_0, Y_0 - координаты центра поверхности r- радиус	
7	sqc	Бесконечный прямоугольный параллелепипед, параллельный оси z	X_0, Y_0 - координаты центра поверхности, r - расстояние от центра до любой стороны, r_0 - радиус скругления углов	 <p>Далее радиусы скругления на схеме не приводятся, все они аналогичны случаю квадратной поверхности</p>

SERPENT. SURFACES

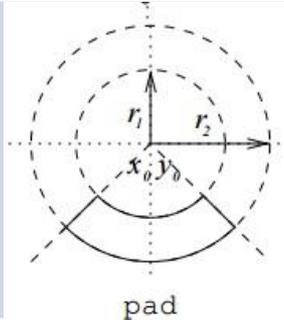
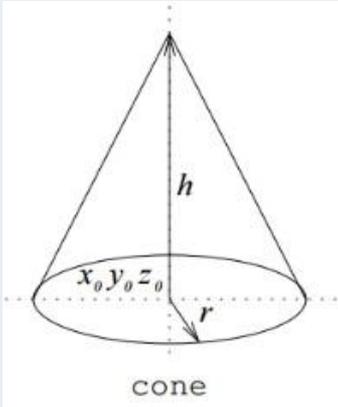


№	Тип	Описание	Параметр	Пояснения
8	cube	куб	X_0, Y_0, Z_0, r	Куб с центром в точке X_0, Y_0, Z_0 и с расстоянием от центра до любой стороны - r
9	hexxc	шестигранник х-типа, параллельный оси z	X_0, Y_0 – координаты центра поверхности, r - радиус вписанной окружности, r_0 - радиус скругления углов	

SERPENT. SURFACES

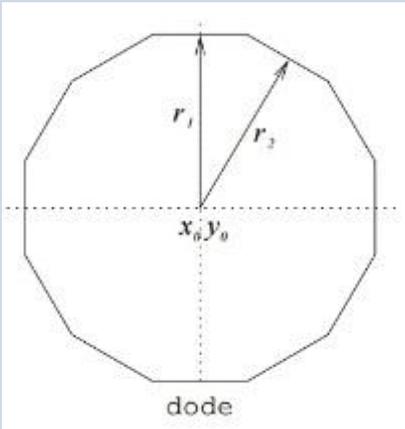
№	Тип	Описание	Параметр	Пояснения
10	hexус	шестигранник у-типа, параллельный оси z	X_0, Y_0 – координаты центра поверхности, r – радиус вписанной окружности, r_0 – радиус скругления углов	
11	cross	крестообразная поверхность, параллельная оси z	X_0, Y_0 – координаты центра поверхности, r – расстояние от центра до края креста, d – половина толщины, r_0 – радиус скругления углов	

SERPENT. SURFACES

№	Тип	Описание	Параметр	Пояснения
12	rad	бесконечный сектор, параллельный оси z	X_0, Y_0 - координаты центра поверхности, r_1 - радиус маленькой окружности r_2 - радиус большой окружности, θ_1, θ_2 - углы	 <p>rad</p>
13	cone	конус, ориентированный по оси z	X_0, Y_0, Z_0 - координаты центра основания, r - радиус основания, h - высота цилиндра. Высота конуса определяет ориентацию: положительное значение указывает, что конус ориентирован в положительном направлении к оси z, а отрицательное - в отрицательном направлении	 <p>cone</p>

SERPENT. SURFACES



№	Тип	Описание	Параметр	Пояснения
14	dode	12-тиугольник, параллельный оси z	X_0, Y_0 - координаты центра поверхности, r_1, r_2 - радиусы	

SERPENT. SURFACES

Пример 1:

Плоскость, перпендикулярная оси x , с координатой $x=4$.

surf 1 px 4.000

Пример 2:

Прямоугольный параллелепипед, в основании которого лежит квадрат с центром в начале координат, с расстоянием от центра до стороны 10 см и закругленными углами с радиусом 0,2 см.

surf 2 sqc 0.000 0.000 10.000 0.200

Attesion! Все фигуры строятся только параллельно оси z .

SERPENT. SURFACES

Положительная и отрицательная сторона поверхности

Поверхности используются для определения геометрии ячеек. Для этой цели каждая поверхность имеет положительную и отрицательную стороны. Если точка находится внутри поверхности, то она находится на отрицательной стороне поверхности. Для трех типов плоскостей, положительная сторона определяется в направлении положительной координатной оси. Положительные стороны шара, куба, конуса и цилиндрических поверхностей определяются вне периметра поверхности.

SERPENT. CELLS

Описание геометрии в ПК Serpent состоит из двух- и трехмерных областей, обозначаемых как ячейки. Каждая такая ячейка определяется с помощью набора положительных и отрицательных чисел, которые соответствуют номеру поверхности, определенной в описании поверхностей.

Синтаксис для задания ячеек имеет вид:

```
cell <name> <u0> <mat> <surf 1> <surf 2> ...
```

где

- <name>** - имя ячейки;
- <u0>** - номер области ячейки;
- <mat>** - имя материала, заполняющего ячейку;
- <surf 1> <surf 2> ...** – номера поверхностей, описывающих ячейку.

SERPENT. CELLS

Именем ячейки является текстовая строка, которая идентифицирует ячейку. Каждая ячейка определяет определенную область и имеет номер. Если число ячеек в задаче велико, то имеет смысл задавать их просто различными номерами. Материал ячейки определяется именем материала, который заполняет ячейку. Есть три исключения:

1. "Void " - пустая ячейка.
2. "Outside" - область пространства, являющаяся внешней, по отношению к задаваемой геометрии.
3. Если ячейка заполнена другой областью, то название материала заменяется командой "Fill", и номером заполняющей области.

Название материала "Outside " необходимо для заполнения областей пространства, которые не являются частью фактической геометрии. Когда поток нейтронов оказывается в такой области, история прекращается или применяются граничные условия.

SERPENT. CELLS

Форма ячейки определяется списком границ поверхностей. Положительный знак перед номером поверхности означает, что данные относятся к положительным ("снаружи") сторонам поверхности, а отрицательный знак - к отрицательным ("внутри") сторонам поверхности. Ячейка определяется как совмещение всех поверхностей из списка.

SERPENT. CELLS

Пример:

Ячейка, состоящая из ТВЭЛа в воде.

```
surf 1 cyl  0.0  0.0  0.4  % окружность с центром в начале
                               координат и радиусом 0.4 см
surf 2 cyl  0.0  0.0  0.45 % окружность с центром в начале
                               координат и радиусом 0.45 см
surf 3 cyl  0.0  0.0  0.60 % окружность с центром в начале
                               координат и радиусом 0.6 см
surf 4 pz  -50.0             % ограничение цилиндра снизу
surf 5 pz   50.0             % ограничение цилиндра сверху
cell 1 1 UO2    -1  4 -5      % диоксид урана внутри
ячейки 1, ограниченной поверхностями 1; 4;5
cell 2 1 void      1 -2  4 -5 % зазор между топливной
                               таблеткой и оболочкой
cell 3 1 clad      2 -3  4 -5 % оболочка
cell 4 1 water      3  4 -5 % вода снаружи оболочки
cell 5 1 water      -4      % вода ниже ТВЭЛа
cell 6 1 water      5      % вода выше ТВЭЛа
```

Все ячейки имеют номер области - 1, эта область далее может быть вставлена в другую область с помощью “**Fill**” (см. ниже).

SERPENT. CELLS

Программный комплекс допускает упрощенное определение для твэлов, состоящих из материалов, заполняющих друг друга.

Синтаксис и команды для такого упрощенного описания стержней имеет вид:

```
pin <id>  
<mat 1> <r1>  
<mat 2> <r2>  
...  
<mat n>
```

где

<id> номер стержня (номер области);

<mat 1> <mat 2> ... имя материала;

<r1> <r2> ... внешние радиусы областей с соответствующими материалами

Области, заполнены материалами и их внешние радиусы приведены в порядке возрастания.

SERPENT. CELLS

Области, заполнены материалами и их внешние радиусы приведены в порядке возрастания. Ячейки строятся, используя цилиндрические поверхности. Область набирается с помощью номеров стержней. Материалами стержня также могут быть другие области, которые определяются с помощью команды **“Fill”**.

Номер стержня, являющийся номером области не должен совпадать с номером другой области.

Крайний материал задается без радиуса, и заполняет остальную часть области.

SERPENT. CELLS

Пример 1:

ТВЭЛ, состоящий из топливной таблетки диоксида урана с внешним радиусом 0.4025 см и оболочки радиусом 0.4750 см, окруженный водой.

pin 1

UO2 0.4025

clad 0.4750

water

Пример 2:

ТВЭЛ, состоящий из топливной таблетки с внешним радиусом 0.4335 см, газового зазора радиусом 0.442 см и оболочки стержня с внешним радиусом 0.5025 см, окруженный теплоносителем.

pin 20

fuel 4.33500E-01

void 4.42000E-01

clad 5.02500E-01

cool

Эти ТВЭЛы имеют бесконечную длину и, если они заполняют другую область (см. ниже), их длина определяется длиной заполняемой ими области.

SERPENT. UNIVERSE

Описание геометрии области позволяет разделять геометрию на отдельные уровни. Такой подход основан на понятии "универс" ("**universe**"). Универс – это некоторое число. Каждая область определяется независимо друг от друга и должна быть замкнутой. Области пространства, не принадлежащие к описываемой геометрии, должны быть определены с использованием ячейки "**outside**". Для того чтобы сделать геометрию многоуровневой необходимо вместо названия материала записать "**Fill**" и заполнить ее другими нужными областями.

SERPENT. UNIVERSE

Синтаксис задания областей разного уровня имеет вид:

cell <name> <u0> fill <u1> <surf 1> <surf 2> ...

где

<name> имя ячейки;

<u0> номер области;

<u1> номер области, в которую включается область с номером <u0>, то есть область, которую входят ячейки с <u0>;

<surf 1> <surf 2> ... границы поверхностей.

В рассмотренном выше случае область с номером <u0> включается в область с номером <u1>. В нее могут также быть включены и другие области (с другими номерами).

SERPENT. UNIVERSE

Пример:

cell 1 0 fill 10 -1 % решетка, заполненная стержнями

cell 4 0 tube 1 -2 % труба

cell 5 0 water 2 -3 % вода в канале

cell 99 0 outside 3 % остальное пространство

В данном случае ячейки с номерами 4, 5, 99, имеющие $u_0=0$, заполняют ячейку с номером $u_1=10$. При этом ячейка 99 будет заполнять в ячейке 1 все пространство, не заполненное ячейками 4 и 5.

Attention! Cell с outside необходимо задать для всех внешних поверхностей.

SERPENT. UNIVERSE

Пример использования fill для заполнения ячеек другими ячейками:

```
surf 6 cyl 0.0 0.0 0.41 % окружность радиусом 0.41 с центром в начале координат
surf 7 cyl 0.0 0.0 0.47 % окружность радиусом 0.47 с центром в начале координат
surf 1 cyl 0.0 0.0 0.96 % окружность радиусом 0.96 с центром в начале координат
surf 2 cyl 0.0 0.0 0.97 % окружность радиусом 0.97 с центром в начале координат
surf 5 cyl 0.0 0.0 1.2 % окружность радиусом 1.2 с центром в начале координат
surf 3 pz 200.4 % высота
surf 4 pz -200.4 % высота
cell 1 40 fuel -6 -3 4 % универс №40: топливный
    % стержень, ограниченный
    % стенкой оболочки и верхней и
    % нижней границами стержня
cell 2 40 clad 6 -7 -3 4
cell 4 40 water -3 4 7 % внешняя часть стержня - вода
cell 5 40 water 3 % внешняя часть стержня - вода
cell 6 40 water -4 % внешняя часть стержня - вода
cell 10 0 fill 40 -1 -3 4 % универс № 40 заполняет цилиндр со
    % стенками, заполненный водой
cell 20 0 clad 1 -2 -3 4
cell 30 0 water 2 -5 -3 4
cell 40 0 outside -3 4 5 % область за внешним цилиндром
cell 50 0 outside 3 % область выше верхней границы
cell 60 0 outside -4 % область ниже нижней границы
```

SERPENT. UNIVERSE

Attesion! Самый последний уровень геометрии принадлежит области 0, которая всегда должна существовать, т.е. если в задаче есть универс-области, то необходимо обязательно задать универс-область с $u=0$, которая должна быть нижним уровнем (например, твэлом).

Каждая универс-область имеет свой собственный центр, который может быть сдвинут с помощью команды преобразования областей.

SERPENT. LATTICE

Решетки – это специальные области, имеющие регулярную структуру и заполненные другими областями. ПК Serpent имеет семь типов решеток: квадратную решетку, два типа шестиугольных решеток, круговой кластерный массив и три типа бесконечных трехмерных решеток, заполненных другими областями.

SERPENT. LATTICE

Синтаксис и команды:

Квадратные и шестигранные решетки.

lat <u0> <type> <x0> <y0> <nx> <ny> <p>

где

<u0> номер области для решетки;

<type> тип решетки (= 1, 2 или 3);

<x0> координата x для центра решетки;

<y0> координата y для центра решетки;

<nx> число ячеек в решетке в направлении координаты x;

<ny> число ячеек в решетке в направлении координаты y;

<p> шаг ячейки.

Типы решетки:

1-квадратная решетка;

2-шестигранная решетка x-типа;

3-шестигранная решетка y-типа.

Определение x или y типа решетки аналогично определению поверхностей (см. №9 и №10, соответственно, в таблице поверхностей).

SERPENT. LATTICE

ВАЖНЫЕ ЗАМЕЧАНИЯ ДЛЯ УНИВЕРСОВ И РЕШЕТОК:

1. Каждая геометрия должна заполнять все пространство. Таким образом область пространства, не принадлежащая описываемой геометрии должна быть обязательно описана с помощью ячейки, помеченной как "Outside". Нейтроны, туда попадающие, исчезают или отражаются на внешней границе.

2.Attension! Самый нижний уровень геометрии, принадлежащий "универс-области 0" должен обязательно существовать, т.е. если в задаче есть универс-области, то необходимо обязательно задать универс-область с $u=0$, которая заполняет другие универс-области.

3. Каждая универс-область имеет свой собственный центр (по умолчанию в начале координат), который может быть сдвинут с использованием команды преобразования центра.

4. Ячейки более высокого уровня геометрии могут быть заданы только через "fill" или решетку (например, топливный стержень и ТВС).

SERPENT. LATTICE

5. Каждая решетка, заполняющая область-контейнер (внешнюю по отношению к ней), должна заполнять ее полностью, чтобы не допускать пустые (не определенные никак) пространства. Это легко решается увеличением числа ячеек в решетке по одному или по обоим направлениям ($\langle nx \rangle$, $\langle ny \rangle$).

6. Гексагональные решетки задаются с использованием квадратных матриц из универсов (решетка). См., например решетку ВВЭР-440 ниже.

7. Многоуровневые гексагональные структуры, активная зона, состоящая из ТВС, которые, в свою очередь, состоят из топливных стержней, задаются через комбинации гексагональных решеток x- и y-типа (например, для ТВС - x-тип, а для активной зоны - y-тип).

8. Если бесконечная решетка используется для расчета выгорания, объемы материалов должны быть заданы вручную.

SERPENT. LATTICE

Пример: ТВС реактора ВВЭР-440 (решетка имеет номер 10 и заполнена областями 1, 2 и 3, заданными в упрощенном виде).

% топливный стержень с центральным каналом:

pin 1

void 0.08000

fuel 0.37800

void 0.38800

clad 0.45750

water

% центральная техническая труба:

pin 2

water 0.44000

clad 0.51500

water

% пустая ячейка, заполненная водой:

pin 3

water

SERPENT. LATTICE

% ТВС (шестигранник х-типа, шаг ячейки = 1.23 см):

lat 10 2 0.0 0.0 15 15 1.23

```
3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3
 3 3 3 3 3 3 3 1 1 1 1 1 1 1 3
  3 3 3 3 3 3 1 1 1 1 1 1 1 1 3
   3 3 3 3 3 1 1 1 1 1 1 1 1 1 3
    3 3 3 3 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 3
     3 3 3 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 3
      3 3 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 3
       3 1 1 1 1 1 1 2 1 1 1 1 1 1 3
        3 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 3 3
         3 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 3 3 3
          3 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 3 3 3 3
           3 1 1 1 1 1 1 1 1 3 3 3 3 3
            3 1 1 1 1 1 1 1 3 3 3 3 3 3
             3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3
```

SERPENT. LATTICE

%Поверхности, задающие внешнюю часть ТВС, шаг = 14.7 см

surf 1 hexuc 0.0 0.0 7.100 % Внутренний радиус трубы ТВС

surf 2 hexuc 0.0 0.0 7.250 % Внешний радиус трубы ТВС

surf 3 hexuc 0.0 0.0 7.350 % Внешняя граница

%--- Ячейки, создаваемые поверхностями и окружающие ТВС

cell 1 0 fill 10 -1 %внутренняя часть ТВС с решеткой внутри

cell 4 0 tube 1 -2 % Оболочка трубы

cell 5 0 water 2 -3 % Вода в канале

cell 99 0 outside 3 % Остальная область

SERPENT. LATTICE

Пример кругового кластерного массива.

Синтаксис и команды для кругового кластерного массива, который является четвертым типом решетки, имеет вид:

lat <u0> <type> <x0> <y0> <nr>

где

<u0> номер области для решетки;
<type> тип решетки (4, в нашем случае);
<x0> координата x для центра решетки;
<y0> координата y для центра решетки;
<nr> количество колец в массиве.

Данный тип решетки сопровождается списком описания колец <nr>:

<n> <r> <theta> <u1> <u2> ... <un>

где

<n> количество стержней в кольце;
<r> центральный радиус кольца;
<theta> угол поворота.
<u1> <u2> ... <un> - номера универсов, заполняющих кольца.

SERPENT. LATTICE

TBC реактора CANDU.

% --- Топливный стержень:

pin 1

fuel 0.6122

clad 0.6540

coolant

% --- Кластерный массив. Массив, состоящий из четырех колец (с одинаковыми стержнями с номером 1).

lat 10 4 0.0 0.0 4

1 0.0000 0.0 1 % первое кольцо, состоящее из 1 центрального стержня;

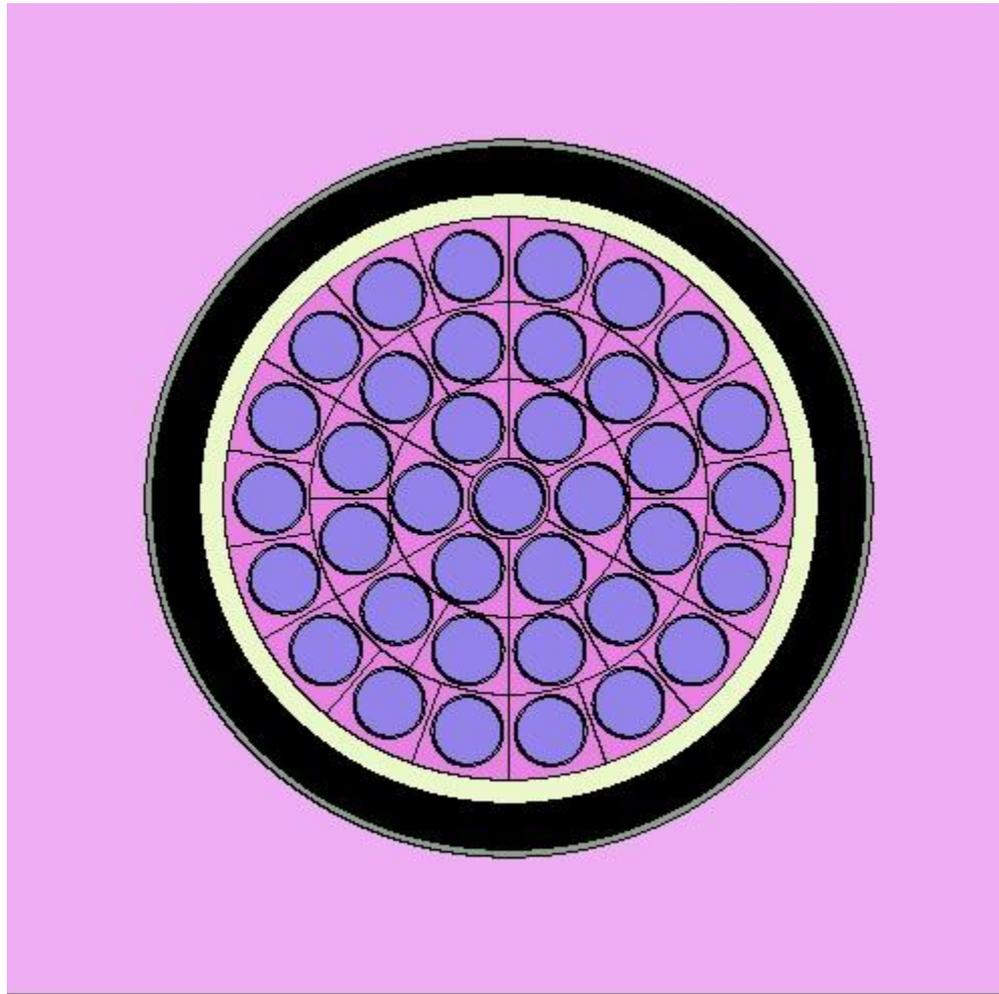
6 1.4885 0.0 1 1 1 1 1 1 % второе кольцо с радиусом 1.4885 см, состоящее из 6 стержней (не повернутое);

12 2.8755 15.0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 % третье кольцо с радиусом 2.8755 см и углом поворота равным 15°, состоящее из 12 стержней;

18 4.3305 0.0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 % четвертое кольцо с радиусом 4.3305 см, состоящее из 18 стержней (без поворота).

Все кольца заполняются универсом с номером 1 (см. рис).

SERPENT. LATTICE



ТВС реактора CANDU

SERPENT. LATTICE

Бесконечная трехмерная решетка.

Бесконечные трехмерные решетки используются для построения повторяющихся структур одинаковых клеток, которые заполняют всю область. Этот тип конструкции может быть использован, например, для описания микроскопических (сферических) частиц топлива внутри реактора ВТГР.

Синтаксис:

```
lat <u0> <type> <x0> <y0> <nx> <ny> <p>
```

где

- <u0> номер области для решетки;
- <type> тип решетки (= 6, 7 or 8);
- <x0> координата x для центра решетки;
- <y0> координата y для центра решетки;
- <p> шаг ячейки;
- <u> заполняющая область.

6 тип – кубическая решетка, 7 и 8 тип – x и y ориентированная шестигранная призматическая решетка соответственно.

SERPENT. GRAPHICS

Графический редактор использует графическую библиотеку GD (Graphics Library) с открытым исходным комплексом для получения PNG -формата выходных файлов визуализации. Для того, чтобы использовать плоттер, исходный комплекс должен быть скомпилирован с включенной библиотекой.

Синтаксис командной строки:

plot <or> <nх> <ny> [<p> <min1> <max1> <min2> <max2>]

где

<or> ориентация плоскости (1, 2 или 3);

<nх> ширина плоскости в пикселях;

<ny> высота плоскости в пикселях;

<p> положение на оси, перпендикулярной плоскости;

<min1> минимальное значение первой координаты (слева);

<max1> максимальное значение первой координаты (справа);

<min2> минимальное значение второй координаты (снизу);

<max2> максимальное значение второй координаты (сверху).

SERPENT. GRAPHICS

Ориентация рисунка в пространстве:

1-uz-ориентация (перпендикулярно оси x);

2-xz- ориентация (перпендикулярно оси y);

3-xу- ориентация (перпендикулярно оси z).

Каждый запуск графического редактора создает выходной файл с именем “<имя файла>_geom<индекс рисунка>.png” . Разрешение рисунка определяется параметрами ширины и высоты плоскости в пикселях. Каждый материал представляет собой случайно выбранный цвет (пустые области окрашены в черный цвет, ошибки геометрии - ярко-зеленый или красный цвет). Следует отметить, что изображение поверхности может не совпадать с фактическими границами ячеек.

SERPENT. GRAPHICS

Пример:

На рисунке 2 и 3 представлены горизонтальное и вертикальное сечение ТВЭЛа.

plot 3 500 500

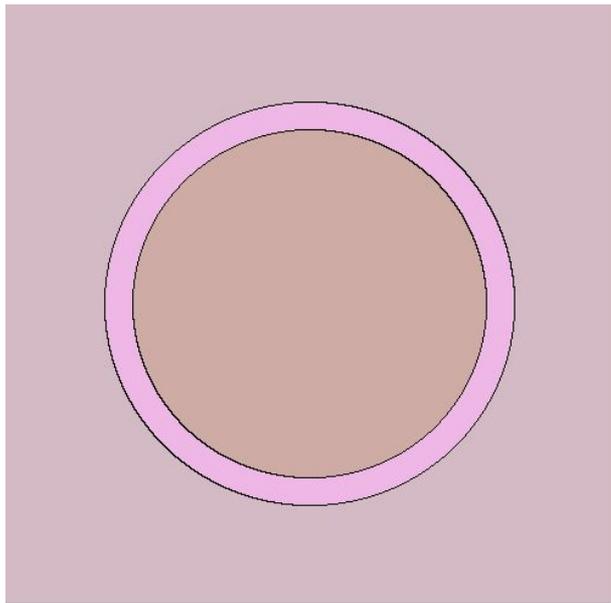


Рис.2. Топливный стержень - горизонтальное сечение.

plot 2 500 500

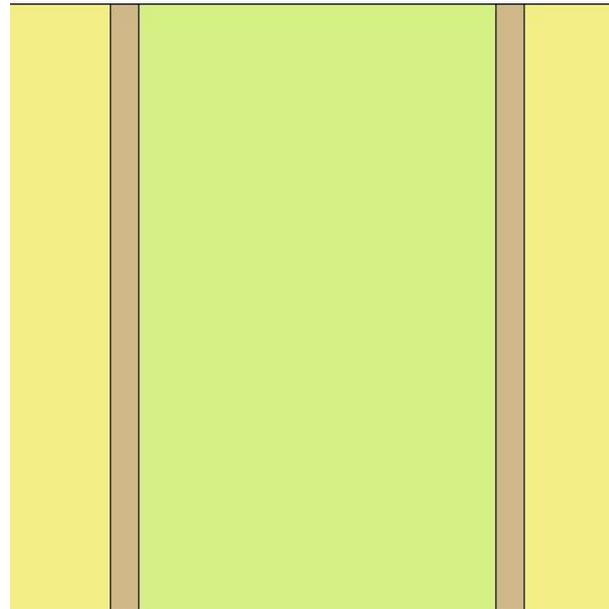


Рис.3. Топливный стержень - вертикальное сечение.

SERPENT. MATERIALS

Геометрия в комплексах на основе метода Монте-Карло состоит из гомогенизированных материальных областей, которые в **Serpent** определяются с использованием ячеек и поверхностей. Каждый материал состоит из набора нуклидов, и каждый нуклид связан с библиотеками сечений, определенных в соответствующем файле библиотеки.

Температуры нуклидов учитываются при создании данных сечений и не могут быть изменены впоследствии.

Нуклиды.

Названия нуклидов должны соответствовать их названию в каталоге библиотеки.

(пример пути к библиотеке:

```
set acelib "/SERPENT/xsdata/900_HEATR_PURR/lib_900.xsdata"):
```

```
<Z><A>.<id>
```

где

<Z> порядковый номер элемента Z

<A> массовое число

<id> идентификационный номер элемента из библиотеки

SERPENT. MATERIALS

Например, нуклид “**92235.09c**” обозначает уран-235. Сечения природного элемента обозначается нулевым массовым числом (“**40000.06c**” - природный цирконий). Идентификационный номер обычно позволяет задавать данные из различных библиотек или различные температуры, используемые в описании модели (например, “**60c**” основаны на библиотеке ENDF/B-VI.0, а “**09c**” для данных, полученных при температуре 900К, и так далее...). Важно понимать, что имена нуклидов используются только для их идентификации, и они не содержат никакой информации для программного комплекса.

SERPENT. MATERIALS

Синтаксис описания материалов:

mat <name> <dens> [<options>]

<iso 1> <frac 1>

<iso 2> <frac 2>

...

где

<name> имя материала;

<dens> плотность материала (массовая или атомная);

<options> опции (при необходимости);

<iso 1> <iso 2> ... имя нуклидов, входящих в состав материала;

<frac 1> <frac 2> ... соответствующие доли (атомные или массовые).

SERPENT. MATERIALS

Имя материала используется для идентификации материала в стержнях или ячейках. Плотности и доли могут быть атомными или массовыми значения. Положительные значения относятся к атомной плотности (в единицах 10^{24} $1/\text{cm}^3$) и атомной доле, соответственно, а отрицательное значение - к массовой плотности (в единицах g/cm^3) и массовой доле. Изотопные составы нормируются перед вычислением и смешанные записи не допускаются.

Если в названии материала указать 0 или “sum”, то плотность материала считается как сумма плотностей входящих в него изотопов.

SERPENT. MATERIALS

Пример:

Атомные плотности даны в единицах $1/(\text{барн}\cdot\text{см})$.

mat UO2Gd	sum	% атомная плотность материала;
92234.09c	4.2940E-06	% атомная плотность U-234;
92235.09c	5.6226E-04	% атомная плотность U-235;
92238.09c	2.0549E-02	% атомная плотность U-238;
64154.09c	4.6173E-05	% атомная плотность Gd-154;
mat clad	-6.55000	% Массовые доли даны в г/см³
40000.06c	-0.98135	% массовая доля природного циркония;
24000.50c	-0.00100	% массовая доля природного хрома;
26000.55c	-0.00135	% массовая доля природного железа;
28000.42c	-0.00055	% массовая доля природного никеля;
50000.42c	-0.01450	% массовая доля природного олова;
8016.06c	-0.00125	% массовая доля кислорода

SERPENT. MATERIALS

Объем материала.

mat <name> <dens> vol <V>

...

где <V> - полный объем материала в .

Альтернативный вариант – плотность материала.

mat <name> <dens> mass <M>

...

где <M> - масса материала в граммах.

SERPENT. MATERIALS

Задание термализации (рассеяние на водороде в воде или на дейтерии в тяжелой воде, бериллии и на других нуклидах в материалах, для которых при рассеянии нейтронов важна структура)

```
mat <name> <dens> moder <thname> <ZA>  
<iso 1> <frac 1>  
<iso 2> <frac 2>
```

...

где

- <name> название материала;
- <dens> плотность (массовая или атомная);
- <thname> название библиотеки с данных теплового рассеяния;
- <ZA> порядковое и массовое число в составе нуклида;
- <iso 1> <iso 2> ... название нуклидов, входящих в состав;
- <frac 1> <frac 2> ... соответствующие доли (массовые или атомные).

SERPENT. MATERIALS

Название библиотеки используется, чтобы связать данные с материалом. В этом случае добавляется запись:

therm <thname> <lib>

где

<thname> имя библиотеки;
<lib> идентификатор библиотеки, в файле каталога.

SERPENT. MATERIALS

Пример:

Рассеяние на водороде и дейтерии в воде и тяжелой воде, соответственно (две библиотеки: lwtr1 и hwtr1))

mat D2OH2O -0.812120 moder lwtr1 1001 moder hwtr1 1002

8016.06c -7.99449E-1

1002.06c -1.99768E-1

1001.06c -7.83774E-4

therm lwtr1 lwtr.04t

therm hwtr1 hwtr.04t

Данные для легкой воды берутся из библиотеки lwtr.04t, а для тяжелой воды - из hwtr.04t.

SERPENT. MATERIALS

Доплеровское уширение (расчет сечений для других температур, отличающихся от температур в библиотеке).

```
mat <name> <dens> tmp <T>  
<iso 1> <frac 1>  
<iso 2> <frac 2>  
...
```

где

<name> название материала;

<dens> плотность (массовая или атомная);

<T> Доплеровская температура в кельвинах;

<iso 1> <iso 2> ... название нуклидов, входящих в состав;

<frac 1> <frac 2> ... соответствующие доли (массовые или атомные).

SERPENT. MATERIALS

Пример (доплеровское уширение до 1000°K):

mat fuel -10.45700 tmp 1000

92235.09с -0.03173

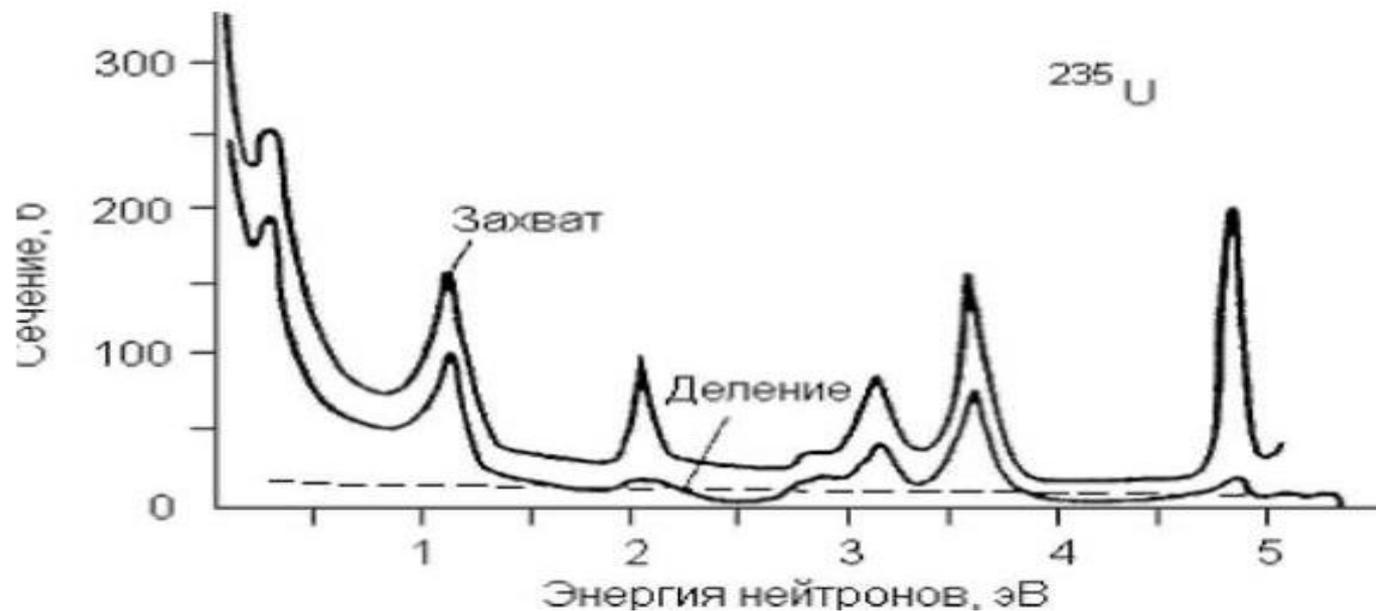
92238.09с -0.84977

8016.09с -0.11850

Нейтронные сечения в резонансной области

Зависимость микроскопических сечений от энергии носит сложный характер.

$$\sigma \approx \frac{1}{v} \approx \frac{1}{\sqrt{E}}$$



Нейтронные сечения в резонансной области

Вся область энергий



Нейтронные сечения в резонансной области

Как описать структуру сечений в резонансной области энергий?

Будем использовать т.н. функции лоренцевого типа:

$$\frac{1}{(E - E_i)^2 + B^2}$$

которые описывают колоколообразную зависимость

и функции типа $\frac{C(E - E_i)}{(E - E_i)^2 + B^2}$

Нейтронные сечения в резонансной области

При энергии E_i эта функция имеет максимум. Кроме того ее можно характеризовать высотой и шириной на половине высоты.

Комбинацией двух функций можно задать перекоп.

С помощью таких функций можно достаточно точно описать резонансы, наблюдающиеся в сечениях

$$\sigma_f(E) = \frac{\sigma_i^0 \Gamma_{fi} \Gamma_i}{4(E - E_i)^2 + \Gamma_i^2}, \quad \sigma_c(E) = \frac{\sigma_i^0 \Gamma_{ci} \Gamma_i}{4(E - E_i)^2 + \Gamma_i^2} \quad \text{ата,}$$

$$\sigma_s(E) = \sigma_p + \frac{\Gamma_{ni}}{\Gamma_i} \frac{\sigma_i^0 \Gamma_i^2}{4(E - E_i)^2 + \Gamma_i^2} \quad \sigma_p + \frac{\sigma_i^0 \Gamma_{ni} \Gamma_i}{4(E - E_i)^2 + \Gamma_i^2}$$

$$\sigma_t(E) = \sigma_p + \frac{\sigma_i^0 \Gamma_i^2}{4(E - E_i)^2 + \Gamma_i^2} \quad \sigma_t(E) = \sigma_p + \sigma_t^{res}(E) \quad \sigma_s(E) = \sigma_p + \sigma_s^{res}(E)$$

=

Нейтронные сечения в резонансной области

Для полного сечения σ_i^0 - есть высота i -го резонанса, E_i – его положение на энергетической шкале, а Γ_i - его резонансная ширина на половине высоты.

Γ_{fi} , Γ_{ci} , Γ_{ni} - называются парсциальными ширинами.

Нейтронная ширина оказывается зависящей от энергии, как $\Gamma_{ni} = \Gamma_{ni}^0 \sqrt{E}$ где Γ_{ni}^0 - приведенная нейтронная ширина.

Отношения $\frac{\Gamma_{fi}}{\Gamma_i}$, $\frac{\Gamma_{ci}}{\Gamma_i}$, $\frac{\Gamma_{ni}}{\Gamma_i}$ - характеризуют вероятности

соответствующих реакций при поглощении нейтрона.

Величину σ_p можно записать в виде

$$\sigma_p = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2(\varphi_0) \quad \text{где } k \text{ – волновое число.}$$

Здесь φ_0 - т.н. параметр рассеяния или фазовый сдвиг.

Нейтронные сечения в резонансной области

Величину σ_i^0 часто записывают в виде

$$\sigma_i^0 = \frac{4\pi}{k^2} \frac{\Gamma_{ni}}{\Gamma_i} g$$

где для s-нейтронов (нейтронов с моментом количества движения $l=0$) $g=(2J+1)/(2(2I+1))$, I – спин ядра-мишени, J – спин i -го резонанса.

Для нейтронов с $l \neq 0$ в σ_i^0 появляется множитель $(2l+1)$, вместо φ_0 записывается φ_l и

$$\sigma_p = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2(\varphi_l)$$

Чтобы получить сечение для каждого возможного l при энергии E мы должны просуммировать вклад от всех возможных резонансов, соответствующих этому l , по приведенным выше формулам и затем просуммировать полученные таким образом значения.

Нейтронные сечения в резонансной области

Мы рассмотрели простейшие представления нейтронных сечений в резонансной области энергий, соответствующие т.н. одноуровневому подходу Брейта-Вигнера. В настоящее время используются более сложные модели, учитывающие взаимодействие между различными резонансами (резонансная интерференция), такие, как многоуровневый подход Брейта-Вигнера (в основном для не делящихся ядер) и подход Рейха-Мура (для делящихся ядер). Однако, являясь значительно более сложными с точки зрения расчетной реализации, все они используют ширины отдельных резонансов и энергии, описывающие их положение на энергетической шкале. Распределение вторичных частиц (например, нейтронов), возникающих в ряде реакций (например при упругом и неупругом рассеянии) по углам вылета и энергиям мы рассмотрим ниже.

Нейтронные сечения в резонансной области

Кроме области энергий, в которой резонансные параметры могут быть определены с использованием экспериментальных данных (т.н. область разрешенных резонансов) существует область энергий, в которой резонансы хотя и существуют, но перекрываются, и их параметры не могут быть определены (область неразрешенных резонансов), которая соответствует более высоким энергиям.

В этом случае используется статистический подход.

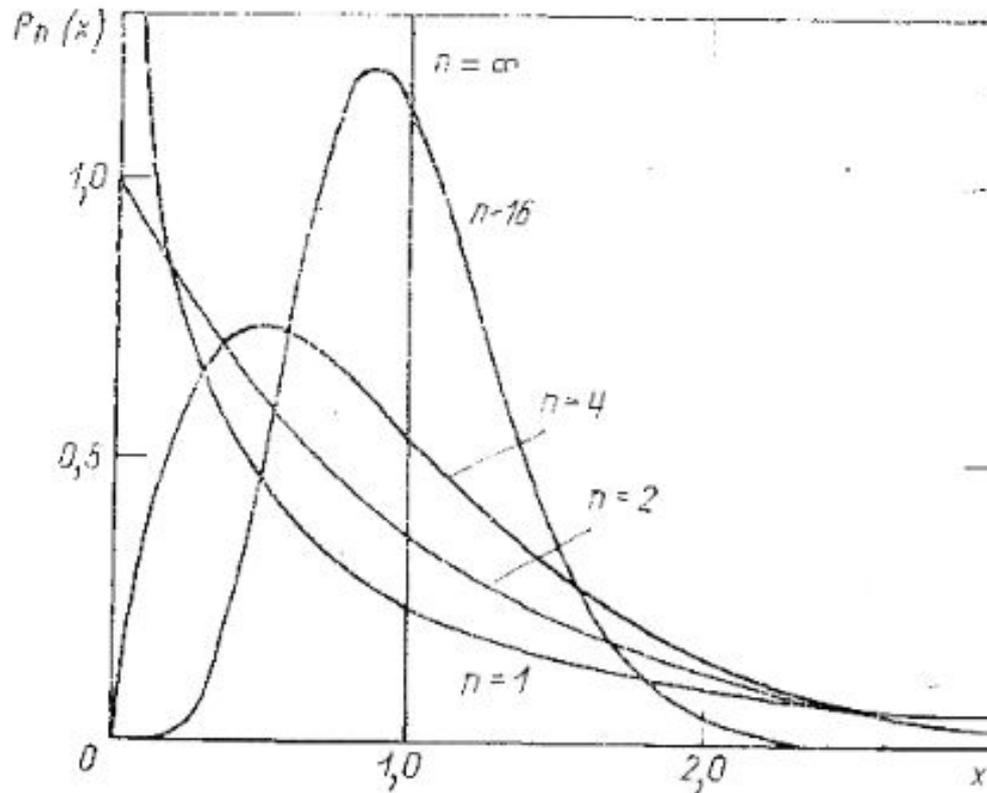
Нейтронные сечения в резонансной области

Приведенная нейтронная ширина Γ_{ni}^0 , делительная и радиационная ширины: Γ_{fi} и Γ_{ci} для резонансов с одним спином могут значительно отличаться, однако отношения $x_{ni} = \Gamma_{ni}^0 / \bar{\Gamma}_n^0$, $x_{fi} = \Gamma_{fi} / \bar{\Gamma}_f$, $x_{ci} = \Gamma_{ci} / \bar{\Gamma}_c$ для некоторого интервала энергий подчиняются статистическому распределению (их можно рассматривать, как случайные величины), называемому распределением Портера-Томаса: вероятность $P_n(x)dx$ того, что x будет лежать между x и $x+dx$ есть

$$P_n(x) dx = \frac{n}{2\Gamma\left(\frac{n}{2}\right)} \left(\frac{nx}{2}\right)^{\frac{n}{2}-1} \exp\left(-\frac{nx}{2}\right) dx,$$

$\Gamma(n/2)$ - гамма-функция.

Нейтронные сечения в резонансной области



Для распределения приведенных нейтронных ширин полагают $n=1$, для делительных ширин $n=2-3$, для радиационных ширин $n \sim 50$. На основании этого можно сделать вывод, что радиационные ширины почти не флуктуируют.

Нейтронные сечения в резонансной области

Установлено также, что расстояния между максимумами соседних резонансов (D_i) также сильно флуктуируют, но отношение D_i/D_{i+1} (может рассматриваться как случайная величина) подчиняется распределению, называемому распределением Вигнера:

$$P(z) dz = \frac{\pi}{2} \exp\left(-\frac{1}{4} \pi z^2\right) dz,$$

Таким образом, определяя для различных интервалов в области разрешенных резонансов средние ширины и расстояния между уровнями, можно экстраполировать их на область неразрешенных резонансов и, с помощью соответствующих распределений строить резонансы в этой области.

Нейтронные сечения в резонансной области

Допплеровское уширение резонансов

В формуле для брейт-вигнеровского представления сечений входит энергия налетающего нейтрона. Она рассматривается относительно ядра. Однако проблема состоит в том, что при любой температуры среды, кроме абсолютного нуля, ядра среды колеблются хаотически и эта энергия не может быть определена. Для расчета сечений в этом случае также применяется статистический подход.

Если скорость нейтрона в лабораторной системе есть v , а случайная скорость ядра в той же системе есть V , то скорость нейтрона относительно ядра есть $v_r = v - V$.

Распределения ядер по скоростям можно записать с помощью распределения Максвелла:

$$P(\mathbf{V}) d\mathbf{V} = \left(\frac{M}{2\pi kT} \right)^{3/2} \exp(-MV^2/2kT) dV_x dV_y dV_z$$

Тогда сечение реакции типа x , как функция энергии в лабораторной системе может быть определена как свертка:

$$\sigma_x(E) = \frac{1}{v} \int v_r \sigma_x(E_r) P(\mathbf{V}) d\mathbf{V}.$$

Этот интеграл может быть рассчитан численно для любой температуры T .

Характеристикой “силы” доплеровского уширения резонанса служит т.н. доплеровская ширина, которая тем больше, чем больше энергия и температура и чем меньше массовое число A :

$$\Delta \equiv \sqrt{4kTE/A}$$

Нейтронные сечения

Описание распределений продуктов реакции по энергии и углам.

В большинстве случаев приводится дважды дифференциальное сечение испускаемой частиц в единицах барн/эВ-стерадиан.

$$\sigma(\mu, E, E') = \sigma(E) y(E) f(\mu, E, E') / 2\pi$$

где μ – косинус угла испускания (косинус угла между направлением налетающей частицы $-\hat{\Omega}$ и испускаемой $-\hat{\Omega}'$)

E – энергия налетающей частицы,

E' - энергия испускаемой частицы,

$\sigma(E)$ - сечение реакции, например, сечение упругого или $(n, 2n)$

$y(E)$ - выход или множественность испускаемой частицы,

$f(\mu, E, E')$ - нормированная функция распределения в единицах – плотность вероятности на эВ конечной энергии и на стерадиан.

Библиотеки оцененных ядерных данных

Резонансные параметры и ряд других величин необходимо где-то хранить и перерабатывать. Для этого служат библиотеки ядерных данных записанных с помощью системы ENDF (EVALUATED NUCLEAR DATA FILES)

Библиотеки оцененных ядерных данных

- Система ENDF была разработана для хранения, обновления и переработки оцененных ядерных данных при их использовании в инженерных расчетах.
- Система ENDF логически разделяется на форматы и процедуры. Форматы описывают, как данные расположены в библиотеках оцененных ядерных данных, и приводят формулы, необходимые для получения физических величин, таких как сечения и угловые распределения по параметрам, содержащимся в библиотеке на основании именно этих данных. Процедуры это жесткие правила, которые определяют, какой тип данных должен быть включен, какой формат может быть использован в определенных условиях и расчетах и т.д.
- Оценка это процесс анализа экспериментально измеренных сечений совместно с расчетными предсказаниями на основе ядерных моделей с целью определить истинную величину сечения. Параметризация и представление данных в табличной форме образует набор оцененных данных. Если имеется письменное описание формирования определенного набора данных на основе исходных данных, то набор данных относят к документированной оценке. Обычно говорят, что оцененные данные записаны в библиотеке оцененных нейтронных данных в формате ENDF. В настоящее время используется формат ENDF/B.

Библиотеки оцененных ядерных данных

- Библиотека ENDF/B содержит рекомендованные оценки для каждого материала. Каждый материал описан так полно, как это возможно; однако, полнота зависит от определенного приложения. Библиотеки в системе ENDF/B создаются в различных странах. Так в США библиотеки называются ENDF/B-xx.yy. xx - номер библиотеки (последние версии 6 и 7), yy - номер ревизии. В Европе - JEFF-xx.yy, в Японии JENDL-xx.yy, в России BROND-xx.yy, ROSFOND-xx.yy.
- Наборы данных ENDF/B выпускаются или заменяются только после тщательного пересмотра и тестирования. Это позволяет использовать их как стандартные справочные данные во время существования определенной версии ENDF/B.
- Если пользователь заинтересован в выполнении расчетов по реакторной физике или проведении анализа защиты, ему потребуется оцененные данные всех нейтронных реакций, охватывающих всю область энергий налетающих нейтронов для каждого материала в системе, которую он анализирует. Пользователь ожидает, что файлы будут содержать угловые и энергетические распределения вторичных нейтронов. Для другого расчета, пользователю может потребоваться только второстепенные изотопы для определения активации, и он был бы удовлетворен оценкой, которая содержит только сечения.

Библиотеки оцененных ядерных данных

- Однажды подготовленные в формате ENDF наборы оцененных данных могут преобразовываться в формы, пригодные для тестировки и непосредственных приложений с помощью обрабатывающих программ.
- Все оценки ENDF/B проходят по крайней мере некоторое тестирование перед выпуском в качестве части библиотеки. Тестирование первого этапа использует набор служебных программ для проверки правильности занесения данных в оценку. Тестирование второго этапа использует результаты расчетов имеющихся тестовых бенчмарков для оценки соответствия оценки реальным приложениям. Процесс проверки и тестирования являются важной частью системы ENDF.

Библиотеки оцененных ядерных данных

- Итак, библиотеки в формате ENDF представляют собой набор документированных оценок данных, хранимых в определенном машиночитаемом формате, и которые могут использоваться в качестве входных данных для кодов обработки ядерных данных. Формат ENDF использует 80-символьные записи. Записи объединены в более крупные логические единицы, такие как **“material”**, **“file”** и **“section”**.

Библиотеки оцененных ядерных данных

"**Material**" может представлять собой один нуклид, природный элемент, содержащий несколько изотопов, либо смесь из нескольких элементов (молекулы и т.д.). Один изотоп может находиться в основном состоянии или возбужденном (или изомерном) состоянии. Каждому материалу в библиотеке ENDF присваивается уникальный идентификационный номер, обозначаемый символом "**MAT**", который может иметь значения от 1 до 9999 (например, MAT = 9228 для U-235).

Библиотеки оцененных ядерных данных

"file" в библиотеке ENDF представляет собой блок данных в оценке, который описывает определенный тип данных. Список разрешенных файлов (MF - номер определенного файла) приведен в таблице ниже.

Библиотеки оцененных ядерных данных

MF (НЕ ВСЕ)

- 1 Общая информация
- 2 Данные по резонансным параметрам
- 3 Сечения реакций
- 4 Угловые распределения для вылетающих частиц
- 5 Энергетические распределения для вылетающих частиц
- 6 Энерго-угловые распределения для вылетающих частиц
- 7 Закон рассеяния тепловых нейтронов с учетом термализации
- 8 Распадные данные и выходы продуктов деления

Библиотеки оцененных ядерных данных

Следующий логический блок "**section**", с которой ассоциируется номер **MT**. Например, $MT = 102$ соответствует сечению радиационного захвата в файле сечений с $MF = 3$.

Библиотеки оцененных ядерных данных

Библиотеки могут создаваться для различных целей и в различных исследовательских центрах. Они имеют различные номера - NLIB.

NLIB

- 0 ENDF/B - United States Evaluated Nuclear Data File
- 1 ENDF/A - United States Evaluated Nuclear Data File (formerly version)
- 2 JEFF - NEA Joint Evaluated Fission and Fusion File (formerly JEF)
- 3 EFF - European Fusion File (now part of JEFF)
- 4 ENDF/B High Energy File
- 5 CENDL - China Evaluated Nuclear Data Library
- 6 JENDL - Japan Evaluated Nuclear Data Library
- 31 INDL/V - IAEA Evaluated Neutron Data Library
- 32 INDL/A - IAEA Nuclear Data Activation Library
- 33 FENDL - IAEA Fusion Evaluated Nuclear Data Library
- 34 IRDF - IAEA International Reactor Dosimetry File
- 35 BROND - Russian Evaluated Nuclear Data File (IAEA version)
- 41 BROND - Russian Evaluated Nuclear Data File (national version)

Библиотеки оцененных ядерных данных

MT	Reaction type
1	Total cross section
2	Elastic Scattering cross section
4	Inelastic Scattering cross section, as sum of cross sections with MT=51-91
16	(n,2n) cross section
17	(n,3n) cross section
18	Total fission cross section, as sum of cross sections with MT=19,20,21,38
19	(n,f) cross section
20	(n,nf) cross section
21	(n,2nf) cross section
22	(n,n α) cross section
23	(n,n3 α) cross section
24	(n,2n α) cross section
25	(n,3n α) cross section
28	(n,np) cross section
29	(n,n2 α) cross section
30	(n,2n2 α) cross section
32	(n,nd) cross section
33	(n,nt) cross section
34	(n,n ³ He) cross section
35	(n,nd2 α) cross section
36	(n,nt2 α) cross section
37	(n,4n) cross section
38	(n,3nf) cross section
51	(n,n ₁) neutron cross section production in the 1-st excited state
52	(n,n ₂) neutron cross section production in the 2-st excited state
.....
90	(n,n ₄₀) neutron cross section production in the 40-st excited state
91	(n,n _c) neutron cross section production in continuum
102	(n,g) cross section

Библиотеки оцененных ядерных данных

MT	Reaction type
103	(n,p) cross section
104	(n,d) cross section
105	(n,t) cross section
106	(n, ³ He) cross section
107	(n, α) cross section
108	(n,2 α) cross section
109	(n,3 α) cross section
111	(n,2p) cross section

Библиотеки оцененных ядерных данных

Единицы ENDF

Величина

Единица

Энергии

электрон-вольты (eV)

Углы

безразмерный косинус

Сечения

барны

Температуры

Кельвин

Массы

в единицах массы нейтрона

Угловые распределения

вероятность на косинус

Энергетические распределения

вероятность на эВ

Энерго-угловые распределения

вероятность на косинус на эВ

Период полураспада

секунды

Библиотеки оцененных ядерных данных

Первая запись каждого раздела (секции, файла, материала) содержит величину ZA , который идентифицирует конкретный материал.

ZA строится таким образом

$$ZA = 1000 \times Z + A,$$

где Z - атомный номер и A - массовое число для материала. Если материал представляет собой элемент, содержащий два или более естественных изотопов (природный Fe, например), A принимается равным 0,0.

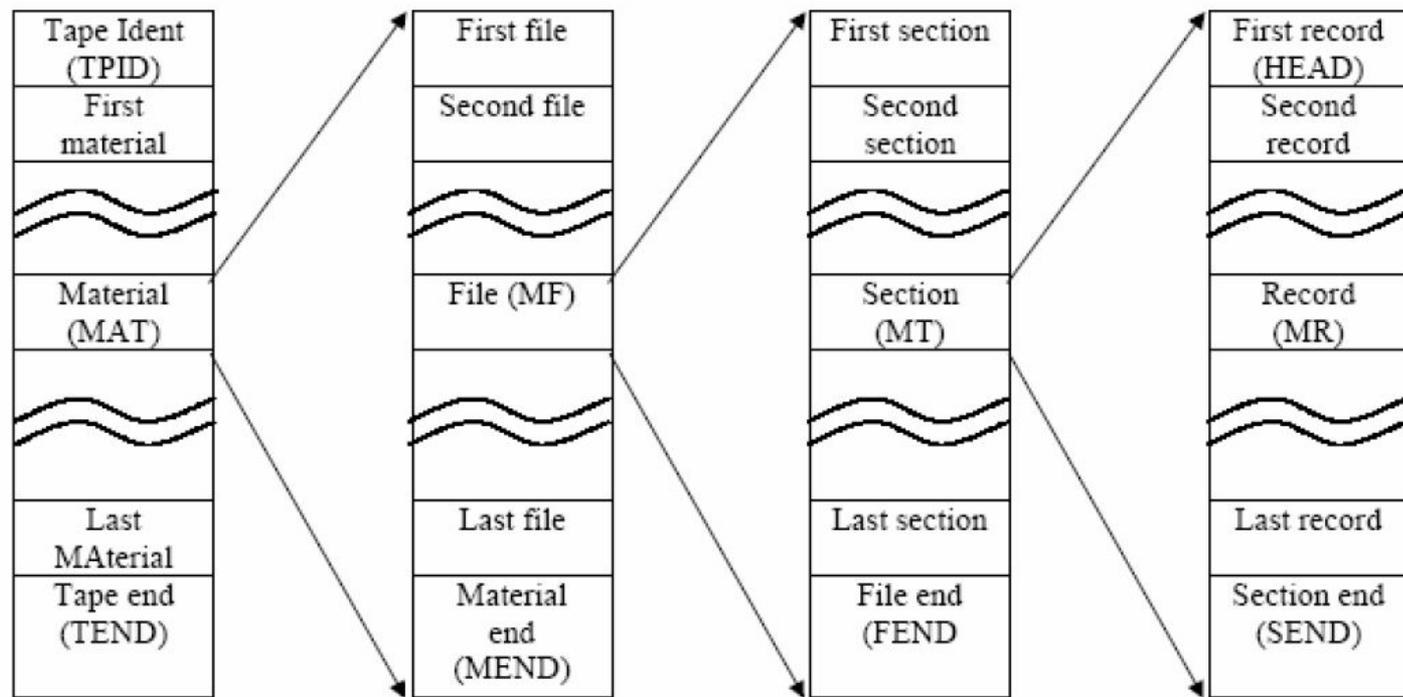
Например,

$$\text{для U-235 } ZA = 1000 \times 92 + 235 = 92235$$

$$\text{для естественного Fe } ZA = 26000.$$

Библиотеки оцененных ядерных данных

Главная единица библиотеки в формате ENDF/B есть **TAPE**, которая имеет специальный идентификатор ленты (**TPID**). Лента обычно состоит из нескольких материалов. Можно представить ленту следующей схемой:



TEND, MEND, FEND, HEAD и SEND специальные 80-символьные записи.

Библиотеки оцененных ядерных данных

Каждая секция состоит из одной или нескольких 80-символьных записей: 66 символов несут специальную информацию (например несколько целых или вещественных чисел), которые управляют работой программного кода или содержат данные (например резонансные параметры).

Позиции с 67 по 70 задают номер МАТ.

Позиции с 71 по 72 задают номер МФ.

Позиции с 73 по 75 задают номер МТ.

Позиции с 76 по 80 задают номер записи.

Библиотеки оцененных ядерных данных

ПРИМЕР ДАННЫХ ИЗ БИБЛИОТЕКИ

```
TAPE NAME
9.42390+ 4 2.36999+ 2          1          1          0          39437 1451 1
0.00000+ 0 0.00000+ 0          0          0          0          09437 1451 2
0.00000+ 0 0.00000+ 0          0          0          754        1199437 1451 3
94-PU-239 NAIG          EVAL-MAR87 M.KAWAI, T.YOSHIDA, K.HIDA          9437 1451 4
                        DIST-SEP89 REV2-FEB93          9437 1451 5
HISTORY                  9437 1451 6
.....
19) H.DERRIEN, J.NUCL.SCI.TECHNOL., 29, 794 (1992).          9437 1451 756
                        9437 1451 757
                        1          451          878          19437 1451 758
                        1          452          16          19437 1451 759
                        1          455          8          19437 1451 760
                        1          456          14          19437 1451 761
                        2          151          1220          39437 1451 762
                        3          1          73          19437 1451 763
.....
end of section 451          9437 1 0 877
```

Библиотеки оцененных ядерных данных

```
9.42390+ 4 2.36999+ 2      0      2      0      09437 1452 878
0.00000+ 0 0.00000+ 0      0      0      1      379437 1452 879
      37      2      0      0      0      09437 1452 880
1.00000- 5 2.88432+ 0 2.53000- 2 2.88432+ 0 5.00000- 2 2.88432+ 09437 1452 881
.....
1.45000+ 7 4.99171+ 0 1.50000+ 7 5.05697+ 0 1.96000+ 7 5.65717+ 09437 1452 892
2.00000+ 7 5.69317+ 0      9437 1452 893
end of section 452      9437 1 0 894
.....
end of file 1      9437 0 0 919
```

Библиотеки оцененных ядерных данных

```

resolved region
9.42390+ 4 2.36999+ 2 0 0 1 09437 2151 920
9.42390+ 4 1.00000+ 0 0 1 4 09437 2151 921
resonances parameters set 1
1.00000- 5 1.00000+ 3 1 3 0 09437 2151 922
5.00000- 1 9.41000- 1 0 0 1 19437 2151 923
2.36999+ 2 0.00000+ 0 0 0 2430 4059437 2151 924
-1.50020+ 2 1.00000+ 0 4.28900- 1 4.57200- 2 1.90500- 1 0.00000+ 09437 2151 925
-1.54670+ 1 1.00000+ 0 1.35500- 4 2.68500- 2 -2.55300- 6 0.00000+ 09437 2151 926
-6.90870+ 0 0.00000+ 0 1.23600- 2 2.60000- 1 -9.41700- 1 2.96200- 19437 2151 927
-2.19440- 1 0.00000+ 0 3.04700- 5 2.59100- 3 -1.61400- 3 -5.82500- 19437 2151 928
2.95624- 1 1.00000+ 0 7.99300- 5 3.93000- 2 5.73800- 2 0.00000+ 09437 2151 929
.....
1.01000+ 3 0.00000+ 0 1.85100- 1 4.60000- 2 -4.92000+ 0 2.08500- 29437 2151 1328
1.10000+ 3 1.00000+ 0 1.22000+ 0 4.60000- 2 4.20000- 2 0.00000+ 09437 2151 1329
resonances parameters set 2
1.00000+ 3 2.00000+ 3 1 3 0 09437 2151 1330
5.00000- 1 9.41000- 1 0 0 1 19437 2151 1331
2.36999+ 2 0.00000+ 0 0 0 2646 4419437 2151 1332
4.92055+ 2 0.00000+ 0 1.24500+ 0 4.20000- 2 -2.90600+ 1 0.00000+ 09437 2151 1333
.....
2.94774+ 3 0.00000+ 0 1.12200+ 1 4.20000- 2 1.14900+ 1 0.00000+ 09437 2151 2000

```

Библиотеки оцененных ядерных данных

```
unresolved resonance region
2.50000+ 3 3.00000+ 4                2                2                0                09437 2151 2001
5.00000- 1 9.31000- 1                0                0                2                09437 2151 2002
2.37699+ 2 0.00000+ 0                0                0                2                09437 2151 2003
unresolved resonance parameters set 1
0.00000+ 0 0.00000+ 0                2                0                156               259437 2151 2004
0.00000+ 0 0.00000+ 0 0.00000+ 0 1.00000+ 0 0.00000+ 0 2.00000+ 09437 2151 2005
2.50000+ 3 9.15750+ 0 0.00000+ 0 1.01050- 3 4.30000- 2 3.31340+ 09437 2151 2006
2.75000+ 3 9.15330+ 0 0.00000+ 0 1.04860- 3 4.30000- 2 4.56200+ 09437 2151 2007
.....
2.75000+ 4 8.74380+ 0 0.00000+ 0 8.87030- 4 4.30000- 2 5.90340+ 09437 2151 2029
3.00000+ 4 8.70350+ 0 0.00000+ 0 8.92980- 4 4.30000- 2 6.30000+ 09437 2151 2030
unresolved resonance parameters set 2
1.00000+ 0 0.00000+ 0                2                0                156               259437 2151 2031
0.00000+ 0 0.00000+ 0 1.00000+ 0 1.00000+ 0 0.00000+ 0 1.00000+ 09437 2151 2032
2.50000+ 3 3.05250+ 0 0.00000+ 0 3.36820- 4 4.30000- 2 2.13000- 29437 2151 2033
.....
2.75000+ 4 2.91460+ 0 4.09110- 2 2.95680- 4 4.30000- 2 3.79510- 29437 2151 2056
3.00000+ 4 2.90120+ 0 4.37320- 2 2.97660- 4 4.30000- 2 4.05000- 29437 2151 2057
.....
end of section 151                9437 1 0 2140
end of file 2                    9437 0 0 2141
```

Библиотеки оцененных ядерных данных

```

9.42390+ 4 2.36999+ 2 0 99 0 09437 3 1 2142
0.00000+ 0 0.00000+ 0 0 0 1 2089437 3 1 2143
208 2 0 0 0 09437 3 1 2144
1.00000- 5 0.00000+ 0 2.53000- 2 0.00000+ 0 7.89316+ 3 0.00000+ 09437 3 1 2145
8.15651+ 3 4.07407- 2 8.41987+ 3 8.01882- 2 8.94658+ 3 1.55509- 19437 3 1 2146

.....
1.87500+ 7 6.26000+ 0 1.90000+ 7 6.27000+ 0 1.95000+ 7 6.29000+ 09437 3 1 2213
2.00000+ 7 6.30000+ 0 9437 3 1 2214
end of total cross-section 9437 3 0 2215
9.42390+ 4 2.36999+ 2 0 0 0 09437 3 2 2216
0.00000+ 0 0.00000+ 0 0 0 1 2019437 3 2 2217
201 2 0 0 0 09437 3 2 2218
1.00000- 5 0.00000+ 0 2.53000- 2 0.00000+ 0 3.00000+ 4 0.00000+ 09437 3 2 2219
3.00000+ 4 1.10458+ 1 3.25000+ 4 1.10530+ 1 3.50000+ 4 1.10059+ 19437 3 2 2220

.....
1.90000+ 7 3.35225+ 0 1.95000+ 7 3.37465+ 0 2.00000+ 7 3.38699+ 09437 3 2 2285
end of scattering cross-section 9437 3 0 2286

.....
end of cross-section file 3 9437 0 0 2763

.....
end of tape 0 0 011125
-1 0 0 0

```

Библиотеки оцененных ядерных данных

Есть несколько типов записей для хранения данных в библиотеке.

Основные (но не все) из них:

TEXT, LIST, TAB1, TAB2

Примеры их применения рассмотрены ниже

Библиотеки оцененных ядерных данных

ТИП ЗАПИСИ ТИПА ТЕХТ СОСТОИТ ИЗ НЕСКОЛЬКИХ ТЕКСТОВЫХ
СТРОК

```
TAPE NAME
9.42390+ 4 2.36999+ 2          1          1          0          39437 1451 1
0.00000+ 0 0.00000+ 0          0          0          0          09437 1451 2
0.00000+ 0 0.00000+ 0          0          0          754        1199437 1451 3
94-PU-239 NAIG          EVAL-MAR87 M.KAWAI, T.YOSHIDA, K.HIDA          9437 1451 4
                        DIST-SEP89 REV2-FEB93          9437 1451 5
HISTORY                  9437 1451 6
.....
19) H.DERRIEN, J.NUCL.SCI.TECHNOL., 29, 794 (1992).          9437 1451 756
                        9437 1451 757
                        1          451          878          19437 1451 758
                        1          452          16          19437 1451 759
                        1          455          8          19437 1451 760
                        1          456          14          19437 1451 761
                        2          151          1220          39437 1451 762
                        3          1          73          19437 1451 763
.....
end of section 451          9437 1 0 877
```

Библиотеки оцененных ядерных данных

Как хранить разрешенные резонансные параметры

Определим запись типа LIST таким образом

```
[MAT, 2,151/ AWRI, QX, L, LRX, 6*NRS, NRS
```

```
ER1, AJ1, GT1, GN1, GG1, GF1,
```

```
ER2, AJ2, GT2, GN2, GG2, GF2,
```

```
ERNRS, AJNRS, GTNRS, GNNRS, GGNRS, GFNRS] LIST
```

Это формальная запись (так, как в ENDF/B Manual). Первая запись содержит управляющие числа, затем идут резонансные параметры (6 чисел типа real в каждой записи)

Может быть задано несколько наборов разрешенных резонансных параметров для различных энергетических областей, различных квантовых чисел (спин нейтрона и т.д.). Каждый набор - это запись типа LIST.

NRX - число резонансов

Библиотеки оцененных ядерных данных

ЗАПИСЬ ТИПА LIST ВНУТРИ ФАЙЛА, СТРОКИ 922-1329, СТРОКИ
1330-2000

```
resolved region
9.42390+ 4 2.36999+ 2 0 0 1 09437 2151 920
9.42390+ 4 1.00000+ 0 0 1 4 09437 2151 921
resonances parameters set 1
1.00000- 5 1.00000+ 3 1 3 0 09437 2151 922
5.00000- 1 9.41000- 1 0 0 1 19437 2151 923
2.36999+ 2 0.00000+ 0 0 0 2430 4059437 2151 924
-1.50020+ 2 1.00000+ 0 4.28900- 1 4.57200- 2 1.90500- 1 0.00000+ 09437 2151 925
-1.54670+ 1 1.00000+ 0 1.35500- 4 2.68500- 2-2.55300- 6 0.00000+ 09437 2151 926
-6.90870+ 0 0.00000+ 0 1.23600- 2 2.60000- 1-9.41700- 1 2.96200- 19437 2151 927
-2.19440- 1 0.00000+ 0 3.04700- 5 2.59100- 3-1.61400- 3-5.82500- 19437 2151 928
2.95624- 1 1.00000+ 0 7.99300- 5 3.93000- 2 5.73800- 2 0.00000+ 09437 2151 929
.....
1.01000+ 3 0.00000+ 0 1.85100- 1 4.60000- 2-4.92000+ 0 2.08500- 29437 2151 1328
1.10000+ 3 1.00000+ 0 1.22000+ 0 4.60000- 2 4.20000- 2 0.00000+ 09437 2151 1329
resonances parameters set 2
1.00000+ 3 2.00000+ 3 1 3 0 09437 2151 1330
5.00000- 1 9.41000- 1 0 0 1 19437 2151 1331
2.36999+ 2 0.00000+ 0 0 0 2646 4419437 2151 1332
4.92055+ 2 0.00000+ 0 1.24500+ 0 4.20000- 2-2.90600+ 1 0.00000+ 09437 2151 1333
.....
2.94774+ 3 0.00000+ 0 1.12200+ 1 4.20000- 2 1.14900+ 1 0.00000+ 09437 2151 2000
```

Библиотеки оцененных ядерных данных

Как хранить неразрешенные резонансные параметры

Определим запись типа LIST таким образом

```
[MAT, 2,151/ AWRI, 0.0, L, 0, NJS, 0]CONT
```

```
[MAT, 2,151/ AJ, 0.0, INT, 0, 6*NE+6, NE/
```

```
0.0, 0.0, AMUX, AMUN, AMUG, AMUF,
```

```
ES1, D1, GX1, GN01, GG1, GF1,
```

```
ES2, D2, GX2, GN02, GG2, GF2,
```

```
-----  
ESNE, DNE, GXNE, GNONE, GGNE, GFNE] LIST
```

Это формальная запись (так, как в ENDF/B Manual). Первая запись содержит управляющие числа, затем идут резонансные параметры (6 чисел типа real в каждой записи). Простейший вариант, нет деления

Может быть задано несколько наборов неразрешенных резонансных параметров для различных энергетических областей, различных квантовых чисел (спин нейтрона и т.д.)

Библиотеки оцененных ядерных данных

ЗАПИСЬ ТИПА LIST ВНУТРИ ФАЙЛА ДЛЯ ЗАДАНИЯ НЕРАЗРЕШЕННЫХ ПАРАМЕТРОВ, СТРОКИ 2004-2030, СТРОКИ 2031-2057

```
unresolved resonance region
2.50000+ 3 3.00000+ 4          2          2          0          09437 2151 2001
5.00000- 1 9.31000- 1          0          0          2          09437 2151 2002
2.37699+ 2 0.00000+ 0          0          0          2          09437 2151 2003
unresolved resonance parameters set 1
0.00000+ 0 0.00000+ 0          2          0          156          259437 2151 2004
0.00000+ 0 0.00000+ 0 0.00000+ 0 1.00000+ 0 0.00000+ 0 2.00000+ 09437 2151 2005
2.50000+ 3 9.15750+ 0 0.00000+ 0 1.01050- 3 4.30000- 2 3.31340+ 09437 2151 2006
2.75000+ 3 9.15330+ 0 0.00000+ 0 1.04860- 3 4.30000- 2 4.56200+ 09437 2151 2007
.....
2.75000+ 4 8.74380+ 0 0.00000+ 0 8.87030- 4 4.30000- 2 5.90340+ 09437 2151 2029
3.00000+ 4 8.70350+ 0 0.00000+ 0 8.92980- 4 4.30000- 2 6.30000+ 09437 2151 2030
unresolved resonance parameters set 2
1.00000+ 0 0.00000+ 0          2          0          156          259437 2151 2031
0.00000+ 0 0.00000+ 0 1.00000+ 0 1.00000+ 0 0.00000+ 0 1.00000+ 09437 2151 2032
2.50000+ 3 3.05250+ 0 0.00000+ 0 3.36820- 4 4.30000- 2 2.13000- 29437 2151 2033
.....
2.75000+ 4 2.91460+ 0 4.09110- 2 2.95680- 4 4.30000- 2 3.79510- 29437 2151 2056
3.00000+ 4 2.90120+ 0 4.37320- 2 2.97660- 4 4.30000- 2 4.05000- 29437 2151 2057
.....
end of section 151          9437 1 0 2140
end of file 2             9437 0 0 2141
```

Библиотеки оцененных ядерных данных

Рассмотрим теперь диапазон энергий выше резонансной области.

В этой области энергетическая зависимость сечений ведет себя гладко.

Мы можем использовать табличное представление энергетической зависимости сечений, парами, E_i и $\sigma(E_i)$ (запись типа TAB1)

Законы интерполяции

Многие типы данных в ENDF приводятся в виде таблиц на определенной сетке с законом интерполяции для определения величин между точками сетки. Разрешены простые одномерные схемы интерполяции и специальные законы интерполяции.

Библиотеки оцененных ядерных данных

Одномерные интерполяционные схемы.

Рассмотрим как определяется простая функция $y(x)$, которая должна задавать сечение. Функция $y(x)$ задается серией табличных значений, парами x и $y(x)$, и методом интерполяции между вводимыми значениями. Пары упорядочены по возрастанию значения x . Будет задаваться NP пар значений x и $y(x)$. Весь интервал, в котором определен x , разбит на NR - интервалов интерполяции. Интервал интерполяции определяется как интервал независимой переменной x , в котором можно использовать определенную схему интерполяции; т.е. одна схема интерполяции определяет значения $y(x)$ при любых значениях x в этом интервале. На Рисунке ниже приведен пример, а ниже определены величины:

$x(n)$ – n -ое значение x ,

$y(n)$ – n -ое значение y ,

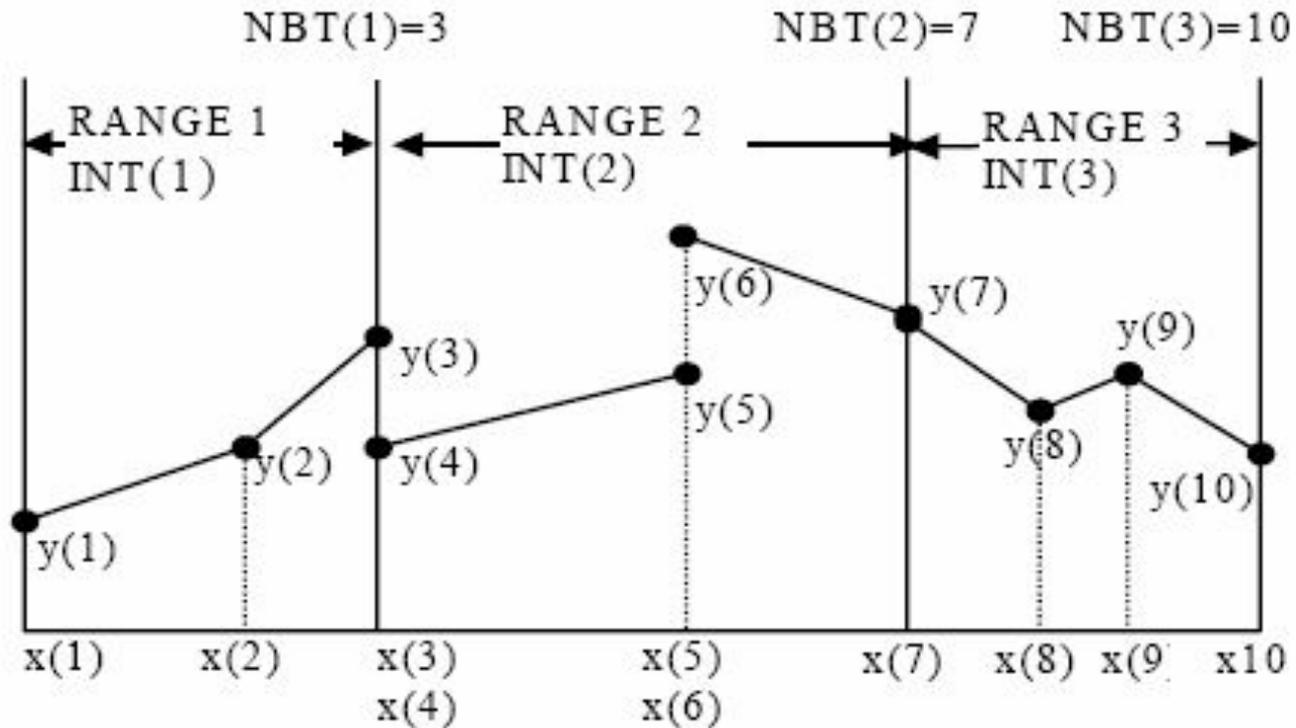
NP – число заданных пар (x и y),

$INT(m)$ – номер схемы интерполяции, используемый в m -ом интервале,

$NBT(m)$ – номер пары в последовательности, задающей границы m -го и $(m+1)$ -го интервалов интерполяции.

Всего интервалов NR .

Библиотеки оцененных ядерных данных



Интерполяция табулированной одномерной функции для случая $NP=10$, $NR=3$.

Заметим, что там, где возможен разрыв в представлении сечений (например, в точке, где стыкуются резонансная и нерезонансная области), значение x (энергия) и y (сечение) должно повторяться.



Определение типов интерполяции

1	Y не зависит от X (постоянное значение, гистограмма)
2	Y линейно относительно X (линейный-линейный)
3	Y линейно относительно $\ln(X)$ (линейно-логарифмический)
4	$\ln(Y)$ линейно относительно X (логарифмически-линейный)
5	$\ln(Y)$ линейно относительно $\ln(X)$ (логарифмический-логарифмический)

Библиотеки оцененных ядерных данных

0.000000+0	0.000000+0	0	0	1	799228	1452	2	
79	2				9228	1452	3	
1.000000-5	2.436700+0	2.530000-2	2.436700+0	5.000000-2	2.436700+0	9228	1452	4
1.000000+0	2.436700+0	2.000000+0	2.433800+0	1.000000+1	2.433800+0	9228	1452	5
5.500000+3	2.433800+0	7.750000+3	2.433800+0	1.000000+4	2.433800+0	9228	1452	6
1.500000+4	2.430407+0	2.000000+4	2.428500+0	3.000000+4	2.425059+0	9228	1452	7
4.000000+4	2.422700+0	5.000001+4	2.422512+0	6.000001+4	2.423800+0	9228	1452	8
7.000001+4	2.425584+0	8.000001+4	2.427660+0	9.000001+4	2.429980+0	9228	1452	9
1.000000+5	2.432500+0	1.200000+5	2.437685+0	1.300000+5	2.440068+0	9228	1452	10
1.400000+5	2.442217+0	1.500000+5	2.444100+0	1.700000+5	2.447262+0	9228	1452	11
2.000000+5	2.451153+0	2.500000+5	2.456510+0	3.000000+5	2.461295+0	9228	1452	12
3.500001+5	2.466178+0	4.000001+5	2.471060+0	5.000001+5	2.480825+0	9228	1452	13
6.000001+5	2.490042+0	7.000001+5	2.499327+0	8.000001+5	2.509725+0	9228	1452	14
9.000001+5	2.520928+0	1.000000+6	2.531700+0	1.200000+6	2.553042+0	9228	1452	15
1.400000+6	2.575793+0	1.600000+6	2.599290+0	1.800000+6	2.622803+0	9228	1452	16
2.000000+6	2.647040+0	2.200000+6	2.670940+0	2.400001+6	2.694490+0	9228	1452	17
2.600001+6	2.718326+0	2.800001+6	2.742881+0	3.000001+6	2.767100+0	9228	1452	18
3.500001+6	2.826700+0	4.000001+6	2.891600+0	4.500001+6	2.965917+0	9228	1452	19
5.000001+6	3.044133+0	5.500001+6	3.130754+0	6.000001+6	3.221267+0	9228	1452	20
6.500001+6	3.317414+0	7.000002+6	3.407200+0	7.500002+6	3.479862+0	9228	1452	21
8.000002+6	3.549800+0	8.500002+6	3.623019+0	9.000002+6	3.695211+0	9228	1452	22
9.500002+6	3.766645+0	1.000000+7	3.836500+0	1.050000+7	3.904966+0	9228	1452	23
1.100000+7	3.972728+0	1.150000+7	4.040011+0	1.200000+7	4.107000+0	9228	1452	24
1.250000+7	4.175742+0	1.300000+7	4.247331+0	1.350000+7	4.320648+0	9228	1452	25
1.400000+7	4.394742+0	1.450000+7	4.468800+0	1.500000+7	4.544075+0	9228	1452	26
1.550000+7	4.620803+0	1.600000+7	4.696942+0	1.650000+7	4.770695+0	9228	1452	27
1.700000+7	4.840483+0	1.750000+7	4.907079+0	1.800000+7	4.972091+0	9228	1452	28
1.850000+7	5.035578+0	1.900000+7	5.097598+0	1.950000+7	5.158203+0	9228	1452	29
2.000000+7	5.217443+0					9228	1452	30

Библиотеки оцененных ядерных данных

Ниже приводятся данные для числа нейтронов на одно деление и полные нейтронные сечения, как функции энергии, записанные с помощью TAB1.

Например, число нейтронов на одно деление для случая табличного задания зависимости от энергии задается, как

[MAT, 1, 452/ 0.0, 0.0, 0, 0, NR, NP/Eint,v(E)]TAB1

А полное сечение для случая табличного задания зависимости от энергии задается, как

[MAT, 1, 452/ 0.0, 0.0, 0, 0, NR, NP/Eint, $\sigma(E)$] TAB1

NR - число интервалов с различными законами интерполяции

NP - число энергий

Библиотеки оцененных ядерных данных

					NR	NP					
1.40280+ 4	2.77366+ 1	0	0	0			0	1425	3	1	345
0.00000+ 0	0.00000+ 0	0	0	3			394	1425	3	1	346
7	5	378	2	394	5			1425	3	1	347
1.00000- 5	6.75386+ 0	2.53000- 2	1.34019- 1	1.00000+ 3	6.72123- 4	1425	3	1	348		
1.00000+ 4	2.01500- 4	1.00000+ 5	1.11300- 4	1.00000+ 6	1.72500- 4	1425	3	1	349		
1.81000+ 6	1.18914- 4	1.81000+ 6	1.88447+ 0	1.83000+ 6	3.55000+ 0	1425	3	1	350		
1.84298+ 6	6.11355+ 0	1.84304+ 6	6.12540+ 0	1.84318+ 6	6.15305+ 0	1425	3	1	351		
1.84333+ 6	6.18268+ 0	1.84347+ 6	6.21033+ 0	1.84362+ 6	6.23995+ 0	1425	3	1	352		
1.84391+ 6	6.29723+ 0	1.84418+ 6	6.35055+ 0	1.84421+ 6	6.35648+ 0	1425	3	1	353		
1.84450+ 6	6.41375+ 0	1.84480+ 6	6.47300+ 0	1.84539+ 6	6.58953+ 0	1425	3	1	354		
1.84598+ 6	6.70605+ 0	1.84657+ 6	6.82258+ 0	1.84775+ 6	7.05563+ 0	1425	3	1	355		
1.84893+ 6	7.28868+ 0	1.85000+ 6	7.50000+ 0	1.85011+ 6	7.48871+ 0	1425	3	1	356		
1.85248+ 6	7.24550+ 0	1.85485+ 6	7.00229+ 0	1.85722+ 6	6.75908+ 0	1425	3	1	357		
1.86197+ 6	6.27164+ 0	1.86673+ 6	5.78317+ 0	1.87151+ 6	5.29264+ 0	1425	3	1	358		

Библиотеки оцененных ядерных данных

```

9.42390+ 4 2.36999+ 2 0 99 0 09437 3 1 2142
0.00000+ 0 0.00000+ 0 0 0 1 2089437 3 1 2143
    208 2 0 0 0 09437 3 1 2144
1.00000- 5 0.00000+ 0 2.53000- 2 0.00000+ 0 7.89316+ 3 0.00000+ 09437 3 1 2145
8.15651+ 3 4.07407- 2 8.41987+ 3 8.01882- 2 8.94658+ 3 1.55509- 19437 3 1 2146

.....
1.87500+ 7 6.26000+ 0 1.90000+ 7 6.27000+ 0 1.95000+ 7 6.29000+ 09437 3 1 2213
2.00000+ 7 6.30000+ 0 9437 3 1 2214
end of total cross-section 9437 3 0 2215
9.42390+ 4 2.36999+ 2 0 0 0 09437 3 2 2216
0.00000+ 0 0.00000+ 0 0 0 1 2019437 3 2 2217
    201 2 0 0 0 09437 3 2 2218
1.00000- 5 0.00000+ 0 2.53000- 2 0.00000+ 0 3.00000+ 4 0.00000+ 09437 3 2 2219
3.00000+ 4 1.10458+ 1 3.25000+ 4 1.10530+ 1 3.50000+ 4 1.10059+ 19437 3 2 2220

.....
1.90000+ 7 3.35225+ 0 1.95000+ 7 3.37465+ 0 2.00000+ 7 3.38699+ 09437 3 2 2285
end of scattering cross-section 9437 3 0 2286

.....
end of cross-section file 3 9437 0 0 2763

.....
end of tape 0 0 011125
-1 0 0 0

```

Библиотеки оцененных ядерных данных

Для некоторых типов реакций (упругое и неупругое рассеяние, $(n,2n)$, $(n,3n)$ и т.д.) необходимо задавать распределение вторичных продуктов (например, нейтронов) по энергиям и углам.

$$\sigma(\mu, E, E') = \sigma(E) y(E) f(\mu, E, E') / 2\pi$$

E начальная энергия,

E' вторичная энергия,

$\sigma(E)$ сечение взаимодействия (File 3),

y множественность (например, 2 для $(n,2n)$)

$f(\mu, E, E')$ нормализованная функция распределения по энергиям и углам.

Библиотеки оцененных ядерных данных

Рассмотрим простой случай, когда функция распределения может быть представлена как произведение двух функций распределения

$$f(\mu, E, E') = f(\mu, E)g(E, E'), \text{ где}$$

$f(\mu, E)$ дает нам угловое распределение для определенной начальной энергии E для вторичных нейтронов (File 4)

$g(E, E')$ дает распределение для E' для определенной энергии E для вторичных нейтронов (File 5)

Рассмотрим, как мы можем представить распределение для вторичной энергии E' для определенной первичной энергии E : $g(E, E')$ (File 5)

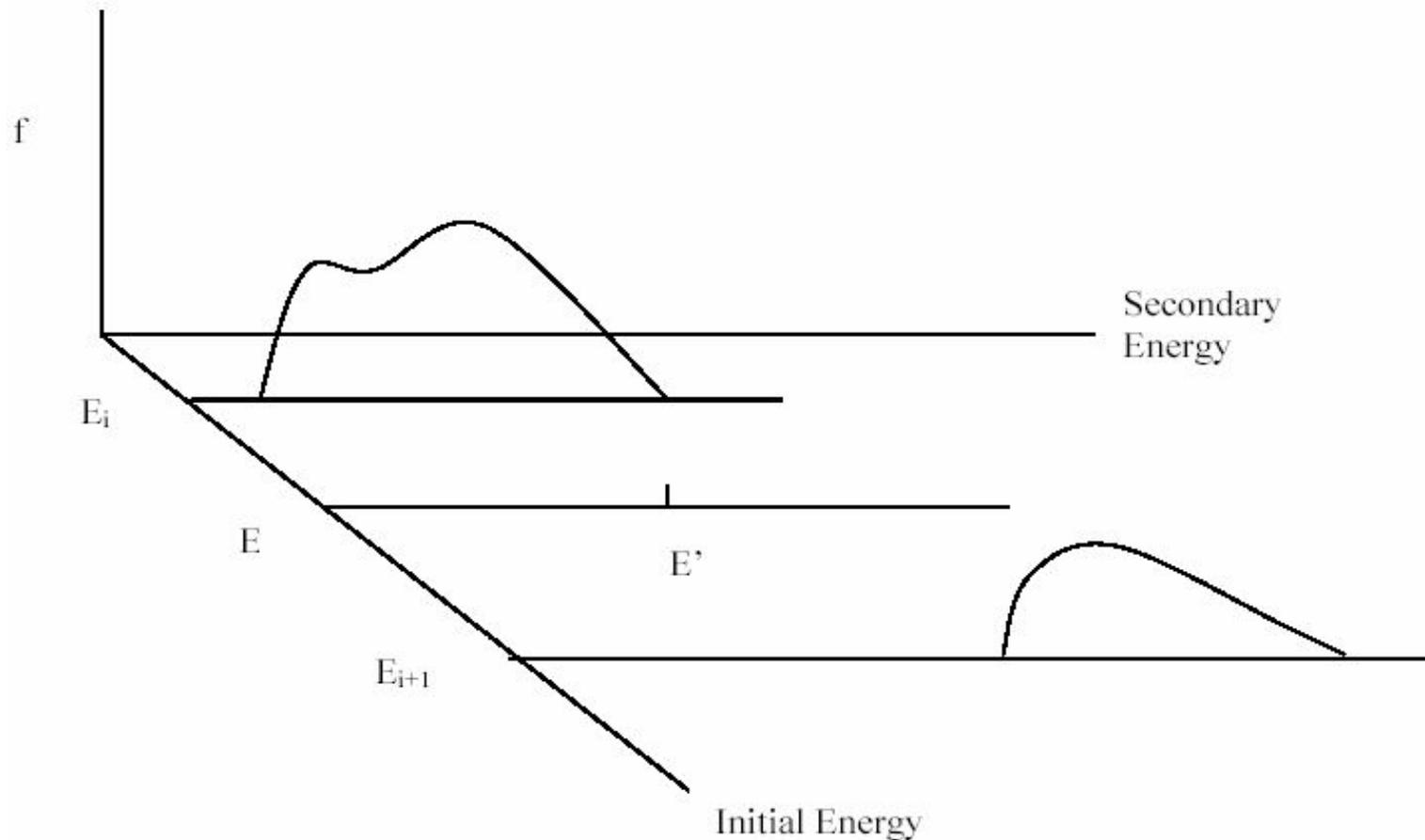
Библиотеки оцененных ядерных данных

Двумерные интерполяционные схемы.

Далее рассмотрим энергетическое распределение, определенное двумерной функцией от начальной энергии E и конечной энергии E' : $f(E, E')$. Функция представляется набором одномерных табулированных функций $f(E, E')$, определенных для значений $E = E_i$ ($i = 1, 2, \dots, I$) и $E' = E_k$ ($k = 1, 2, \dots, K(i)$).

Для начальной энергии E' обязательно задается $f = 0$

Библиотеки оцененных ядерных данных



Интерполяция двумерных распределений. Для каждой начальной энергии E мы конструируем распределение по вторичным энергиям E' как запись TAB1. Такая конструкция называется запись TAB2.

Библиотеки оцененных ядерных данных

Как правило, $f(E_i, E_k)$ представляет собой нормированное распределение по конечной энергии, т.е. такое, что интеграл по всем возможным значениям этой энергии равен единице. Функция $f(E, E_k)$ интерполированная к значению E начальной энергии ($E_i < E < E_{i+1}$) должна сохранить свойство нормированности, т.е. при интерполяции в любую точку E между E_i и E_{i+1} должна сохраняться нормировка по конечной энергии.

Для интерполяции двумерных распределений предусмотрены три интерполяционные схемы:

- 1) простая декартова интерполяция, когда интерполяция по E' ведется вдоль линии, параллельной оси вторичных энергий, а интерполяция по начальной энергии – по оси начальных энергий;
- 2) интерполяция на единичной базе;
- 3) интерполяция методом соответствующих точек.

Библиотеки оцененных ядерных данных

Для интерполяции двумерного распределения к заданным значениям E и E' , прежде всего, требуется определить закон интерполяции по первой переменной. Это может быть сделано с использованием определенных выше законов интерполяции INT=1 – 5. Если для интерполяции по второй переменной использовать те же законы, приходим к так называемой простой гауссовой интерполяционной схеме: интерполяция $f(E, E')$ по E' при каждом E производится как для обычной функции одной переменной. Далее эта функция должна интерполироваться по начальной энергии по заданному для нее закону интерполяции при заданном значении E' .

Библиотеки оцененных ядерных данных

Например, если для интерполяции по каждой из переменных задан линейный закон интерполяции, то

$$f(E, E') = f(E_i, E') + \frac{E - E_i}{E_{i+1} - E_i} [f(E_{i+1}, E') - f(E_i, E')],$$

где

$$f(E_i, E') = f(E_i, E'_k) + \frac{E' - E'_k}{E'_{k+1} - E'_k} [f(E_i, E'_{k+1}) - f(E_i, E'_k)]$$

В ряде случаев применяются более сложные схемы.

Библиотеки оцененных ядерных данных

Эта схема является наиболее общей и позволяет моделировать сложные распределения (здесь используется запись типа TAB2, состоящая из набора записей типа TAB1).

```
[MAT, 5, MT/ 0.0, 0.0, 0, 0, NR, NE/ Eint ]TAB2
```

```
[MAT, 5, MT/ 0.0, E1, 0, 0, NR, NF/ E'int /  
E'1 0.0, E'2, g(E1 → E'2), E'3, g(E1 → E'3)
```

```
-----  
--- E'NF-1, g(E1 → E'NF-1), E'NF, 0.0]TAB1
```

```
[MAT, 5, MT/ 0.0, E2, 0, 0, NR, NF/ E'int /  
E'1 0.0, E'2, g(E2 → E'2), E'3, g(E2 → E'3)
```

```
-----  
--- E'NF-1, g(E2 → E'NF-1), E'NF, 0.0]TAB1
```

```
[MAT, 5, MT/ 0.0, ENE, 0, 0, NR, NF/ E'int /  
E'1 0.0, E'2, g(ENE → E'2), E'3, g(ENE → E'3)
```

```
-----  
--- E'NF-1, g(ENE → E'NF-1), E'NF, 0.0]TAB1
```

NR - число интерполяционных схем, NE - число начальных энергий, NF - число вторичных энергий

Библиотеки оцененных ядерных данных

9.42390+	4	2.36999+	2	0	0	1	09437	5	17	4033
0.00000+	0	0.00000+	0	0	1	1	29437	5	17	4034
	2		2	0	0	0	09437	5	17	4035
1.27078+	7	1.00000+	0	2.00000+	7	1.00000+	9437	5	17	4036
0.00000+	0	0.00000+	0	0	0	1	99437	5	17	4037
	9		2	0	0	0	09437	5	17	4038
0.00000+	0	1.27078+	7	0	0	3	49437	5	17	4039
	2		2	3	4	4	29437	5	17	4040
0.00000+	0	0.00000+	0	1.25000+	5	8.82861-	6	2.50000+	5	8.72300-
2.92496+	5	0.00000+	0				79437	5	17	4041
0.00000+	0	1.30000+	7	0	0	3	9437	5	17	4042
	2		2	3	4	4	49437	5	17	4043
0.00000+	0	0.00000+	0	1.25000+	5	8.82861-	6	2.50000+	5	8.72300-
2.92496+	5	0.00000+	0				29437	5	17	4044
0.00000+	0	1.40000+	7	0	0	3	79437	5	17	4045
	2		2	10	4	11	9437	5	17	4046
0.00000+	0	0.00000+	0	1.25000+	5	1.30920-	6	2.50000+	5	1.66136-
3.75000+	5	1.54811-	6	5.00000+	5	1.24687-	6	6.25000+	5	9.56873-
7.50000+	5	6.75263-	7	8.75000+	5	4.26976-	7	1.00000+	6	2.23854-
1.25000+	6	4.21979-	9	1.29250+	6	0.00000+	0			
0.00000+	0	1.50000+	7	0	0	3	9437	5	17	4052
							169437	5	17	4053

Библиотеки оцененных ядерных данных

Угловое распределение рассеянных нейтронов задается в 4-м файле. Распределение может задаваться различным способом, в зависимости от управляющих параметров, задаваемых в начале 4-го файла. Наиболее общим является табличное представление, имеющее вид:

```
[MAT, 4, MT/ 0.0, 0.0, 0, 0, NR, NE/ Eint] TAB2  
[MAT, 4, MT/ T, E1, LT, 0, NR, NP/  $\mu_{int}/f(\mu, E1)$ ]TAB1  
[MAT, 4, MT/ T, E2, LT, 0, NR, NP/  $\mu_{int}/f(\mu, E2)$ ]TAB1  
-----  
-----  
[MAT, 4, MT/ T, ENE, LT, 0, NR, NP/  $\mu_{int}/f(\mu, ENE)$ ]TAB1
```

NR - число интервалов с различными интерполяционными схемами
NE - число энергий NP - число косинусов

Библиотеки оцененных ядерных данных

Возможно также разложение $f(\mu, E)$ в ряд по полиномам

$$f(\mu, E) = \sum_{l=0}^{NL} \frac{2l+1}{2} \alpha_l(E) P_l(\mu)$$

```
[MAT, 4, MT/ 0.0, 0.0, 0, 0, NR, NE/ Eint]TAB2
```

```
[MAT, 4, MT/ T, E1, LT, 0, NL, 0/ al(E1)]LIST
```

```
[MAT, 4, MT/ T, E2, LT, 0, NL, 0/ al(E2)]LIST
```

```
[MAT, 4, MT/ T,ENE, LT, 0, NL, 0/ al(ENE)]LIST
```

Библиотеки оцененных ядерных данных

Разложение $f(\mu, E)$ в ряд по полиномам для Pu-239

0.00000+ 0	0.00000+ 0	0	0	0	0	1	129437	4	51	3084
12	2	0	0	0	0	0	09437	4	51	3085
0.00000+ 0	7.89316+ 3	0	0	0	0	2	09437	4	51	3086
0.00000+ 0	0.00000+ 0	0	0	0	0	0	9437	4	51	3087
0.00000+ 0	1.00000+ 6	0	0	0	0	12	09437	4	51	3088
5.16115- 2	-6.96573- 2	-4.22426- 2	8.25257- 3	3.04573- 3	2.32028- 3	39437	4	51	3089	
3.27645- 5	3.98461- 5	-7.28224- 7	1.26486- 7	4.77812- 8	0.00000+ 0	09437	4	51	3090	
0.00000+ 0	2.00000+ 6	0	0	0	0	14	09437	4	51	3091
5.01782- 2	-2.49673- 2	-3.54882- 2	-2.02538- 2	1.79692- 2	1.46169- 2	29437	4	51	3092	
1.89342- 3	2.01216- 3	-7.64638- 5	6.89567- 5	-1.23885- 6	5.36745- 6	79437	4	51	3093	
-3.03520-10	0.00000+ 0	0	0	0	0	0	9437	4	51	3094
.....										
0.00000+ 0	2.00000+ 7	0	0	0	0	20	09437	4	51	3134
5.19823- 1	2.86017- 1	1.48151- 1	1.00428- 1	6.74898- 2	5.63026- 2	29437	4	51	3135	
4.74714- 2	3.73246- 2	3.46141- 2	2.39556- 2	2.15580- 2	8.54460- 2	39437	4	51	3136	
-1.68860- 3	-1.31495- 2	-1.10602- 2	5.22294- 3	9.49040- 3	1.31164- 3	29437	4	51	3137	
1.62845- 2	5.74588- 3	0	0	0	0	0	9437	4	51	3138
0	0	0	0	0	0	0	9437	4	0	3139

Библиотеки оцененных ядерных данных

Немного про гамма-кванты.

13 Photon production cross sections

14 Photon angular distributions

Сечения имеют вид (в барн)

$$\sigma_{tot}^{\gamma}(E) = \sum_{k=1}^{NK} \sigma_k^{\gamma}(E)$$

NK - число фотонов

[MAT, 13, MT/ 0.0, 0.0, 0, 0, NR, NP/ Eint / $\sigma_k^{\gamma}(E)$]TAB1
(NK>1)

<subsection for k=1>

<subsection for k=2>

Угловые распределения для гамма-квантов задаются аналогично
<subsection for k=NK>

Библиотеки оцененных ядерных данных

Сечения гамма-квантов для фтора (NK=1)

0.00000+ 0	0.00000+ 0	0	1	1	253	92513	3	3607
253	2	0	0	0	0	92513	3	3608
1.00000- 5	0.00000+ 0	2.53000- 2	0.00000+ 0	1.00000+ 5	0.00000+ 0	92513	3	3609
4.63361+ 6	0.00000+ 0	4.63361+ 6	1.42408+ 0	4.64084+ 6	1.42437+ 0	92513	3	3610
4.65436+ 6	1.42492+ 0	4.67463+ 6	1.42576+ 0	4.67517+ 6	1.42579+ 0	92513	3	3611
4.68814+ 6	1.42632+ 0	4.70841+ 6	1.42715+ 0	4.72867+ 6	1.42799+ 0	92513	3	3612
4.74894+ 6	1.42882+ 0	4.76504+ 6	1.42948+ 0	4.77597+ 6	1.42993+ 0	92513	3	3613
1.65000+ 7	5.40443- 1	1.67181+ 7	5.59598- 1	1.70000+ 7	5.84166- 1	92513	3	3689
1.75000+ 7	6.25780- 1	1.79072+ 7	6.58844- 1	1.80000+ 7	6.66308- 1	92513	3	3690
1.82500+ 7	6.85997- 1	1.85000+ 7	7.05424- 1	1.87500+ 7	7.24456- 1	92513	3	3691
1.90000+ 7	7.43219- 1	1.92500+ 7	7.58907- 1	1.95000+ 7	7.74338- 1	92513	3	3692
2.00000+ 7	8.04285- 1					92513	3	3693
						92513	0	3694
						925 0	0	3695

Угловые распределения для гамма-квантов задаются аналогично

Уравнение переноса нейтронов

Основой для математического описания процессов, протекающих в ядерном реакторе, является т.н. уравнение Больцмана, которое в физике реакторов обычно называется уравнением переноса нейтронов. Вообще говоря, это нестационарное уравнение, но мы будем рассматривать условно-критическую задачу. Тогда уравнение переноса нейтронов для такой задачи может быть записано в виде:

Уравнение переноса нейтронов

$$\begin{aligned} & (\vec{\Omega}, \vec{\nabla} \Phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega})) + \Sigma_t(\vec{r}, E) \Phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \\ & \int \int [\Sigma_s(\vec{r}, E') f_s(E', \vec{\Omega}' \rightarrow E, \vec{\Omega}) \Phi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}')] dE' d\vec{\Omega}' \\ & + \frac{\chi(E)}{4\pi k_{\text{эфф}}} \int \int [\bar{\nu}(E') \Sigma_f(\vec{r}, E') \Phi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}')] dE' d\vec{\Omega}' \end{aligned}$$

Первый член уравнения имеет различный вид для различных геометрий, например, для декартовой системы координат он получается с учетом того, что единичный вектор и градиент равны:

$$\vec{\Omega} = \Omega_x \vec{i} + \Omega_y \vec{j} + \Omega_z \vec{k} \quad \vec{\nabla} = \frac{\partial}{\partial x} \vec{i} + \frac{\partial}{\partial y} \vec{j} + \frac{\partial}{\partial z} \vec{k}$$

R-приближения и уравнение диффузии

Обычно угловая зависимость входящих в уравнение величин учитывается с помощью известных функций, сферических, в общем случае или полиномов Лежандра в частных случаях.

$$\Sigma_s(\vec{r}, E') f_s(E', \vec{\Omega}' \rightarrow E, \vec{\Omega}) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{4\pi} \Sigma_{sl}(\vec{r}, E' \rightarrow E) P_l(\mu_0)$$

в предположении, что индикатриса зависит только от относительного угла (косинуса относительного угла)

P-приближения и уравнение диффузии

Для плотности потока нейтронов

$$\Phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \phi_{lm}(\vec{r}, E) Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

Рассмотрим более частное P1-приближение в произвольной геометрии ($l=1$). В этом случае имеем разложение потока в ряд до линейного члена:

$$\Phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) = \frac{1}{4\pi} \phi(\vec{r}, E) + \frac{3}{4\pi} (\vec{\Omega}, \vec{J}(\vec{r}, E))$$

Здесь мы записали скалярное произведение, т.к. поток – величина скалярная, а $\vec{\Omega}$ – векторная величина.

R-приближения и уравнение диффузии

После ряда преобразований можно получить систему для полного потока и тока (P1-приближение) :

$$\begin{aligned}
 (\nabla, J(\bar{r}, E)) + \Sigma_t(\bar{r}, E)\phi(\bar{r}, E) &= \int \Sigma_{s0}(\bar{r}, E' \rightarrow E)\phi(\bar{r}, E')dE' + \frac{\chi(E)}{4\pi k_{\text{эфф}}} \int v(E')\Sigma_f(\bar{r}, E')\phi(\bar{r}, E')dE' \\
 \nabla \phi(\bar{r}, E) + 3\Sigma_t(\bar{r}, E)J(\bar{r}, E) &= 3 \int \Sigma_{s1}(\bar{r}, E' \rightarrow E)J(\bar{r}, E')dE'
 \end{aligned}$$

С учетом закона Фика:
$$J(\bar{r}, E) = -D(\bar{r}, E)\nabla\Phi(\bar{r}, E)$$

$$\begin{aligned}
 -(\nabla, D(\bar{r}, E)\nabla\phi(\bar{r}, E)) + \Sigma_t(\bar{r}, E)\phi(\bar{r}, E) &= \int \Sigma_{s0}(\bar{r}, E' \rightarrow E)\phi(\bar{r}, E')dE' + \\
 \frac{\chi(E)}{k_{\text{эфф}}} \int v(E')\Sigma_f(\bar{r}, E')\phi(\bar{r}, E')dE' &
 \end{aligned}$$

Многогрупповой подход

Вводится некоторое количество дискретных энергетических групп. Нумерация групп начинается с группы, соответствующей самой большой энергии.

$$\phi_g(\mathbf{r}) = \int_{E_{g+1}}^{E_g} \phi(\mathbf{r}, E) dE$$

$$J_g(\mathbf{r}) = \int_{E_{g+1}}^{E_g} J(\mathbf{r}, E) dE$$

Многогрупповой подход

Интеграл

$$\int dE' = \sum_{g'=0}^{G-1} \int_{E_{g'+1}}^{E_{g'}} dE'$$

Для P1-приближения проинтегрируем каждый член уравнений по интервалу $[E_{g+1}, E_g]$. Например, первое уравнение P1-приближения будет иметь вид:

$$\int_{E_{g+1}}^{E_g} (\nabla, J(r, E)) dE + \int_{E_{g+1}}^{E_g} \Sigma_t(r, E) \phi(r, E) dE =$$

$$\sum_{g'=0}^{G-1} \int_{E_{g'+1}}^{E_{g'}} \int_{E_{g'+1}}^{E_g} \Sigma_{s0}(r, E' \rightarrow E) \phi(r, E') dE dE' + \sum_{g'=0}^{G-1} \int_{E_{g'+1}}^{E_{g'}} \int_{E_{g'+1}}^{E_g} \frac{\chi(E)}{k_{eff}} \nu(E') \Sigma_f(r, E') \phi(r, E') dE dE'$$

Многогрупповой подход

Первый член уравнения есть $(\nabla, \mathbf{J}_g(\mathbf{r}))$

Вводя

$$\Sigma_{tg}(\mathbf{r}) = \frac{\int_{E_{g+1}}^{E_g} \Sigma_t(\mathbf{r}, E) \phi(\mathbf{r}, E) dE}{\phi_g(\mathbf{r})}$$

можно записать второй член уравнения в виде $\Sigma_{tg}(\mathbf{r}) \phi_g(\mathbf{r})$

Первый член справа можно записать в виде $\sum_{g'=0}^{G-1} \Sigma_{s0}^{g'g}(\mathbf{r}) \phi_{g'}(\mathbf{r})$

если ввести

$$\Sigma_{s0}^{g'g}(\mathbf{r}) = \left(\int_{E_{g'+1}}^{E_{g'}} \int_{E_{g+1}}^{E_g} \Sigma_{s0}(\mathbf{r}, E' \rightarrow E) \phi(\mathbf{r}, E') dE dE' \right) / \phi_{g'}(\mathbf{r})$$

Многогрупповой подход

При наличии эффектов термализации матрица будет иметь элементы под главной диагональю.

Во втором члене справа от E зависит только $\chi(E)$

Обозначим $\chi_g = \int_{E_{g+1}}^{E_g} \chi(E) dE$ и введем

$$\left(v \Sigma_f(\vec{r}) \right)_{g'} = \left(\int_{E_{g'+1}}^{E_{g'}} v(E') \Sigma_f(\vec{r}, E') \phi(\vec{r}, E') dE' \right) / \phi_{g'}$$

Многогрупповой подход

Тогда второй член справа можно записать в виде

$$\frac{\chi_g}{4\pi k_{\text{эфф}}} \sum_{g'=0}^{G-1} \left(\nu \Sigma_f(\mathbf{r}) \right)_{g'} \phi_{g'}(\mathbf{r})$$

и уравнение примет вид:

$$\begin{aligned} (\nabla, \mathbf{J}_g(\mathbf{r})) + \sum_{tg} (\mathbf{r}) \phi_g(\mathbf{r}) = \\ \sum_{g'=0}^{G-1} \Sigma_{s0}^{g'g}(\mathbf{r}) \phi_{g'}(\mathbf{r}) + \frac{\chi_g}{k_{\text{эфф}}} \sum_{g'=0}^{G-1} \left(\nu \Sigma_f(\mathbf{r}) \right)_{g'} \phi_{g'}(\mathbf{r}) \end{aligned}$$

$$g = 0, \dots, G-1$$

Многогрупповой подход

Второе уравнение системы – векторное. Запишем его для проекции на ось z:

$$\nabla_z \phi(\vec{r}, E) + 3\Sigma_t(\vec{r}, E)J_z(\vec{r}, E) = 3 \int \Sigma_{s1}(\vec{r}, E' \rightarrow E) J_z(\vec{r}, E') dE'$$

в частности, для одномерной плоской геометрии

$$\nabla_z \phi(\vec{r}, E) = \frac{\partial \phi(\vec{r}, E)}{\partial z}$$

Проинтегрируем уравнение на интервале $[E_{g+1}, E_g]$

Многогрупповой подход

Если ввести

$$\Sigma_{s1}^{g'g}(\mathbf{r}) = \left(\int_{E_{g'+1}}^{E_{g'}} \int_{E_{g+1}}^{E_g} \Sigma_{s1}(\mathbf{r}, E' \rightarrow E) J_z(\mathbf{r}, E') dE dE' \right) / J_{zg'}(\mathbf{r})$$

$$\Sigma_{t1g}(\mathbf{r}) = \int_{E_{g+1}}^{E_g} \Sigma_t(\mathbf{r}, E) J_z(\mathbf{r}, E) dE / J_{gz}(\mathbf{r})$$

то можно легко получить уравнение

$$\frac{\partial \phi_g(\mathbf{r})}{\partial z} + 3 \Sigma_{t1g}(\mathbf{r}) J_{zg}(\mathbf{r}) = 3 \sum_{g'=0}^{G-1} \Sigma_{s1}^{g'g}(\mathbf{r}) J_{zg}(\mathbf{r})$$

Многогрупповой подход

В предположении, что энергетическая зависимость $J_z(\mathbf{r}, E)$, $J_x(\mathbf{r}, E)$, $J_y(\mathbf{r}, E)$

одинакова, можно записать векторное уравнение (умножив на орты и просуммировав)

$$\nabla \phi_g(\mathbf{r}) + 3 \sum_{t1g}(\mathbf{r}) J_g(\mathbf{r}) = 3 \sum_{g'=0}^{G-1} \sum_{s1}^{g'g}(\mathbf{r}) J_g(\mathbf{r})$$

$g = 0, \dots, G - 1.$

иначе надо определять $\sum_{s1}^{g'g}(\mathbf{r})$

различные для разных проекций тока

Многогрупповой подход

Можно определить многогрупповой коэффициент диффузии, используя второе уравнение Р1-приближения и многогрупповой закон Фика

$$\vec{J}_g(\vec{r}) = -D_g(\vec{r}) \nabla \phi_g(\vec{r})$$

Подставляя в выражение закона Фика градиент потока из 2-го уравнения, получаем:

$$\vec{J}_g(\vec{r}) = -D_g(\vec{r}) \left(-3 \Sigma_{t1g}(\vec{r}) \vec{J}_g(\vec{r}) + 3 \sum_{g'=0}^{G-1} \Sigma_{s1}^{g'g}(\vec{r}) \vec{J}_g(\vec{r}) \right)$$

или

$$1 = D_g(\vec{r}) \left(3 \Sigma_{t1g}(\vec{r}) - 3 \sum_{g'=0}^{G-1} \Sigma_{s1}^{g'g}(\vec{r}) \right)$$

Многогрупповой подход

Тогда

$$D_g(\vec{r}) = \frac{1}{3(\Sigma_{t1g}(\vec{r}) - \sum_{g'=0}^{G-1} \Sigma_{s1}^{g'g}(\vec{r}))}$$

Во всех определенных выше групповых константах под интегралом стоит неизвестное значение $\phi(\vec{r}, E)$.

При этом основную проблему представляет неизвестная энергетическая зависимость потока нейтронов

Наличие большого числа резонансов в сечениях приводит к сложной энергетической зависимости потока нейтронов

Многогрупповой подход

Аналогично для уравнения диффузии нейтронов

$$-(\nabla, D(\vec{r}, E) \nabla \phi(\vec{r}, E)) + \Sigma_t(\vec{r}, E) \phi(\vec{r}, E) = \int \Sigma_{s0}(\vec{r}, E' \rightarrow E) \phi(\vec{r}, E') dE' + \frac{\chi(E)}{k_{\phi\phi}} \int \nu(E') \Sigma_f(\vec{r}, E') \phi(\vec{r}, E') dE'$$

С учетом $\int dE' = \sum_{g'=0}^{G-1} \int_{E_{g'+1}}^{E_{g'}} dE'$

проинтегрируем все члены уравнения по интервалу $[E_{g+1}, E_g]$ и введя, аналогично описанному выше способу,

.

Многогрупповой подход

$$D_g(\mathbf{r}) = \frac{\int_{E_{g+1}}^{E_g} D(\mathbf{r}, E) \phi(\mathbf{r}, E) dE}{\phi_g(\mathbf{r})} \quad \Sigma_{tg}(\mathbf{r}) = \frac{\int_{E_{g+1}}^{E_g} \Sigma_t(\mathbf{r}, E) \phi(\mathbf{r}, E) dE}{\phi_g(\mathbf{r})}$$

$$\Sigma_{s0}^{g'g}(\mathbf{r}) = \left(\int_{E_{g'+1}}^{E_{g'}} \int_{E_{g+1}}^{E_g} \Sigma_{s0}(\mathbf{r}, E' \rightarrow E) \phi(\mathbf{r}, E') dE dE' \right) / \phi_{g'}(\mathbf{r})$$

$$\chi_g = \int_{E_{g+1}}^{E_g} \chi(E) dE \quad \left(\nu \Sigma_f(\mathbf{r}) \right)_{g'} = \left(\int_{E_{g'+1}}^{E_{g'}} \nu(E') \Sigma_f(\mathbf{r}, E') \phi(\mathbf{r}, E') dE' \right) / \phi_{g'}$$

Многогрупповой подход

получим многогрупповое уравнение диффузии нейтронов

$$-\left(\nabla, D_g(\mathbf{r}) \nabla \phi_g(\mathbf{r})\right) + \Sigma_{t_g}(\mathbf{r}) \phi_g(\mathbf{r}) = \sum_{g'=0}^{G-1} \Sigma_{s0}^{g'g}(\mathbf{r}) \phi_{g'}(\mathbf{r}) + \frac{\chi_g}{k_{eff}} \sum_{g'=0}^{G-1} \left(\nu \Sigma_f(\mathbf{r}) \right)_{g'} \phi_{g'}(\mathbf{r})$$

$$g = 0, \dots, G - 1.$$

Учет энергетической зависимости плотности потока нейтронов

Зависимость плотности потока нейтронов от энергии носит сложный характер и заранее неизвестна. Эта зависимость, однако должна быть каким-то образом учтена, т.к. плотность потока нейтронов напрямую входит в формулы для расчета многогрупповых сечений. Рассмотрим подход, позволяющий достаточно корректно учитывать эту зависимость.

Для бесконечной среды плотность потока нейтронов не зависит от пространственной переменной. Будем также предполагать, что существует только упругое рассеяние нейтронов. Рассмотрим среду, состоящую из замедлителя с сечением независящим от энергии (Σ_m) и поглотителя, сечение которого зависит от энергии

($\Sigma_s(E) + \Sigma_a(E)$). Полное сечение ($\Sigma_t(E) = \Sigma_m + \Sigma_s(E) + \Sigma_a(E)$).

Учет энергетической зависимости плотности потока нейтронов

Тогда уравнение переноса нейтронов дает

$$\Sigma_t(E)\phi(E) = \int_E^{E/\alpha_m} \frac{\Sigma_m}{(1-\alpha_m)E'}\phi(E')dE' + \int_E^{E/\alpha_a} \frac{\Sigma_s(E')}{(1-\alpha_a)E'}\phi(E')dE' +$$

$$\frac{\chi(E)}{k_{eff}} \int \bar{v}(E')\Sigma_f(E')\phi(E')dE' \quad \alpha = ((A-1)/(A+1))^2$$

Решая это уравнение численно, можно определить пространственное распределение плотности потока нейтронов в бесконечной среде для заданного состава этой среды. При этом сечения должны быть представлены в виде подробных функций энергии нейтронов, а интегралы заменялись приближенными интегральными суммами.

Учет энергетической зависимости плотности потока нейтронов

Рассмотрим другой подход, позволяющий получить хорошие результаты.

$$\Sigma_t(E)\phi(E) = \int_E^{E/\alpha_m} \frac{\Sigma_m}{(1-\alpha_m)E'} \phi(E') dE' + \int_E^{E/\alpha_a} \frac{\Sigma_s(E')}{(1-\alpha_a)E'} \phi(E') dE'$$

Предположим, что резонансы узкие. Т.к. потеря энергии при столкновении нейтрона с ядром тяжелого поглотителя меньше, чем при столкновении с ядром замедлителя, то “узость” резонанса поглотителя означает, что потеря энергии при столкновении с ядром поглотителя должна быть много больше ширины резонанса

$$\Gamma_i \ll (1-\alpha_a)E_i$$

для доплеровски уширенного резонанса $\sqrt{\Gamma_i^2 + \Delta_i^2} \ll (1-\alpha_a)E_i$

Учет энергетической зависимости плотности потока нейтронов

Тогда основной вклад в интеграл дают энергии, далекие от рассматриваемого резонанса, так что поток несущественно возмущается этим резонансом. Это – приближение узкого резонанса (NR). Будем использовать это приближение.

Тогда полагаем $\sigma_s(E') = \sigma_p$ т.е. вклад резонанса не включается в интеграл рассеяния на поглотителе.

Подставим асимптотическое значение потока (спектр Ферми) $\phi(E') = 1/E'$ в уравнение замедления.

Учет энергетической зависимости плотности потока нейтронов

Первый интеграл

$$\int_E^{E/\alpha_m} \frac{\Sigma_m}{(1-\alpha_m)E'} \frac{1}{E'} dE' = \frac{\Sigma_m}{1-\alpha_m} \left(-\frac{1}{E'}\right) \Big|_E^{E/\alpha_m} = \frac{\Sigma_m}{1-\alpha_m} \left(\frac{1}{E} - \frac{\alpha_m}{E}\right) = \frac{\Sigma_m}{E}$$

Аналогично, второй интеграл = $\frac{\Sigma_p}{E}$

Тогда $\Sigma_t(E)\phi(E) = \frac{\Sigma_m + \Sigma_p}{E}$ или $\phi(E) = \frac{\Sigma_m + \Sigma_p}{\Sigma_t(E)} \frac{1}{E}$

Учет энергетической зависимости плотности потока нейтронов

Эффективное сечение типа x ($x=s, f, c$) для i -го нуклида по интервалу (E_1, E_2) , охватывающему резонанс, есть

$$\langle \Sigma_{xi} \rangle = \frac{\int_{E_1}^{E_2} \Sigma_{xi}(E) \phi(E) dE}{\int_{E_1}^{E_2} \phi(E) dE} = \frac{\int_{E_1}^{E_2} \frac{\Sigma_{xi}(E)}{\Sigma_t(E)} \frac{dE}{E}}{\int_{E_1}^{E_2} \frac{1}{\Sigma_t(E)} \frac{dE}{E}}$$

(множитель $\Sigma_m + \Sigma_p$ сверху и снизу сократился).

Учет энергетической зависимости плотности потока нейтронов

Тогда

$$\langle \rho_i \sigma_{xi} \rangle = \frac{\int_{E_1}^{E_2} \frac{\rho_i \sigma_{xi}(E) dE}{\sum_{j=1}^N \rho_j \sigma_{tj}}}{\int_{E_1}^{E_2} \frac{1}{\sum_{j=1}^N \rho_j \Sigma_{tj}} dE} E$$

, где N – число нуклидов в смеси.

Учет энергетической зависимости плотности потока нейтронов

И

$$\langle \sigma_{xi} \rangle = \frac{\int_{E_1}^{E_2} \frac{\sigma_{xi}(E)}{\sigma_{ti}(E) + \frac{1}{\rho_i} \sum_{j \neq i}^N \rho_j \sigma_{tj}} dE}{\int_{E_1}^{E_2} \frac{1}{\sigma_{ti}(E) + \frac{1}{\rho_i} \sum_{j \neq i}^N \rho_j \Sigma_{tj}} dE} = \frac{\int_{E_1}^{E_2} \frac{\sigma_{xi}(E)}{\sigma_{ti}(E) + \sigma_{0i}} dE}{\int_{E_1}^{E_2} \frac{1}{\sigma_{ti}(E) + \sigma_{0i}} dE}$$

где $\sigma_{0i} = \frac{1}{\rho_i} \sum_{j \neq i}^N \rho_j \sigma_{tj}$

Здесь мы предполагали, что для всех нуклидов, кроме i -го, который считаем поглотителем, сечения постоянны.

Учет энергетической зависимости плотности потока нейтронов

Величину $\langle \sigma_{xi} \rangle$ обычно записывают, как $\langle \sigma_{xi}(\sigma_{0i}) \rangle$

или, считая интервал усреднения группой номер g , $\sigma_{xig}(\sigma_{0ig})$

Величину σ_{0ig} называют сечением разбавления i -го нуклида остальными нуклидами в смеси для группы g , а $\langle \sigma_{xi}(\sigma_{0i}) \rangle$ или $\sigma_{xig}(\sigma_{0ig})$ называют блокированными сечениями. Резонансы поглотителя блокируются за счет наличия в среде других нуклидов.

Учет энергетической зависимости плотности потока нейтронов

При $\sigma_{0ig} \rightarrow \infty$ σ_{0ig} становится $\gg \sigma_{ti}(E)$ и знаменатель $\approx \sigma_{0ig}$ - постоянная величина, тогда имеем

$$\langle \sigma_{xi} \rangle = \frac{\int_{E_1}^{E_2} \frac{\sigma_{xi}(E) dE}{\sigma_{0i} E}}{\int_{E_1}^{E_2} \frac{1}{\sigma_{0i} E} dE} \approx \int_{E_1}^{E_2} \sigma_{xi}(E) dE$$

т.е. резонансы не блокируются.

Учет энергетической зависимости плотности потока нейтронов

Если в $\sigma_{xi}(E)$ нет резонансов, то получается такой же результат, т.к. $\sigma_{ti}(E) + \sigma_{0i} \approx \text{const}$.

Все остается справедливым, если в интервал интегрирования содержит несколько резонансов.

Вместо асимптотического потока $1/E$ часто рассматривается более общая функция $C(E)$ (т.е. в формулах вместо dE/E появится $C(E)dE$).

Учет энергетической зависимости плотности потока нейтронов



Если зависимостью от энергии нельзя пренебречь для нескольких нуклидов в смеси (например, поглотитель – обогащенный уран), то хорошие результаты для определения сечения разбавления получаются с помощью итерационной процедуры (номер итерации записываем сверху):

Учет энергетической зависимости плотности потока нейтронов

$$\sigma_{0i}^{(1)} = \frac{1}{\rho_i} \sum_{j \neq i}^N \rho_j \langle \sigma_{t,j} \rangle \quad (\text{некоторые } \sigma_{tj} \text{ могут зависеть от } E)$$

$$\sigma_{0i}^{(k)} = \frac{\langle \Sigma_{t0}^{(k-1)} \rangle}{\rho_i} \langle \sigma_{t,0,i}^{(k-1)} \rangle$$

$$\langle \Sigma_{t0}^{(k-1)} \rangle = \sum_{j=1}^N \rho_j \langle \sigma_{t,0,j}^{(k-1)} \rangle$$

$$\langle \sigma_{t,0,j}^{(k-1)} \rangle = \sum_x \langle \sigma_{xj}(\sigma_{0,j}^{(k-1)}) \rangle$$

Учет энергетической зависимости плотности потока нейтронов



Т.е. мы несколько раз пересчитываем сечение разбавления, учитывая измененные блокированные сечения на каждой итерации, соответствующие поправленному на данной итерации сечению разбавления.

Учет энергетической зависимости плотности потока нейтронов

Можно ввести т.н. факторы резонансной самоэкранировки:

$$f_c(\sigma_0) = \frac{\langle \sigma_c / (\sigma_t + \sigma_0) \rangle}{\langle \sigma_c \rangle \langle 1 / (\sigma_t + \sigma_0) \rangle} \Rightarrow \langle \sigma_c(\sigma_0) \rangle = \langle \sigma_c \rangle f_c(\sigma_0)$$

$$f_f(\sigma_0) = \frac{\langle \sigma_f / (\sigma_t + \sigma_0) \rangle}{\langle \sigma_f \rangle \langle 1 / (\sigma_t + \sigma_0) \rangle} \Rightarrow \langle \sigma_f(\sigma_0) \rangle = \langle \sigma_f \rangle f_f(\sigma_0)$$

$$f_s(\sigma_0) = \frac{\langle \sigma_s / (\sigma_t + \sigma_0) \rangle}{\langle \sigma_s \rangle \langle 1 / (\sigma_t + \sigma_0) \rangle} \Rightarrow \langle \sigma_s(\sigma_0) \rangle = \langle \sigma_s \rangle f_s(\sigma_0)$$

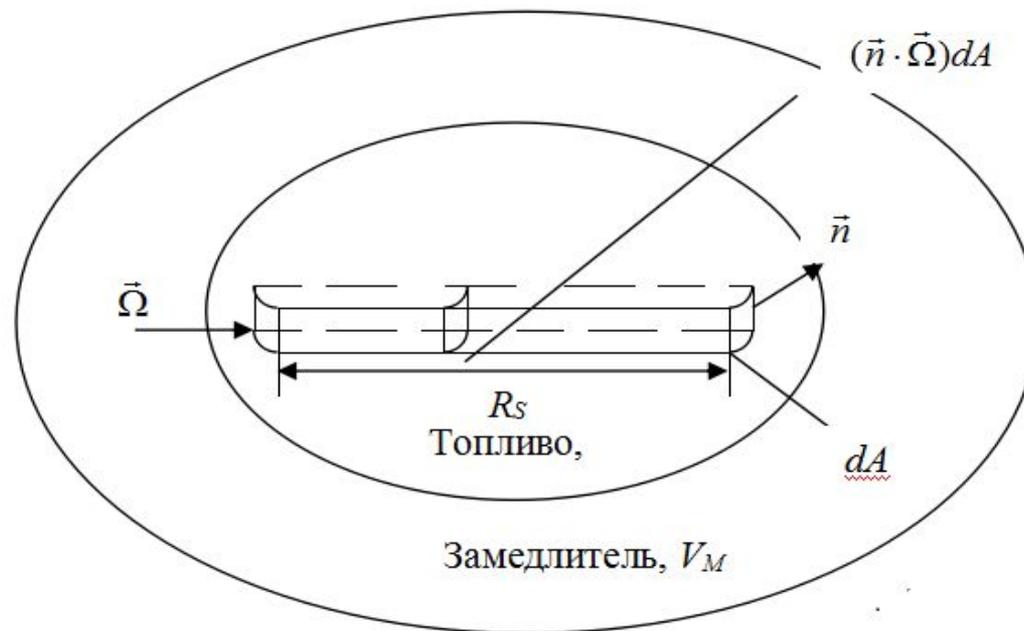
где

$\langle \sigma_c \rangle$, $\langle \sigma_f \rangle$, $\langle \sigma_s \rangle$ — неблокированные средние сечения.

Основы теории гетерогенной блокировки сечений

Для более ясного понимания эффектов гетерогенной блокировки нейтронных сечений рассмотрим вначале простую модель системы, состоящей из топлива объемом V_F и замедлителя больших размеров объемом V_M

РИСУНОК 1



Основы теории гетерогенной блокировки сечений



Предположим, что нейтроны рождаются равномерно и изотропно в выпуклой области объемом V_F , заполненной веществом, имеющим постоянное полное сечение Σ_t . Если рассмотреть нейтрон, рожденный в произвольной точке \vec{r} и имеющий направление движения $\vec{\Omega}$, то, положив $R(\vec{r}, \vec{\Omega})$ – расстояние от этой точки до границы области в направлении $\vec{\Omega}$, можно получить, что вероятность нейтрону покинуть область V_F не испытав ни одного столкновения спадает по экспоненте т.е. записывается в виде $\exp(-\Sigma_t R(r, \vec{\Omega}))$. Если источник испускает нейтроны равномерно и изотропно, то вероятность рождения нейтрона в элементе объема dV_F вблизи точки r с направлением $d\vec{\Omega}$ вблизи $\vec{\Omega}$, равна $(d\vec{\Omega}/4\pi)(dV_F/V_F)$. Вероятность избежать столкновения P для нейтрона, рожденного в объеме V_F , находится интегрированием произведения этих вероятностей по объему и по углам:

$$P = \frac{1}{4\pi V_F} \int \int \exp(-\Sigma_t R(\vec{r}, \vec{\Omega})) d\vec{\Omega} dV_F.$$

|

Основы теории гетерогенной блокировки сечений



Для оценки этого интеграла объем V_F разбивается на части так, что каждая из них имеет площадь сечения $(\vec{n} \cdot \vec{\Omega})dA$ и ось, параллельную выбранному направлению $\vec{\Omega}$. Обозначим длину каждого такого элементарного объема R_s . Тогда объем элемента объема длиной dR есть $dV_F = (\vec{n} \cdot \vec{\Omega})dA dR$ и, т.к. $dV_F > 0$, то $(\vec{n} \cdot \vec{\Omega}) > 0$. Выражение выше можно записать в виде:

$$P = \frac{1}{4\pi V} \int_0^{R_s} \iint_{(\vec{n} \cdot \vec{\Omega}) > 0} \exp(-\Sigma_t R(r, \vec{\Omega})) (\vec{n} \cdot \vec{\Omega}) d\vec{\Omega} dA dR$$

и проинтегрировать по R (R изменяется от 0 до R_s):

$$P = \frac{1}{4\pi \Sigma_t V_F} \iint_{(\vec{n} \cdot \vec{\Omega}) > 0} (1 - \exp(-\Sigma_t R_s)) (\vec{n} \cdot \vec{\Omega}) d\vec{\Omega} dA.$$

Основы теории гетерогенной блокировки сечений

Если размеры тела велики по сравнению со средней длиной свободного пробега нейтрона, равной $1/\Sigma_t$, то экспонента под знаком интеграла может быть положена равной нулю. Учтем, что

$$\iint_{(\vec{n} \cdot \vec{\Omega}) > 0} (\vec{n} \cdot \vec{\Omega}) d\vec{\Omega} dA = \pi A.$$

Тогда интеграл можно записать в виде:

$$P = \frac{1}{4\pi\Sigma_t V_F} \pi A = \frac{A}{4\Sigma_t V_F}.$$

Так как равенство применимо для больших тел, в то время, как для малых тел вероятность испытать взаимодействие в замедлителе близка к единице, то можно использовать так называемое рациональное приближение Вигнера:

$$P \approx \frac{1}{1 + 4\Sigma_t V_F / A}.$$

Основы теории гетерогенной блокировки сечений

Используем известное определение средней хорды для нашего поглотителя:

$$\bar{R} = \frac{\iint_{(\vec{n} \cdot \vec{\Omega}) > 0} R_s (\vec{n} \cdot \vec{\Omega}) d\vec{\Omega} dA}{\iint_{(\vec{n} \cdot \vec{\Omega}) > 0} (\vec{n} \cdot \vec{\Omega}) d\vec{\Omega} dA}.$$

Объем, выделенный нами в поглотителе на Рис.1, есть $R_s / (\vec{n} \cdot \vec{\Omega}) / dA$. Полный объем получается, как

$$V_F = \int R / (\vec{n} \cdot \vec{\Omega}) / dA.$$

Тогда выражение сверху есть $4\pi V_F$.

Кроме того из математики можно получить (см. выше), что

$$\iint (\vec{n} \cdot \vec{\Omega}) / d\vec{\Omega} dA = \pi A.$$

Тогда выражение (26) принимает вид:

$$\bar{R} = 4V_F / A.$$

Тогда рациональное приближение Вигнера принимает вид:

$$P \approx \frac{1}{1 + \Sigma_t \bar{R}}.$$

Основы теории гетерогенной блокировки сечений

Запишем теперь уравнения замедления для простых гомогенной и двухзонной гетерогенной систем.

Для гомогенной системы (обозначим ее F), в которой замедлитель и поглотитель гомогенно размешаны в бесконечном объеме, и единственными типами взаимодействий являются рассеяние нейтронов ядрами замедлителя с постоянным макроскопическим сечением σ_{mF} , рассеяние нейтронов на ядрах поглотителя с сечением $\sigma_{SF}(E)$ и поглощение нейтронов ядрами поглотителя с сечением $\sigma_{aF}(E)$ уравнение переноса нейтронов может быть записано в виде (уже записывалось нами ранее)

Основы теории гетерогенной блокировки сечений

$$\Sigma_{tF}(E)\phi(E) = \int_E^{E/\alpha_m} \frac{\Sigma_{mF}}{(1-\alpha_m)E'}\phi(E')dE' + \int_E^{E/\alpha_a} \frac{\Sigma_{sF}(E')}{(1-\alpha_a)E'}\phi(E')dE'$$

Где α_m и α_a определяется как $((A-1)/(A+1))^2$ для замедлителя и поглотителя соответственно, а

$$\Sigma_{tF}(E) = \Sigma_{mF} + \Sigma_{sF}(E) + \Sigma_{aF}(E).$$

Для случая двухзонной модели примем объемы зон поглотителя и замедлителя (рис. 1.) V_F и V_M , соответственно. Вероятности нейтрону избежать столкновения в зонах F и M : P_F и P_M

Макроскопические сечения рассеяния замедлителя Σ_{mF} в области F и Σ_{mM} в области M примем постоянными, в то время, как сечения поглощения и рассеяния в поглотителе $\Sigma_{aF}(E)$ и $\Sigma_{sF}(E)$ примем зависящими от энергии.

Основы теории гетерогенной блокировки сечений

Тогда уравнение переноса для области F можно записать в виде:

$$V_F \Sigma_{tF}(E) \phi_F(E) = (1 - P_F) V_F \left\{ \int_E^{E/\alpha_{mF}} \frac{\Sigma_{mF}}{(1 - \alpha_{mF}) E'} \phi_F(E') dE' + \right. \\ \left. + \int_E^{E/\alpha_a} \frac{\Sigma_{sF}(E')}{(1 - \alpha_a) E'} \phi_F(E') dE' \right\} + P_M V_M \int_E^{E/\alpha_{mM}} \frac{\Sigma_{mM}}{(1 - \alpha_{mM}) E'} \phi_M(E') dE',$$

Это уравнение баланса, аналогичное однозонной задаче.

Член слева: число нейтронов в зоне F ;

1-й член справа: число нейтронов, не уходящих из зоны F при рассеянии в ней (за счет рассеяния на замедлителе в зоне F и на топливе в зоне F);

2-й член справа: число нейтронов, попадающих в зону F , за счет рассеяния в замедлителе M .

При $V_M = 0$ и $P_F = 0$, вероятность вылететь из зоны топлива = 0, получаем однозонное уравнение.

Основы теории гетерогенной блокировки сечений

Найдем связь между однозонным и двухзонным уравнениями замедления.

Во-первых выпишем т.н. соотношение взаимности, связывающее сечения и вероятности вылета при рассеянии для обеих зон:

$$\Sigma_{mM} V_M P_M = \Sigma_{tF} V_F P_F$$

где

$$\Sigma_{tF}(E) = \Sigma_{aF}(E) + \Sigma_{sF}(E) + \Sigma_{mF}.$$

используем рациональное приближение Вигнера

$$P_F(E) \approx \frac{1}{1 + \Sigma_{tF}(E)\bar{R}} = \frac{\Sigma_e}{\Sigma_e + \Sigma_{tF}(E)},$$

где $\Sigma_e = 1/\bar{R}_F$ и имеет размерность макроскопического сечения

Основы теории гетерогенной блокировки сечений



Примем приближение узкого резонанса, т.е.

$$\phi(E') = \phi_M(E') = \phi_F(E') = 1/E.$$

Тогда уравнения для одной и двух зон примут вид

$$\Sigma_{tF}(E)\phi(E) = \int_E^{E/\alpha_a} \frac{\Sigma_{sF}(E')}{(1-\alpha_a)E'} \phi(E') dE' + \frac{\Sigma_{mF}}{E},$$

$$V_F \Sigma_{tF}(E)\phi_F(E) = (1-P_F) \int_E^{E/\alpha_a} \frac{\Sigma_{sF}(E')}{(1-\alpha_a)E'} \phi_F(E') dE' + (\Sigma_{mF} + P_F(\Sigma_{aF} + \Sigma_{sF})) \frac{1}{E}.$$

Вводя рациональное приближение для P_F и умножая его на

$(\Sigma_{tF} + \Sigma_e) / \Sigma_{tF}$, можно найти, что

$$(\Sigma_{tF} + \Sigma_e)\phi_F(E) = \int_E^{E/\alpha_a} \frac{\Sigma_{sF}(E')}{(1-\alpha_a)E'} \phi_F(E') dE' + (\Sigma_{mF} + \Sigma_e) \frac{1}{E}.$$

Основы теории гетерогенной блокировки сечений

Сравнивая оба уравнения, можно увидеть, что для гетерогенного случая к сечениям в области топлива всегда добавляется величина Σ_e , имеющая размерность макроскопического сечения и представляющая собой вклад гетерогенных эффектов.

ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС NJOY



Система переработки ядерных данных NJOY представляет собой набор относительно независимых между собой программных модулей для получения поточечных и многогрупповых ядерных данных и связанных с ними величин в стандартном формате ENDF. При этом возможно получение полного набора данных для нейтронов и гамма-квантов, достаточного для решения реакторных задач и задач защиты от излучений как детерминистическими методами, так и методом Монте-Карло.

Система NJOY работает с ядерными данными из библиотеки оцененных ядерных данных, которая записана в формате ENDF (Evaluated Nuclear Data Files Format)

ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС NJOY



Для каждого модуля имеется определенное количество входных и выходных файлов, а также файл, содержащий инструкции по работе модуля и управляющий его работой. Обычно выходные файлы одного модуля (или модулей) являются входными для следующего и т.д. Входные и выходные файлы имеют номера, например, 20, 31, -42 и т.д. и называются соответственно TAPE20, TAPE31, TAPE42. При этом, если перед номером файла стоит знак минус, то это означает, что файл записан в бинарном виде, в противном случае файл имеет текстовый вид. Для перевода файлов из текстового вида в бинарный и наоборот служит модуль, который называется MODER. В дальнейшем входные и выходные файлы будем называть лентами или TAPE.

ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС NJOY



Ниже кратко перечислены модули, необходимые для получения библиотек многогрупповых нейтронных данных, позволяющих проводить расчеты по таким широко известным Sn-программам как ANISN (одномерная), двумерные DORT, TWODUNT, трехмерная TORT, а также получать непрерывно зависящие от энергии нейтронные сечения и индикатрисы рассеяния для программ метода Монте-Карло (MCNP, SERPENT), и кратко описаны их функции:

ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС NJOY

MODER преобразует ленты в формате ENDF из текстового представления в бинарный и обратно;

RECONR конструирует поточечные (непрерывно зависящие от энергии) сечения в т.н. формате PENDF (pointwise ENDF), используя резонансные параметры и схемы интерполяции;

BROADR конструирует непрерывно зависящие от энергии сечения для заданных температур с учетом температурного уширения резонансов;

UNRESR рассчитывает заблокированные сечения в области перекрывающихся резонансов (область неразрешенных резонансов) для заданного набора разбавлений;

ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС NJOY



THERMR конструирует сечения и индикатрисы рассеяния в области термализации для отдельных атомов и атомов в молекулах и кристаллах;

GROUPE генерирует блокированные многогрупповые сечения и матрицы переходов с использованием поточечного представления и индикатрис рассеяния в формате GENDF (groupwise ENDF);

MATXS на основе файлов GENDF создает библиотеку многогрупповых констант в формате MATXS, причем после обработки этой библиотеки модулем TRANSX можно получить блокированные многогрупповые константы для конкретного расчетного варианта, используемого в большинстве широко известных транспортных кодов;

ACER подготавливает библиотеку в ACE-формате для программы метода Монте-Карло MCNP.



Модуль **MODER**

Модуль **MODER** используется для перевода лент в форматах ENDF, PENDF и GENDF из текстового вида в бинарный и наоборот. Еще одна функция модуля **MODER**, связанная с формированием библиотек данных будет описана далее (см. описание модуля **MATXS**).

ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС NJOY



СПЕЦИФИКАЦИИ ВВОДА В СВОБОДНОМ ФОРМАТЕ

Карта 1

0/

Карта 2

Номер обрабатываемой библиотеки (обычно 5 или 6)/

Карта 3

Имя модуля в * */

Карта 4

nin номер входной ленты в формате ENDF

nout номер выходной ленты в формате ENDF файла/

Если nin или nout > 0 – файл в текстовом виде

Если nin или nout < 0 – файл в бинарном виде

Может быть несколько входных и выходных файлов

Каждая пара на отдельной карте

nin=0/ прекращает выполнение модуля

Карта 5

stop в * */

ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС NJOY

Пример

0/

6/

moder/

20 –21/

0/

stop/

Здесь входной лентой является TARE20 в текстовом виде, а выходной- TARE21 в бинарном виде.



Модуль **RECONR**

Модуль **RECONR** используется для получения поточечных (непрерывно зависящих от энергии) сечений по резонансным параметрам, задаваемым в файле с MF=2 и секции с MT=151. Резонансные параметры задаются для сечения упругого рассеяния, деления и радиационного захвата. Кроме того, в секции с MT=1 конструируется полное сечение как сумма всех парциальных сечений.

ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС NJOY



СПЕЦИФИКАЦИИ ВВОДА В СВОБОДНОМ ФОРМАТЕ

Карта 1
0/
Карта 2
Номер обрабатываемой библиотеки (обычно 5 или 6)/
Карта 3
Имя модуля в * */
Карта 4
nendf номер входной ленты в формате ENDF
npend номер выходной ленты в формате PENDF файла/
Карта 5
Метка из 66 символов, помечающих новую PENDF-ленту и ограниченных * */
Карта 6
mat номер обрабатываемого изотопа
ncards число строк в описании для MT=451
ncards=0 – нет описания
ngrid число энергетических точек, добавляемых пользователем /
Возможно ngrid=0
Карта 7
егг точность восстановления сечений /
etempr температура в градусах Кельвина. По умолчанию = 0/
Карта 8
ncards число строк для описания в MT=451. Каждая карта ограничена * * и заканчивается /
Карта 9
enode число энергетических точек, задаваемых пользователем /
Карты 6, 7, 8, 9 должны вводиться для каждого желаемого изотопа
mat=0/ прерывает выполнение RECONR.
Карта 10
stop в * */

ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС NJOY

Пример

0/

6/

reconr/

-21 -22/

Am-241 and Al-27 from ENDF/B-6/

9543 1 1/

.001/

test/

0.0253/

1325 0 0 /

.001

0/

stop/

Входная лента TARE21 - бинарная, выходная TARE22 - бинарная



Модуль **BROADR**

Модуль **BROADR** генерирует сечения в формате PENDF для заданного набора температур, учитывающие температурное движение ядер (так называемые доплеровски уширенные сечения). Входные ленты должны быть получены либо после модуля **RECONR**, либо после еще одного модуля **BROADR**.

ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС NJOY



СПЕЦИФИКАЦИИ ВВОДА В СВОБОДНОМ ФОРМАТЕ

Карта 1

0/

Карта 2

Номер обрабатываемой библиотеки (обычно 5 или 6)/

Карта 3

Имя модуля в * */

Карта 4

nendf номер входной ленты в формате ENDF

npend номер выходной ленты в формате PENDF файла /

Карта 6

mat1 номер обрабатываемого изотопа

ntemp2 число конечных температур (maximum=10)

istart рестарт (0 – нет, 1 – да, обычно – 0)

istrap bootstrap (0 – нет, 1 – нет, обычно – 0)

temp1 начальная температура в nin (в градусах K)/

Карта 7

errthn точность /

Карта 8

temp2 конечные температура (в градусах K) (ntemp2 штук)/

Карта 9

mat1 номер следующего изотопа, обрабатываемого с этими параметрами (mat=0 прерывает работу)/

Карта 10

stop в * */

ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС NJOY

Пример

0/

6/

broadr/

-22 -23/

9543 0 0 2 0./

.001/

300. 600./

0/

stop/

Входная лента TARE22 - бинарная, выходная TARE23 - бинарная

ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС NJOY

Модуль UNRESR

Модуль **UNRESR** позволяет рассчитать заблокированные сечения в области неразрешенных резонансов для набора разбавлений, задаваемых пользователем.

В области перекрывающихся резонансов невозможно получить точные значения сечений для конкретной энергии, т. к. в этой области существуют лишь средние по некоторому энергетическому интервалу резонансные параметры. Известны функции распределения, которым подчиняются ширины и расстояния между резонансами. В модуле реализована специальная схема получения средних по определенным энергетическим интервалам нейтронных сечений для набора сечений разбавления, что позволяет в дальнейшем получать с помощью схем интерполяции конкретные заблокированные микро- и макросечения для различных расчетных вариантов.

ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС NJOY



СПЕЦИФИКАЦИИ ВВОДА В СВОБОДНОМ ФОРМАТЕ

Карта 1

0/

Карта 2

Номер обрабатываемой библиотеки (обычно 5 или 6)/

Карта 3

Имя модуля в * */

Карта 4

nendf номер входной ленты в формате ENDF

npend номер выходной ленты в формате PENDF /

Карта 5

matd номер обрабатываемого изотопа

ntemp число температур (10 max)

nsigz число сечений разбавления (10 max)

iprint признак печати (0=min, 1=max)/

Карта 6

temp температуры в градусах Кельвина /

Карта 7

sigz сечения разбавления по убыванию

(начиная обязательно с 1.e+10) /

Карты 5, 6, 7 должны вводиться для каждого желаемого материала

matd=0/ прерывает выполнение модуля

Карта 8

stop в * */

ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС NJOY



Пример:

0/

6/

unresr/

-21 -23 -24/

9543 2 5 1/

300. 600./

1.e+10 1000. 500. 10. 1./

0/

stop/

Входные ленты TARE21 и TARE23 - бинарные,
выходная TARE24 - бинарная

Модуль THERMR

Модуль **THERMR** генерирует поточечные сечения рассеяния и индикатриссы рассеяния нейтронов в области термализации и добавляет их к существующей ленте в формате PENDF (после **BROADR** или **UNRESR**).

Для области энергий, лежащих ниже нескольких электронвольт, законы, которым подчиняются дифференциальные сечения рассеяния (упругого и неупругого), имеют вид, принципиально отличающийся от рассеяния для более высоких энергетических областей. Это принципиальное отличие связано с наличием возможности для нейтронов не только терять, но и приобретать энергию в результате взаимодействия.

ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС NJOY



Типы рассеяния в тепловой области для некоторых материалов

Материал	MAT	TAPE	MT для output tape	elastic, inelastic	secondary atom
Be metal	26	special for Be	231, 232	inel as S(α , β), coh ela	none
BeO	27	special for Be in BeO	233, 234	inel as S(α , β), coh ela	usual for O
C (graphite)	31	special for C	229, 230	inel as S(α , β), coh ela	none
CH ₂ (polyethylene)	34	special for H	223	inel as S(α , β)	free C
D (D ₂ O)	11	special for D in D ₂ O	228	inel as S(α , β)	usual for O
H (H ₂ O)	1	special for H in H ₂ O	222	inel as S(α , β)	usual for O
Zr (ZrH)	58	special for Zr in ZrH	235, 236	inel as S(α , β) coh ela	H
H (ZrH)	7	special for H in ZrH	225, 226	inel as S(α , β) coh ela	Zr

Таким образом, для ZrH мы должны применять THERMR специальным образом как для H, так и для Zr

ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС NJOY



СПЕЦИФИКАЦИИ ВВОДА В СВОБОДНОМ ФОРМАТЕ

Карта 1

0/

Карта 2

Номер обрабатываемой библиотеки (обычно 5 или 6)/

Карта 3

Имя модуля в * */

Карта 4

nendf номер ленты в формате ENDF с дополнительной информацией для случая молекулы или кристалла (см. табл.2) или 0 для одноатомного газа

nin номер входной ленты в формате PENDF

pout номер выходной ленты в формате PENDF/

Карта 5

Matde MAT для дополнительной информации на ENDF-ленте или 0 для одноатомного газа

ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС NJOY



СПЕЦИФИКАЦИИ ВВОДА В СВОБОДНОМ ФОРМАТЕ	
Matdp	номер обрабатываемого материала на входной PENDF-ленте
nbin	число углов, в которых рассчитывается угловая зависимость индикатрисы
Ntemp	число температур
iiinc	различные опции для расчета неупругого рассеяния
	0 - не учитывается, 1 - расчет по модели одноатомного газа
	2, 3 - зарезервировано
	4 - read s(a,b) and compute matrix
icoh	различные опции для расчета упругого рассеяния
	0 - не учитывается, 1 - для графита, 2 - для бериллия, 3 - для оксида бериллия
	11 - для полиэтилена, 12 - для водорода в zrh, 13 - для zr в zrh
Natom	число основных атомов, например, 2 для водорода в h2o
mtref	МТ для создаваемых в результате работы THERMR
	Данных для реакции неупругого рассеяния (возможно 201-250)
Iprint	признак печати (0=minimum, 1=maximum, 2=max.Normal + промежуточные рез-ты)/
	Карта 6
Tempg	необходимые температуры/
	Карта 7
Tol	точность
Emax	максимальная энергия для учета термализации
stop	в **/

ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС NJOY



Примеры для случая термализации на одноатомном газе (А) и для термализации на водороде в воде (Б).

А).

0/

6/

thermr/

0 -24 -25/

0 9237 8 1 1 0 1 221 1/

293./

0.001 4.65/

stop/

Б).

0/

6/

thermr/

20 -24 -25/

1 125 16 1 4 0 2 222 1/

293./

0.001 4.65/

stop/

ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС NJOY

Пример расчета эффектов термализации для графита. В секцию MT= 229 заносятся термализационные данные для неупругого некогерентного рассеяния, а в секцию MT= 230 - для когерентного упругого рассеяния. Оба типа сечений присутствуют в этом случае.

```
0/  
6/  
*thermr*/  
26 24 25/  
1065 1306 8 1 4 1 1 229 0/  
300./  
.01 1.2/  
*stop*/
```



Модуль **GROUPR**

Модуль предназначен для расчета групповых сечений и матриц межгрупповых переходов. В модуле предусмотрены важные возможности расчета многогрупповых сечений для произвольной групповой структуры и свертка как со стандартным спектром, так и со спектром, задаваемым пользователем.

Многогрупповые константы обычно используются компьютерными программами для расчета распределений нейтронов и/или гамма-квантов по пространству и энергии, а также получения их функционалов, таких как коэффициент размножения, скорости реакций и т.д.

ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС NJOY



СПЕЦИФИКАЦИИ ВВОДА В СВОБОДНОМ ФОРМАТЕ

Карта 1

0/

Карта 2

Номер обрабатываемой библиотеки (обычно 5 или 6)/

Карта 3

Имя модуля в * */

Карта 4

nendf номер входной ленты в формате ENDF

npend номер выходной ленты в формате PENDF

0

Ngout номер выходной ленты в формате GENDF/

Карта 5

matb номер обрабатываемого изотопа

ign признак нейтронной групповой структуры (см. расшифровку ниже)

igg признак групповой структуры для гамма (0 для случая только нейтронов)

iwt признак весовой функции (см. ниже)

lord порядок полиномов Лежандра (используемое Pn-приближение)

Ntemp число температур

nsigz число сечений разбавления

iprint признак печати (0/1=минимум/максимум)/

ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС NJOY



СПЕЦИФИКАЦИИ ВВОДА В СВОБОДНОМ ФОРМАТЕ

Карта 6

Текст (до 80 символов, ограниченных в * *и ограниченных /)

Карта 7

temp температуры в градусах Кельвина/

Карта 8

sigz сечения разбавления по убыванию (включая бесконечное = $1 \cdot 10^{**10}$)/

Если ign=1, то задаются карты 9a и 9b

Карта 9a

ngn число нейтронных групп/

Карта 9b

egn ngn+1 границы нейтронных групп в эВ/

Если igg=1, то задаются карты 10a и 10b

Карта 10a

ngg число групп для гамма-квантов/

Карта 10b

egg ngg+1 границы групп для гамма-квантов в эВ/

ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС NJOY



СПЕЦИФИКАЦИИ ВВОДА В СВОБОДНОМ ФОРМАТЕ

В зависимости от значения iwt задаются карты 11a, 11b, 11c, 11d

Карта 11a параметры функции "flux calculator" для $iwt=0$ (здесь не рассматр.)

Карта 11b задается весовая функция $C(E)$ (только для $iwt=1$)

(см. инструкции ниже)/

Карта 11c Параметры для аналитического расчета потока (только для $iwt=4$)

eb граница теплового спектра в эВ

tb значение температуры для теплового спектра в эВ

ec граница спектра деления в эВ

tc температура для спектра деления в эВ/

Карта 11d Задание резонансного потока (только для $iwt=0$)

$pinwt$ номер ленты для ввода резонансного потока, получаемого с помощью функции "flux calculator" (здесь не рассматривается)

Карта 12

mfd номер обрабатываемого файла

mtd номер обрабатываемой секции

Mtname текстовое описание обрабатываемой секции в * */

Карта 12 повторяется для всех желаемых реакций

mfd=0/ прерывает обработку для заданной температуры/материала

Карта 13

Matb следующий Mat Matb=0 прерывает выполнение groupr/

ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС NJOY



ЗНАЧЕНИЯ ПАРАМЕТРА IGN

ЗНАЧЕНИЯ ПАРАМЕТРА IGN	
1	произвольная структура (вводится, см. ниже)
2	csewg 239 групп
3	lanl 30 групп
4	anl 27 групп
5	rrd 50 групп
6	gam-i 68 групп
7	gam-ii 100 групп
8	laser-thermos 35 групп
9	epri-cpm 69 групп
10	lanl 187 групп
11	lanl 70 групп
12	sand-ii 620 групп
13	lanl 80 групп
14	eurlib 100 групп
15	sand-ii-a 640 групп
16	vitamin-e 174 группы
17	vitamin-j 175 групп

ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС NJOY



ЗНАЧЕНИЯ ПАРАМЕТРА IWT

1	гладкая весовая функция задается во входном файле в специальном формате
2	постоянная
3	1/e
4	1/e + спектр деления + максвелловский спектр в тепловой области
5	epri-cell lwr
6	(тепловой) -- (1/e) -- (спектр деления + fusion) *
7	быстрый реактор
8	тепловой--1/e--спектр быстрого реактора--спектр деления + fusion
9	специальная весовая функция (claw)
10	то же, но с температурной зависимостью в тепловой области
11	весовая функция для системы констант vitamin-e

ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС NJOY



ЗНАЧЕНИЯ ПАРАМЕТРА MFD (ТОЛЬКО ДЛЯ НЕЙТРОННЫХ РАСЧЕТОВ)

3	расчет сечений
5	расчет спектра деления (χ) в предположении, что он не зависит от начальной энергии
6	расчет матрицы рассеяния для нейтронов, если заданы файлы mf4/5
8	расчет матрицы рассеяния для нейтронов, если задан файл mf6 вместо mf4/5

ЗНАЧЕНИЯ ПАРАМЕТРА MTD

-n обрабатываются все реакции mt, начиная с заданного в предыдущей строке до значения n включительно.

221-250 зарезервированы для термализации (см. модуль THERMR)

АВТОМАТИЧЕСКАЯ ОБРАБОТКА

3/ модуль обрабатывает все реакции в файле 3 на входной pendf ленте

6/ модуль обрабатывает матрицы для всех реакций из словаря на endf-ленте

ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС NJOY

В этих инструкциях карта 4 задает входные и выходные ленты, которые требуются для модуля GROUPT. Модуль требует задания как исходной ленты в ENDF-формате, так и ленты в формате PENDF, обработанной последовательно всеми описанными выше модулями. Для материалов, которые не содержат резонансных параметров, можно просто скопировать исходную ENDF-ленту на место PENDF-ленты и затем обработать ее модулями BROADR и THERMR. В карте 5 параметр ign позволяет задать либо собственную групповую структуру, либо выбрать какую-либо стандартную. В соответствии с типом установки, для которой готовятся константы, можно также с помощью параметра iwt выбрать тип гладкой функции $S(E)$. Параметр lord позволяет получать константы для различных P_n -приближений. Число соответствующих наборов констант есть lord+1. Если число сечений разбавления больше единицы, то задаются компоненты полного сечения для $l=0$ и $l=1$. Если в карте 5 iwt=4, то в карте 11c необходимо задать границы теплового и быстрого участков спектра и соответствующие им температуры, используемые в распределениях. Может быть рекомендован следующий вид карты 11c:

```
.10 .025 820.3E3 1.4E6/.
```

ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС NJOY



В случае $iwt=1$ в карте 11b специальным образом задается зависимость $C(E)$:

$$\begin{matrix} 0. & 0. & 0 & 0 & nint & n_1 & int_1 & n_2 & int_2 & n_{nint} & int_{nint} \\ E_1 & C(E_1) & E_2 & C(E_2) & & & & & & E_{nint} & C(E_{nint})/ \end{matrix}$$

Здесь $nint$ число различных схем интерполяции для расчета $C(E)$ для произвольного E , n_i - последняя точка для заданного типа интерполяции, n_{nint} - полное число энергий int_i - номер соответствующего закона интерполяции.

ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС NJOY

Карта 12 задает номера реакций, для которых пользователю необходимо рассчитать групповые константы и матрицы. Эта карта повторяется для всех заказанных температур и материалов, например,

31 *total */.

Описание типа реакции в * * может быть пустым

3 1 * */.

Запись

351 * */

3-66 * */.

означает, что обрабатываются все реакции, начиная с 51 и заканчивая 66.

Отметим, что в этом случае пользователь сам задает необходимые ему типы реакций.

ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС NJOY

Карта 12 задает номера реакций, для которых пользователю необходимо рассчитать групповые константы и матрицы. Эта карта повторяется для всех заказанных температур и материалов, например,

31 *total */.

Описание типа реакции в * * может быть пустым

3 1 * */.

Запись

351 * */

3-66 * */.

означает, что обрабатываются все реакции, начиная с 51 и заканчивая 66.

Отметим, что в этом случае пользователь сам задает необходимые ему типы реакций.

ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС NJOY



Однако есть возможность автоматического расчета групповых констант для всех сечений, заданных в словаре (см. все реакции, присутствующие для третьего файла в словаре (MF=1, MT=451):

3/.

При этом не рассчитываются термализационные данные (MT=221-250) и специальные данные (MT=251-253, 258-259, 452-456). Если эти данные все-таки нужны, то их необходимо задать дополнительно без * *, например,

3/

3 221/ (термализация)

3 452/ (среднее число нейтронов деления, мгновенных + запаздывающих).

Результаты записываются в третий файл выходной GENDF-ленты.

ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС NJOY



Групповые нейтронные матрицы рассеяния и деления рассчитываются аналогично и записываются в шестой файл выходной GENDF-ленты, например,

```
6 2 *elastic matrix*/  
6 51 * */  
6 -66 * */.
```

Для этого используются данные из файла 4 или файлов 4 и 5 исходной ENDF-ленты. Номера реакций, для которых могут быть рассчитаны матрицы, берутся из словаря для четвертого файла. Матрица упругого рассеяния рассчитывается для всех заданных сечений разбавления. Для всех других реакций матрицы рассчитываются только для $\sigma_0 = \infty$. Не может быть рассчитана также полная матрица всех неупругих процессов. Необходимо рассчитывать матрицу для каждого типа неупругого процесса в отдельности.

ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС NJOY



Матрицы рассчитываются автоматически для всех номеров реакций, содержащихся в словаре для четвертого файла (исключая термализационные данные MT=221-250 и MT=103-107), если задано

6/.

При расчете матриц для этих реакций их необходимо задать дополнительно без * *, например,

6/

6 221/ (матрица упругого рассеяния для области термализации).

ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС NJOY



Данные для ν задаются следующим образом (пример задан для запаздывающих нейтронов):

```
3 455 *средние значения  $\nu$  для запаздывающих нейтронов*/  
5 455 *спектр запаздывающих нейтронов*/.
```

Последняя строка автоматически задает расчет спектра для всех шести групп запаздывающих нейтронов.

Начиная с шестой версии формата ENDF/B в файле 6 исходной ленты уже может содержаться сложная энергоугловая зависимость распределения вторичных нейтронов для некоторых реакций (смотри данные в словаре). В этом случае соответствующие карты вместо MF=6 должны содержать MF=8, например,

```
8 91 * */.
```

ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС NJOY



В качестве примера приведем расчет групповых констант для Pu-239 из библиотеки ENDF/B-6 для системы типа БНАБ:

```
0/  
6/  
*group*/  
-21 -25 0 -26/  
9437 1 0 4 6 1 10 1 /  
*PU-239 FROM ENDF/B-6 */  
293./  
1.e10 1.e4 5.00e3 1.e3 300 100. 50. 10. 5. 1. /  
28 /  
.1e-4 .2154434 .4641589 .1e+01 .2154434e+1 .4641589e+1 .1e+2  
.2154434e+02 .4641589e+2 .1e+03 .2154434e+3 .4641589e+03  
.1e+04 .2154434e+4 .4641589e+4 .1e+05 .2154434e+05 .4641589e+5  
.1e+6 .2e+6 .4e+6 .8e+06 .14e+7 .25e+7 .4e+7 .1e+08 .105e+08  
.14e+8 .145e+8/  
.10 .025 820.3e3 1.4e6/  
3 1 * */  
3 2 * */  
3 102 * */  
3 221 * */  
6 2 * */  
6 221 /  
0 /  
0 /  
*stop*/
```

Спасибо за внимание!