

**РУКОВОДСТВО ПОЛЬЗОВАТЕЛЯ ФОРМАТА
ENDF-6**

Версия от июня 2005

Формат разработан членами рабочей группы по оценке сечений
Брукхэйвенской Национальной Лаборатории
Редактор: Виктория Мак-Лэйн

**Перевод Забродской С.В.
Редактор перевода Николаев М.Н.**

Физико-энергетический институт, г. Обнинск

Аннотация

ENDF/B-6 является международным форматом для хранения оцененных ядерных данных. В настоящем руководстве⁵ детально описаны принятые в ENDF-6 форматы представления оцененных данных и процедуры их использования. Описание основано на отчете BNL-NDC-449450-1(04-Rev) или, что то же, ENDF-201, Rev.4/2001) с несколькими начальными страницами, добавленными секцией по ядерным данным МАГАТЭ

КРАТКОЕ ОПИСАНИЕ СТРУКТУРЫ ДАННЫХ

Глава

(номер файлаMF)

- 0.1 Введение в формат ENDF-6.
- 1.1 Общая информация (описание и перечень приведенных данных)

Некоторые характеристики деления

- 1.2 – 1.4 Выходы нейтронов деления
- 1.5 Параметры энерговыделения при делении

Сечения $\sigma(E)$

- 2 Резонансные параметры
- 3 Сечения

Дифференциальные данные

- 4 Угловые распределения вторичных частиц.
- 5 Энергетические распределения вторичных частиц.
- 6 Энерго-угловые распределения продуктов реакции.
- 7 Закон рассеяния тепловых нейтронов.

Другие данные

- 8 – 10 Образование радионуклидов (включая продукты деления)
- 11 – 15 Образование фотонов.
- 23, 26, 27, 28 Характеристики взаимодействия фотонов с веществом.
- 30 – 40 Данные о погрешностях и их корреляциях (ковариационные данные).

Приложения

- A – Словарь
- B – Определение типов реакций (MT)
- C – Идентификаторы материалов ZA и MAT.
- D – Резонансные формулы
- E – Кинематические формулы.
- F – Сводка идентификаторов, используемых в формате ENDF
- G – ограничения параметров по величине.
- H - фундаментальные константы.

В связи с тем, что формат ENDF/B-VI имеет международный статус, идентификатор библиотеки **NLIB** должен иметь международно согласованные значения. Ниже приводятся согласованные значения этого идентификатора для ряда библиотек. Для введения нового значения для новой библиотеки следует связаться с Секцией ядерных данных МАГАТЭ (IAEA Nuclear Data Section)

Значения **NLIB**

- 0 – ENDF/B**
- 1 – ENDF/A**
- 2 – JEF**
- 3 – EFF**
- 4 – ENDF/B (библиотека данных для высоких энергий)**
- 5 – CENDL**
- 6 – JENDL**
- 10 - RUSFOND¹**
- 31 - INDL/V**
- 32 – INDL/A**
- 33 – FENDL/E, FENDL/C, FENDL/D,
FENDL/E (нейтроны, полные оценки)
FENDL/C (заряженные частицы, термоядерные реакции)
FENDL/D (распадные данные)**
- 34 – IRDF
(нейтронная дозиметрия) - то же, что FENDL/DS**
- 35 – BROND-NDS**
- 36 – INGDB-90
(геофизические данные)**
- 37 – FENDL/A
(данные по нейтронной активации)**
- 38 – SPALLDOS**
- 41 – BROND
(исходная версия)**

Перечень будет пополняться как EXFOR Dictionary #43

¹ Значение NLIB=10 для РОСФОНДа пока не согласовано с МАГАТЭ.
April 2001

Правила ссылок на оцененные данные в формате ENDF

При необходимости сослаться в научной работе на данные из библиотеки в формате ENDF, это надо делать следующим образом:

- Ссылка на оценку данных для отдельного материала (MAT):

“В.Н.Кошечев. : Файл оцененных нейтронных данных для натрия, библиотека РОСФОНДб MAT 1123, октябрь 2005. – Описание оценки: «РОСФОНД. Сводная документация». Отчет ФЭИ № , 2006”.

или

“ A.B. Author et al.: Evaluated neutron reaction data file for U-235, data library ENDF/B-V MAT 1234 MOD 2 dated Jan. 1992. – Description of evaluation: A.B.Author et al. report ABC-123 (1992). - See also P.F.Rose, ENDF.B-Summary Documentation, report BNL-NDC-17541 (ENDF-201)”

- Ссылка на библиотеку в целом:

“ГНЦ РФ ФЭИ . Библиотека оцененных нейтронных данных РОСФОНД (распространяемая версия). Документация по библиотеке: «РОСФОНД. Сводная документация». Отчет ФЭИ № , 2006”

или

“NEA Data Bank, Evaluated Data Library JEF-2 in version distributed (date). – Documentation of the library in NEA report JEF-234 (1992)”

или

“N/P/Kocherov et al.? The International Reactor Dosimetry File IRDF-90, data library by IAEA Nuclear data Section (distr/ 1991), documented in report IAEA-NDS-141 Rev.0 (Aug. 1990).”

Пожалуйста, имейте в виду, что набор оцененных данных однозначно определяется заданием

1. Имени библиотеки
2. Версии библиотеки
3. Номером MAT
4. Номером модификации MOD (если оценка была подвержена ревизии)
5. Датой оценки или датой ревизии или датой распространения библиотеки.

Кроме того, для определения набора оцененных данных следует указать автора (или авторов) оценки (или лица, ответственного за библиотеку в целом). Должна быть также дана ссылка на источник, содержащий описание оценки.

Примечание: Правильно говорить так:

- Формат ENDF-6, который описан в настоящем руководстве.
- РОСФОНД– это российская библиотека оцененных нейтронных данных, представленных в формате ENDF-6

Настоящее руководство, как и английский оригинал, не свободно от неточностей.

Пожалуйста, присылайте Ваши замечания и предложения В ГНЦ РФ ФЭИ Николаеву М.Н. или непосредственно в IAEA Nuclear Data Section. Ваши замечания будут учтены при переиздании Руководства.

Благодарности

Следующие люди внесли значительный вклад в написание и редакцию форматов и процедур, входящих в этот документ:

Р. Ла-Броу (R. LaBauve) – Лос-Аламосская Национальная Лаборатория. (LANL)
НьюЛарсон (N. Larson) – Ок-Риджская Национальная лаборатория (ORNL)
К. Любитц (C. Lubitz) Ядерно-энергетическая лаборатория в Карлсруе (KAPL)
Р. Мак-Ферлейн (R. MacFarlane) - Лос-Аламосская Национальная Лаборатория. (LANL)
Д. Мюир (D. Muir) - Лос-Аламосская Национальная Лаборатория. (LANL)
С.Пирлстейн (S. Pearlstein) – Брукхэйвенская Национальная Лаборатория (BNL)
Р. Пил (R. Peele) – Ок-Риджская Национальная лаборатория (ORNL)
Ф. Пери (F. Perey) – Ок-Риджская Национальная лаборатория (ORNL)
Р. Руссен (R. Roussin) – Ок-Риджская Национальная лаборатория (ORNL)
Р.Е.Симон (R. E. Seamon) – Лос-Аламосская Национальная Лаборатория. (LANL)
Л. Стюарт (L. Stewart) – Лос-Аламосская Национальная Лаборатория. (LANL)

Национальный Центр по Ядерным Данным выражает признательность тем, кто корректировал эту версию, особенно К.Любицу, Д. Мюиру, К. Шибата, И. Ширакову.

Форматы данных и процедуры представления файлов оцененных ядерных данных в формате ENDF-6

0. Предисловие к ENDF-6

Эта модификация к ревизии 4/01 “Форматы данных и процедуры представления файлов ядерных данных” относится к 6-й версии формата ENDF. Седьмая версия библиотеки ENDF/B, ENDF/B-VII, а также библиотека РОСФОНД базировались именно на этом формате².

Ниже представлен список изменений к форматам и методикам, которые появились в этой редакции. Кроме того, исправлены некоторые типографские ошибки. На отредактированных страницах внизу будут проставлены даты редактирования.

Пользователям этого руководства, у которых появятся замечания или возникнут предложения, предлагается связаться с Национальным Центром Ядерных данных. Я бы хотел выразить благодарность всем пользователям, приславшим свои исправления к предыдущей версии.

Основные модификации к Руководству к версиям формата от 2000 и 2001 г.г.
(последние модификации выделены жирным шрифтом)

Численные значения фундаментальных констант были перемещены из текста самого Руководства и находятся сейчас в новом Приложении H.

Секция	Страница	Дополнения
0		<i>Жирным курсивом добавлены замечания, касающиеся особенностей библиотеки РОСФОНД</i>
0.	0.6	Добавлены две новые подбиблиотеки NSUB = 6 и 113.
	0.7	Добавлены новые типы файлов MF = 26 и 113.
	0.7.3.	Введен новый тип записи INTG (N. Larson)
	0.22	Добавлен верхний предел в экспоненту чисел с плавающей запятой.
	0.23	Последовательность числа для конца записи изменена на 99999.
1.	1.4	Добавлено число выпуска и максимальная энергия во второй записи CONT.
2.		Разнообразные коррекции и дополнения (C.Lubitz)
2.		В описании R- матричных параметров LRF=5 и LRF=6 заменено на LRF=7 (N.Larson)
		Дополнения для 2 канальных спинов (N.Larson, C.Lubitz)
4.	4.3,4.5	Дополнительная опция LTT=3 для различных представлений углового распределения в разных энергетических интервалах.
	4.7	Дополнительное решение выражения предела Wick; замена численного значения константы на эквивалентное выражение.
6.	6.1	Снятие ограничения для опций LCT=3 при LANG≠2.
8	8.7, 8.9-10	Многочисленные дополнения к новым атомным форматам (R.MacFarlane)
23-28		Многочисленные дополнения к новым атомным форматам (R.MacFarlane)
30,32		Многочисленные дополнения и исправления (D.Muir).
32		Для описания ковариаций резонансных параметров

² Формат ENDF/B-6 использован также в библиотеках ENDF/B-VII, JEFF-3.1, JENDL-3.3 и российской библиотеке РОСФОНД. (Прим. перев.)

Приложение D	добавлен новый формат LCOMP=2 (N.Larson)
Приложение D	Заменена секция D.3.1 (C.Lubitz). Добавлена подсекция D.1.7. содержащая описание LRF=7. Секции D.1.5 и D.1.6 удалены.
Приложение G	Увеличены максимальные значения чисел параметров в файлах MF= 2, MF=3 и MF=4.
Приложение H	Новое Приложение с фундаментальными константами(N.Larson,V.McLane).

0.1. ВВЕДЕНИЕ В ФОРМАТ ENDF-6

Форматы ENDF и библиотеки были приняты Рабочей группой по Оценке Сечений(CSEWG). Национальный Центр Ядерных данных(NNDC) объединил усилия национальных лабораторий, промышленности и университетов в США и Канады³.

Ранние версии формата ENDF обеспечивали представление данных о нейтронных сечениях и их распределениях, данных об образовании фотонов и ограниченного количества заряженных частиц в нейтронных реакциях, данных о фото-атомных взаимодействиях, данных о рассеянии тепловых нейтронов, данных об образовании радионуклидов и их распадных данных (включая продукты деления). Версия 6 (ENDF-6) позволила расширить энергетический интервал для взаимодействия нейтронов, добавила более детальные описания распределений испускаемых частиц, и обеспечила отдельное существование подбиблиотек ENDF для данных о взаимодействии с заряженными частицами и фотоядерных данных. Также формально были выделены в подбиблиотеки распадные данные, данные о выходах продуктов деления⁴, данные по тепловому рассеянию и фото-атомные данные. Кроме того, это обновленное Руководство представляет собой значительно дополненное Руководство V-ой версии⁵.

0.2. ФИЛОСОФИЯ СИСТЕМЫ ENDF

Система ENDF была разработана для хранения и обновления оцененных ядерных данных при их использовании в инженерных расчетах. Эти приложения определяются многими особенностями, включая выбор включаемых материалов, выбор используемых данных и форматов, и определение необходимой проверки перед выпуском библиотеки. Важность всего этого заключается в том, что каждая оценка должна быть полной для ее планируемого применения. Если необходимые данные отсутствуют для отдельных реакций, оценщику следует оценить их с использованием систематик и ядерных моделей.

Система ENDF логически разделяется на форматы и процедуры. **Форматы** описывают, как данные расположены в библиотеках, и приводят формулы, необходимые для получения физических величин, таких как сечения и угловые распределения по параметрам, содержащимся в библиотеке. **Процедуры** это жесткие правила, которые определяют, какой тип данных должен быть включен, какой формат может быть использован в определенных условиях и т.д. Обычно, процедуры вводятся определенной организацией, и библиотека, соответствующая этим процедурам, Рабочей Группой по Оценке Сечений(CSEWG), определяется как ENDF/B-библиотека. Другие организации могут использовать какие-то отличные процедуры, если это им необходимо, но они рискуют столкнуться с тем, что их библиотеки не будут обрабатываться программами, утвержденными CSEWG.

0.2.1. Оцененные данные

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**.

³ На странице vi приводится список действующих и бывших членов рабочей группы CSEWG.

⁴ В библиотеке РОСФОНД данные о выходах продуктов деления в отдельную подбиблиотеку не выделены (Прим. перев.)

⁵ ENDF-102 Форматы данных и процедуры для оцененных ядерных данных, ENDF/B-V, BNL-NCS-50496(ENDF-102), под редакцией R.Kinsey, 1989.(Дополненное В.Magurno, Ноябрь 1983) April 2001

0.2.2. Библиотека ENDF/B

Библиотека ENDF/B, сопровождаемая Национальным Центром Ядерных Данных (NNDC), содержит рекомендованные оценки для каждого материала⁶. Каждый материал описан так полно, как это возможно; однако, полнота зависит от определенного приложения. Например, если пользователь заинтересован в выполнении расчетов по реакторной физике или проведении анализа защиты, ему потребуются 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.

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.

0.2.3. Выбор Данных

Наборы данных, содержащиеся в библиотеке ENDF/B – это те данные, которые выбрала Рабочая Группа CSEWG из предложенных оценок⁷. Это выбор делается на с учетом требований приложений, соответствия оценки форматам и процедурам, и, по возможности, с учетом результатов тестирования оцененных данных. Набор данных, который представлен для одного материала, может быть заменен, когда (1) становятся доступными новые экспериментальные данные, существенно более точные или существенно дополняющие имевшиеся ранее; (2) когда интегральные тесты показывают, что данные приводят к ошибочным результатам, (3) когда потребности пользователя указывают на необходимость более точных данных и/или лучшее представление данных для отдельных материалов **и имеется возможность эти потребности удовлетворить**. Новые или пересмотренные наборы данных включаются в новую версию библиотеки ENDF/B.

0.2.4. Библиотеки экспериментальных данных

Национальный Центр по Ядерным данным США поддерживает библиотеку экспериментально измеренных ядерных сечений (CSISRS). В дополнении к данным, библиотека CSISRS содержит библиографическую информацию, так же как и детали о экспериментах (стандарт, перенормировка, коррекции и прочее).

В начале процесса оценки оценщик может получить имеющиеся экспериментальные данные для определенного материала прямым запросом в базу данных CSISRS через мировую сеть Web или используя интерактивную службу центра NNDC⁸. Данные могут быть запрошены в центре NNDC, и переданы в виде листингов, рисунков, и/или файлов, которые могут быть отформатированы для удовлетворения большинства запросов.

Существует также международная база экспериментальных ядерных данных EXFOR, широко использовавшаяся при создании библиотеки РОСФОНД.

0.2.5. Обрабатывающие программы

Однажды подготовленные в формате ENDF наборы оцененных данных могут преобразовываться в формы, пригодные для тестирования и непосредственных приложений с

⁶ Это же относится и к библиотеке РОСФОНД, сопровождаемой специалистами ГНЦ РФ ФЭИ.

⁷ В случае библиотеки РОСФОНД этот выбор сделан специалистами ГНЦ РФ ФЭИ.

⁸ C.L.Dunford, T.W.Burrows. Интерактивная служба по ядерным данным, NNDC/ONL-99/3, периодически обновляется.

помощью обрабатывающих программ. Разработаны обрабатывающие программы, которые получают усредненные по группам сечения из библиотеки ENDF для использования в нейтронных расчетах. Эти программы⁹ выполняют такие функции как восстановление детального хода сечений по параметрам резонансов, Доплеровское уширение резонансных линий, усреднение по заданным энергетическим группам, и/или перевод в специальные интерфейсные форматы.

Базовые форматы данных в библиотеки ENDF разрабатываются таким образом, что имеют место быть незначительные ограничения при использовании данных в качестве исходных для программ, которые генерируют любые вторичные библиотеки.

0.2.6. Тестировка

Все оценки ENDF/B проходят по крайней мере некоторое тестирование перед выпуском в качестве части библиотеки. Тестирование первого этапа использует набор служебных программ¹⁰, поддерживаемых центром NNDC, и визуальный контроль рецензента для подтверждения, что оценка соответствует текущим форматам и процедурам. Затем отдается предпочтение наилучшим современным данным, и выбираются опции форматов, пригодных для представления физики. Тестирование второго этапа использует результаты расчетов имеющихся тестовых бенчмарков для оценки соответствия оценки реальным приложениям.¹¹

Процесс проверки и тестирования являются важной частью системы ENDF, *в частности, библиотеки РОСФОНД.*

0.2.7. Документация

Система документируется отчетами по ENDF(см.Раздел 0.8), выпускаемыми центром NNDC в Брукхейвенской лаборатории. Кроме того, краткое изложение встреч Рабочей группы CSEWG содержит информацию о текущем статусе форматов, процедур, процесса оценки и тестирующих программ.

Документация оценок, включенных в библиотеку РОСФОНД, сосредоточена в документе “Энциклопедия нейтронных данных РОСФОНД. Полный пакет обоснований отбора оценок”, размещенном на том же сайте, что и настоящий перевод формата ENDF-6.

0.3. ОБЩЕЕ ОПИСАНИЕ СИСТЕМЫ ENDF

Библиотеки ENDF – это собрание документированных оценок, хранимых в определенном машинно-читаемом формате, который может быть использован в виде основного ввода в обрабатывающие программы ядерных данных. По этой причине формат ENDF разрабатывался вместе с обрабатывающими программами. Формат ENDF использует записи длиной 80 символов. Параметры записываются в виде FORTRAN-переменных (то есть, целые значения начинаются с букв I, J, K, L, M или N, все остальные – это реальные значения). Весь список параметров, определенных в формате ENDF можно найти в Приложении А (Перечень).

⁹ D.E.Cullen, Обрабатывающие программы ENDF 1996г(PREPRO96), отчет IAEA-NDS-39,Вер.9,1996
R.E.MacFarlane, D.W.Muir, Система обработки ядерных данных NJOY, Версия 91, отчет LA-12740-M, Октябрь 1994. *Для обработки оцененных данных библиотеки РОСФОНД использовалась обновленная версия этой программной системы – NJOY-2000.*

¹⁰ C.L.Dunford, Служебные программы ENDF выпуска 6.11, Апрель 1999. Доступны на web-странице NNDC.

¹¹ Описания бенчмарков Рабочей группы по оценке сечений, ENDF-202,1974(последняя редакция 1991).

0.3.1. Структура библиотек

Каждая ENDF оценка определяется набором ключевых параметров, образующих иерархию. Ниже приводится список этих параметров и их определения.

Библиотека	NLIB набор оценок определенной группы оценщиков (например, NLIB= 0 - ENDF/B; NLIB=10 - РОСФОНД).
Версия	NVER одна из периодических модификаций библиотеки в формате ENDF (например, NVER= 6 - ENDF/B-VI). Изменение версии обычно означает изменение формата, стандартов и процедур. номер пересмотра(ревизии) указывается в конце имени после номера версии , например, ENDF/B-VI.2 означает вторую ревизию библиотеки ENDF/B-VI. Идентификатор для обозначения номера ревизии форматом не предусмотрен.
Подбиблиотека	NSUB набор оценок для определенного вида данных (например, NSUB=4 - данные о характеристиках радиоактивного распада, NSUB=10 - нейтронные данные, NSUB=12 данные о законах рассеяния тепловых нейтронов) ¹² .
Формат	NFOR формат табулирования данных; сообщает обрабатывающим программам, как читать соответствующие записи с данными (например, NFOR= 6 - ENDF-6).
Материал	MAT идентификатор ядра-мишени в подбиблиотеке реакций, или радиоактивный (родительский) нуклид в подбиблиотеке распадных данных; см.Раздел 0.3.2.
Mod	NMOD указатель модификации; см. Раздел 0.3.2.
Файл	MF старший структурный элемент данных для материала(MAT); каждый файл содержит данные определенного класса (например, MF=3 включает данные о сечениях реакций, MF=4 содержит угловые распределения). Параметр MF может иметь значения от 1 до 99.(См. Таблицу 0.2 с полным перечнем принятых номеров MF).
Секция	MT структурный элемент файла(MF); каждая секция описывает определенную реакцию или определенный тип дополнительных данных (например, MT=102 содержит данные о радиационном захвате). Параметр MT может принимать значения от 1 до 999. (См. Приложение В с полным списком принятых MT номеров).

0.3.2. Материал(MAT)

По определению материал - это отдельный изотоп или набор изотопов. Он может быть отдельным изотопом; природным элементом, состоящим из нескольких изотопов, или

¹² В библиотеке РОСФОНД (по крайней мере, в созданной исходной ее версии) подбиблиотеки отсутствуют. Библиотека характеризуется значением NSUB=10 (нейтронные данные). Данные об образовании радионуклидов (файлы MF=8, MF=9, MF=10), в частности данные о выходах продуктов деления, включены в основную библиотеку нейтронных данных. В основную библиотеку внесены также данные о законах рассеяния тепловых нейтронов.

смесью из нескольких элементов (соединение, сплав, молекула и прочее). Единичный изотоп может быть в возбужденном или изомерном состоянии. Каждому материалу в библиотеке ENDF присваивается уникальный идентификационный номер МАТ от 1 до 9999.¹³

Материал будет иметь один и тот же номер МАТ в каждой подбиблиотеке (распадных данных, нейтронных данных или данных по заряженным частицам и прочее).

Для каждого химического элемента Z (два знака) зарезервировано 100 четырехзначных номеров МАТ (Z01-Z99) Z , вплоть до $Z = 98$. Природные элементы имеют МАТ вида Z00 (два последних разряда МАТ содержат нули). В ENDF/B-VII и во многих других зарубежных библиотеках номер МАТ для изотопов элемента присваивается с увеличением массы с шагом 3, позволяющим описывать как основное, так и два метастабильных состояния.¹⁴ В файлах ENDF/B, ориентированных на конкретные приложения, важны оценки данных для нейтронно-избыточных нуклидов (именно эта категория нуклидов требуется в оценках тепловыделения при распадах). По договоренности, самому легкому стабильному изотопу присваивается МАТ = Z25. Такая формализация позволяет однозначно описать нейтронно-избыточные изотопы и изомеры и достаточное число нейтронно-дефицитных нуклидов.

В специальных случаях для элементов от эйнштейния до лоуренция ($Z \geq 99$) номера МАТ присваиваются в виде 99xx, где xx = 20, 25, 20, 15 и 12 для элементов от 99 до 103 соответственно, таким образом охватываются все известные нуклиды с расширением по изотопам.

Для смесей, соединений, сплавов и молекул, номера МАТ присваиваются от 0001 до 0099 на специальной основе (см. Приложение С).

В библиотеке РОСФОНД сохранена прежняя, более ясная для пользователя система формирования номеров МАТ. Как и в ENDF/B-VI,-VII, два старших разряда МАТ используются для записи зарядового числа Z , так что МАТ однозначно определяет элемент, к которому относятся оцененные данные. Два младших разряда в случае изотопов, находящихся в основных состояниях, содержат два младших разряда массового числа A . Это позволяет по номеру МАТ однозначно определить и изотоп, к которому относится оценка, если рассматривается основное состояние этого изотопа. Например ^{172}Hf ($T_{1/2}=1.87$ з) присвоен МАТ=7272; ^{178}Hf (стабильному) – МАТ=7278 и т.д. В библиотеке РОСФОНД содержатся нейтронные данные для всех радионуклидов, период полураспада которых превышает 1 сутки. Идентификация радионуклидов, находящихся в основных состояниях, с помощью идентификатора МАТ, как ясно из изложенного выше, проблем не представляет. Для идентификации изомеров используется второй разряд в числе МАТ, которому для обозначения первого изомера присваивается значение 1 (или – изредка -3), для обозначения второго изомера – значение 2. Так, $^{91}\text{Nb}^m$ ($T_{1/2}=60.9$ д), $^{92}\text{Nb}^m$ ($T_{1/2}=10.15$ д) и $^{93}\text{Nb}^m$ ($T_{1/2}=16.13$ з) соответствуют МАТ=4111, 4112 и 4113, не позволяющие спутать эти изомеры с иными изотопами ниобия, поскольку ^{111}Nb , ^{112}Nb или ^{113}Nb не существует; $^{178}\text{Hf}^n$ ($T_{1/2}=31$ з) и $^{179}\text{Hf}^n$ ($T_{1/2}=25$ д) соответствуют МАТ=7228 и 7229, что также не позволяет их спутать с другими изотопами или изомерами гафния, т.к. ^{128}Hf или ^{128}Hf не существует. Значение “3” используется для обозначения первого изомера у изотопов с массовым числом, близким к 100. Так изомеру $^{114}\text{In}^m$ ($T_{1/2}=49.5$ д) присваивается МАТ=5934, отличающему его от основного состояния, имеющего МАТ=5914, $^{119}\text{Sn}^m$ ($T_{1/2}=293$ д) присваивается МАТ=5039, а $^{121}\text{Sn}^m$ ($T_{1/2}=50$ з) – МАТ=5031, что также не порождает путаницы т.к. ^{139}Sn не существует, а ^{131}Sn имеет период полураспада 30с (в изомерном состоянии 50с) и для него нейтронные данные в библиотеке РОСФОНД, естественно, не приводятся.

Принятые правила присвоения значений идентификаторам МАТ будут не пригодны для обозначения всех изомеров в библиотеке распадных данных. Однако в библиотеке РОСФОНД подбиблиотеки распадных данных пока не содержится. Если

¹⁴ Эта процедура приводит к затруднениям для нуклидов Хе, Се, Ос, Рl и т.д., где может потребоваться более 100 номеров для включения всех изотопов.

такая библиотека будет создана в формате ENDF/B в будущем, то, возможно, к тому времени разработчики формата придут к выводу о целесообразности увеличения числа знаков идентификатора MAT (скажем, до пяти) и проблема идентификации нуклидов будет снята).

0.3.3. Модификация материала(MOD)

Все версии набора данных (т.е. начальная версия, ее частичные ревизии или полные переоценки) обозначаются с помощью идентификатора модификации MOD. Для первого выпуска библиотеки ENDF/B (в частности, библиотеки РОСФОНД), указатель модификации для каждого материала и каждой секции, в том числе взятых из предыдущих версий *или из других библиотек*, устанавливается равным 0 (MOD=0); При замене их полностью или частично пересмотренными данными, они будут отмечаться значением MOD=1. Далее при каждой замене оцененных MOD увеличивается на 1. Указатель модификации для каждой секции, меняемой в пересматриваемой оценке, устанавливается равным номеру новой модификации материала. Если секция сохранена неизменной, ее идентификатор MOD сохраняет прежнее значение. При полной переоценке, указатель модификации для каждой секции совпадает с новым номером модификации материала.

Рассмотрим следующий пример. Оценщик X получил новый набор данных для ^{235}U . После проверки и тестирования, оценщик делает вывод, что набор данных хорош и посылает его в центр NNDC. Центр при условии одобрения Рабочей группы CSEWG присваивает этому набору номер MAT=9228 и заменяет ею прежний набор данных. Этой оценки присваивается номер модификации MOD=1 как для материала, так и для всех секций. После того как файл выпущен, оценщик Y находит его в Центре под номером MAT 9228, включает его в свою библиотеку, и обрабатывающие программы обращаются к нему по номеру 9228. Если оценка материала 9228 претерпит последующую ревизию, которая будет одобрена Рабочей группой CSEWG, то материал получит новый номер модификации MOD = 2. Тогда этот номер будет присвоен каждой обновленной секции, но неизменные секции изменений сохраняют MOD=1.

0.4. СОДЕРЖАНИЕ ОЦЕНОК ENDF

Как уже говорилось ранее, подбиблиотека (NSUB) и материал (MAT) определяют ядро-мишень, для которого приведена оценка сечений или радиоактивной нуклид (при рассмотрении оценки распадных данных). MF и MT указывают на тип данных, представленных в секции и определяют продукты реакции.

Подбиблиотеки различаются между собой разными типами данных, используя номер $\text{NSUB} = 10 \cdot \text{IPART} + \text{ITYPE}$. В этой формуле $\text{IPART} = 1000 \cdot Z + A$ определяет налетающую частицу; для фотонов или при отсутствии частиц (радиоактивный распад) используется $\text{IPART} = 0$, для налетающего электрона используется $\text{IPART} = 11$, для фото-атомных и электронно-атомных данных – $\text{IPART} = 0$. В Таблице 0.1. приведены подбиблиотеки, определяемые в библиотеках ENDF.

Таблица 0.1
Номера и названия подбиблиотек

NSUB	IPART	ITYPE	Название подбиблиотеки
0	0	0	Фото-ядерные данные
1	0	1	Выходы продуктов фотоделения
3	0	3	Данные о взаимодействии фотонов с атомами
4	0	4	Характеристики радиоактивного распада
5	0	5	Выходы продуктов спонтанного деления

6	0	6	Данные о релаксации возбужденных атомов
10	1	0	Нейтронные данные
11	1	1	Выходы продуктов деления нейтронами
12	1	2	Законы рассеяния тепловых нейтронов
113	11	3	Данные по электронно-атомному взаимодействию
10010	1001	0	Данные о взаимодействии протонов с ядрами
10011	1001	1	Выходы продуктов при делении протонами
10020	1002	0	Данные о взаимодействии дейтронов с ядрами
....			
20040	2004	0	Данные о взаимодействии альфа-частиц с ядрами

В Таблице 0.2 приведены номера файлов и их использование в различных подбиблиотеках.

Таблица 0.2
Определение типа файлов

MF	Описание
1	Общая информация
2	Резонансные параметры
3	Сечения реакций
4	Угловые распределения испускаемых частиц
5	Энергетические распределения испускаемых частиц
6	Энерго-угловые распределения испускаемых частиц
7	Законы рассеяния тепловых нейтронов
8	Радиоактивность и выходы продуктов деления
9	Множественность образования радиоактивных ядер ¹⁵
10	Сечения образования радиоактивных ядер
12	Множественность образования фотонов
13	Сечения образования фотонов
14	Угловые распределения фотонов
15	Энергетические распределения фотонов
23	Сечения фото-или электронно-атомных взаимодействий
26	Угловые и энергетические распределения продуктов электронно-атомных взаимодействий
27	Атомные форм-факторы и функция рассеяния для фото-атомных взаимодействий
28	Данные о релаксации возбужденных атомов
30	Ковариационные данные, полученные из ковариаций модельных параметров и чувствительностей сечений к этим параметрам ¹⁶
31	Ковариационные данные для \bar{v}
32	Ковариационные данные для резонансных параметров
33	Ковариационные данные для сечений реакций
34	Ковариационные данные для угловых распределений
35	Ковариационные данные для энергетических распределений
39	Ковариационные данные для выходов радионуклидов
40	Ковариационные данные для сечений образования радионуклидов

В MF- номерах отсутствуют следующие значения: 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 24, 25.

¹⁵ Например, вероятность образования продукта реакции в изомерном состоянии.

¹⁶ Фактически формат не определяет способа оценки ковариационных данных. Применение модельных оценок не обязательно.

0.4.1. Нейтронные данные (NSUB 10)

Процедуры для описания нейтронных реакций в формате ENDF/B-VI аналогичны процедурам, используемых в предыдущих версиях формата, так что существующие оценки могут быть перенесены без утраты их возможностей. Новые особенности касаются в основном области высоких энергий (5-10 MeV) или малых атомных весов (^2H , ^9Be), и состоят в улучшении описания энерго-угловых распределений, тепловыделения и числа смещений на атом, спектральных данных для заряженных продуктов реакций и в использовании R-матричной параметризации и резонансных R-функций.

Каждая оценка начинается с файла MF=1? Содержащего текстовое описание оценки перечень секций (см. Раздел 1.1). Для делящихся изотопов, в Файле 1 могут задаваться секции для описания числа нейтронов при делении и энергии, освобождающейся в этом процессе.

Файл 2 задается всегда. Для некоторых материалов он может содержать только эффективный радиус рассеяния, для других – полные наборы разрешенных и/или неразрешенных резонансов.

Файл 3 присутствует всегда. Требуемый энергетический интервал начинается или от порога реакции или от 10-5 eV до 20 MeV, хотя разрешены и более высокие энергии. Каждая важная реакция или сумма реакций выделяется в секцию. Номера MT для этих реакций определяются на основе классификации испускаемых частиц, описанных в Разделе 0.5 (Система обозначений реакций) и в Приложении В. Для резонансных материалов в области разрешенных резонансов сечения для упругого рассеяния, деления и радиационного захвата обычно получаются суммированием величин, заданных в Файле 3, и вкладов резонансов, рассчитанных по параметрам из Файла 2. Однако, исключения из этого правила допускаются (см. указатель LRP=2 в Разделе 1.1). В области неразрешенных резонансов самоэкранированные средние сечения могут быть получены непосредственно с учетом суммы вкладов из Файлов 2 и 3 (как и выше), или равняться средним сечениям, рассчитанным из Файла 3, умноженным на фактор самоэкранировки, рассчитанный по данным Файла 2. (См. Раздел 2.3.1. и 2.4.21.)

Распределение испускаемых нейтронов и других частиц или ядер задаются в Файле 4, в Файлах 4 и 5, или в Файле 6. Как будет описано более детально ниже, Файл 4 используется для простых реакций двух тел (упругое рассеяние, неупругое рассеяние с возбуждением дискретных уровней). Файлы 4 и 5 используются для простых реакций с непрерывным вторичных частиц, которые обычно почти изотропны, имеют минимальное предравновесное состояние, и излучают только одну важную частицу, как правило - нейтрон. Файл 6 используется для более сложных реакций, которые требуют описания энерго-угловой корреляции, которая может быть важна при расчетах энерговыделения и радиационных повреждений, или(и) в которых образуется несколько важных продуктов, энерго-угловые распределения которых должны быть описаны (например, фотоны, образующиеся в реакции, ядра отдачи и пр).

Если какие-то продукты реакций радиоактивны, они должны быть далее описаны в Файле 8. Этот файл указывает, как сечение образования может быть определено (из данных Файлов 3, 6, 9 или 10) и дает минимальную информацию о характеристиках распада продукта. Дополнительная распадная информация может быть получена, если потребуется, из подбиблиотеки распадных данных.

Заметим, что выходы частиц и остаточных ядер иногда определяются неявно; например, выход нейтронов для реакции $A(n,2n)$ равняется 2, а выход продукта $A-1$ составляет 1. Если используется Файл 6, то все выходы определены явно. Это удобно для расчета сечений образования газов и трансмутации. Явно выходы радиоактивных ядер могут быть заданы в Файле 9, а сечения образования могут быть определены в Файле 10. В последнем случае, выход может быть определен если разделить заданное в этом файле сечение образования радионуклида на сечение соответствующей реакции. Определенное в Файле 3. В резонансной области использование Файла 9 предпочтительнее по сравнению с

Файлом 10 т.к. выход радионуклида (например, при радиационном захвате) не зависит от энергии или зависит слабо, тогда как сечение меняется чрезвычайно сильно).

Для совместимости с ранними версиями, образование фотонов и их распределения могут быть описаны с использованием Файла 12 (выходы образуемых фотонов), Файла 13 (сечения образования фотонов), Файла 14 (угловые распределения фотонов) и Файла 15 (энергетические распределения фотонов). Отметим, что если имеются сильные резонансы в сечении (радиационного захвата, деления), то использование Файла 12 имеет преимущество перед Файлом 13. Вообще всегда, когда возможно, образование фотонов следует описывать в Файл 12 для каждой реакции, которая их порождает (например, для сечения возбуждения каждого дискретного уровня при неупругом рассеянии). Когда это не удастся, можно использовать Файлы 12 или 13 сумму для МТ-номеров, описывающих суммарные реакции, как описано в Разделе 0.5.9.

Когда для представления распределения нейтронов и заряженных частиц в реакциях используется Файл 6, в нем следует также описать и распределение испускаемых в реакции фотонов. Это обеспечивает проверку энергетического баланса в реакции. Когда испускаемые фотоны не могут быть отнесены к определенной реакции, они могут быть описаны под МТ номерами, соответствующими суммарным реакциям (см. Раздел 0.5.9).

Наконец, ковариационные данные задаются в Файлах 30-40. Процедуры для этих файлов описаны в Разделах 30-40 настоящего руководства.

0.4.2. Рассеяние тепловых нейтронов(NSUB 12)¹⁷

Данные по рассеянию тепловых нейтронов должны храниться в отдельной подбиблиотеке, потому что ядра-мишени в этом случае связаны с другими атомами в молекулах или кристаллах, с которыми они совместно участвуют в тепловом движении; поэтому физика представления этих данных¹⁸ требует специальных форматов. Тепловые данные распространяются до нескольких eV и приводятся для нескольких молекул, жидкостей, твердых тел и газов. Как обычно, каждая оценка начинается с текстового описания оценки и перечня секций (см. Раздел 1.1). Остальные данные включены в Файл 7. Сечение когерентного упругого рассеяния, если требуется, определяется по брегговским углам и структурным факторам, а сечения некогерентного упругого рассеяния определяются из сечения на несвязанных ядрах и интеграла Дебая-Уиллера. Закон неупругого когерентного рассеяния задается, используя S(α , β)-формализм в приближении короткого времени столкновения¹⁹.

0.4.3. Выходы продуктов деления

Данные по образованию продуктов деления задаются в разных подбиблиотеках²⁰ в зависимости от того, каким образом было вызвано деление. В настоящее время, определены подбиблиотеки выходов продуктов при делении нейтронами и при спонтанном делении. Формат также позволяет также в будущем описывать выходы продуктов деления фотонами и заряженными частицами. Каждый материал начинает с текстового описания и перечня секций (см. Раздел 1.1). Остальные данные представлены в Файле 8, который содержит две секции: независимые выходы и кумулятивные выходы. Как сказано в Разделе 8.2, формат для этих двух секций одинаков. Ковариационные данные для Файла 8 автономны.

¹⁷ Согласно правилам ENDF используется только с IPART=0. *В библиотеке РОСФОНД эти данные, определенные для молекул, жидкостей и кристаллов, объединены с данными для отдельных нуклидов*

¹⁸ J.H.Koppel and D.H.Houston, Ссылочное руководство для данных ENDF по тепловому рассеянию, Общий отчет GA-8774(ENDF-269) (пересмотрен и переиздан NNDC в июле 1978)

¹⁹ *Детально рассеяние тепловых нейтронов описано в книге И.Ф.Турчина «Медленные нейтроны», Госатомиздат, 1963.*

²⁰ *В библиотеке РОСФОНД содержатся данные о выходах продуктов деления под действием нейтронов. Поэтому эти данные в отдельную подбиблиотеку не выделены.*

0.4.4. Характеристики радиоактивного распада(NSUB=4)²¹

Оцененные распадные данные для радиоактивных нуклидов объединены в специальную подбиблиотеку. Эта подбиблиотека содержит распадные данные для всех радиоактивных продуктов (осколков деления и продуктов активации нейтронами). Выходы продуктов деления и сечения активации хранятся в других в другом подбиблиотеках. Каждый материал состоит из 2-х, 3-х или 4-х файлов. Он начинается с текстового описания оценки и перечня секций (см. Раздел 1.1). Материалы, испытывающие спонтанное деление, в Файле 1 включают секции с описанием выхода нейтронов деления (полного, мгновенных и запаздывающих) и параметров энерговыделения. Кроме того, в Файле 5 приводятся спектры мгновенных и запаздывающих нейтронов. Форматы Файла 5 - такие же как и для деления нейтронами (см. Раздел 5), а распределения предполагаются изотропными в лабораторной системе. Файл 8 содержит периоды полураспада, типы и энергии распада, и спектры радиоактивных излучений (см. Раздел 8.3). Ковариационные данные для этих спектров могут быть определены в Файле 35; ковариационные данные для Файла 8 – автономны.

0.4.5. Фото-ядерная подбиблиотека(NSUB=0) и подбиблиотека заряженных частиц(NSUB≥10010)

Оценки фото-ядерных реакций и реакции с налетающими частицами объединены в подбиблиотеки по налетающим частицам. Как обычно, оценка начинается с текстового описания оценки и перечня секций (см. Раздел 1.1). Для процесса деления фотоном или другой частицей Файл 1 может включать секции с описанием выхода нейтронов деления (полного, мгновенных и запаздывающих) и параметров энерговыделения. Данные по резонансным параметрам (Файл 2) могут быть пропущены совсем (см. LRP=-1 в Разделе 1.1)

В файле 3 заданы сечения. Используемые номера МТ определяются по испускаемым частицам, как описано в Разделе 0.5. В Файле 6 должны быть явно заданы выходы для всех продуктов. Кроме этого, следует указывать энергию торможения заряженных частиц. Если есть радиоактивные продукты, описанные в Файле 6, они должны быть дальше описаны в соответствующей секции Файла 8. Эта секция должна содержать период полураспада, минимальную информацию о распадной цепочке, энергию распада для радиоактивного продукта. Дальнейшие подробности, если потребуется, можно найти в подбиблиотеке распадных данных.

Угловые распределения или коррелированные энерго-угловые распределения могут быть заданы для всех частиц, остаточного ядра и фотонов в Файле 6. Для не очень важных реакций можно задать только среднюю энергии частиц или даже указать на “неизвестное” распределение (см. Раздел 6.2.1.).

Наконец, для описания ковариаций фото-ядерных реакций и реакций с заряженными частицами могут быть использованы Файлы 30 и 40.

0.4.6. Данные по фото-атомным взаимодействиям (NSUB=3)

Реакции фотонов с атомными электронами²² выделены в отдельную под-библиотеку. Эти данные ассоциируются скорее с элементами, чем с изотопами. Каждый материал, как обычно, начинается с текстового описания оценки и перечня секций (см. Раздел 1.1). Кроме того, материал может содержать Файл 23 для сечений фотонных взаимодействий и Файл 27 для атомных форм-факторов.

²¹ Как отмечалось подбиблиотека распадных данных в библиотеке РОСФОНД отсутствует. Пользователи могут обратиться к библиотеке распадных данных системы констант БНАБ-93 (см. Жердев Г.М. и др. Расчет интенсивности источников радиоактивных излучений (программа SOURCE). *Вопр. атомной науки и техн., сер. Физика ядерных реакторов. Вып.4, 2002 г. М. РИЦ “Курчатовский институт”*)

²² D.E. Cullen, и др. Таблицы и графики сечений фотонных взаимодействий от 10 эВ до 100 ГеВ. Получены из библиотеки оцененных фотонных данных(EPDL).UCRL-50400, Том 6(Выпуск 1989).

0.4.7. Данные по электронно-атомным взаимодействиям (NSUB=113)

Реакции электронов с атомными электронами также выделены в отдельную подбиблиотеку. Эти данные тоже ассоциируются больше с материалами, чем с изотопами. Как всегда, каждый материал начинается с текстового описания оценки и перечня секций (см. Раздел 1.1). Сечения упругого рассеяния, сечения ионизации, торможения и возбуждения задаются в Файле 23, а угловые распределения упругого рассеяния, спектров тормозного излучения и потери энергии, перенос энергии возбуждения атомов и молекул и спектры рассеянных электронов и электронов отдачи определяются в Файле 26.

0.4.8. Данные о релаксации возбужденных атомов (NSUB=6)

Ядро атома может быть приведено к ионизированное состояние различными взаимодействиями, такими как ионизация фотонами или электронами, внутренняя конверсия и прочее. Это секция представляет данные, необходимые для описания перехода ионизированного атома обратно в квазинейтральное состояние. Здесь описываются энергии оболочек, энергии и вероятности переходов и другие параметры, необходимые для расчета спектров X-лучей и электронов в процессе возбуждения атома.

Материал рассматривается как элемент. Как обычно, каждый материал начинается с текстового описания оценки и перечня секций (см. Раздел 1.1). Данные по возбуждению всех оболочек, определенных в фото-атомных и электрон-атомных подбиблиотеках определяются в Файле 28.

0.4.9. Энергетические и угловые распределения продуктов реакций (Файлы 4, 5 и 6)

В формате ENDF-6 существует несколько различных возможностей для описания распределений продуктов реакции по энергии и углам. В большинстве случаев приводится дважды дифференциальное сечение испускаемой частиц в единицах барн/эВ-стерадиан

$$\sigma(\mu, E, E') = \sigma(E) y(E) f(\mu, E, E') / 2\pi \quad (0.1)$$

где μ – косинус угла испускания,
 E – энергия налетающей частицы,
 E' – энергия испускаемой частицы,
 $\sigma(E)$ – сечение реакции,
 $y(E)$ – выход или множественность испускаемой частицы, и
 $f(\mu, E, E')$ – нормированная функция распределения в единицах – плотность вероятности на эВ конечной энергии и на стерадиан.

Для простых реакций двух тел энергия испускаемой частицы может быть получена из кинематики (см. Приложение E); запишем

$$f(\mu, E, E') = f(\mu, E) \delta(E' - \xi) \quad (0.2)$$

где ξ определяется из уравнения (E.5) в Приложении E.

Функция распределения $f(\mu, E)$ может быть задана в секции Файла 4 без соответствующей секции в Файле 5 или в виде секции Файла 6 без соответствующих секций Файлов 4 и 5. Для простых реакция с непрерывным распределением продуктов это распределение иногда задается виде произведения распределений по углу и по энергии:

$$f(\mu, E, E') = f(\mu, E) g(E, E') \quad (0.3)$$

Угловая функция задается в Файле 4, а $g(E, E')$ определяется в Файле 5. Этот формат не позволяет адекватно описать энерго-угловые корреляции и подходит только для

испускания одной частицы. Испускаемые фотоны также могут быть описаны по этой простой схеме, но при этом используются Файлы 14 и 15.

Для более сложных реакций полное описание задается в Файле 6. Этот файл позволяет описать продукты всех реакций и энерго-угловую корреляция испускаемых частиц.

0.5. КЛАССИФИКАЦИЯ РЕАКЦИЙ – МТ

Настоящие параграфы объясняют, как выбирать номера МТ в формате ENDF-6 для фотонных реакций и реакций с частицами. Полный список определений номеров МТ можно найти в Приложении В.

0.5.1. Упругое рассеяние

Упругое рассеяние - это реакция двух тел, которая подчиняется кинематическим уравнениям, приводимым в Приложении Е. Секции обозначаются номером МТ=2 (кроме фото-атомных данных, см. Раздел 23). Для налетающих нейтронов упругое рассеяние определяется из Файла 3 вместе с резонансными вкладами из Файла 2 (если они есть). В Файле 4 приводится угловое распределение рассеянных нейтронов.

Для налетающих заряженных частиц кулоновское рассеяние делает невозможным определение полного сечения, и Файл 3, МТ=2 содержит фиктивное значение, равное 1 или “ядерное+интерференционное” сечение, определяемое граничным углом рассеяния. Дифференциальное сечение для рассеянной частицы вычисляется по параметрам, заданным в Файле 6, МТ=2 (см. Раздел 6.2.6).

0.5.2. Простые реакции с вылетом одной частицы

Многие реакции имеют на выходе только одну частицу и остаточное ядро (и возможно фотоны) . Эти реакции ассоциируются или с определенными дискретными состояниями или с континуумом уровней остаточного ядра; они могут протекать и через набор широких уровней, которые могут рассматриваться как континуум. Обычно используются следующие МТ номера:

Дискретные	Континуум	Дискретные+Континуум	Испускаемые частицы
50-90	91	4	n
600-648	649	103	p
650-698	699	104	d
700-748	749	105	t
750-798	799	106	³ He
800-848	849	107	α

По определению, испускаемой частицей названа более легкая двух образующихся в реакции.

Если в реакции возбуждаются дискретные состояния остаточного ядра, используйте первый столбец. Для удобства номер МТ=50 предусмотрен для основного состояния, МТ=51 – для первого возбужденного состояния, МТ=52 – для второго, и т.д. Однако реакция упругого рассеяния использует номер МТ=2, как указывалось ранее; поэтому не используйте МТ=50 для упругого рассеяния нейтрона и МТ=600 для упругого рассеяния протона и т.д. Для налетающих нейтронов реакции с возбуждением дискретных уровней подчиняются кинематики двух тел (см. Приложение Е), а угловые распределения частиц задаются в Файле 4 или 6 (кроме МТ=2). Испускаемых фотонов с дискретных уровней, то их следует детально описать в Файле 6 или Файле 12 с соответствующими номерами МТ. Для налетающих

заряженных частиц, испускаемые частицы должны быть описаны в Файле 6. Кинематика двух тел может быть использована для узких – дискретных - уровней, но и широкие уровни также могут быть приближенно описаны в терминах той же кинематической энерго-угловой корреляции. Фотоны, образующиеся при реакции с возбуждением дискретных уровней желательнее задавать в соответствующей секции (МТ) Файла 6.

Если в реакции возбуждается континуум уровней ядра-мишени, используйте для номеров МТ второй столбец. Для налетающих нейтронов для совместимости с предыдущими версиями допускается использование Файлов 4 и 5 для, но лучше, все же использовать Файл 6. Когда используются Файлы 4 и 5, фотоны следует задавать в Файле 12, используя те же номера МТ, если возможно. Для более сложных нейтронных реакций или реакций с налетающими заряженными частицами Файл 6 должен использоваться для частиц и фотонов.

“Суммарные” номера МТ используются в Файле 3 для описания сечений суммарных реакций. Использование этих номеров МТ в файлах Файлах 4, 5 и 6 не допускается. Например, оценка нейтронных данных может включать секции MF/MT=3/4, 3/51, 3/91, 4/51 и 6/91. Оценка данных для дейтерия может включать секции 3/103, 3/600 и 6/600 (две секции в файле 3 были бы идентичными). Для нейтронной оценки не содержащей парциальных сечений или распределений частиц, образованных в реакции с возбуждением отдельных уровней (серии 600) будут содержаться суммарные реакции с МТ=103-107; которые являются простыми составляющими сечения поглощения.

В некоторых случаях, трудно определить все фотоны, испускаемые одновременно с определенной частицей, определяющей тип реакции. В таких случаях, эти фотоны могут быть описаны, используя “суммарные” номера МТ в Файле 12 или 13 (для нейтронов) и в Файле 6 (для других частиц).

Ниже приводится таблица с примерами простых одночастичных реакций.

Реакция	МТ
${}^9\text{Be}(\alpha, n_0){}^{12}\text{C}$	50
$\text{Fe}(n, n_c)\text{Fe}$	91
${}^2\text{H}(d, p_0){}^3\text{He}$	600
${}^6\text{Li}(t, d_0){}^7\text{Li}$	650
${}^6\text{Li}(t, d_1){}^7\text{Li}$	651

В этом руководстве реакции записаны в предположении, что все мгновенные фотоны испускаются в момент реакции; Поэтому фотоны не появляются явно в классификации реакций. И поэтому у ${}^7\text{Li}$ в последнем примере не указан не показан символ возбужденности ядра-продукта (*).

0.5.3. Простые многочастичные реакции

Если в результате реакции образуется только две или четыре частицы, остаточное ядро и фотоны остаточное ядро не распадается, то эта реакция будет называться простой много-частичной реакцией. Эти реакции характеризуются следующими значениями МТ

МТ	Испускаемые частицы	МТ	Испускаемые частицы
11	2nd	36	nt2 α
16	2n	37	4n
17	3n	41	2np
22	n α	42	3np
23	n3 α	44	n2p
24	2n α	43	np α
25	3n α	108	2 α
28	np	109	3 α

29	$n2\alpha$	111	2p
30	$2n2\alpha$	112	t2 α
32	nd	113	d2 α
33	nt	114	pd
34	$n^3\text{He}$	115	pt
35	nd2 α	116	d α

При наименовании процессов частицы всегда располагаются в порядке ZA; так (n,np) и (n,pn) суммируются под одним номером MT=28. Кроме того, всегда должна быть остаточная частица. По определению это частица или ядро в конечном состоянии с самым большим значением ZA. Это означает, что реакция $d+t \rightarrow n+\alpha$ должна рассматриваться как реакция ${}^3\text{H}(d,n){}^4\text{He}$ (MT=50), а не как реакция ${}^3\text{H}(d,n\alpha)$ (MT=22).

Приведенный список не является исчерпывающим и новые при необходимости могут добавляться новые номера MT. Однако, некоторые реакции более естественно определять, как “реакции развала” или “комплексные” реакции (см.ниже).

Для совместимости с предыдущими версиями в нейтронных подбиблиотеках допустимо использование Файлов 4 и 5. В этом случае частица, описываемая в Файлах 4 и 5, является первой частицей, приводимой как “испускаемая частица”. При высоких энергиях использование Файла 6 особенно предпочтительнее, поскольку в нем возможно описать энерго-угловые корреляции при предравновесных эффектах и задать более одного вида частиц. Использование Файла 6 также делает возможным представление энергетического распределения для остаточного ядра. Это распределение необходимо для расчета энерговыделения и радиационных повреждений. Если используются Файлы 4 и 5 фотоны следует задавать в Файлах 12 или 13, используя соответствующие номера MT. Аналогично, если используется файл 6 для описания испускаемых частиц, то и фотоны следует задавать в файле 6 с соответствующим номером MT. Часто возникает необходимость в введении секции MT=3 для описания суммы неупругих взаимодействий. В подбиблиотеках для взаимодействия с заряженными частицами для этих реакций должен использоваться Файл 6. Фотоны следует задавать в Файле 6, используя, где возможно, номера MT для парциальных реакций. Если это не удастся, то в Файле 6 можно использовать номер секции неупругих взаимодействий MT=3.

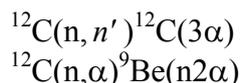
0.5.4. Реакции развала

Ряд важных реакций могут быть описаны двумя шагами: первая или несколько частиц испускаются по типу простых реакций, как было описано выше, затем оставшаяся система также распадается или испускает другие частицы. В классификации ENDF-6, эти оба способа называются реакциями с развала. В ENDF/B-V эти реакции представлялись с использованием специального номера MT или указателя LR. В ENDF/B-VI предпочтение отдавалось описанию их в Файлах 3 и 6. Используются те же номера MT, что и описанные выше номера для простых реакций, протекающих на первом этапе. Сечение приводится в Файле 3 как обычно, и определенное значение LR указывает на то, что ядро-продукт реакции распадается (см. ниже). Выходы, угловые и энерго-угловые распределения для каждой частицы до распада заносятся в Файл 6. Кроме того, выходы и распределения всех продуктов после распада также разрешается заносить в Файл 6. Для фотонных подбиблиотек и подбиблиотек с заряженными частицами фотоны также задаются в Файле 6, но в нейтронных подбиблиотеках они могут быть как в Файле 6, так и в Файлах 12-15. Такой подход обеспечивает полный учет спектров частицы и остаточного ядра в расчетах переноса, тепловыделения и радиационных повреждений. Также это делает возможным полный учет продуктов в расчетах образования газов и в активационных расчетах. В результате, это позволило не вводить длинный список новых номеров MT.

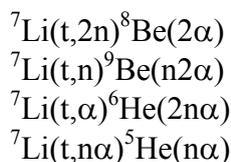
Ниже приводится несколько примеров реакций развала

Реакция	MT
${}^3\text{H}(t,n_0){}^5\text{He}(n\alpha)$	50
${}^6\text{Li}(d,n_3){}^7\text{Be}({}^3\text{He}\alpha)$	53
${}^7\text{Li}(n,n_c){}^7\text{Li}(t\alpha)$	91
${}^7\text{Li}(t,2n){}^8\text{Be}(2\alpha)$	16
${}^7\text{Li}(p,d_1){}^6\text{Li}(d\alpha)$	651
${}^9\text{Be}(\alpha,n_3){}^{12}\text{C}(3\alpha)$	53
${}^{16}\text{O}(n,n_6){}^{16}\text{O}(\alpha){}^{12}\text{C}$	56

По соглашению частицы располагаются по порядку ZA в скобках. Это приводит к неоднозначности в промежуточных состояниях, например

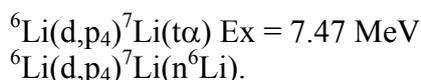


или

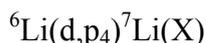


Оценщик должен выбрать один из каналов, распределить реакция по каналам, или использовать представление “сложной реакции”(см. ниже). Следует проявлять осторожность, чтобы избежать повторного учета одной и той же реакции.

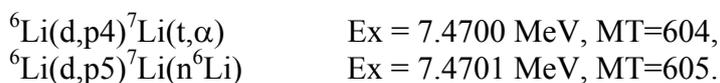
В некоторых случаях, определенное промежуточное состояние может распасться более, чем одним способом, например



Если оба канала приводятся под одним и тем же номером MT, , чтобы упорядочить испускаемые частицы и определить их долевые вклады используется Файл .Система обозначений, используемая для таких типов реакции, следующая



Отметим, что величина Q, рассчитываемая для подобной реакции, определяется не вполне корректно. Другая возможность – это разделение реакции и использование двух последовательных номера MT, например



Фотонных распределения для MT=604 и 605 будут в этом случае идентичными. Величина Q разностей масс для обеих реакций определяется хорошо, но номер уровня уже не соответствует реальному уровня. Выбор между представлением простой много-частичной реакцией и “развальным” вариантом следует основывать на физике процесса. Например, спектр излучения может показывать несколько пиков, образующих гладкую подложку. Если пики могут быть распределены по известным уровням в одной или несколько промежуточных систем, они могут быть выделены и представлены разными номерами MT. Оставшаяся гладкая подложка может быть представлена в виде простой много-частичной реакции.

0.5.5. Указатель LR

Как описано раньше, номера MT простой реакции указывает, какие частицы излучаются. Однако, в сложных развалных реакциях испускаются дополнительные частицы. Идентифицировать эти дополнительные частицы можно или по указателю LR или в Файле 6.

LR	Значение
0	Простая реакция. Определение продукта содержится в номере MT
1	Сложная распада или реакция развала. Определение всех продуктов задается явно в файле 6
22	Из продукта реакции испускается α -частица (плюс остаточное ядро, если есть)
23	Из продукта реакции испускается 3α -частицы (плюс остаточное ядро, если есть)
24	Из продукта реакции испускаются нейтрон и α -частица (плюс остаточное ядро, если есть)
25	Из продукта реакции испускается 2нейтрона и α -частица (плюс остаточное ядро, если есть)
28	Из продукта реакции испускается протон (плюс остаточное ядро, если есть)
29	Из продукта реакции испускается две α -частицы(плюс остаточное ядро, если есть)
30	Из продукта реакции испускается нейтрон и две 2α -частицы (плюс остаточное ядро, если есть)
32	Из продукта реакции испускается дейтон (плюс остаточное ядро, если есть)
33	Из продукта реакции испускается тритон (плюс остаточное ядро, если есть)
34	Из продукта реакции испускается ${}^3\text{He}$ (плюс остаточное ядро, если есть)
35	Из продукта реакции испускается дейтон и две α -частицы (плюс остаточное ядро, если есть)
36	Из продукта реакции испускается тритон и две α -частицы (плюс остаточное ядро, если есть)
39	Происходит внутренняя конверсия фотона
40	Образуется электрон-позитронная пара

Значения LR=22-36 обеспечивают совместимость с версией ENDF/B-V. Ниже приведены пример их использования

Реакция	MT	LR
${}^6\text{Li}(n,n^1){}^6\text{Li}(d\alpha)$	51	32
${}^7\text{Li}(n,n_c){}^7\text{Li}(t\alpha)$	91	33
${}^{10}\text{B}(n,n_{12}){}^{10}\text{B}(d2\alpha)$	62	35
${}^{12}\text{C}(n,n_2){}^{12}\text{C}(3\alpha)$	52	23
${}^{16}\text{O}(n,n_1){}^{16}\text{O}(e^+e^-){}^{16}\text{O}$	51	40
${}^{16}\text{O}(n,n_6){}^{16}\text{O}(\alpha){}^{12}\text{C}$	56	22

Отметим, что идентификация остаточного ядра определяется по MT и LR. В Файле 4 и/или Файле 5 описывается только первая частица; единственная имеющаяся информация по продуктам распада это энергия реакции, которую можно получить из кинематики.

Для новых оценок рекомендуется использовать LR=1 и Файл 6, где могут быть заданы точные выходы и распределения для всех реакций.

0.5.6. Сложные реакции

При высоких энергиях существует много каналов реакций, и трудно представить сечение простыми реакциями. В этих случаях в оценку следует вводить секцию $MT=5^{23}$. Этот комплексный идентификатор реакции определяется как сумма всех реакций, нигде отдельно еще не заданных в оценке. Например, в оценке может использоваться только $MT=2$ и 5 . Тогда секции Файла 6 с $MT=5$ и правильными энерго-зависимыми выходами представили бы нейтронный спектр всех неупругих процессов, весь фотонный спектр и т.д. Немного более детальная оценка может включать $MT=2, 5, 51-66$ и $600-609$. В этом случае $MT=5$ представляло бы все нейтронные континуумы и фотонное излучение. Дискретные уровни задавались бы отдельно для корректного представления детального углового распределения и кинетики двух тех. Например, система обозначений для составной реакции следующая - ${}^6\text{Li}(d,X)$.

0.5.7. Радиационный захват

Радиационный захват определяется $MT=102$. В нейтронных библиотеках единственный продукт – это фотоны, которые представляются в Файле 6 или 12-15. Отметим, что для материалов с сильными резонансами должны использоваться Файл 6 или 12. Для захвата заряженных частиц простой радиационный захват должен быть представлен с использованием Файла 3 и Файла 6. Кроме того, в этом случае за радиационным захватом обычно следует распад на легкие ядра: например $d+t \rightarrow \gamma+n+\alpha$, которая записывается как реакции распада по формату в виде ${}^3\text{H}(d, \gamma){}^5\text{He}(n\alpha)$. Эта реакция записывается в файле 3 с $MT=102$ и специальным указателем распада. В Файле 6 задаются все распределения – фотонное, нейтронное и альфа-частиц.

0.5.8. Деление

Идентификаторы, используемые для деления, повторяют те, которые использовались в предыдущей версии формата ENDF.

MT	Значение	Описание
18	деление	Полное
19	f	Первый шанс деления (деление составного ядра)
20	nf	второй шанс деления (после испускания нейтрона)
21	2nf	Третий шанс деления (после испускания двух нейтронов)
38	3nf	Четвертый шанс деления (после испускания трех нейтронов)
452	$\bar{\nu} t$	полное число нейтронов деления
455	$\bar{\nu} d$	число запаздывающих нейтронов деления
456	$\bar{\nu} p$	число мгновенных нейтронов деления
458		Параметры энерговыделения при делении.

Сечения могут задаваться (Файл 3), как с использованием секции $MT=18$, так и комбинацией секций $MT=19, 20, 21$ и 38 . В последних случаях $MT=18$ также задается для представления суммы парциальных реакций.

²³ В современных оценках сложная реакция с $MT=5$ используется только для описания части процессов выше 20 МэВ. Поскольку в библиотеке РОСФОНД данные представлены только до 20 МэВ, $MT=5$ в ней не используется.

0.5.9. Реакции неупругого взаимодействия с образованием фотонов

Когда возможно, следует использовать один и тот же номер МТ для описания, как испускаемой частицы, так и фотонов. Однако, обычно это возможно только для дискретных фотонов с низколежащих уровней, радиоактивного захвата или для фотонов, испускание которых рассчитывается по ядерными моделями. Любые фотоны, которые не могут быть привязаны к определенному уровню или распределению частиц, должны задаваться в секции суммы неупругих взаимодействий МТ=3 в Файле 6, 12, или 13 (для нейтронов) или в Файле 6 (для других частиц). Как описывалось в Разделе 0.5.2. номера МТ=4, 103,104,105,106 и 107 также могут использоваться для описания суммы реакций с образованием фотонов в Файлах 12 и 13.

0.5.10. Сечения образования важных продуктов реакций

Для сечений образований важных продуктов реакций предлагается использовать специальные данные.

МТ	Значение
201	образование нейтронов
202	образование фотонов
203	образование протонов
204	образование дейтерия
205	образование трития
206	образование ^3He
207	Образование α -частиц

Каждый номер является суммой всех сечений, умноженных на выходы частицы в конечном состоянии. Рассчитанный выход должен включать неявные выходы,определенные указателями LR, или остаточного ядра в добавление к точным выходам из Файла 6. Например, в оценке, состоящей из реакций (n,α) (МТ=107) и $(n,n'3\alpha)$ (МТ=91, LR=23), сечение образования гелия равнялось бы

$$\text{МТ}207 = \text{МТ}107 + 3*\text{МТ}91.$$

Сечение в Файле 3 задается в барнах на частицу (или фотон). Соответствующие распределения могут быть представлены с использованием Файлов 4 и 5, или Файла 6 с выходом частицы 1. Эти номера МТ будут использоваться в Файле 3 в специальных библиотеках образования газов.

0.5.11. Вспомогательные номера МТ

Несколько номеров МТ используются для представления вспомогательных величин помимо сечений. Значения 151, 451, 452, 455, 456, 457, 458 и 459 уже упоминались. В таблице приводятся дополнительные значения

МТ	Значение
251	μ_L , средний косинус упругого рассеивания (лабораторная система). Получается только из основного файла.
252	ξ , средний логарифмический декремент энергии упругого рассеяния. Получается только из основного файла.
253	γ , средний квадрата логарифмического декремента, разделенного на 2 ξ . Получается только из основного файла.
301-450	Параметры энерговыделения - керма (эВ-барн) в реакции, получаютс вычитанием из номера МТ числа 300; например 301 – полное керма, 407 – керма для реакции (n,α) и т.д. Получаются только из основного файла.
851-870	Специальные серии номеров МТ, используемые в ковариационных файлах (МТ=31-40), для задания ковариаций групп реакций, рассматриваемых вместе. См. Раздел 30.

Параметры замедления (MT=251-253) и энерговыделения (MT=301-450) обычно используются только в библиотеках, созданных после обработки основной библиотеки. Полный список номеров реакций MT приводится в Приложении В.

0.5.12. Правила суммирования в ENDF

Ряд типов реакций в ENDF могут быть рассчитаны из других реакций. Правила суммирования этих реакций следующие.

MT	Значение: компоненты
1	Полное сечение (только для нейтронов): 2, 4, 5, 11, 16-18, 22-26, 28-37, 41-42, 44-45, 102-117.
4	Полное сечение неупругого рассеяния по нейтронным уровням: 50-91
18	Полное деления: 19-21, 38
103	Полное сечение реакции (n,p) по уровням ядра-продукта: 600-649
104	Полное сечение реакции (n,d) по уровням ядра-продукта: 650-699
105	Полное сечение реакции (n,t) по уровням ядра-продукта: 700-749
106	Полное сечение реакции (n, ³ He) по уровням ядра-продукта: 750-799
107	Полное сечение реакции (n, α) по уровням ядра-продукта: 800-849

Сечение неупругих взаимодействий (MT=3) используется только для сечений с образованием фотонов. Оно включает следующие MT-номера: 4, 5, 11, 16-18, 22-26, 28-37, 41-42, 44-45, 102-117.

0.6. ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ДАННЫХ

0.6.1. Определения и соглашения

Данные, приводимые во всех секциях, всегда используют один и тот же набор единиц. Их можно объединить следующим образом.

Параметры	Единицы
энергии	Электронвольт эВ)
углы	безразмерные величины косинусов угла
сечения	барн
температура	по шкале Кельвина
масса	в единицах нейтронной массы
угловые распределения	вероятность, отнесенная к единичному изменению косинуса угла рассеяния
энергетические распределения	вероятность, отнесенная к единичному интервалу энергии (электронвольт)
энерго-угловые распределения	вероятность, отнесенная к единичному изменению косинуса и единичному изменению энергии
период полураспада	секунды

Первая запись каждого сечения содержит номер ZA, который определяет отдельный материал. Идентификаторы ZA также применяются для определения частиц и продуктов реакции. В большинстве случаев ZA определяется так

$$ZA = 1000.0 * Z + A,$$

где Z – атомный номер, A – массовое число материала. Если материал – это элемент, состоящий из двух и более естественных изотопов с соответствующим составом, то A принимается равным нулю. Для смесей, составов, сплавов и молекул определены специальные номера ZA между 1 и 99 (см. Приложение С).

Материал (ядро-мишень), налетающая частица или продукт реакции также характеризуются величиной, пропорциональной их массе относительно массы нейтрона. Обычно, эти величины обозначаются AWR, AWI или AWP для материала, частицы и продукта, соответственно. Например, AWR определяется отношением массы ядра-мишени к массе нейтрона²⁴. Другими словами – все массы выражаются в единицах массы нейтрона. Для материала, который представляет собой смесь изотопов, используется усредненная по весовому содержанию масса.

0.6.1.0. Атомные и ядерные массы

Величины масс для материалов (AWR для всех Z) и тяжелых продуктов реакций (AWP для $Z > 2$) следует выражать в атомных единицах, т.е. должна быть включена масса электронов. Величины масс для налетающих частиц (AWI) и легких продуктов реакции ($AWP \leq 2$) следует выражать в ядерных единицах масс. Для нейтронов это отношение равно 1.00000. Для заряженных частиц смотри Приложение H в ENDF/B-VI.

0.6.2. 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, специальный закон интерполяции Гамова для сечений

²⁴ См. в Приложении H массу нейтрона
April 2001

заряженных частиц, простая (прямоугольная) декартова интерполяция для двумерных функций и двойные нелинейные схемы для двумерных распределений.

0.6.2.1. 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 Рис.0.1 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,
 $NBT(m)$ – величина узла в последовательности n -ых значений, разделяющих границы m - и $m+1$ интервалов интерполяции.

В таблице 0.3 приведены разрешенные схемы интерполяции.

Таблица 0.3 Определение типов интерполяций

INT	Схема 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)
6	специальный одномерный закон интерполяции, используемый только для заряженных частиц
11-15	Метод соответствующих точек (следует за законами интерполяции 1-5)
21-25	Интерполяция на единичной базе (следует за законами интерполяции 1-5)

Интерполяционная программа при $INT=1$ (константа) предполагает, что функция постоянна и равна значению, заданному на нижней границе интервала.

Заметим, что там, где функция неоднородна (например, в одном интервале используются резонансные параметры для определения сечения), значения x повторяются и пара (x, y) задается для каждого их двух значений в области разрыва (см. Рис.0.1).

Одномерный закон интерполяции $INT=6$ задается для сечений при взаимодействии с заряженными частицами и основывается на упрощенных представлениях кулоновской проницаемости для экзотермических реакций при низких энергиях и для эндотермических – около порога. Энергетическая зависимость определяется выражением

$$\sigma = \frac{A}{B} \exp \left[- \frac{B}{\sqrt{E - T}} \right] \quad (0.4)$$

где $T=0$ для экзотермических реакций ($Q>0$) и T – кинетический порог для эндотермических реакций ($Q\leq 0$). Заметим, что эта формула задает вогнутую энергетическую зависимость около $E=T$, что совершенно отлично от поведения нейтронных сечений.

Эта формула может быть преобразована в схему интерполяции для двух точек

$$B = \frac{\ln \frac{\sigma_2 E_2}{\sigma_1 E_1}}{\frac{1}{\sqrt{E_1 - T}} - \frac{1}{\sqrt{E_2 - T}}} \quad (0.5)$$

и

$$A = \exp \left[\frac{B}{\sqrt{E_1 - T}} \right] \sigma_1 E_1 \quad (0.6)$$

где E_1, σ_1 и E_2, σ_2 – две последовательные точки в табулированном сечении.

Этот интерполяционный метод следует использовать для E близких к T . При высоких энергиях будет проявляться не экспоненциальное поведение и более подходящей является в этом случае линейно-линейная интерполяция.

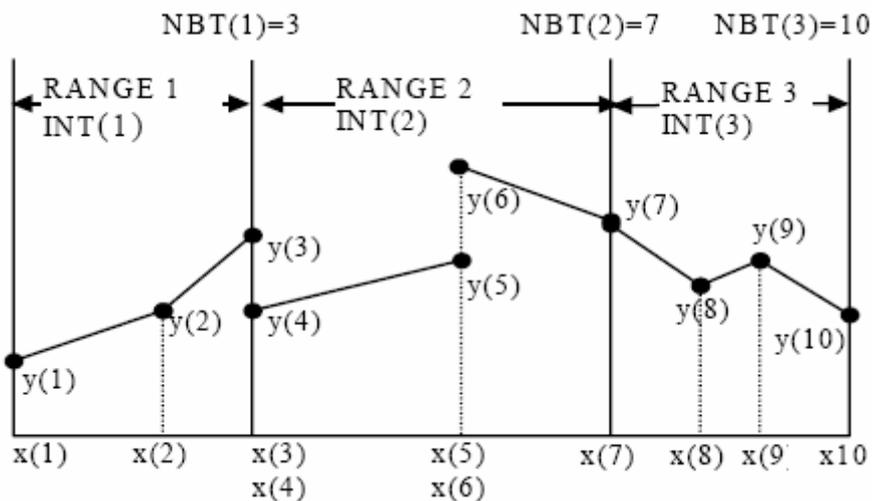


Рис.0.1. Интерполяция табулированной одномерной функции для случая $NP=10, NR=3$.

0.6.2.2. Двумерные интерполяционные схемы.

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

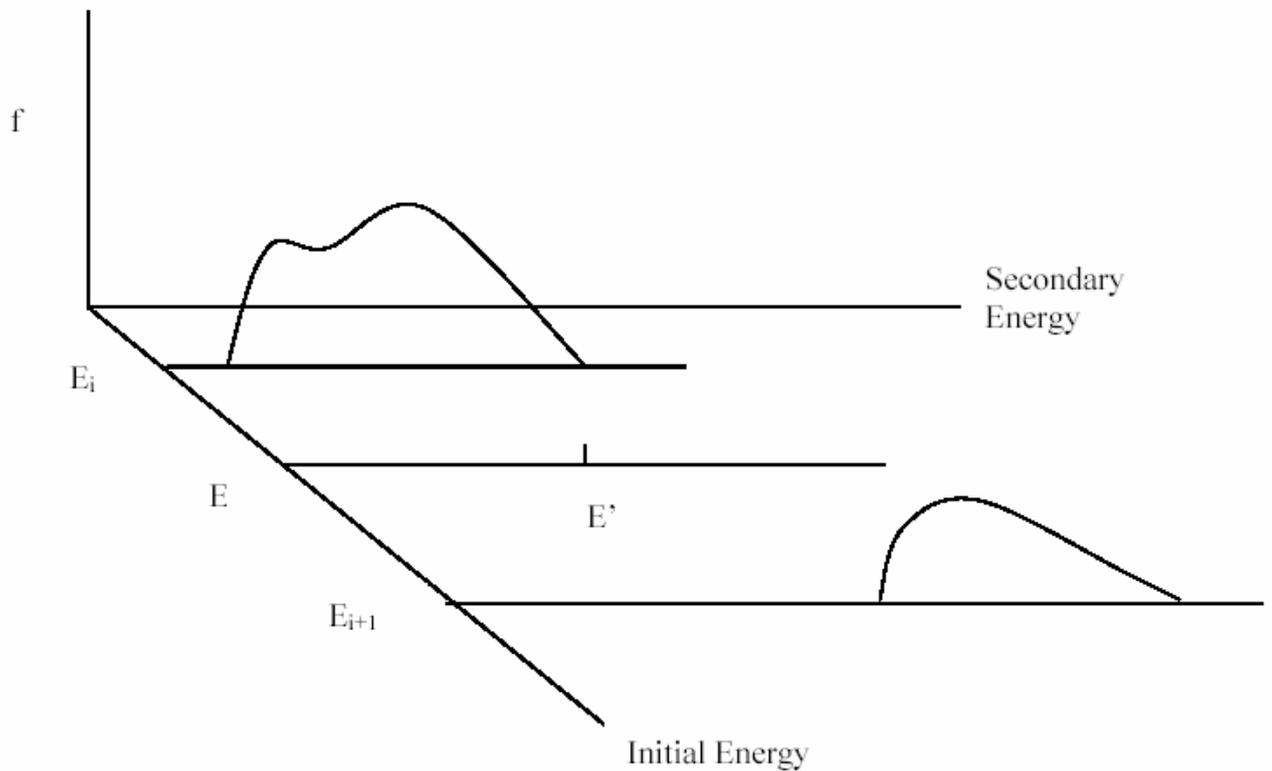


Рис. 0.2. Интерполяция двумерных распределений.

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.

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.

Для интерполяции этого 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 $f(E')$ по E' при каждом E производится как для обычной функции одной переменной. Эта интерполяция определяет одномерную функцию $f(E, E')$ для любого заданного E' при каждом из заданных значений $E = E_i$. Далее эта функция должна интерполироваться по начальной энергии по заданному для нее закону интерполяции при заданном значении E' . Например, если для интерполяции по каждой из переменных задан линейный закон интерполяции, то

$$f(E, E') = f(E_i, E') + \frac{E - E_i}{E_{i+1} - E_i} [f(E_{i+1}, E') - f(E_i, E')], \quad (0.4a)$$

где

$$f(E_i, E') = f(E_i, E'_k) + \frac{E' - E'_k}{E'_{k+1} - E'_k} [f(E_i, E'_{k+1}) - f(E_i, E'_k)] \quad (0.4b)$$

Если $\max E'(E_i) \neq \max E'(E_{i+1})$ или (и) $\min E'(E_i) \neq \min E'(E_{i+1})$ возникает проблема определения интерполируемой функции при тех значениях E' , при которых она не определена для одной из энергий. Обычно процедура интерполяции полагает неопределенное значение равным нулю, что ведет к погрешностям. Поэтому требуются более совершенные интерполяционные схемы, которые гладко, без образования изломов, часто наблюдаемых при простой декартовой интерполяции, соединит соседние на сетке E распределения, определенные для разных интервалов E' .

Первая недекартовая схема интерполяции – это интерполяция на единичной базе. Спектры $f(E')$ при E_i и E_{i+1} преобразуются к единому масштабу, путем замены конечной энергии переменной x , определенной следующим образом:

$$x \equiv \frac{E' - E'_i(1)}{E'_i(N) - E'_i(1)} \quad (0.5)$$

Здесь $E'_i(1)$ – энергия второй переменной в первой точке, при которой $f(E, E')$ задано при $E=E_i$; $E'_i(N)$ – в последней такой точке. Точно так же определяется переменная x для распределения, заданного при $E=E_{i+1}$. В этих переменных проводится простая декартова интерполяция по x и по E . Значения границы диапазона изменения E' в интерполированном распределении интерполируются между значениями $E'_i(1)$ и $E'_{i+1}(1)$ и между значениями $E'_i(N)$ и $E'_{i+1}(N)$ по тому закону, который задан для начальной энергии. Если этот закон – линейный (INT=2), то границы диапазона определяться как

$$E'_{low}(E) = E'_i(1) + \frac{E - E_i}{E_{i+1} - E_i} [E'_{i+1}(1) - E'_i(1)] \quad (0.7)$$

$$E'_{high}(E) = E'_i(N) + \frac{E - E_i}{E_{i+1} - E_i} [E'_{i+1}(M) - E'_i(N)] \quad (0.8)$$

Здесь M – номер последней точки, при которой задано распределение $f(E, E')$ при $E=E'_i$.

Особое внимание должно обращать на нормировку, т.е. на соблюдение равенства

$$\int_{E'_{low}}^{E'_{high}} f(E') dE' = \int_0^1 g(x) dx \quad (0.6)$$

Что требует соблюдения равенства $f(E') dE' = g(x) dx$ или $g(x) = f(E') \left| \frac{dE'}{dx} \right|$.

Последнее выражение представляет собой якобиан преобразования, конкретное выражение которого зависит от закона интерполяции

Заметим, что если границы диапазонов изменения E' при соседних значениях начальной энергии совпадают, интерполяция на единичной базе становится эквивалентной простой декартовой интерполяции. Метод интерполяции на единичной базе определяется значениями INT=21-25, где соответственно преобразованные величины будут интерполироваться по законам интерполяции INT=1-5.

Другая недекартовая схема интерполяции – названа методом соответствующих энергий. Она позволяет избежать проблемы, неявной зависимости якобиана преобразования x в E' от выбора закона интерполяции по начальной энергии, с помощью которого определяются границы области изменения E' . Пусть заданы распределения $f(E_i, E'_{ik})$ и $f(E_j, E'_{jk})$ в двух соседних энергиях в *одинаковом* числе точек по конечной энергии (при этом энергии E'_{ik} и E'_{jk} , вообще говоря, различны). Интерполяция по начальной энергии

происходит по линии, соединяющей k-е точки. Конечно, если сетки по E' одинаковы для E_i и E_j , то этот метод абсолютно эквивалентен простой декартовой интерполяции.

Метод соответствующих точек определяется законами интерполяции INT=11-15, при которых интерполяция между точками E'_{ik} и E'_{jk} происходит по законам интерполяции INT=1-5.

0.7. ОБЩЕЕ ОПИСАНИЕ ФОРМАТОВ ДАННЫХ

“Лента” ENDF строится из небольшого количества основных структур, называемых “записями”, названных записями типа TPID, TEND, CONT, TAB1 и т.д. Эти записи обычно состоят из одного или более 80-символьных фортранных строк. Возможно использование бинарного варианта, где каждая из основных структур приводится как логическая фортран-строка. Преимущество использования таких базовых ENDF записей состоит в том, что они могут читаться и записываться небольшими библиотеками универсальных подпрограмм.

0.7.1. Структура ленты данных ENDF

Структура ленты данных ENDF (содержащей обычно один или несколько наборов оцененных данных) изображена на Рис.0.2. Лента начинается со специальной записи- строки, которая идентифицирует ленту. Лента содержит данные для некоторого набора материалов, характеризуемых идентификаторами MAT. Данные, приведенные для материала, делятся на файлы, и каждый файл (с номером MF) включает данные определенного типа. Файл состоит из секций, каждая секция содержит данные для определенной реакции (под номером MT). И наконец, секция состоит из определенного числа строк, сгруппированных в записи, вид которых будет определен ниже. Каждая строка на ленте содержит три идентификационных номера: MAT, MF и MT. Эти номера всегда расположены в возрастающем порядке и в следующей последовательности MAT, MF и MT. Конец секции, файла и материала обозначается специальными записями SEND, FEND и MEND, соответственно.

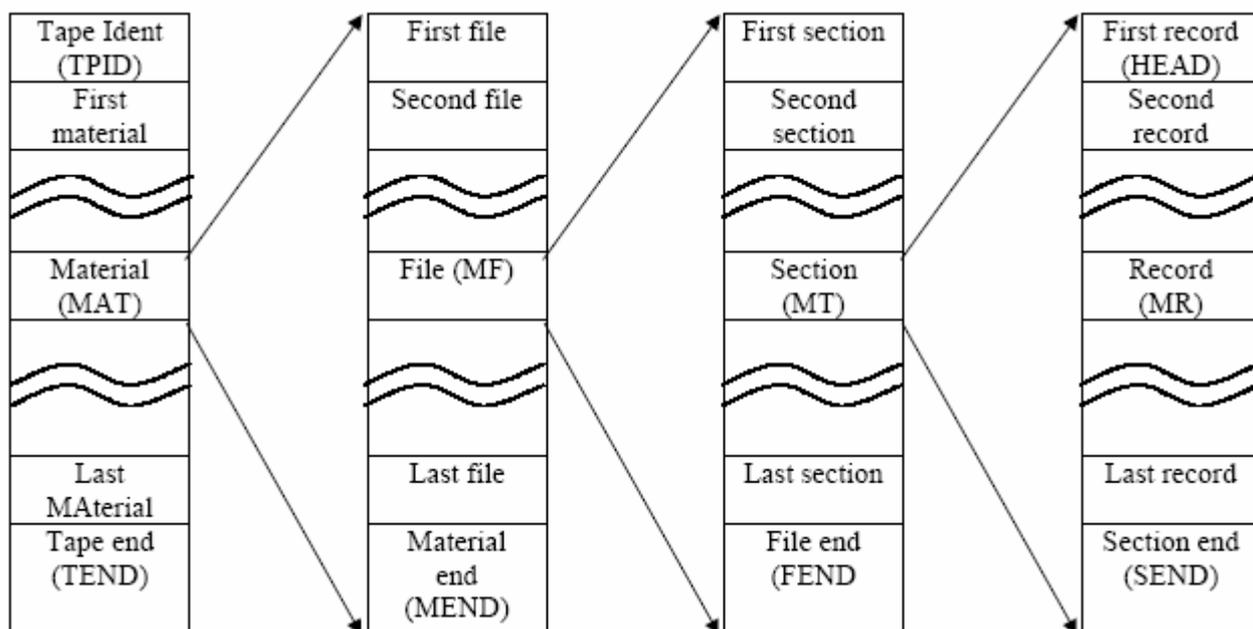


Рис.2. Структура данных на ленте ENDF

0.7.2. Система обозначений

Была сделана попытка введения внутренне согласованных обозначений идентификаторов по следующим правилам

- a) Идентификаторы, названия которых начинающиеся с букв I, J, K, L, M и N, являются целыми (типа integer). Все остальные обозначения и символы относятся к числам с плавающей запятой (типа real)
- b) Буква I или обозначения, начинающиеся с нее, указывает на вид интерполяции/
- c) Одиночные буквы J, K, L, M и N являются индексами.
- d) Обозначение, начинающееся с буквы M является контрольным числом. Например, MAT, MF и MT.
- e) Обозначение, начинающееся с буквы N является признаком.

Идентификаторы, названия которых начинаются с буквы N, используются для счета индексов.

Все числа задаются в поле с 11 позициями. При символьном формате числа с плавающей запятой следует вводить следующим образом:

$\pm 1.234567 \pm n$

$\pm 1.23456 \pm nn$, где $nn \leq 38$. FORTRAN

Оба этих формата могут быть прочитаны по формату FORTRAN E11.0. Однако, для вывода чисел в таком формате нужно использовать специальные подпрограммы, доступные, в частности, в Ядерном Центре NNDC. Если оценки созданы с использованием чисел в формате IPE11.5 (то есть $1.2345E \pm nn$), то они будут стандартизированы в форму с 6 или 7 цифрами, но реальная точность останется на уровне 5 цифр.

0.7.3. Типы записей

Все записи на ленте ENDF – это записи одного из 5-ти типов, обозначаемых TEXT, CONT, LIST, TAB1, TAB2 и INTG. Запись CONT имеет шесть специальных видов DIR, HEAD, SEND, FEND, MEND и TEND. Запись TEXT имеет специальный случай TPID. Каждая запись содержит контрольные номера MAT, MF и MT в соответствующем порядке. Описание других полей в каждой записи будет зависеть от ее использования и описано ниже.

0.7.4. Записи TEXT

Эта запись используется как для первой строки на ленте ENDF(TPID), так и для комментариев в Файле 1. Она имеет следующий формат:

[MAT, MF, MT/ HL] TEXT

где HL – это текстовая информация из 66 символов. Запись TEXT может читаться следующими FORTRAN – операторами:

```
READ (LIB, 10) C1, C2, L1, L2, N1, N2, MAT, MF, MT, NS
```

```
10 FORMAT (2E11.0, 4I11, I4, I2, I3, I5) .
```

где NS – номер строки.²⁵ Для обычной записи TEXT MF=1 и MT=451. В первой TPID записи значения MAT – номер NTAPE, значения MF и MT равны 0.

0.7.5. Контрольные записи.

0.7.5.1. Записи CONT

Самой простой из записей является контрольная запись CONT. По соглашению запись CONT имеет вид:

²⁵ При заданных значениях MAT/MF/MT строки пронумерованы по порядку
April 2001

```
[MAT, MF, MT/ C1, C2, L1, L2, N1, N2] CONT
```

Запись CONT может читаться следующими FORTRAN – операторами:

```
READ (LIB, 10) C1, C2, L1, L2, N1, N2, MAT, MF, MT, NS  
10 FORMAT (2E11.0, 4I11, I4, I2, I3, I5) .
```

Фактические параметры, хранящиеся в полях C1, C2, L1, L2, N1 и N2, будут зависеть от применения записи CONT.

0.7.5.2. Записи HEAD

Запись HEAD – первая запись в секции и имеет тот же формат, что и запись CONT, кроме полей C1 и C2, которые всегда содержат значения ZA и AWR соответственно.

0.7.5.3. Записи END

Записи SEND, FEND, MEND и TEND используют только три контрольных целых числа, которые указывают на конец секции, файла, материала и ленты соответственно. В бинарном виде все шесть стандартных поля равны 0. В символьном виде они также равны 0 и имеют вид:²⁶

```
[MAT, MF, 99999/ 0.0, 0.0, 0, 0, 0, 0] SEND14  
[MAT, 0, 0/ 0.0, 0.0, 0, 0, 0, 0] FEND  
[ 0, 0, 0/ 0.0, 0.0, 0, 0, 0, 0] MEND  
[ -1, 0, 0/ 0.0, 0.0, 0, 0, 0, 0] TEND
```

Нулевые значения могут быть заменены пробелами

0.7.5.3. Записи DIR

Более детально записи DIR описаны в Разделе 1.1.1. Единственное различие между записями DIR и CONT заключается в том, что в первых двух полях записи DIR стоят пробелы в текстовом виде.

0.7.6. Записи LIST

Этот тип записей используется для представления последовательности чисел B1, B2, B3 и т.д. Значения задаются в массиве B(n) длиной NPL. По соглашению запись LIST имеет вид:

```
[MAT, MF, MT/ C1, C2, L1, L2, NPL, N2/ Bn] LIST
```

Запись LIST может читаться следующими FORTRAN – операторами:

```
READ (LIB, 10) C1, C2, L1, L2, NPL, N2, MAT, MF, MT, NS  
10 FORMAT (2E11.0, 4I11, I4, I2, I3, I5)  
READ (LIB, 20) (B(N), N=1, NPL)  
20 FORMAT (6E11.0)
```

Максимальное значение NPL зависит от назначения записи (см. Приложение G). Таким образом, запись типа LIST состоит из многих строк.

0.7.7. Записи TAB1

²⁶ Запись SEND имеет порядковый номер 99999.

Эти записи используются для табулирования одномерных функций, типа $y(x)$. Для задания данных, определенных как одномерная табулированная функция, для каждого интервала NR с NP количеством пар $x(n)$ и $y(n)$ необходимо определение интерполяционных таблиц NBT(N) и INT(N). Представление имеет вид

```
[MAT,MF,MT/ C1, C2, L1, L2, NR, NP/xint/y(x)]TAB1
```

Запись TAB1 может быть прочитана следующими FORTRAN – операторами:

```
READ (LIB, 10) C1, C2, L1, L2, NR, NP, MAT, MF, MT, NS
10 FORMAT (2E11.0, 4I11, I4, I2, I3, I5)
READ (LIB, 20) (NBT(N), INT(N), N=1, NR)
20 FORMAT (6I11)
READ (LIB, 30) (X(N), Y(N), N=1, NP)
30 FORMAT (6E11.0)
```

Максимальные значения NR и NP зависят от назначения записи (см. Приложение G). Эти максимальные значения должны точно соблюдаться оценщиками для защиты от ошибок в обрабатываемых программах, которые используют обычный бинарный формат. Однако, в программно сгенерированных библиотеках, в которых резонансные параметры преобразованы в детальные табулированные сечения по энергии, эти максимальные значения могут быть изменены. Эти сгенерированные библиотеки могут быть записаны и в текстовом виде и в нестандартном структурно-бинарном виде.

0.7.8. Записи TAB2

Последняя запись – это запись TAB2, которая используется для табулирования двумерных функций типа $y(x,z)$. Она определяет, сколько нужно задать величин z и как провести интерполяцию между последовательными значениями z . Табличные значения $y_i(x)$ при каждом значении z задаются записями TAB1 или LIST, идущими за записью TAB2 с соответствующим значением z в поле C2. Запись TAB2 имеет вид

```
[MAT,MF,MT/ C1, C2, L1, L2, NR, NZ/ Zint]TAB2,
```

Запись TAB2 может быть прочитана следующими FORTRAN – операторами:

```
READ (LIB, 10) C1, C2, L1, L2, NR, NZ, MAT, MF, MT, NS
10 FORMAT (2E11.0, 4I11, I4, I2, I3, I5)
READ (LIB, 20) (NBT(N), INT(N), N=1, NR)
20 FORMAT (6I11)
```

Например, запись TAB2 используется для представления углового распределения в Файле 4. В этом случае запись TAB2 определяет число энергий налетающего нейтрона, в которых задается угловое распределение. Каждое распределение – это запись TAB1 или LIST.

0.7.9. Записи INTG

Записи INTG (сокращенное INTeGer) используются в файлах, содержащих коэффициенты корреляции погрешностей, которые удобно представить в целочисленной форме.

Сокращенная форма записи INTG имеет вид:

```
[MAT,MF,MT/ I I, J J, KIJ] INTG.
```

Здесь I I и J J – указатели положения массива KIJ, который представляет собой массив из 18 целых чисел.

Запись INTG может быть прочитана следующими FORTRAN-операторами:

```
DIMENSION KIJ(18)
READ (LIB, 10) I I, J J, KIJ, MAT, MF, MT, NS
10 FORMAT(2I5, 1X, 18I3, 1X, I4, I2, I3, I5)
```

Детально об использовании этого формата говорится в описании Файла MF=32 при LCOMP=2.

0.8. Документы по ENDF

1. **BNL 8381**, ENDF - *Evaluated Nuclear Data File Description and Specifications*, January 1965, H.C. Honeck.
2. **BNL 50066 (ENDF 102)**, ENDF/B - *Specifications for an Evaluated Nuclear Data File for Reactor Applications*, May 1966, H.C. Honeck. Revised July 1967 by S. Pearlstein.
3. **BNL 50274 (ENDF 102)**, Vol. I - *Data Formats and Procedures for the ENDF Neutron Cross Section Library*, October 1970, M.K. Drake, Editor.
4. **LA 4549 (ENDF 102)**, Vol. II - *ENDF Formats and Procedures for Photon Production and Interaction Data*, October 1970, D.J. Dudziak.
5. **BNL-NCS-50496 (ENDF 102)**, *ENDF102 Data Formats and Procedures for the Evaluated Nuclear Data File, ENDF*, October 1975, Revised by D. Garber, C. Dunford, and S. Pearlstein.
6. **ORNL/TM-5938 (ENDF-249)**, *The Data Covariance Files for ENDF/B-V*, July 1977, F. Perey.
7. **BNL-NCS-50496 (ENDF 102)**, Second Edition, *ENDF-102 Data Formats and Procedures for the Evaluated Nuclear Data File, ENDF/B-V*, October 1979, Edited by R. Kinsey. Revised by B.A. Magurno, November 1983.
8. **BNL-NCS-28949 (Supplement ENDF 102)**, Second Edition, *Supplement to the ENDF/B-V Formats and Procedures Manual for Using ENDF/B-IV Data*, November 1980, S. Pearlstein.
9. **BNL-NCS-44945 (ENDF-102)**, Revision 10/91, *ENDF-102 Data Formats and Procedures for the Evaluated Nuclear Data File ENDF-6*, October 1991, Edited by P. F. Rose and C. L. Dunford.

1.ФАЙЛ 1. ОБЩАЯ ИНФОРМАЦИЯ

Этот файл является первой частью любого набора оцененных данных для материала. Каждый материал должен содержать Файл 1, который, в свою очередь, должен содержать, по крайней мере, одну секцию. Файл 1 содержит краткую текстовую информацию о том, как оценивались данные, и содержание, в котором перечисляются все файлы и секции, содержащие оцененные данные для материала. В случае с делящимися материалами Файл 1 может включать четыре дополнительных секции с информацией о выходах продуктов деления и энерговыделении. Каждой секции присваивается номер МТ (см. ниже) и секции располагаются в порядке увеличения этих номеров. Каждая секция всегда начинается с записи HEND и заканчивается записью SEND. В конце Файла 1 (так и в конце всех других файлов) заносится запись FEND. Детально эти типы записей определены в параграфе 0.7.

1.1.ОБЩЕЕ ОПИСАНИЕ ФАЙЛА И СОДЕРЖАНИЕ (МТ=451)

Эта секция всегда является первой для любого материала, и содержит две части:

- (1) краткая информация об оценке данных и
- (2) содержание набора данных для материала.

В первой части содержится краткое описание наборов оцененных данных. Эта информация должна включать ссылки на основные эксперименты, использованные при получении оцененных данных, описание расчетных моделей, четкое описание всех номеров МТ для определения реакций, историю оценки и ссылки. Описательная информация приводится в виде набора записей, каждая запись – длиной не более 66 символов.

Первые три записи описательной части содержат стандартную заголовочную информацию о материале, о налетающей частице, об авторах оценки и об ее модификации.

В этих записях секции МТ=451 Файла 1 MF=1 определяются следующие величины:

ZA, AWR	идентификатор зарядового и массового чисел и массы ядра-мишени.
LRP	указатель наличия данных о параметрах разрешенных или неразрешенных резонансов в Файле 2: LRP=-1, Файл 2 отсутствует (не допустимо для нейтронных данных); LRP= 0, Файл 2 присутствует, но содержит лишь эффективный радиус рассеяния; резонансные параметры не заданы; LRP= 1, в Файле 2 заданы параметры разрешенных и/или неразрешенных резонансов и сечения, рассчитываемые по ним, должны быть добавлены ¹ к нерезонансной подложке, определенной из Файла 3; LRP=2, параметры задаются в Файле 2, но сечения, полученные по ним, не добавляются к сечениям из Файла 3. Опция LRP=2 может использоваться только для вторичных библиотек, сгенерированных из основной.
LFI	указатель делящегося материала: LFI=0, материал – неделящийся; LFI=1, материал – делящийся.
NLIB	номер библиотеки: значение NLIB= 0 – для библиотек ENDF/B.

¹ В области неразрешенных резонансов допустима версия, когда на основе данных Файла 2 рассчитываются лишь факторы резонансной самоэкранировки, на которые затем должны умножаться сечения, приведенные в Файле 3.

Другие значения идентификатора обозначают различные другие библиотеки в формате ENDF; в частности, NLIB=10 – библиотека РОСФОНД.

NMOD	номер модификации материала: NMOD =0, оценка перенесена из библиотеки предыдущей версии; NMOD =1, новая или исправленная оценка для библиотеки текущей версии; NMOD \geq 2 последующие модификации.
ELIS STA	энергия возбуждения ядра-мишени, равная 0.0 для основного состояния. признак стабильности ядра-мишени: STA =0 ядро стабильное; STA =1 ядро нестабильное. Если ядро – нестабильное, то в подбиблиотеке распадных данных (NSUB=4) должны приводиться характеристики радиоактивного распада ² .
LIS	номер возбужденного состояния ядра-мишени. Для основного состояния полагается LIS=0.
LISO	номер изомерного состояния. Для основного состояния LISO =0 и т.д. LIS – больше или равен LISO.
NFOR	Формат библиотеки. NFOR=6 – для всех библиотек, подготовленных в соответствии с определениями, данными в этом руководстве.
AWI	масса налетающей частицы в единицах нейтронной массы. AWI=0.0 для взаимодействия с фотонами и для распадных данных. Для библиотеки нейтронных данных AWI=1.0.
EMAX LREL NSUB	максимальная энергия налетающих частиц, рассматриваемая в оценке. номер очередного пересмотра библиотеки ³ . номер подбиблиотеки. См. раздел 0.4 для определения номера подбиблиотек.
NVER	номер версии библиотеки; например, NVER=6 – для библиотеки ENDF/B-VI.
TEMP	Температура(в градусах Кельвина) для сечений, сгенерированных с учетом Доплеровского уширения резонансов. Используется только для вторичных библиотек. Для основной оценки следует использовать TEMP=0.0.
LDRV	Указатель вторичной библиотеки, использующей те же идентификаторы MAT, NMOD, NSUB: LDRV=0, исходная библиотека; LDRV \geq 1 специальная вторичная библиотека (например, дозиметрическая библиотека с использованием секций MT, взятых из исходной библиотеки).
NWD	число текстовых записей, используемых для описания оцененных данных для материала. Каждая запись может содержать не более 60 символов.
NXC	число записей в разделе «Содержание». Каждая секция MT имеет соответствующую строку в разделе «Содержание» с указанием соответствующих значений MF, MT, NC и MOD.

² В библиотеке РОСФОНД подбиблиотека распадных данных в настоящее время отсутствует.

³ Пересмотром называется включение в библиотеку обновленных данных для одного или нескольких материалов при сохранении оцененных данных для важнейших материалов.

	Число NC – это количество записей в секции (не включая запись SEND), а MOD – номер модификации (см. ниже).
ZSYNAM	Символьное представление зарядового числа, химического символа, атомного номера и метастабильности материала в форме Z-cc-AM: для Z отводиться 3 позиции с 1 по 3, в 4-ой – дефис, в 5 и 6-ой позиции символьное обозначение химического элемента, в 7-ой – дефис, с 8 по 10 позиции заносится атомная масса A или пробелы, в 11-ой позиции идентификатор метастабильности M, например, 94-PU-239, 1-H – 2 и т.д.
ALAB	обозначение лаборатории, в которой составлена оценка (с 12 по 22 позицию)
EDATE	Дата оценки, приводимой в виде “EVAL-DEC74” с 23 по 32 позиции.
AUTH	позиции 34-66 – авторы оценки,
REF	позиции 2-22– исходная ссылка на оценку, начиная с позиции 2.
DDATE	позиции 23-32 – дата распространения в виде “EVAL-DEC74”.
RDATE	позиции 34-43 - дата и номер последней ревизии оценки в виде “REV2-DEC74”, где 2 – номер ревизии IREV; параметр IREV может быть запрошен при обращении к библиотеке.
ENDATE	для ENDF/B - дата утверждения данных National Nuclear Data Committee в виде ууууmmdd в 56-63 позициях. Для РОСФОНДа – дата выпуска из ФЭИ.
HSUB	Идентификатор библиотеки, содержащий следующие три записи. Первая запись начинается с 4-х тире в 1-й колонке, за которыми следуют тип библиотеки (NLIB) и версия (NEVER). Например, за ”----ENDF/B-VI” следует слово MATERIAL и с 23- позиции номер материала в виде XXXX, и REVISION 2 (начиная с 45-ой позиции, если требуется), где 2 – номер ревизии IREV. Вторая запись включает пять тире, начинающихся с 1 позиции и следующих перед идентификатором библиотеки(см.Таблицу 0.1). Например, “-----DECAY DATA,” “-----PHOTON-ATOMIC INTERACTION DATA,” или “-----INCIDENT NEUTRON DATA.” Третья запись содержит шесть тире с 1-ой позиции, за которыми идет слово ENDF-6, где 6 – это тип формата библиотеки(NFOR). Замечание: три записи HSUB могут быть сформированы сервисной программой.
MF _n	номер MF для n-ого файла.
MT _n	номер MT для n-ой реакции.
NC _n	количество записей в n-ой секции. Эта величина не включает запись SEND.
MOD _n	идентификатор модификации для n-ого набора. Величина MOD _n равняется NMOD, если соответствующая секция была изменена в этой версии. MOD _n должен всегда быть меньше или равен NMOD.

1.1.1. Форматы

Секция MT=451 имеет следующую структуру:

```
[MAT, 1, 451/   ZA,   AWR,   LRP,   LFI, NLIB, NMOD] HEAD
[MAT, 1, 451/  ELIS,  STA,   LIS,   LISO,   0, NFOR] CONT
[MAT, 1, 451/  AWI,   EMAX,  LREL,   0, NSUB, NVER] CONT
[MAT, 1, 451/  TEMP,  0.0,  LDRV,   0,  NWD,  NXC] CONT
[MAT, 1, 451/ ZSYMM,  ALAB,  EDATE,  AUTH   ] TEXT
[MAT, 1, 451/  REF,  DDATE,  RDATE,  ENDATE ] TEXT
[MAT, 1, 451/  HSUB   ] TEXT
```

далее идут NWD текстовых записей. За ними следует раздел «Содержание»:

```
-----
[MAT, 1, 451/ blank, blank, MF1,   MT1,  NC1,  MOD1] CONT
[MAT, 1, 451/ blank, blank, MF2,   MT2,  NC2,  MOD2] CONT
-----
```

```
-----
[MAT, 1, 451/ blank, blank, MFNXC, MTNXC, NCNXC, MODNXC] CONT
[MAT, 1, 0/   0.0,  0.0,   0,     0,     0,     0] SEND
-----
```

1.1.2. Процедуры

Заметим, параметры NLIB, NEVER, NSUB, MAT, NMOD, LDRV и иногда TEMP определяют уникальный набор “ключей”, которые в системе ENDF задают определенную оценку или “материал”. Эти ключи могут быть использованы, если необходимо, при обращении к библиотеке с помощью формализованной системы управления базами данных.

Флаг LRP указывает, следует ли искать в Файле 2 (резонансные параметры) данные о параметрах разрешенных и/или неразрешенных резонансов и как эти данные могут быть использованы совместно с Файлом 3 для поточечного расчета сечений. В библиотеке нейтронных данных Файл 2 должен содержаться для каждого материала. Если LRP=0, то файл включает только радиус рассеяния, который уже учтен в сечениях Файла 3. Если LRP=1, то Файл 2 содержит параметры разрешенных и/или неразрешенных резонансов. Сечения или факторы самоэкранировки, рассчитанные по этим параметрам, объединяются с сечениями Файла 3 для получения правильных поточечных сечений. Для других подбиблиотек (распадные данные, взаимодействие с фотонами, заряженными частицами, выходы продуктов деления) Файл 2 может быть опущен (используйте LRP=-1). Для восстановления сечений в резонансной области по резонансным параметрам существует целый ряд программ, которые выдают результаты в формате ENDF. Такая программа может установить LRP=2 и скопировать исходный Файл 2 в выходной файл ENDF. Другие обрабатывающие программы, использующие этот файл, будут знать, что сечение уже восстановлено по резонансным параметрам, однако программы будет иметь доступ к ним, если это необходимо. Опция LRP=2 не разрешена в исходных оценках.

Флаг LFI указывает, что материал - делящийся. В этом случае в Файле 1 должна быть задана секция MT=452, определяющая полное число нейтронов деления, $\nu(E)$. Могут быть также заданы секция MT=455, определяющая количество запаздывающих нейтронов деления, и секция MT=456, определяющая мгновенное число нейтронов деления, секция MT=458, содержащая информацию о составляющих энерговыделения при делении.

Флаг LDRV указывает, что данные для рассматриваемого материала были каким-то образом получены из исходной оценки; например, это может быть библиотека активации, содержащая сечения реакций из более полной оценки, или библиотека файлов газообразования, полученная из общей библиотеки, или библиотека детально восстановленных по резонансным параметрам энергетических зависимостей сечений и т.д.

Секции МТ=452 должна быть задана для каждого материала. Первые три записи используются для создания заголовков листингов, графиков и т.д., поэтому следует внимательно соблюдать формат. Остальные записи задают вербальное описание оцененных данных для материала. В описании следует указать важные экспериментальные данные, на которых базировалась оценка сечений, используемые методы и модели, краткую историю и первоначальную оценку, важные ограничения по наборам, оцененные погрешности и ковариации, ссылки и любые другие замечания, которые помогут пользователю в понимании оцененных данных. Сечения взаимодействия нейтронов со скоростью 2200м/с должны быть представлены таблично. Должны быть приведены значения резонансных интегралов (при бесконечном разбавлении) радиационного захвата и деления (если требуется). Значения МТ для взаимодействий заряженных частиц и взаимодействиях всех частиц при высоких энергиях следует определить очень внимательно исходя из описания в Разделе 0.5.

1.2. Число вторичных нейтронов деления, $\bar{\nu}$, (МТ=452)

Если материал делящийся (LFI=1), то должна быть включена секция, описывающая среднее суммарное число нейтронов на один акт деления, $\bar{\nu}$ (МТ=452). Этот формат пригоден для любых налетающих частиц и спонтанного деления, (в соответствующей подбиблиотеке). Величины $\bar{\nu}$ могут быть представлены виде таблицы как функция от энергии или коэффициентами полиномиального разложения $\bar{\nu}(E)$:

$$\bar{\nu}(E) = \sum_{n=1}^{NC} C_n E^{n-1} \quad (1.1)$$

где $\bar{\nu}(E)$ = среднее полное число нейтронов деления при делении нейтроном с энергией E(eV) (мгновенные плюс запаздывающие);

C_n = n-ый коэффициент,

NC = количество членов полинома.

Энергетически-зависимая множественность нейтронов в МТ=452 не может быть представлена полиномиальным разложением, если в файле используются секции МТ=455 и МТ=456.

1.2.1. Форматы

Структура этой секции зависит от того, представлена функция $\bar{\nu}(E)$ табличной зависимостью или полиномом. Определим следующие величины:

LNU указатель, определяющий вид представления $\bar{\nu}(E)$;

LNU =1, используется полиномиальное представление;

LNU =2, табличное представление.

NC число слагаемых в полиномиальном представлении. (NC ≤ 4)

C_n коэффициенты полинома. Определены NC коэффициентов.

NR число интервалов интерполяции, используемых при табличном задании $\bar{\nu}(E)$ (см. Раздел 0.6.2.)

NP суммарное число значений энергий при табличном задании $\bar{\nu}(E)$.

Eint интерполяционная схема (см. детали в Разделе 0.6.2).

$\bar{\nu}(E)$ среднее число нейтронов на один акт деления.

Если LNU =1, то структура секции такова:

```
[MAT, 1, 452/ ZA, AWR, 0, LNU, 0, 0]HEAD (LNU=1)
[MAT, 1, 452/ 0.0, 0.0, 0, 0, NC, 0/ C1, C2, ...CNC]LIST
[MAT, 1, 99999/ 0.0, 0.0, 0, 0, 0, 0]SEND
```

Если LNU=2, секция имеет следующую структуру:

```
[MAT, 1, 452/ ZA, AWR, 0, LNU, 0, 0]HEAD (LNU=2)
[MAT, 1, 452/ 0.0, 0.0, 0, 0, NR, NP/Eint /  $\bar{\nu}(E)$ ]TAB1
[MAT, 1, 99999/ 0.0, 0.0, 0, 0, 0, 0]SEND
```

1.2.2. Процедуры

Если для $\bar{\nu}(E)$ используется полиномиальное представление (LRU=1), то оно распространяется на любой интервал, в котором определяется сечение деления (в файлах 2 и 3). При полиномиальном задании $\bar{\nu}(E)$ степень полинома не должна превосходить четырех ($NC \leq 4$). Если при этом полином не описывает рекомендованные величины $\bar{\nu}(E)$, следует применить табличное представление (LRU=2).

Если $\bar{\nu}(E)$ представлено таблицей (LRU=2), то задаются пары энергия - значение $\bar{\nu}$. Значения $\bar{\nu}(E)$ должны быть определены для любой энергии в энергетическом интервале, для которых в файле 2 и/или в файле 3 определено сечение деления.

Значения $\bar{\nu}(E)$, заданные в секции – это среднее полное число нейтронов, испускаемых в одном акте деления. Если приводится секция (MT=455) для определения среднего число запаздывающих нейтронов ($\bar{\nu}_d$), то секция MT=452 содержит сумму $\bar{\nu}_d$ и среднее число мгновенных нейтронов $\bar{\nu}_p$ из секции MT=456. В этом случае, для MT=452 разрешается только LNU=2.

Для спонтанного деления используется вырожденное полиномиальное представление (LRU=1) с $NC=1$ и $C_1 = \bar{\nu}_{total}$ без энергетической зависимости.

1.3. ДАННЫЕ О ЗАПАЗДЫВАЮЩИХ НЕЙТРОНАХ, $\bar{\nu}_d$, (MT=455)

Это секция описывает запаздывающие нейтроны, получающиеся при делении частицами и при спонтанном делении. Определяется среднее полное число предшественников запаздывающих нейтронов $\bar{\nu}_d$, испускаемых при одном акте деления, а также постоянные распада λ_i , для каждой группы предшественников. Доля каждого семейства $\bar{\nu}_d$ определяется в Файле 5 (см раздел 5 этого руководства). Энергетические распределения запаздывающих нейтронов, выпускаемых группой предшественников, также определяются в Файле 5.

Полное число предшественников запаздывающих нейтронов при делении определяется как функция энергии падающих нейтронов в табличном виде (LNU=2). Зависимость от налетающей энергии нейтронов $\bar{\nu}_d(E)$ может быть представлена таблицей в таком же формате, что и в секции MT=452. Для спонтанного деления используется вырожденное полиномиальное распределение LRU=1 с $NC=1$ и $C_1 = \bar{\nu}_d$, как в секции MT=452.

Полное число предшественников запаздывающих нейтронов, испускаемых в одном акте деления под действием нейтронов с энергией E, задается в этом файле и определяется как сумма чисел предшественников каждой группы:

$$\bar{\nu}_d = \sum_{i=1}^{NNF} \bar{\nu}_i(E),$$

где NNF сумма групп предшественников. Доля групп предшественников $P_i(E)$ определяются в Файле 5 (см. параграф 5) следующим образом:

$$P_i(E) = \frac{\bar{\nu}_i(E)}{\bar{\nu}_d(E)}$$

1.3.1. Форматы

Определяются следующие величины:

LNU признак, определяющий вид используемого представления:

LNU =1 означает, что используется вырожденное «полиномиальное» представление ;

LNU =2 означает, что используется табличное представление.

LDG признак, указывающий на энергетическую зависимость параметров запаздывающих нейтронов(константы распада и доли):

LDG = 0 означает, что энергетическая зависимость отсутствует.

LDG = 1 означает, что энергетическая зависимость имеет место.

NC число членов в полиномиальном представлении. (NC=1)

NR число используемых интервалов интерполяции ($NK \leq 20$)

NP суммарное число значений энергий при табличном задании $\nu(E)$.

Eint интерполяционная схема (см. Раздел 0.6.2).

$\bar{\nu}_d(E)$ среднее число запаздывающих нейтронов на один акт деления.

NNF число рассматриваемых групп предшественников

λ_i эффективная постоянная распада(сек⁻¹) для i-ой группы предшественников.

При табличном представлении $\bar{\nu}_d$ (LNU=2) и энергетической независимости параметров запаздывающих нейтронов (LDG = 0) секция MT=455 имеет следующую структуру:

```
[MAT, 1, 455/ ZA, AWR, LDG, LNU, 0, 0]HEAD (LDG=0, LNU=2)
[MAT, 1, 455/ 0.0, 0.0, 0, 0, NNF, 0/ $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_{NNF}$ ]LIST
[MAT, 1, 455/ 0.0, 0.0, 0, 0, NR, NP/ Eint /  $\bar{\nu}_d(E)$ ]TAB1
[MAT, 1, 0/ 0.0, 0.0, 0, 0, 0, 0]SEND
```

При табличном представлении $\bar{\nu}_d$ (LNU=2) и энергетической зависимости параметров запаздывающих нейтронов(LDG = 1) структура секции MT=455 такова:

```
[MAT, 1, 455/ ZA, AWR, LDG, LNU, 0, 0]HEAD (LDG=1, LNU=2)
[MAT, 1, 455/ 0.0, 0.0, 0, 0, NR, NE/ Eint]TAB2
[MAT, 1, 455/ 0.0, E1, 0, 0, NNF*2, 0/
 $\lambda_1(E_1), \alpha_1(E_1), \lambda_2(E_1), \alpha_2(E_1), \lambda_3(E_1), \alpha_3(E_1),$ 
 $\dots, \lambda_{NNF}(E_1), \alpha_{NNF}(E_1)$ ]LIST
-----
[MAT, 1, 455/ 0.0, ENE, 0, 0, NNF*2, 0/
 $\lambda_1(E_{NE}), \alpha_1(E_{NE}), \lambda_2(E_{NE}), \alpha_2(E_{NE}), \lambda_3(E_{NE}), \alpha_3(E_{NE}),$ 
 $\dots, \lambda_{NNF}(E_{NE}), \alpha_{NNF}(E_{NE})$ ]LIST
[MAT, 1, 455/ 0.0, 0.0, 0, 0, NR, NP/ Eint /  $\bar{\nu}_d(E)$ ]TAB1
[MAT, 1, 0/ 0.0, 0.0, 0, 0, 0, 0]SEND
```

При спонтанном делении (LNU=1) и, естественно, энергетической независимости параметров запаздывающих нейтронов (LDG = 0) структура секции MT=455 имеет следующий вид:

```
[MAT, 1, 455/ ZA, AWR, LDG, LNU, 0, 0]HEAD (LDG=0, LNU=1)
[MAT, 1, 455/ 0.0, 0.0, 0, 0, NNF, 0/ $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_{NNF}$ ]LIST
[MAT, 1, 455/ 0.0, 0.0, 0, 0, 1, 0/ $\bar{v}_d$ ]LIST
[MAT, 1, 0/ 0.0, 0.0, 0, 0, 0, 0]SEND
```

При спонтанном делении (LNU=1) и энергетической зависимости⁴ параметров запаздывающих нейтронов (LDG = 1) структура следующая:

```
[MAT, 1, 455/ ZA, AWR, LDG, LNU, 0, 0]HEAD (LDG=1, LNU=1)
[MAT, 1, 455/ 0.0, 0.0, 0, 0, NR, Ne/  $E_{int}$ ]TAB2
[MAT, 1, 455/ 0.0,  $E_1$ , 0, 0, NNF*2, 0/
 $\lambda_1(E_1), \alpha_1(E_1), \lambda_2(E_1), \alpha_2(E_1), \lambda_3(E_1), \alpha_3(E_1),$ 
 $\dots, \lambda_{NNF}(E_1), \alpha_{NNF}(E_1)$ ]LIST
-----
[MAT, 1, 455/ 0.0,  $E_{NE}$ , 0, 0, NNF*2, 0/
 $\lambda_1(E_{NE}), \alpha_1(E_{NE}), \lambda_2(E_{NE}), \alpha_2(E_{NE}), \lambda_3(E_{NE}), \alpha_3(E_{NE}),$ 
 $\dots, \lambda_{NNF}(E_{NE}), \alpha_{NNF}(E_{NE})$ ]LIST
[MAT, 1, 455/ 0.0, 0.0, 0, 0, 1, 0/ $\bar{v}_d$ ]LIST
[MAT, 1, 0/ 0.0, 0.0, 0, 0, 0, 0]SEND
```

1.3.2. Процедуры

При табличном представлении $\bar{v}_d(E)$, как требуется в разделе 1.2, величины должны задаваться в том же энергетическом интервале, что и сечения деления.

В файле 5 приводятся вероятности образования предшественников каждой группы и энергетические распределения нейтронов каждой группы (раздел 5 данного отчета). Чрезвычайно важно, чтобы в Файле 5 были заданы те же группы предшественников и в том же порядке, что и в Файле 1 (MT=455). Рекомендуется, чтобы группы предшественников были упорядочены по убыванию периода распада ($\lambda_1 < \lambda_2 < \dots < \lambda_{NNF}$).

Для спонтанного деления используется полиномиальное представление (LNU = 1) с одним членом (NC=1, $C_1 = \bar{v}_d$).

Если используется секция MT=455, то MT=456 должна присутствовать секция, так же как и MT=452.

1.4. Число мгновенных нейтронов на один акт деления, \bar{v}_p , (MT=456)

Если материал делящийся (LFI=1), то в Файл 1 может быть включена секция (MT=456), определяющая среднее число мгновенных нейтронов \bar{v}_p на один акт деления, по формату подобная секции MT=452. Для деления \bar{v}_p задается как функция энергии. Для спонтанного деления \bar{v}_p также может приводиться в секции MT=456, только без энергетической зависимости.

⁴ Последний раздел появился в последней редакции формата. Здесь приведен дословный перевод этого раздела. Из текста неясно, зависимость выхода запаздывающих нейтронов спонтанного деления от какой энергии имели в виду авторы нововведения.

1.4.1 Форматы

Определяются следующие величины:

- LNU указатель, определяющий вид представления $\bar{\nu}_p(E)$;
 LNU =1, используется полиномиальное представление;
 LNU =2, табличное представление.
NC число слагаемых в полиномиальном представлении. ($NC \leq 4$)
NR число интервалов интерполяции, используемых при табличном задании $\bar{\nu}_p(E)$
 (см. Раздел 0.7.7.)
NP суммарное число значений энергий при табличном задании $\bar{\nu}_p(E)$.
Eint интерполяционная схема (см. Раздел 0.6.2).
 $\bar{\nu}_p(E)$ среднее число мгновенных нейтронов на один акт деления.

Если LNU =2 (используется табличное представление $\bar{\nu}$), структура секции такова:

```
[MAT, 1, 456/ ZA, AWR, 0, LNU, 0, 0] HEAD            (LNU=2)
[MAT, 1, 456/ 0.0, 0.0, 0, 0, NR, NP/Eint/  $\bar{\nu}_p(E)$ ] TAB1
[MAT, 1, 0/ 0.0, 0.0, 0, 0, 0, 0] SEND
```

Если LNU =1 (спонтанное деление), секция имеет следующую структуру:

```
[MAT, 1, 456/ ZA, AWR, 0, LNU, 0, 0] HEAD    (LNU=1)
[MAT, 1, 456/ 0.0, 0.0, 0, 0, 1, 0/  $\bar{\nu}_p$ ] LIST
[MAT, 1, 0/ 0.0, 0.0, 0, 0, 0, 0] SEND
```

1.4.2. Процедуры

Если $\bar{\nu}_p(E)$ представлено таблицей (LNU=2), то задаются пары энергия - значение $\bar{\nu}$. Значения $\bar{\nu}_p(E)$ должны быть определены для любой энергии в энергетическом интервале, для которых в файле 2 и/или в файле 3 определено сечение деления. Значения $\bar{\nu}_p(E)$, заданные в секции, – это среднее число мгновенных нейтронов, испускаемых в одном акте деления. Для спонтанного деления энергонезависимая величина $\bar{\nu}_p(E)$ задается с использованием LNU=1 при NC=1 и $C_1 = \bar{\nu}_p(E)$, как описано для MT=452.

Если используется секция MT=455, то секция MT=456 должна присутствовать, так же как и MT=452.

1.5. КОМПОНЕНТЫ ЭНЕРГОВЫДЕЛЕНИЯ ПРИ ДЕЛЕНИИ (MT=456)

Энергия при делении выделяется осколками деления, нейтронами, гамма-лучами и бета-частицами (электронами и позитронами) и нейтрино (антинейтрино). Под осколками понимают все заряженные частицы, испускаемые мгновенно; при расчетах энерговыделения считается, что все такие частицы имеют малые пробеги и выделяют свою энергию локально. Нейтроны и гамма частицы переносят свою энергию в пространстве, и их следует рассматривать отдельно. Кроме того, часть гамма-лучей и нейтронов запаздывает, и в заглушенном реакторе важно знать обусловленное ими энерговыделение в его распределении во времени. Энергия нейтрино в большинстве применений полностью теряется, но и она является частью полного энерговыделения Q. Что касается бета-частиц, то мгновенные бета-частицы просто объединяются с осколками и их энергия включается в энергию осколков.

ET	сумма всех перечисляемых ниже парциальных энергий. Эта сумма – полная энергия, выделяемая в одном акте деления и равна величине Q.
EFR	кинетическая энергия осколков.
ENP	кинетическая энергия «мгновенных» нейтронов деления.
END	кинетическая энергия запаздывающих нейтронов деления.
EGP	суммарная энергия «мгновенных» γ -лучей.
EGD	суммарная энергия запаздывающих γ -лучей.
EB	суммарная энергия запаздывающих бета-частиц.
ENU	энергия, уносимая нейтрино.
ER	это энергия, равная разности полной энергии минус энергия нейтрино (ET-ENU), она равна эффективной величине Q, приводимой в файле 3 для MT=18.

Все эти энергии заданы для нулевой энергии налетающей частицы⁵

$$E_i(0) = E_i(E_{inc}) + \delta E_i \quad (1.2)$$

где E_i - любая из компонент энерговыделения;

$E_i(0)$ - значение при $E_{inc} = 0$; $E_{inc} = 0$ - условное значение начальной энергии. Для заряженных частиц это просто параметр, используемый для описания зависимости энерговыделения от любого E_{inc} .

$E_i(E_{inc})$ - величина при налетающей энергии E_{inc} .

Значения δE_i определяются следующим образом:

$$\delta ET = -\left(1.057 E_{inc} - 8.07 \left(\bar{v}(E_{inc}) - \bar{v}(0)\right)\right)$$

$$\delta EB = 0.075 E_{inc}$$

$$\delta EGD = 0.075 E_{inc}$$

$$\delta ENU = 1.000 E_{inc}$$

$$\delta EFR = 0$$

$$\delta ENP = -\left(1.307 E_{inc} - 8.07 \left(\bar{v}(E_{inc}) - \bar{v}(0)\right)\right)$$

$$\delta EGP = 0$$

1.5.1 Форматы

Структура этой секции всегда начинается с записи HEAD и заканчивается записью SEND. Секция не включает подсекции и содержит только одну запись LIST. Структура секции следующая:

```
[MAT, 1, 458/ ZA, AWR, 0, 0, 0, 0] HEAD
[MAT, 1, 458/ 0.0, 0.0, 0, 0, 18, 9/
      EFR, ΔEFR, ENP, ΔENP, END, ΔEND,
      EGP, ΔEGP, EGD, ΔEGD, EB, ΔEB,
      ENU, ΔENU, ER, ΔER, ET, ΔET] LIST
[MAT, 1, 0/ 0.0, 0.0, 0, 0, 0, 0] SEND
```

где символом Δ отмечены погрешности оценок перечисленных выше величин.

⁵ Приводимые параметры основаны на рекомендациях работы R.Sher и C.Beck, Энергия деления для 16 делящихся нуклидов, EPRI-NP-1771(1981). В файле данных приводятся данные для более корректного учета энергии, уносимой мгновенными и запаздывающими нейтронами, а могут быть приведены и выходы отдельных продуктов деления (вообще говоря, зависящие от энергии частиц, вызывающих деления), которые совместно с данными о их радиоактивном распаде позволяют точнее рассчитать энерговыделение за заряженных продуктов и фотонов распада. Подробнее см. подраздел 1.5.2.

1.5.2. Процедуры

Эта секция используется только для сырьевых и делящихся изотопов. Должна быть обеспечена согласованность между значениями Q в Файле 3, расчетными энергиями из Файлов 5 и 15 и энергиями, указанными в Файле 1. Напомним, что $ER =$ псевдо- Q для деления ($MT=18$) в Файле 3.

Другие компоненты не так легко определяются и проверяются. Процедура должна быть такой, чтобы данные Файла 5 и Файла 15 были получены ранее данных этой секции. Это значит, например, что в Файле 1 энергия мгновенных нейтронов деления должна вычисляться по спектру из Файла 5 с $MT=18$. То же относится и к спектрам запаздывающих нейтронов Файл 5, $MT=455$. Энергия мгновенных гамма квантов в Файле 1 должна вычисляться по данным Файла 15 ($MT=18$ для деления).

Все эти величины должны вычисляться при самой низкой энергии, данной в Файле для $MT=18$, кроме делящихся изотопов, для которых следует использовать спектры при тепловой энергии. Для сырьевых материалов лучше всего годится спектр, заданный при пороговой энергии. Заметим, что спектры из файла 5 для $MT=18$ должны использоваться вкуче с $\bar{\nu}$ мгновенным, а не с $\bar{\nu}$ полным для деления. Секция $MT=455$ в файле 5 включает спектры запаздывающих нейтронов деления.

Во многих реакторных приложениях, требуется временная зависимость энерговыделения, а не только компоненты суммарной энергии при делении, значения которой даны в рассматриваемых MT . Временная зависимость энерговыделения, обусловленная запаздывающими нейтронами, может рассчитываться по данным Файла 5 в приближении заданного числа групп запаздывающих нейтронов ($MT=455$).

Для получения более детальной информации о запаздывающих нейтронах и всех времязависимых параметрах бета и гамма-излучения при делении следует обращаться к таким программам, как, например, CINDER, RIBD, ORIGEN.

Интегральные по времени энергии запаздывающих нейтронов, запаздывающих гамма-квантов и бета-частиц, вычисленные по перечисленным выше программам, могут не всегда согласоваться с компонентами энергии, данной в Файле 1. Компоненты Файла 1 должны в сумме давать ET (полное энерговыделение на одно деление).

В теплофизических расчетах энергия, выделенная при всех ядерных реакциях, кроме деления, главным образом, энергия гамма-квантов, испускаемых при радиационном захвате нейтронов, учитывается аналогично различным компонентам энерговыделения при делении. Эта энергия будет равна величине Q , приведенной в Файле 3 для $MT=102$. Захватные гамма-кванты могут быть мгновенными или запаздывающими (если возможно возбуждение изомерных состояний) и это следует учитывать в расчетах энерговыделения в выгоревшем топливе. Например, «эффективная энергия» в теплофизическом расчете – это сумма ER , определенной выше, и энергии, выделяющейся в других реакциях.

2. ФАЙЛ 2. РЕЗОНАНСНЫЕ ПАРАМЕТРЫ

2.1. ОБЩЕЕ ОПИСАНИЕ

Основное назначение Файла 2 - описание параметров как разрешенных, так и неразрешенных резонансов. Файл содержит только одну секцию с номером MT=151. В оцененных данных для переноса нейтронов наличие Файла 2 обязательно, но в других случаях он может отсутствовать. Использование Файла 2 определяется параметром LRP, записанном в 3-й позиции в первой строке секции MT=451 (см. раздел 1.1):

LRP=-1 Файл 2 не задается.

LRP= 0 Кроме радиуса рассеяния AP, в Файле 2 не задаются никакие иные параметры.

LRP= 1 Резонансные вклады в сечения (полное, упругое, деление и радиационный захват) должны рассчитываться по резонансным параметрам и добавляться в соответствующие сечения из Файла 3.

Резонансные вклады добавляются к сечениям реакций, заданным в файле Файле 3¹ (в том числе и к суммарным реакциям – таким, как суммарное сечение неупругих взаимодействий и пр.). При использовании одноуровневого (SLBW) или многоуровневого (MLBW) формализма Брейта-Вигнера любые конкурирующие реакции кроме упругого рассеяния, деления и радиационного захвата в резонансной области должны быть полностью представлены в соответствующих секциях Файла 3 и включены в подложку к полному сечению в секции MT=1. Учет конкурирующих реакций в резонансной области осуществляется путем задания конкурирующих ширин, Γ_x . В области неразрешенных резонансов эта ширина задается явно; в области разрешенных резонансов – неявно: в ней разрешено превышение полной ширины над суммой нейтронной, радиационной и делительной ширин. Разница интерпретируется как конкурирующая ширина:

$$\Gamma_x = \Gamma - (\Gamma_n + \Gamma_\gamma + \Gamma_f)$$

В формализме Рейха-Мура или Адлеров конкурирующая ширина не используется. В новых форматах ограниченной R-матрицы и гибридной R-функции, конкурирующие сечения рассчитываются по резонансным параметрам, как другие сечения. В этом случае резонансный вклад добавляется к подложке Файла 3 для каждой конкурирующей реакции, как и для других резонансных реакций.

LRP= 2 Резонансные параметры задаются в Файле 2, но не используются для расчета сечений, которые считаются полностью заданными в Файле 3. LRP=2 может использоваться для контроля только в некоторых вторичных библиотеках, составленных на базе основной.

¹ В неразрешенной области оценщик может по выбору определить различные процедуры, которые использует для неразрешенных резонансных параметров в Файле 2 с целью расчета энергетически-зависимых факторов самоэкранировки. Эта возможность определяется указателем LSSF, описанном в разделах 2.3.1. и 2.4.21. Когда указатель LSSF введен, Файл 3 содержит сечения, усредненные по всем неразрешенным резонансам, и назначение файла 2 состоит в расчете факторов самоэкранировки мультигрупповых сечений или сечений, заданных поточно.

Резонансные параметры для *материала* есть совокупность параметров для каждого *изотопа* этого материала. Резонансные параметры для различных *изотопов* располагаются в порядке увеличения величин ZAI (заряд – масса изотопа). Резонансные данные для каждого изотопа можно разделить на несколько энергетических интервалов. При этом данные для энергетических интервалов упорядочиваются по увеличению энергии. Энергетические интервалы не должны пересекаться; в каждом из интервалов может использоваться свое представление резонансных сечений.

В дополнение к этим интервалам с параметризованными резонансными сечениями рассматриваемая энергетическая область может содержать два дополнительных нерезонансных интервала, не пересекающихся ни друг с другом, ни с резонансными интервалами – нижний энергетический интервал и верхний энергетический интервал, Ниже следует комментарий к перечисленным интервалам.

1. Нижний энергетический интервал (Low Energy Region - LER) – интервал, в котором сечения затабулированы как гладкая функция энергии. Доплер эффект должен быть мал настолько, чтобы им можно было пренебречь: учет влияния теплового движения атомов в нижнем энергетическом интервале (если он присутствует) не производится. Для легких элементов, для которых доплеровское уширение резонансов несущественно, вся энергетическая область может быть охвачена нижним энергетическим интервалом. Для тяжелых материалов, нижний энергетический интервал может использоваться иногда ниже области самых нижних разрешенных резонансов. При хорошей подгонке резонансных параметров LER разрешается не приводить совсем, что и рекомендуется. В разделе 2.4.6.4. даны важные рекомендации по представлению сечений в нижнем энергетическом интервале.

2. Область разрешенных резонансов (Resolved Resonance Region - RRR) – это интервал, где параметры задаются для отдельных резонансов. Обычно это значит, что экспериментальное разрешение достаточно, чтобы “увидеть” резонансы и определить их параметры по площади и форме, но при этом оценщик, если пожелает, может задать и параметры фиктивных резонансов – например, для учета пропуска слабых резонансов в эксперименте. Если оценщик принимает это решение, то резонансы должны иметь физически допустимые квантовые числа, и их параметры должны удовлетворять статистическим свойствам (Приложение D, раздел D.2.2). В Файле 3 может быть задана нерезонансная подложка к сечениям, рассчитываемым по параметрам разрешенных резонансов в RRR. Включение области разрешенных резонансов позволяет пользователю учитывать резонансную самоэкранировку отдельно для каждого резонанса – используя, если нужно, приближение промежуточного резонанса и т.п.

3. Область неразрешенных резонансов (Unresolved Resonance Region - URR) - область, в которой резонансы еще не настолько широки, чтобы накладываться друг на друга, но экспериментальное разрешение недостаточное для определения параметров отдельных резонансов. Резонансная самоэкранировка сечений в этой области по прежнему важна. В этой ситуации, самоэкранировка должна учитываться на статистической основе. Нерезонансные сечения могут быть заданы в Файле 3 и в области неразрешенных резонансов. Интерпретация этих сечений, определяется указателем LSSF (см. Раздел 2.3.1 и 2.4.21). Эти сечения могут интерпретироваться, и как плавные подложки к резонансным вкладам, рассчитанным по параметрам из Файла 2 (как в области разрешенных резонансов) или же как обычные средние сечения (сечения, соответствующие условиям бесконечного разбавления рассматриваемого материала другими). В последнем случае данные Файл 2 используются для определения самоэкранировки сечений рассматриваемого материала в среде, в которой он содержится в достаточно высокой концентрации. Важно так выбрать границу между RRR и URR, чтобы в области неразрешенных резонансов были применимы основания для статистического рассмотрения средних резонансных параметров. Эта проблема обсуждается дальше в разделе 2.4.

4. Интервал высоких энергий (HER) начинается со столь высоких энергий, где резонансы становятся настолько широкими, что перекрывают друг друга и сечения сглаживаются. Границу между URR и HER следует выбирать так, чтобы в HER эффекты самоэкранировки были не существенны.

Нерезонансные подложки к сечениям могут быть заданы в Файле 3 как компенсации неточности описания формы резонансов в выбранном упрощенном формализме (например, SLBW), либо для учета вклада резонансов, лежащих за пределами рассматриваемого энергетического интервала, либо для усредненного учета пропущенных резонансов или учета вклада конкурирующих процессов, не описываемых резонансными формулами. Если Файле 3 заданы нерезонансные подложки, на границах интервалов (кроме 10^{-5} эВ) должны быть заданы двойные точки для учета разрывов в параметрическом представлении сечений. Более детальное обсуждение подложек приводится в разделе 2.4.

Для определения параметров разрешенных резонансов существует несколько представлений, определяемых указателем LRF:

- LRF=1** одноуровневая формула Брейта-Вигнера (нет межрезонансной интерференции; допускается одна конкурирующая реакция неупругого рассеяния).
- LRF=2** многоуровневая формула Брейта-Вигнера (В сечении упругого рассеяния и в полном сечении учитываются эффекты межрезонансной интерференции; допускается одна конкурирующая реакция неупругого рассеяния).
- LRF=3** формула Райха-Мура (многоуровневая многоканальная R-матрица; описание конкурирующих реакций допустимо). Если спин ядра-мишени и орбитальный угловой момент больше 0, допускается задание парциальных ширин $\Gamma_{l_s, J}$ и $\Gamma_{l_{s_2}, J}$ с двумя различными канальными спинами. Это выполняется путем задания знака спина резонанса AJ. Большой канальный спин ($s=I+1/2$) идентифицируется путем задания положительного значения спинового параметра AJ, меньший канальный спин ($s=I-1/2$) идентифицируется путем задания AJ со знаком минус (см. определение AJ в разделе 2.2.1). В старых файлах ENDF такая возможность отсутствовала, и AJ всегда задавалось положительным; в этом случае предполагалось, что все резонансы с заданными l, J имеют одинаковый канальный спин.
- LRF=4** многоуровневая формула Адлеров (эффекты межрезонансной интерференции учтены во всех сечениях через “эффективные” резонансные параметры; обычно применяется к материалам, делящимся под действием медленных нейтронов. Учет конкурирующих процессов не предусмотрен).
- LRF=5** Обобщенная R-матрица (многоуровневая многоканальная R-матрица с учетом конкурирующих процессов) – *опция, в действующем формате недопустима*
- LRF=6** Гибридная R-функция (включает многоуровневую, но не многоканальную интерференцию, предусмотрен учет конкурирующих процессов) – *опция, в действующем формате недопустима.*
- LRF=7** Ограниченный R- матричный формализм.

Наиболее употребительные формализмы для представления резонансных сечений обсуждаются в разделе 2.4.17. Более полное обсуждение формализмов помещено в разделе Процедуры (параграф 2.4).

Каждый энергетический интервал содержит указатель LRU, который определяет, содержатся ли в интервале параметры разрешенных или неразрешенных резонансов. LRU=1 определяет область разрешенных резонансов (RRR), LRU=2 – область неразрешенных резонансов (URR).

В области неразрешенных резонансов допустимо только одно представление, а именно усредненное одноуровневое представление Брейта-Вигнера. Однако, разрешены некоторые варианты, обозначаемые признаком LRF. Для первого варианта, LRF=1, разрешается представлять среднюю делительную ширину как функцию энергии падающих нейтронов. Во втором варианте, LRF=2, от энергии могут зависеть следующие средние резонансные параметры: расстояние между уровнями, делительная ширина, приведенная нейтронная ширина, радиационная ширина и ширина для суммы всех конкурирующих процессов.

Форматы данных для различных представлений резонансных параметров определяются в Параграфах 2.2.1 (область разрешенных резонансов) и 2.3.1 (область неразрешенных резонансов). Формулы для расчета сечений по различным формализмам даются в Приложении D.

Некоторые величины, используемые в Файле 2, определяются одинаково для всех представлений резонансных параметров:

- NIS** количество изотопов в материале ($NIS \leq 10$);
- ZAI** обозначение (Z, A) для изотопа;
- NER** количество резонансных интервалов для изотопа;
- ABN** содержание изотопа в материале. Это есть *атомарная* (а не весовая) *доля* изотопа (а не его процентное содержание);
- LFW** указатель, показывающий приводятся ли средние делительные ширины в области неразрешенных резонансов для данного изотопа:
LFW = 0, средние делительные ширины не приводятся;
LFW = 1, средние делительные ширины приводятся
- NER** количество энергетических интервалов для изотопов ($NER \leq 2$);
- EL** нижний предел для энергетического интервала²;
- EH** верхний предел энергетического интервала;
- LRU** флаг, указывающий включает ли данный энергетический интервал параметры разрешенных или неразрешенных параметров резонансов;
LRU=0, определен только радиус рассеяния
(в этом случае LRF=0, NLS=0, LFW=0);
LRU=1, определяются параметры разрешенных резонансов;
LRU=2, определяется средние параметры неразрешенных резонансов;
- LRF** флаг, указывающий какое представление использовалось для энергетического интервала. Значение LRF зависит от значения LRU:
Если LRU=1 (разрешенные резонансы), то
LRF=1, одноуровневое приближение Брейта-Вигнера (SLBW);
LRF=2, многоуровневое приближение Брейта-Вигнера (MLBW);

² Эти энергии являются пределами при расчете сечений по параметрам. Энергии некоторых разрешенных резонансов могут лежать за пределами энергетического интервала.

LRF=3, приближение Райха-Мура (RM).
 LRF=4, приближение Адлеров (AA)
 LRF=5, обобщенная R-матрица (GRM)- *ныне не используется*
 LRF=6, R-функция (HRF) – *ныне не используется*.
 LRF=7, ограниченный R- матричный формализм.

Если LRU=2 (неразрешенные резонансы), то
 LRF =1, от энергий зависят только средние делительные ширины;
 LRF=2, от энергии зависят средние расстояния между уровнем, ширины для конкурирующих реакций, средние приведенные нейтронные ширины, радиационные ширины и средние делительные ширины.

NRO флаг, указывающий на возможную энергетическую зависимость радиуса рассеяния:

NRO=0, радиус не зависит от энергии;
 NRO=1(в библиотеке ENDF/B-VI не разрешен)³.

NAPS флаг, определяющий использование двух радиусов: радиуса канала а и радиуса рассеяния AP. Смысл NAPS зависит от NRO:

Если NRO=0 (радиус AP энергетически независим), то
 при NAPS=0, радиус канала а рассчитывается из уравнения (D.0) в Приложении D , а радиус рассеяния AP есть константа, заданная в записи CONT (range) – см. ниже. Радиус канала используется для расчета проницаемостей и факторов сдвига, а радиус рассеяния – в расчетах фазового сдвига.

При NAPS=1, уравнение (D.0) не используется; Радиус AP используется и для расчета проницаемостей и всех факторов сдвига.

Если NRO=0 (радиус AP зависит от энергии), то:

при NAPS=0, радиус канала а рассчитывается из уравнения (D.0) в Приложении D и используется для расчета проницаемостей и факторов сдвига. AP(E) считывается в записи TAB1 каждой секции и используется в зависимости от значения NAPS:

при NAPS=1, AP(E) используется для расчета P_l, S_l, φ_l ;

при NAPS=2, AP(E) используется для расчета фазовых сдвигов φ_l .

Кроме того, следует воспользоваться энергонезависимой величиной “AP” (из записи CONT (range)) и использовать ее для расчета P_1 и S_1 , игнорируя радиус канала, определенный по уравнению (D.0).

Файл 2 содержит единственную секцию (MT=151), состоящую из подсекций для каждого энергетического интервала каждого изотопа в материале.

Структура Файла 2 для определенного случая, когда задан только радиус рассеяния (параметры разрешенных и неразрешенных резонансов не приводятся), следующая⁴:

```

[MAT, 2,151/ ZA, AWR, 0, 0, NIS, 0] HEAD (NIS=1)
[MAT, 2,151/ ZAI, ABN, 0, LFW, NER, 0] CONT
(ZAI=ZA,ABN=1.0,LFW=0,NER=1)
[MAT, 2,151/ EL, EH, LRU, LRF, NRO, NAPS] CONT
(LRU=0,LRF=0,NRO=0,NAPS=0)
[MAT, 2,151/ SPI, AP, 0, 0, NLS, 0] CONT (NLS=0)
[MAT, 2, 0/ 0.0, 0.0, 0, 0, 0, 0] SEND
[MAT, 0, 0/ 0.0, 0.0, 0, 0, 0, 0] FEND
  
```

³ Ранее в этом представлении энергетическая зависимость радиуса задавалось таблично - парами – энергия, радиус.

⁴ В этом случае описываемый материал не может содержать несколько изотопов, для которых приводятся резонансные параметры, и радиус рассеяния не может быть функцией энергии.

Если резонансные параметры заданы (LRU>0), то файл 2 следующую структуру:

```
[MAT, 2,151/ ZA, AWR, 0, 0, NIS, 0] HEAD  
[MAT, 2,151/ ZAI, ABN, 0, LFW, NER, 0] CONT (isotope)  
[MAT, 2,151/ EL, EH, LRU, LRF, NRO, NAPS] CONT (range)
```

<подсекция для первого энергетического интервала первого изотопа>
(зависит от LRU и LRF)

```
[MAT, 2,151/ EL, EH, LRU, LRF, NRO, NAPS] CONT (range)
```

<подсекция для второго энергетического интервала первого изотопа>

```
-----  
[MAT, 2,151/ EL, EH, LRU, LRF, NRO, NAPS] CONT (range)
```

<подсекция для последнего энергетического интервала последнего изотопа этого материала>

```
[MAT, 2, 0/ 0.0, 0.0, 0, 0, 0, 0] SEND
```

Данные располагаются последовательно для всех интервалов первого изотопа, затем для всех интервалов второго изотопа и т.д. Данные, для каждого интервала начинаются с записи CONT (range); данные для каждого изотопа – в записи CONT (isotope). Описания подсекций, которые включают резонансные параметры, даются ниже в параграфах 2.2.1 и 2.3.1. Для многоизотопного материала разрешается иметь *часть* изотопов, для которых заданы только радиусы рассеяния; однако, хотя бы для одного изотопа резонансные параметры должны быть заданы обязательно. Структура подсекции изотопа, для которого задан только радиус рассеяния, такова:

```
[MAT, 2,151/ SPI, AP, 0, 0, NLS, 0] CONT (NLS=0)
```

и, как указано выше, для этого изотопа полагаются LWF=0, NER=1, LRU=0, LRF=0, NRO=0 и NAPS=0.

Если NRO≠0, то непосредственно за записью CONT (range), предшествующей каждой подсекции, сразу же следует запись типа TAB1 с энергетической зависимостью радиуса рассеяния AP:

```
[MAT, 2,151/ 0.0, 0.0, 0, 0, NR, NP/ Eint / AP(E)] TAB1
```

Если NAPS равен 0 или 1, то значение AP в следующей записи подсекции следует положить равным 0.0. Если NAPS равно 2, то AP в следующей записи должно быть задано равным требуемой величине радиуса канала.

2.2. ПАРАМЕТРЫ РАЗРЕШЕННЫХ РЕЗОНАНСОВ (LRU=1)

2.2.1 Форматы

Для представления параметров разрешенных резонансов используется шесть различных формализмов. Формулы, связанные с этими представлениями, приводятся в Приложении D. Признак LRU=1 в записи CONT (range) указывает, что в рассматриваемом интервале определяются параметры разрешенных резонансов. Другой признак в той же записи - LRF - определяет вид резонансной формулы.

Следующие величины используются во всех формализмах:

SPI спин ядра-мишени, I.

AP радиус рассеяния в единицах 10^{-12} см. Для LRF=1 - 4 предполагается, что он не зависит квантового числа канала.

- NLS** количество значений орбитальных моментов взаимодействующих нейтронов – величин l - в данном энергетическом интервале.
- При LRF=1-4 – набор резонансных параметров задается для каждого значения l .
- При LRF=5 и 6, NLS – количество значений l , необходимых для сходимости расчета сечения рассеяния (см. раздел 2.4.23 и 2.4.24). Другое ограничение NLSC (см. ниже) обеспечивает сходимость угловых распределений, рассчитываемых по резонансным параметрам. Обычно $NLS \leq 4$.
- AWRI** отношение массы изотопа к массе нейтрона.
- QX** величина QX добавляется к энергии частицы в системе центра масс для определения энергии канала при расчете фактора проницаемости. Переход в лабораторную систему энергии зависит от приведенной массы в выходном канале. Для неупругого рассеяния на дискретных уровнях величина QX равна энергии возбужденного уровня, взятой со знаком минус. Если конкурирующие процессы отсутствуют (LRX=0), то QX=0.0.
- L** величина орбитального момента l .
- LRX** флаг, указывающий приводится ли в данном энергетическом интервале ширина конкурирующего процесса.
- LRX=0, ширина конкурирующего процесса не задается, и в области разрешенных резонансов $\Gamma = \Gamma_n + \Gamma_\gamma + \Gamma_f$, а в области неразрешенных резонансов $\langle \Gamma_x \rangle = 0$; LRX должно обязательно равняться 0 при использовании LRF=3 или 4;
- LRX=1, ширина конкурирующего процесса задается, этот процесс является неупругим рассеянием с возбуждением первого состояния. В разрешенной области эта ширина определяется по разности $\Gamma_x = \Gamma - (\Gamma_n + \Gamma_\gamma + \Gamma_f)$.
- NRS** число разрешенных резонансов для данного значения l . (NRS \leq 600⁵.)
- ER** энергия резонанса (в лабораторной системе)
- AJ** величина AJ (спин, или полный суммарный угловой момент резонанса) записанная в формате REAL.
- Когда возможны два канальных спина, отрицательный знак у AJ, означает что спин состояния образован при вычитании спина канала из спина ядра-мишени спина, если - положительный, то – при сложении этих спинов. Если AJ равно 0, возможно только одно значение канального спина, неоднозначность исчезает: спин канала s равен орбитальному угловому моменту l .
- GT** полная ширина резонанса Γ , при энергии резонанса ER.
- GN** нейтронная ширина резонанса при энергии резонанса ER.
- GG** радиационная ширина Γ_γ , константа.
- GF** делительная ширина Γ_f , константа.
- GX** ширина конкурирующего процесса Γ_x при энергии резонанса ER. Она не определяет явно при LRF=1 или 2, но ее можно определить вычитанием:

⁵ Реально это ограничение отсутствует. Например, для урана-235 в файле ENDF/B-VII в области разрешенных резонансов в одном интервале приводятся параметры 3193 резонансов.

$$GX=GT-(GN+GG+GF), \text{ если } LRX \neq 0.$$

- а** радиус канала в единицах 10^{-12} см. Форматом библиотеки явно не определяется. Значение радиуса канала в зависимости от величины NAPS либо рассчитывается из упомянутого ранее уравнения (Приложение D), или принимается равным радиусу рассеяния.

2.2.1.1. Одноуровневая и многоуровневая формулы Брейта-Вигнера SLBW и MLBW(LRU=1, LRF=1 или 2)

Структура подсекции следующая:

```
[MAT, 2, 151/ 0.0, 0.0, 0, 0, NR, NP/ Eint / AP(E)] TAB1
                                                    (if NRO ≠ 0)
[MAT, 2, 151/ SPI, AP, 0, 0, NLS, 0] CONT
```

Если задана энергетическая зависимость AP(E) и NAPS=0 или 1, значение AP в этой записи должно равняться 0.0.

```
[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
```

- параметры резонансов с указанным в первой строке значением орбитального момента $L=l$.

Запись LIST повторяется NLS-раз, пока будут приведены резонансные параметры для резонансов со всеми значениями l (в порядке возрастания). Для каждого значения l величины ER задаются также в порядке возрастания.

2.2.1.2. Формула Райх-Мура (LRU=1, LRF=3)

Определяются следующие дополнительные величины:

- LAD** признак, показывающий могут ли эти параметры использоваться для расчета угловых распределений.
LAD=0 не используются
LAD=1 при желании могут использоваться. *Не добавляются* к данным Файла 4⁶.
- LNCS** Число значений l , которое должно использоваться для правильного расчета углового распределения нейтронов упругого рассеяния (см. раздел D.1.5. и D.1.6.5). $LNCS \geq NLS$ ⁷.
- APL** Радиус рассеяния, зависящий от орбитального момента l . Если задано APL=0, в расчетах будет использоваться APL=AP.
- GFA** Первая парциальная делительная ширина, константа.
- GFB** Вторая парциальная делительная ширина, константа.

GFA и GFB – знаковые величины, их знаки определяются относительной фазой амплитуд ширин в двух каналах деления. В этом случае структура подсекции подобна случаю LRF=1 и LRF=2, но при этом полная ширина не указывается и освободившееся место используется для записи дополнительной парциальной делительной ширины. Если GFA = GFB=0.0, формализм Райха-Мура сводится к R-функции.

⁶ Описание опции LAD=1 страдает неопределенностью. Не ясно, что значит “не добавляются”. При отсутствии примеров использования этой опции, разрешить эту неопределенность не удастся.

⁷ Из Приложения D следует, что целесообразно принимать $LNCS=NLS+1$.

Структура подсекции следующая:

```
[MAT, 2, 151/ 0.0, 0.0, 0, 0, NR, NP/ Eint / AP(E)] TAB1
                                                    (if NRO≠0)
[MAT, 2, 151/ SPI, AP, LAD, 0, NLS, NLSC] CONT
[MAT, 2, 151/ AWRI, APL, L, 0, 6*NRS, NRS/
              ER1, AJ1, GN1, GG1, GFA1, GFB1,
              ER2, AJ2, GN2, GG2, GFA2, GFB2,
              -----
              ERNRS, AJNRS, GNNRS, GGNRS, GFANRS, GFBNRS] LIST
```

Запись LIST повторяется NLS-раз, пока будут приведены резонансные параметры для резонансов со всеми значениями l (в порядке возрастания). Для каждого значения l величины ER задаются также в порядке возрастания.

2.2.1.3. Формула Адлер-Адлера (LRU=1, LRF=4)

Для этого случая также вводятся дополнительные величины:

LI параметр, указывающий на то, какие ширины приводятся:

- LI=1, только полные ширины,
- =2, только делительные ширины,
- =3, полные и делительные ширины,
- =4, только радиационные ширины,
- =5, полные и радиационные ширины,
- =6, делительные и радиационные ширины,
- =7, полные, делительные и радиационные ширины.

NX число заданных наборов констант фоновых сечений. Каждый набор описывает определенный тип сечения. Набор содержит шесть констант. Фоновые поправки для полного сечения вычисляются при помощи шести констант следующим образом:

σ_T Фоновая подложка = $[C/\sqrt{E} (AT_1 + AT_2/E + AT_3/E^2 + AT_4/E^3 + BT_1E + BT_2E^2)]$

где $C = \pi\lambda^2 = \pi/k^2$, а волновое число k определяется в Приложении D.

Подложка для деления и радиационного захвата рассчитывается аналогичным образом.

Если NX=2 задаются фоновые константы для полного сечения и сечения радиационного захвата.

Если NX=3 задаются фоновые константы для полного сечения, сечения деления и для сечения радиационного захвата.

NJS количество наборов параметров разрешенных резонансов (каждый набор характеризуется значением спина J) для определенного значения l .

NLJ количество резонансов, для которых задаются параметры, для определенных AJ и L (т.е. J и l);

AT₁, AT₂, AT₃, AT₄, BT₁, BT₂ константы фонового полного сечения

AF₁, AF₂, AF₃, AF₄, BF₁, BF₂ константы фонового сечения деления

AC₁, AC₂, AC₃, AC₄, BC₁, BC₂ константы фонового сечения радиационного захвата

DETr	энергия резонанса, (μ), для полного сечения. Здесь и ниже индекс r обозначает r -ый резонанс ⁸ .
DEFr	энергия резонанса, (μ), для сечения деления
DECr	энергия резонанса, (μ), для сечения радиационного захвата
DWTr	значение $\Gamma/2$, (ν), для полного сечения
DWFr	значение $\Gamma/2$, (ν), для сечения деления
DWCr	значение $\Gamma/2$, (ν), для сечения радиационного захвата.
GRT_r	симметрический параметр для полного сечения, G_r^T .
GIT_r	несимметрический параметр для полного сечения, H_r^T .
GRF_r	симметрический параметр для сечения деления, G_r^f .
GIF_r	несимметрический параметр для сечения деления, H_r^f .
GRC_r	симметрический параметр для сечения захвата, G_r^c .
GIC_r	несимметрический параметр для сечения захвата, H_r^f .

Структура подсекции, содержащей данные для LRU=1 и LRF=4, зависит от величины NX (количество наборов фоновых констант). Структура для наиболее общего случая (NX =3) следующая:

```
[MAT, 2, 151/ 0.0, 0.0, 0, 0, NR, NP/ Eint / AP(E)] TAB1
```

(запись TAB1 для энерго-зависимого радиуса рассеяния не обязательна).

```
[MAT, 2, 151/ SPI, AP, 0, 0, NLS, 0] CONT
[MAT, 2, 151/ AWRI, 0.0, LI, 0, 6*NX, NX/
  AT1, AT2, AT3, AT4, BT1, BT2,
  AF1, -----, BF2,
  AC1, -----, BC2] LIST
[MAT, 2, 151/ 0.0, 0.0, L, 0, NJS, 0] CONT(l)
[MAT, 2, 151/ AJ, 0.0, 0, 0, 12*NLI, NLI/
  DET1, DWT1, GRT1, GIT1, DEF1, DWFr1,
  GRF1, GIF1, DEC1, DWC1, GRC1, GIC1,
  DET2, DWT2, -----,
  -----, GIC2,
  DET3, -----
  -----, GICNLJ] LIST
```

Последняя запись LIST повторяется для каждого J - состояния (поэтому всего будет NJS таких записей LIST). За первой порцией NJS записей LIST будет следовать новая запись CONT(l=1); за ней соответствующая порция NJS записей LIST и т.д. пока не будут исчерпаны все NLS значений l . Разумеется, для разных l числа NJS могут различаться. Заметим, что если NX=2, то величины AF₁, ..., BF₂ в первой записи LIST не задаются. Если LI≠7, то не нужные параметры для каждого уровня зануляются, именно, нули проставляются в полях для не определяемых параметров (в зависимости от значения LI).

Поскольку формат не предусматривает прямого расчета сечения рассеяния, его следует получать путем вычитания суммы сечений захвата и деления из полного сечения.

Хотя формат предусматривает разделение резонансов по спинам J, это разделение в расчетах никак не используется. В формуле Адлеров не предусматривается учет интерференции между резонансами с различными спинами, аналогичного резонанс-резонансному интерференционному члену, имеющемуся в формуле Райха-Мура. Эта интерференция должна учитываться явно путем задания несимметрических членов в сечениях деления и захвата.

⁸ Отметим, что DETr=DEFr=DECr и DWTr=DWFr=DWCr.

Избыточность параметров связан с исторически

2.2.1.4.(LRU=1, LRF=5) больше не доступен

2.2.1.5.(Удален)

2.2.1.6.(LRU=1, LRF=6) больше не доступен

2.2.1.7. Ограниченный R-матричный формализм (LRU=1, LRF=7)

В R-матричной теории рассеяния, канал определен двумя частицами, образующими этот канал, и квантовыми числами для их комбинации. В дальнейшем эти две частицы упоминаются как пара частицы (PP- particle-pair), и определяются свойствами: нейтрона (или другой частицы) и ядра-мишени (в основном или возбужденном состоянии) с индивидуальными идентификаторами, такими, как масса, спин, четность, заряд. Дополнительные квантовые числа, определяющие канал, включают орбитальный угловой момент l , спин канал s и соответствующую четность, и полный спин и четность J^π .

Замечание: Этот формат не ограничен одним нейтронным (входным) каналом и двумя выходными каналами. Входных каналов может быть несколько, а выходных каналов - множество. Не исключены выходные каналы с заряженными частицами.

Чтобы определить набор резонансов с одинаковыми каналами и квантовыми числами может использоваться термин "спиновая группа". В спиновой группе постоянны только полный спин и четность. Она может включать несколько входных каналов и/или выходных каналов (каналов реакций), каждый из которых характеризуется своими значениями значений l или s , и т.д.

Формат "ограниченного R-матричного формализма" (RML-R-Matrix Limited) был разработан, чтобы ввести в обиход формализм R-матрицы в том виде, в котором он реально осуществлен в программах анализа, используемых для оценки ядерных данных. В Прeжде всего формат определяет пары частиц: их массы, спины и четности, а также заряды; кроме того определяются величины Q и значение MT (которое определяет тип реакции между парой частиц - упругое рассеяние, деление, неупругое рассеяние, захват, и т.д.). Всегда должны быть определены по крайней мере две пары частиц: нейтрон + ядро-мишень в основном состоянии и гамма + составляет ядро. При необходимости включаются и другие пары частицы.

Список резонансных параметров упорядочивается по значениям J и π , которые являются единственными постоянными величиной для любой спиновой группы. В каждой спиновой группе, каналы сначала определены в порядке, в котором они появятся в списке резонансов. Для каждого канала задаются номер пары частиц и значения для l и s , наряду с радиусами канала. Детали прояснятся из дальнейшего.

2.2.1.7.1. Форматы для основной подсекции RML

Определяются (а в некоторых случаях, переопределяются) дополнительные величины:

KMP Признак, указывающий, какие формулы для R-матрицы должны использоваться.
KRM = 1 для одноуровневого Брейт-Вигнаровского представления,
KRM = 2 для многоуровневого Брейт-Вигнаровского представления,
KRM = 3 для представления Райха-Мура,
KRM = 4 для полной R-матрицы (позднее могут быть добавлены и другие.)

KRL Признак равный нулю для нерелятивистского кинематики, и единице для релятивистской.

NJS Полное число комбинаций J^π ,

NPP	Общее количество пар частицы.
IA	Спин (и четность, если отлична от нуля) первой частицы в паре (нейтрон или иная налетающая частица, если это - входной канал).
IB	Спин второй частицы в паре (ядро-мишень, если это - входной канал). IB равен нулю и игнорируется, если первая частица - фотон.
PA	Четность первой частицы в паре, используется только в случае, где IA - ноль и четность отрицательна. В этом случае полагается PA=-1.0. Если IA≠0, четность определяется знаком IA.
PB	Четность второй частицы, используется, если IB = 0 и четность отрицательна.
MA	Масса первой частицы в паре (в единицах нейтронной массы).
MB	Масса второй частицы (в единицах нейтронной массы).
ZA	Заряд первой частицы.
ZB	Заряд второй частицы.
QI	Величина Q для этой пары частицы. (см. раздел. 3.3.2)
PNT	Признак потребности в расчете проницаемости: если проницаемость должна быть рассчитана, то PNT = 1, если нет, то PNT =-1, (значение по умолчанию зависит от номера; MT=108 подразумевает PNT =-1, для других обычно - PNT = +1).
SHF	Признак необходимости расчет фактора сдвига: если он должен быть рассчитан, то SHF =1, если нет SHF =-1 (по умолчанию SHF =-1)
MT	Тип реакции, связанный с парой частиц, см. Приложение В.
AJ	Значение J (спин) в формате REAL; знак указывает четность.
PJ	Четность (используется только, если AJ = 0.0).
NCH	Число каналов для данной комбинации J^π .
IPP	Номер пары частиц для этого канала (записанный в формате REAL)
L	Орбитальный угловой момент (REAL).
SCH	Спин канала (записанный в формате REAL).
BND	Граничное условие для этого канала (необходимо, когда SHF = + 1)
APE	Эффективный радиус канала (радиус рассеяния), используемый только для вычисления сдвига фазы (в единицах - 10^{-12} см).
APT	Эффективный радиус канала (радиус рассеяния), используемый для вычисления проницаемости и факторов смещения. (в единицах - 10^{-12} см).
KBK	Признак, отличный от нуля, если существует подложка к R-матрице; см. секцию 2.2.1.7.2. (Обычно равен 0.)
KPS	Признак, отличный от нуля, если сдвиг фазы должен рассчитываться не по - сферической модели (часто принимается равным 0.)
NRS	Число резонансов для данного J^π .
NX	Число строк, требуемых для записи всех резонансов с данным J^π , полагая, что параметры каждый резонанса начинают записываться с начала новой ; NX=(NCH/6+1) *NRS. Если для спиновой группы никаких резонансов не задано, то NX = 1.
ER	энергия резонанса в eV.
IFG	Признак, равный 0, если GAM - ширина канала в eV, IFG= 1, если GAM представляет собой амплитуду приведенной ширины в $eV^{1/2}$.
GAM	Ширина канала в eV или амплитуда приведенной ширины в $eV^{1/2}$.

Замечание: Для IFG = 0, входное величина GAM - ширина при энергии резонанса; амплитуды приведенных ширин рассчитываются по соотношению (7) из D.1.7, с E равным E_λ . (Для связанных состояний с отрицательной энергией, по соглашению приведенная ширина рассчитывается с использованием абсолютного значения энергии резонанса.) Во всех случаях, если величина GAM, заданная в Файле 2 для парциальной ширины отрицательна, по соглашению: отрицательный знак относится к амплитуде приведенной ширины $\gamma_{\lambda c}$, а не с $\Gamma_{\lambda c}$ (так как $\Gamma_{\lambda c}$ всегда положительная величина). Более определенно: $\Gamma_{\lambda c} = |GAM|$, а $\gamma_{\lambda c} = \text{sign}(GAM) * \sqrt{GAM/2P}$, где проницаемость P оценена при энергии резонанса.

Если $IFG = 1$, приводимое значение есть амплитуда приведенной ширины γ_λ .

Форматы следующие:

```
[MAT,2,151/ 0.0, 0.0, IFG, KRM, NJS, KRL ]
CONT
```

Следующая запись охватывается все описания пар частиц. Для KRM=1, 2 или 3 первая пара это фотон и составное ядро.

```
[MAT,2,151/ 0.0, 0.0, NPP, 0, 12*NPP, 2*NPP/
MA1, MB1, ZA1, ZB1, IA1, IB1,
Q1, PNT1, SHF1, MT1, PA1, PB1,
MA2, MB2, ZA2, ZB2, IA2, IB1,
Q2, PNT2, SHF2, MT2, PA2, PB1,
-----
MANPP, MBNPP, ZANPP, ZBNPP, IANPP, IBNPP,
QNPP, PNTNPP, SHFNPP, MTNPP, PANPP, PBNPP ] LIST
```

Следующая запись охватывает описания всех каналов для спиновой группы.

```
[Mat,2,151/ AJ, PJ, KBK, KPS, 6*NCH, NCH/
IPP1, L1, SCH1, BND1, APE1, APT1,
IPP2, L2, SCH2, BND2, APE2, APT2,
-----
IPPNCH, LNCH, SCHNCH, BNDNCH, APENCH, APTNCH] LIST
```

Следующая запись задает величины энергий резонансов и ширин для каждого резонанса в спиновой группе.

```
[Mat,2,151/ 0.0, 0.0, 0, NRS, 6*NX, NX/
ER1, GAM1,1, GAM2,1, GAM3,1, GAM4,1, GAM5,1,
GAM6,1, GAMNCH,1,
ER2, GAM1,2, GAM2,2, GAM3,2, GAM4,2, GAM5,2,
GAM6,2, ..., GAMNCH,2,
-----
ERNRS, GAM1,NRS, GAM2,NRS, GAM3,NRS, GAM4,NRS, GAM5,NRS,
GAM6,NRS, ..., GAMNCH,NRS ] LIST
```

Если для данной спиновой группы резонансов не приводится, то в этой записи NRS = 0 , но NX=1.

Как описано в разделе 2.2.1.7.2, за этим могут следовать и другие записи.

Если KBK больше 0, то задается R-матричная подложка.

Если KPS больше 0, задаются табличные значения фазовых сдвигов.

Если KBK = 0 и KPS = 0, дополнительных записей не нужно.

Записи, начиная с «описаний каналов», повторяются до тех пор, пока каждая из J^{π} спиновых групп полностью не будет определена.

2.2.1.7.2. Форматы для дополнительных расширений к RML

Форматы, используемые в предыдущей секции, достаточны для представления большинства, реально существующих на 2003 г оценок (используя KRM = 3, KBK = 0 и KPS = 0). В формат RML для единообразия включены дополнительные возможности для возможных будущих развитий R-матричных программ анализа.

2.2.1.7.2.1 Различные формулировки R-матрицы (KRM = 1,2,4)

Уравнения, данные в Приложении D.1.7, относятся к приближению Райха-Мура в теории R-матрицы. Однако, формат может также использоваться для одноуровневого (KRM = 1), многоуровневого приближения Врайта-Вигнера (KRM = 2) и R-матрицы без приближений (KRM = 4).

Уравнения для KRM = 1 или 2 будут написаны, если/когда потребность возникает. Уравнения для KRM = 4 идентичны данным в Приложении D.1.7 с устранением мнимой величины в знаменателе уравнения (6), и включением каждого гамма-канала на равном основании со всеми другими каналами.

2.2.1.7.2.2 Фоновая подложка к R-матрице (KBK > 0):

Как описано в Приложении D (D.1.7.7), фоновая подложка может быть определена различными методами.

При KBK = 0, для всех каналов спиновой группы для подложки R-матрицы используется опция 0. В этом случае не требуются никакие дополнительные форматы, и не требуется включать никаких дополнительных записей. Подложка описывается с помощью фиктивных резонансов, включенных в запись LIST наряду с реальными резонансами.

При KBK > 0, для каждого канала текущей спиновой группы включается одна дополнительная запись LIST (и две записи TAB1, содержащих табулируемые данные); общее число записей равно NCH. Конкретная опция, используемая для задания фоновой подложки для канала, определяется параметром LBK. Ниже определены форматы для четырех опций

Опция 0. Фиктивные резонансы (LBK = 0)

Эта запись не содержит никакой информации, кроме LBK = 0. Никаких членов к R-матрице для этого канала не добавляется.

```
[Mat,2,151/ 0.0, 0.0, 0, 0, LBK, 1/  
            0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0 ] LIST
```

Опция 1. Табулированная сложная функция энергии (LBK = 1)

Примечание:

RBR Значение реальной части табулированной функции

RBI Значение мнимой части табулированной функции

```
[Mat,2,151/ 0.0, 0.0, 0, 0, LBK, 1/  
            0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0] LIST  
[Mat,2,151/ 0.0, 0.0, 0, 0, NR, NP/ Eint / RBR(E) / TAB1  
[Mat,2,151/ 0.0, 0.0, 0, 0, NR, NP/ Eint / RBR(E) / TAB1
```

Напомним, что NR и NP - параметры, которые определяют схему интерполяции в записях TAB1, см. раздел 0.7.7. Значения энергии, задаваемые E_{int}, приводятся в единицах eV.

Опция 2. Логарифмическая параметризация SAMMY (LBK = 2)

Примечание: см. уравнение (47) в разделе D.1.7.7 для определения смысла нижеследующих величин:

R0	$\bar{R}_{com,c}$	S0	$\bar{S}_{com,c}$				
R1	$\bar{R}_{lin,c}$	S1	$\bar{S}_{lin,c}$				
R2	$\bar{R}_{g,c}$						
EU	E_c^{up}	ED	E_c^{down}				


```
[Mat,2,151/ ED, EU, 0, 0, LBK, 1/
R0, R1, R2, S0, S1, 0.0] LIST
```

Опция 3. :Параметризация Фрёнера (LBK = 3)

Примечание: см. уравнение (48 и 49) в разделе D.1.7.7 для определения смысла нижеследующих величин.

R0	\bar{R}_c	S0	\bar{s}				
GA	Γ_γ						
EU	E_c^{up}	ED	E_c^{down}				


```
[Mat,2,151/ ED, EU, 0, 0, LBK, 1/
R0, S0, GA, 0.0, 0.0, 0.0] LIST
```

2.2.1.7.2.3 Табулированные фазовые сдвиги (KPS = 1)

Если фазовые сдвиги рассчитаны заранее (по оптической модели, например), а не по обычным формулам сферической оптики, то рассчитанные сдвиги должны быть представлены в табличной форме.

Если параметр KPS равен 0, все фазовые сдвиги рассчитываются по формулам сферической оптики (см. Таблицу D.1.7.1 для некулоновских фазовых сдвигов, раздел D.1.7.2 для кулоновских фазовых сдвигов).

Если $KPS > 0$, то для каждого канала текущей спиновой группы вводится одна запись LIST (и две записи TAB1, для табулированных величин), общим числом NCH-записей. Специальная опция, которая используется для канала, определяется параметром LPS. Форматы для этих двух вариантов следующие:

Опция 0. Фазовые сдвиги рассчитываются по сферической оптике-(LPS = 0)

В записи LIST не приводится ничего, кроме $LPS = 0$.

```
[Mat,2,151/ 0.0, 0.0, 0, 0, LPS, 1/
0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0] LIST
```

Опция 1. Фазовое смещение - сведенная в таблицу сложная функция энергии (LPS = 1)

Примечание:

PSR Величина реальной части табулированного фазового сдвига

PSI Величина мнимой части табулированного фазового сдвига

```

[Mat,2,151/ 0.0, 0.0, 0, 0, LPS, 1/
            0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0] LIST
[Mat,2,151/ 0.0, 0.0, 0, 0, NR, NP/ Eint / PSR (E) / TAB1
            0.0, 0.0, 0, 0, NR, NP/ Eint / PSR (E) / TAB1

```

Напомним, что NR и NP - параметры, которые определяют интерполяционную схему в записях TAB1, как показано в разделе 0.7.7. Значения энергии в E_{int}, приводятся в eV.

2.3. ПАРАМЕТРЫ НЕРАЗРЕШЕННЫХ РЕЗОНАНСОВ (LRU=2)

2.3.1. Форматы

Для параметров неразрешенных резонансов используется только один формализм (см. соответствующие формулы в Приложении D). Однако существует несколько вариантов задания энергетической зависимости параметров, отмеченных флагом LRF. Так как параметры неразрешенных резонансов являются усредненными по энергии параметрами разрешенных резонансов, то они не зависят от энергии в пределах интервала усреднения. Однако, от интервала к интервалу они могут изменяться. Именно эта энергетическая зависимость и рассматривается здесь и в последующих параграфах.

Параметры зависят как от l (орбитальный момент количества движения), так и от J (полный угловой момент). Каждая ширина распределена в соответствии с χ^2 - распределением с определенным числом степеней свободы. Это число может быть различным для нейтронной и длительной ширины, а также для различных каналов (l, J).

При описании параметров неразрешенных резонансов (LRU=2) используются следующие величины:

SPI	спин ядра-мишени,
AP	радиус рассеяния в единицах 10^{-12} см. Существующий формат не предусматривает возможности задания зависимости этого радиуса от квантовых чисел.
LSSF	Признак, определяющий интерпретацию сечений, заданных в Файле 3 LSSF=0, Файл 3 содержит парциальные подложки, которые следует добавить к сечениям, рассчитанным по параметрам Файла 2. LSSF=1, Файл 3 содержит средние сечения в области неразрешенных резонансов целиком. Это – сечения для материала, концентрация которого в среде ничтожно мала (условие бесконечного разбавления). Файл 2 в этом случае следует использовать только для расчета факторов самоэкранировки, как описано в Разделе 2.4.21.
NE	количество энергетических точек, в которых определяются средние ширины, зависящие от энергии ($NE \leq 250$)
NLS	число значения l ($NLS \leq 3$)
ESi	энергия i -ой энергетической точки в таблице энергетической зависимости ширин.
L	величина орбитального момента l .
AWRI	отношение массы рассматриваемого изотопа к массе нейтрона.
NJS	число допустимых значений J для данного значения l ($NJS \leq 6$)
AJ	значение J (спин или полный угловой момент для тех состояний, которые описываются данным набором параметров) – записанный в формате REAL.
D	среднее расстояние между резонансами со спином J (может зависеть от энергии, если LRF =2)
AMUX	число степеней свободы, определяющее распределение ширин конкурирующего процесса (если этот процесс - неупругое рассеяние, то

	$1.0 \leq AMUX \leq 2.0$ в зависимости от того равняется ли нулю спин основного состояния или нет) ⁹ .
AMUN	число степеней свободы, определяющее распределение нейтронной ширины ($1.0 \leq AMUN \leq 2.0$).
AMUG	число степеней свободы, определяющее в распределение радиационной ширины. В данное время $AMUG = 0.0$ означает постоянство Γ .
AMUF	число степеней свободы определяющее распределение делительной ширины ($1.0 \leq AMUF \leq 4.0$)
MUF	целое число степеней свободы для делительных ширин ($1 \leq MUF \leq 4$).
INT	определяет схему интерполяции сечений, рассчитанных по средним резонансным параметрам. Интерполяция параметров рассматривается в параграфах 2.4.2.
GNO	средняя приведенная нейтронная ширина. Если $LRF=2$, она может зависеть от энергии.
GG	средняя радиационная ширина. Если $LRF=2$, она может зависеть от энергии.
GF	средняя делительная ширина. Если $LRF=1$, или 2 она может зависеть от энергии.
GX	средняя ширина конкурирующей реакции, задаваемая только тогда, когда $LRF=2$ (все ширины зависят от энергии).

Структура подсекции¹⁰ зависят от значения признака $LRF=1$. Если $LRF=1$, только делительная ширина зависит от энергии. Если $LRF=1$ и делительная ширина не задается (указывается $LEW=0$), структура подсекции наиболее проста. При $LRF=2$ от энергии могут зависеть плотность уровней, средняя ширина конкурирующего процесса, средняя приведенная нейтронная ширина, радиационная ширина и средняя делительная ширина. Ниже приведены три примера формата (все для $LRU=2$ – т.е. для области неразрешенных резонансов).

A. $LEW=0$ (делительная ширина не задается)

$LRF=1$ (параметры от энергии не зависят)

Структура подсекции:

```
[MAT, 2,151/ SPI,    AP,  LSSF,    0,   NLS,    0] CONT
[MAT, 2,151/ AWRI,  0.0,    L,     0,  6*NJS,  NJS/
      D1,   AJ1, AMUN1,  GN01,   GG1,  0.0,
      D2,   AJ2, AMUN2,  GN02,   GG2,  0.0,
      -----
      DNJS, AJNJS, AMUNNJS, GN0NJS, GGNJS, 0.0] LIST
```

Запись LIST повторяются для каждого значения l пока не исчерпаются все значения. Предполагается, что параметр AMUG равен 0 и конкурирующая ширина отсутствует.

B. $LEW=1$ (заданы делительные ширины)

$LRF=1$ (только делительные ширины зависят от энергии, остальные – от энергии не зависят).

Структура подсекции:

⁹ См. Приложение D. Раздел D.2.2.6.

¹⁰ Структура этой секции была определена ранее, и охватывала подсекции для разрешенных и неразрешенных резонансов.

```

[MAT, 2,151/ SPI, AP, LSSF, 0, NE, NLS] CONT
          ES1, ES2, ES3, -----
          ESNE] LIST
[MAT, 2,151/ AWRI, 0.0, L, 0, NJS, 0] CONT
[MAT, 2,151/ 0.0, 0.0, L, MUF, NE+6, 0/
          D, AJ, AMUN, GNO, GG, 0.0,
          GF1, GF2, GF3, -----
          GFNE] LIST

```

Такая запись LIST повторяется для каждого состояния J (таких записей LIST будет NJS). Затем приводится следующая серия записей LIST, для состояний J, образуемых при взаимодействии нейтронов со следующим значением орбитального момента, и так до тех пор, пока не будут исчерпаны все моменты (получится NLS наборов данных).

В предыдущей секции параметр INT не определялся, предполагается, что закон интерполяции сечений линейно-линейный.

С. LFW =0 или 1 (формат не зависит от LFW)

LRF =2 (все параметры зависят от энергии).

Структура подсекции:

```

[MAT, 2,151/ SPI, AP, LSSF, 0, NLS, 0] CONT
[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, GNO1, GG1, GF1,
          ES2, D2, GX2, GNO2, GG2, GF2,
          -----
          ESNE, DNE, GXNE, GNONE, GGNE, GFNE] LIST

```

Запись LIST повторяется, пока не будут приведены данные для всех J состояний для данного значения l. Затем снова следует запись CONT(l) и задаются все данные для каждого значения J для следующего значения l.

Структура повторяется, пока не будут приведены данные для всех значений l. В этом варианте можно задать числа степеней свободы для распределений всех 4-х шириин.

2.4. ПРОЦЕДУРЫ ДЛЯ ОБЛАСТЕЙ РАЗРЕШЕННЫХ И НЕРАЗРЕШЕННЫХ РЕЗОНАНСОВ.

СОДЕРЖАНИЕ ПАРАГРАФА.

- 2.4.1. Аббревиатуры
- 2.4.2. Интерполяция в области неразрешенных резонансов.
- 2.4.3. Перекрывание областей разрешенных и неразрешенных резонансов.
- 2.4.4. Разрывы на границах энергетических областей.
- 2.4.5. Численное интегрирование в области неразрешенных резонансов.
- 2.4.6. Доплеровское уширение плавных сечений, заданных в Файле 3.
- 2.4.7. Использование фиктивных значений J.
- 2.4.8. Эквивалентные одноуровневые представления.
- 2.4.9. Использование формулы Райха-Мура.
- 2.4.10. Ширина конкурирующего процесса в резонансной области.
- 2.4.11. Отрицательные сечения в области разрешенных резонансов.
- 2.4.12. Отрицательные сечения в области неразрешенных резонансов.
- 2.4.13. Использование двух ядерных радиусов.
- 2.4.14. Многоуровневая формула Адлера-Гаусса для MLBW.
- 2.4.15. Замечания по формуле Адлеров.

- 2.4.16. Сравнение многоуровневых и одноуровневых формул, в областях разрешенных и неразрешенных резонансов.
- 2.4.17. Предпочитаемые формализмы для описания резонансных сечений.
- 2.4.18. Затраты машинного времени на построение сечений по формализму MLBW.
- 2.4.19. Амплитудно-квадратичная форма MLBW формулы.
- 2.4.20. Числа степеней свободы, определяющие распределения параметров неразрешенных резонансов.
- 2.4.21. Процедуры для неразрешенных резонансов.
- 2.4.22. Процедуры для расчета угловых распределений в области разрешенных резонансов.
- 2.4.23. Полнота и сходимость канальных сумм.
- 2.4.24. Спины каналов и другие вопросы.

2.4.1. Аббревиатуры

UR(R)	неразрешенные резонансы(область)
RR(R)	разрешенные резонансы(область)
RRP	параметры разрешенных резонансов
URP	параметры неразрешенных резонансов
SLBW	одноуровневая формула Брейта-Вигнера
MLBW	многоуровневая формула Брейта-Вигнера
MLAG	многоуровневая формула Адлера-Гаусса
UCS	сечения в неразрешенной области

2.4.2. Интерполяция в области неразрешенных резонансов

Рекомендуемая процедура в энергозависимом формате (LRF=2 или LRF=1 с LFW=1) – процедура интерполяции сечений, полученных по параметрам неразрешенных резонансов(URP). Эта процедура отличается от используемых ранее в ENDF/B-III и IV процедур интерполяции параметров. Энергетическая сетка должна быть настолько подробной, чтобы сечение в промежуточных точках можно было рассчитать с достаточной точностью. Обычно для получения разумной точности требуется от трех до десяти точек на декаду. В некоторых оценках, сделанных ранее, этот подход не соблюдался. В таких случаях, если две соседние точки сетки отличались, более чем втрое, обрабатывающая программа должна была добавить промежуточные энергетические точки по энергии, приблизительно десять на декаду, и рассчитывать сечения в промежуточных точках по соответствующему закону интерполяции. Дополнительные сечения могут затем быть получены по интерполяции сечений обычным способом.

Для многих изотопов нет достаточной информации для полной энерго-зависимой оценки. В этих случаях, оценщик может представить один набор параметров неразрешенных резонансов, основанный на систематике или на экстраполяции из области разрешенных резонансов (см. LRF=1, LFW=0). Такой набор параметров имеет определенную энергетическую зависимость сечений в области неразрешенных резонансов благодаря медленно меняющемуся волновому числу, проницаемости и факторов сдвига в формулах SLBW. Однако, некорректно рассчитывать сечения в на концах UR областей, а затем получать промежуточные сечения через интерполяцию сечений. Вместо этого, обрабатывающей программе следует сгенерировать набор промежуточных энергий, используя аппроксимацию десять точек на декаду, и затем рассчитать сечения на этой сетке, используя один набор параметров, заданный в файле. Дополнительные промежуточные значения затем получают по линейной интерполяции сечений, как в энерго-зависимом случае.

Рекомендуется, чтобы, оценщики, обеспечивали задание параметров неразрешенных резонансов на достаточно частой сетке, чтобы различия в результатах интерполяции

параметров или рассчитанных по ним сечениям были небольшими. Максимальное различие в 1% было бы идеальным, но и 5% вполне приемлемо.

Конечно, даже если сам оценщик задает параметры сетки, пользователь может внести изменения по количеству. Это будет разумно, если в сечении проявляется структура, не описываемая параметрами неразрешенных резонансов, и пользователь решает принять иные подложки, чем рекомендуется в оценке. Решения этой проблемы пока не существует, но использование частой сетки сводит разногласия к минимуму.

Для того, чтобы дать возможность пользователю определить, какие ошибки он сделал, оценщикам рекомендуется указывать в документации какие средние сечения они имели в виду представить параметрами в файле 2. Заметим, что опция фактора самоэкранировки, определяемая LSSF (раздел 2.3.1. и 2.4.21) значительно уменьшают влияние этой неоднозначности.

2.4.3. Неразрешенные резонансы в области разрешенных резонансов

Как указывалось в разделе 2.4.4., границу между разрешенными и неразрешенными областями следует выбирать так, чтобы в UR области было применимо статистическое рассмотрение резонансов. Это порождает некоторые проблемы при оценке резонансных параметров в RR-области.

Проблема 1. Вблизи верхней границы области разрешенных резонансов слабые резонансы пропускаются. Необходимо поэтому внести в Файле 3 компенсирующую этот пропуск плавные подложки в сечения. Самоэкранировка этой подложки не будет учитываться обрабатывающими программами, поэтому, она не должен быть «значительной». Лучший путь – это ввести фиктивные параметры, которые дополнят измеренные резонансы так, чтобы обеспечит сохранение статистических свойств и согласие усредненных сечений с результатами измерений с низким разрешением. Если используются оба метода, необходимо позаботиться о том, чтобы статистические распределения параметров, приведенных в файле 2, не оказалась искаженными.

Проблема 2. Поскольку d-резонансы уже, чем r-резонансы, которые в свою очередь уже s-резонансов, энергия, начиная с которой r-резонансы неразрешены, ниже границы разрешимости s-резонансов, а d-резонансы становятся неразрешенными, начиная с еще более высокой энергии. Поэтому область неразрешенных r-резонансов обычно налагается на область разрешенных s-резонансов. То же смеет место и для d-волны. Действующий формат не допускает точного учета этого эффекта: граница разрешимости должна быть одинаковой для всех значений l .

Возможные способы приближенного учета аналогичны изложенным выше: описание известных или оцененных резонансов в виде плавной подложки к UR-области или введение оцененных «фиктивных» резонансов в RR-области. Предпочитается последнее, так как узкие резонансы более подвержены самоэкранировке, чем широкие и, следовательно, ошибка, вызванная неучетом самоэкранировки плавной подложки, возможно, будет не пренебрежимо малой.

2.4.4. Разрывы на границах энергетических областей.

Может существовать 4 вида границ, которые разрешены в RR-области:

1. между низко-энергетической областью, заданной в файле 3 (область 1), и EL для RR области (область 2),
2. между последовательными RR - областями,
3. между высокоэнергетической RR областью и UR,
4. между EH для UPR и высокоэнергетической областью из Файла 3.

На каждой границе могут быть разрывы сечений. Разрыв на 1-й границе произойдет, если доплеровское уширение в интервалах 1 и 2 будет выполнено с помощью несогласованных

методов. Вообще говоря, уширение с помощью интегрального ядра будет непрерывным, только если сечение области 1 уширены при температуре, при которой они были измерены, а в области 2 по абсолютному 0. Если доплеровское уширение в области 1 учитывать с помощью интегрального ядра или вообще его не учитывать, а в области 2 с помощью функций ψ - χ , то разрыв на границе между областями неизбежен. При обычных реакторных температурах этот эффект, однако, не велик и хорошо знаком и реакторщикам и специалистам по ядерному оружию. Из-за этих проблем, обычно двойная точка по энергии не будет прерывать полное сечение, (файл 2 + файл 3), если оценщик и пользователь используют идентичные методы повсюду.

Разрыв произойдет между последовательным RR-областями, если оценщику не удастся установить "внешние" резонансы для каждой RR-области, чтобы получить непрерывность в абсолютном поле.

Если неуширенные сечения в двух последовательных RR-областях уширены отдельно, разрыв будет сохранен, и возможно увеличен. Эти разрывы, как полагают, являются технологически существенными.

Разрыв сечений на нижней границе области неразрешенных резонансов неизбежен, так как здесь меняется представление сечений. Однако¹¹, если сечения в RR-области усреднены по группам или сглажены иным образом, то влияние граничного разрыва будет очень мало. Если оно превышает 10 или 15% в среднем по специально выбранному интервалу, то оценщик может захотеть пересмотреть свою параметризацию области слабо-разрешенных резонансов. Некоторые материалы имеют большие реальные флуктуации в UR-области, для них -10 или 15% неприемлемы. На границе обычно задается двойная точка, которая, конечно, не ликвидирует разрыв.

Разрыв на верхней границе области неразрешенных резонансов должен быть небольшим, так как и в UR - области и в области высоких энергий, сечения довольно сильно размыты, и вероятность ошибки должна быть маленькой. Если разрыв составляет 5% или более, оценщик должен уделить этому внимание.

Верхние и нижние границы любого диапазона энергии указывают диапазон энергии действия параметров, заданных для вычисления сечения. Вне этого интервала энергии сечения должны быть получены по параметрам, заданным в другом диапазоне энергии и/или по данным в файле 3.

Чтобы статистические предположения были действительны в энергетическом диапазоне, следует выбирать более низкий предел энергии в URR. Основное требование состоит в том, чтобы в энергетически-усредняемом интервале было "много" резонансов и, чтобы он был узким относительно медленно-изменяющихся функций от E , таких как волновое число и проницаемость. Например, предположим, что энергетически-усредняемый интервал может простираться на 10 % выше и ниже энергетической точки, и в среднем на 1 эВ приходится один резонанс и "много"- это 100 в интервале. Тогда разумная самая нижняя энергия для URR была бы приблизительно 500 эВ, как в этом случае $0.2 * E_{LOW} = 100$. Некоторые соображения по выбору границ RR-UR-областей были обсуждены в разделе 2.4.3.

Иногда необходимо дать параметры, энергии которых лежат *вне* указанного диапазона энергии, чтобы вычислить сечения для нейтронных энергий, которые являются *в пределах* диапазона энергии. Например, для описания сечений при низких энергиях может потребоваться включение связанных состояний (т.е. лежащих при отрицательных энергиях нейтрона); зачастую требуется привязать параметры резонансов, лежащих выше границы EN для учета их вклада в область разрешенных резонансов.

¹¹ Здесь имеется ввиду разрыв между *средним* сечением в RR-области и точечным сечением в UR-области, которое рассчитывают по URR- параметрам. Если выбрана опция LSSF=1, (см. раздел 2.3.1), Файл 3 будет содержать сечения целиком, которые и должны быть выбраны так, чтобы разрыв был несущественен.

Для материалов, которые содержат больше, чем один изотоп, рекомендуется¹², чтобы нижний энергетический предел резонансной области был одинаковым для всех изотопов. Если разрешенные и/или неразрешенные параметры резонансов даются только для **некоторых** из природных изотопов, то в подсекциях для остальных изотопов должны быть заданы радиусы рассеяния AP.

Если используется несколько энергетических диапазонов, эти диапазоны не должны перекрываться и должны покрывать всю рассматриваемую в оценке область энергий.

Перекрывание областей разрешенных и неразрешенных диапазонов одного и того же изотопа недопустимо, в у разных изотопов естественной смеси границы RRR и URR могут быть различны (см., однако, примечание¹²). Этого трудно избежать, так как плотность уровней четно-четных и четно-нечетными изотопов резко различаются. Однако корректный учет резонансной самоэкранировки в таких случаях затруднен. Программа доплеровского уширения должна сначала вычесть усредненное по неразрешенным резонансам сечение (соответствующее бесконечному разбавлению), затем уширить поточечно заданное сечение, определенное резонансными параметрами и вновь добавить неразрешенную компоненту. При расчете групповых констант детальный ход сечений, полученный по резонансным параметрам (или непосредственно заданный поточечно), должен быть отделен от сечения, заданного параметрами неразрешенных резонансов; в последнем должна быть учтена резонансная самоэкранировка с учетом энергетически зависимого сечения разбавления, а затем обе компоненты должны быть усреднены по групповому интервалу¹³.

2.4.5. Численное интегрирование в области неразрешенных резонансов

При расчете эффективных сечений в UR-области следует учитывать эффект Доплера, резонансную самоэкранировку, перекрывание резонансов, а также статистические распределения параметров резонансов всех компонент смеси материалов.

В предыдущих рекомендациях ENDF/V для сложного многомерного интегрирования предлагалась схема Гриблера-Хатчинса [1], в основном трапецеидальное интегрирование. В программе MC²-II [2] для этой цели используется более хитроумный метод взвешенных ординат, который при тех же вычислительных затратах приводит к результатам на несколько процентов отличающихся от результатов интегрирования по Гриблеру-Хатчинсу. В настоящее время эта процедура рекомендуется всем¹⁴.

Рекомендуется также аналитический метод Бира [3], весьма элегантный, но, к сожалению, непригодный для использования в общем гетерогенном случае.

2.4.6. Доплеровское уширение «плавной» подложки, заданной в файле 3.

1. Вообще говоря, добавка в каждое сечение из файла 3 должна подвергаться доплеровскому уширению, но в действительности многие программы этого не делают. Поэтому оценщикам рекомендуется включать в файл 3 лишь небольшие подложки к или RR и UR-областям, так чтобы пренебрежение их доплеровским уширением незначительно влияло на сумму вкладов из файлов 2 и 3 при температурах до 300°K. К сожалению, разнообразие областей применения библиотеки ENDF/V не позволяет точно определить, что значит «незначительно».

2. . Обычной причиной структуры подложки, заданной в файле 3, является представление сечения, параметризованного многоуровневой формулой или в простой одноуровневый

¹² Фактически - требуется. Например, файл данных для урана-238 из библиотеки ФОНД-2.2, содержащий 2 фиктивных изотопа – ²³⁸U-s ²³⁸U-p – для описания разных границ RRR и URR для s- и p-резонансов, не обрабатывается программой NJOY – прим. переводчика.

¹³ Сложность этой процедуры побуждает оценщиков к составлению файлов для отдельных изотопов. То, в какой степени при этом учитывается экспериментальная информация для природной смеси изотопов остается на совести оценщика. – прим. переводчика.

¹⁴ Эта процедура поставляется автором – H. Henryson II (ANL)

формат SLBW. В этом случае в файл 3 заносятся различия между этими представлениями. Это различие обусловлено интерференционными всплесками и провалами, которые проявляются между резонансами и, следовательно, влияют на пропускание через толстые образцы, на поглощение в блоках поглотителя, в защите, в отражателях и т.п. Пользователи, работающие только в рамках SLBW-схемы должны иметь в виду эти эффекты при расчетах распространения нейтронов через протяженные области. Однако, применение Адлер-гауссовой формы многоуровневой формулы Брейта-Вигнера (см. раздел 2.4.14) позволяет обойти эту трудность. Если резонанс-резонансный интерференционный член в MLBW-формуле разложить на составные части, он представляется в виде суммы симметричных и антисимметричных одноуровневых SLBW-членов. Хотя каждый из этих членов характеризуется двумя параметрами, являющимися суммами по всем резонансам, эти суммы слабо зависят от энергии, благодаря чему в полученном приближении доплеровское уширение можно достаточно точно учитывать с помощью ψ и χ - функций.

3. Точный «в принципе» метод построения резонансных сечений состоит в следующем.

- а) Использование ядра Соллбриджа [12] для приведения сечений, заданных параметрически в файле 2, к температуре, при которой задана подложка в файле 3 (эта температура может быть отличной от нуля, например, комнатной).
- б) Суммирование данных файлов 2 и 3.
- с) Приведение суммарного сечения к требуемой температуре с использованием ядра Соллбриджа.

При малых энергиях использование ядра Гаусса вместо Соллбриджа приводит к небольшой ошибке, но если вообще не учитывать доплер-эффект, ошибка может быть достаточно большой. Использование ψ и χ -функций вносит добавочные ошибки. Фактически и ядро Соллбриджа основано лишь на аппроксимации движения молекул на основе модели свободного газа, но добиться большей точности довольно трудно.

4. Некоторые оценки тяжелых элементов используют представление Файла 3 ниже области разрешенных резонансов. Часто эти сечения задаются при комнатной температуре, так что если они будут позже уширены, предполагая, они заданы при нуле по Кельвину, то уширение получится двойное.

Простой способ уменьшить воздействие этой процедуры, не изменяя представление о данных – это вычислить сечения по параметрам резонансов, *уширенных при комнатной температуре*, и провести вычисление сечений в области низких энергии. Эти значения следует вычесть из результатов непосредственных измерений, заданных файла 3, и оставить в файле 3 только полученную *разность*. Разумеется, следует опустить нижнюю границу RRR до начала файла. В этом случае проблема "двойного уширения" затрагивает только (маленький) остаточный файл 3, а не все сечение.

Обратите внимание, что вычитание вклада резонанса *при нулевой температуре* не имеет смысла.

2.4.7. Приписывание значений J тем резонансом, для которых они неизвестны

Кроме формулы Адлеров, Величины J определяют какие резонансы интерферируют друг с другом (исключение составляет лишь формула Адлеров). Обычно значение J известно только для нескольких резонансов, а для других измерено лишь произведение $2g\Gamma_n$. Обычно, это число полагается равным Γ_n , что ведет к ошибке неопределенной величины, зависящей от того, насколько

$$g = \frac{2J+1}{2(2I+1)}$$

отличается от 1/2, сколь велика Γ_n относительно ширин других процессов и насколько существенна межрезонансная интерференция.

Оценщикам рекомендуется так приписывать каждому резонансу значения J , чтобы плотность уровней с данным спином была пропорциональна $2J+1$. Для того, чтобы ослабить интерференцию, значение J для соседних резонансов можно выбирать различными.

Раньше некоторые оценщики для резонансов с неизвестными значениями J принимали J равным спину ядра-мишени I . Это соответствовало $g=1/2$, вместо правильной величины. Смешивание резонансов $J=I$ с резонансами с известным спином $J=I=\pm 1/2$ в зависимости от выбранной резонансной формулы может привести либо к отрицательным сечениям рассеяния, либо к существенным искажениям сечения потенциального рассеяния.

В амплитудно-квадратичной формуле MLBW для сечения рассеяния

$$\sigma_m = \sum_{lJ} g_J \left| A_{pot}^{lJ} + A_{resonance}^{lJ} \right|^2 \quad (2.1)$$

использование резонансов с $J=I$ может привести к исчезновению эквивалентности между этой формулой и квадратичной формулой MLBW из Приложения D, так как в сумме по lJ будут фигурировать физически не допустимые значения.

Исключение составляет случай, когда спины J неизвестны, ни для одного резонанса. В этом случае, если всем резонансам присвоить $J=I$, то сечение рассеяния, рассчитанное по формализму MLBW, сохранится положительным.

2.4.8. “Эквивалентные” одноуровневые представления

Во многих инженерных программах, используемых проектировщиками реакторов, для описания резонансных эффектов используется одноуровневая формула Брейта-Вигнера. На вход этих широко используемых программ необходимо подавать SLBW-параметры. Для оценщиков ENDF/B, работающими с другими, более точными, представлениями, требуется переход к эквивалентному набору SLBW-параметров. Это не снижает важности использования уточненных методов, но и не устраняет необходимости предоставления в SLBW-параметров реакторным программам. Адлеровский формализм позволяет представить сечения, рассчитанные в многоуровневом многоканальном приближении, в псевдоодноуровневой форме, позволяющей учитывать доплеровское уширение с помощью ψ, χ – функций. Это очень полезно, однако при этом антисимметричные члены возникают не только в сечении рассеяния, но и в сечениях захвата и деления и далеко не все программы предусматривают учет асимметрии этих сечений.

Рекомендуются следующие пути использования параметров усложненных формализмов в SLBW-расчетах:

1. MLBW. Используйте приведенные параметры, так, как будто это SLBW-параметры.
2. Формализм Райха-Мура. Поступайте точно так же с тем лишь исключением, что абсолютные значения парциальных делительных ширин надо сложить и сумму использовать как Γ_f . (Альтернатива: преобразование Райха-Муровских параметров в адлеровские и использование последних так, как указано ниже).
3. Адлеровский формализм. Успешный опыт в преобразовании адлеровских параметров для ^{241}Pu и ^{233}U был получен при использовании метода, описанного в работе [4].
4. Гибридная R-функция. Используйте параметры, так, как будто это SLBW-параметры.

2.4.9. Использование формулы Райха-Мура.

Если оценка делящихся материалов в области низких энергий, где существенны только только с-резонансы, выполнена с на основе формализма Райха-Мура, оцененные параметры могут быть переведены в Адлеровское представление. Формула Райха-Мура имеет преимущество при оценке данных, поскольку в ней фигурируют резонансные спины и ее параметры теснее связаны с обычными резонансными

параметрами. В то же время формула Адлеров более удобна при использовании, так как позволяет применять для учета доплеровского уширения ψ и χ - функции.

Преобразовать набор многоуровневых резонансных параметров Райха –Мура для s-резонансов в формат Адлеров можно, в частности с помощью Программа POLLA [5]. Если преобразование вызывает несоответствие между сечениями Адлера и Райха-Мура превышающее 0,1%, его следует учесть в виде подложки, заданной в файле 3, т.к. преобразование никоим образом не должно изменять первоначально оцененного сечения. Это несоответствие можно минимизировать, если выходные параметры, полученные по программе POLLA, использовать в качестве входных данных в программе, подбирающей адлеровские параметры методом наименьших квадратов для наилучшего описания райх-муровских сечений.

Согласно BNL-50296¹⁵ программа RAMP1 с формализмом Райха-Мура, введенная в RESEND, обеспечивает нулевое искажение для s-резонансов и не создаст никаких проблем при описании p- и d-резонансов, если искажения при расчетах будут учтены в виде подложки.

2.4.10. Ширина, соответствующая конкурирующему процессу

2.4.10.1. Область разрешенных резонансов

Процедуры для области разрешенных резонансов описаны в параграфе 3.1. Приложения D.

2.4.10.2. Область неразрешенных резонансов

Процедуры для области неразрешенных резонансов описаны в параграфе 3.2. Приложение D. Пользователям рекомендуется также обратиться к параграфу 3.3. Приложения D, где содержатся замечания Х.Хенрисона–второго о возможных ошибках в расчете полного сечения по программе MC²-II.

2.4.11. Отрицательные сечения в области разрешенных резонансов

2.4.11.1. SLBW–формула

Сечения захвата и деления описываются положительными симметричными брейт-вигнеровскими членами, которые не могут быть отрицательными. Сечение рассеяния включает асимметричный брейт-вигнеровский член, который для $E < E_R$ отрицателен, что может явиться причиной отрицательных сечений.

Изолированный резонанс или набор далеко отстоящих друг от друга резонансов обычно не порождают отрицательных сечений. Но при близком расположении двух или более резонансов их отрицательные «хвосты» могут налагаться так, что получаться отрицательные суммарные сечения. На самом деле отрицательные «хвосты» должны компенсироваться положительными «хвостами» нижележащих резонансов и эффектами межуровневой интерференции. Однако, в файлах оцененных данных резонансы обычно задаются только до «E=0» - точки, на шкале энергии возбуждения составного ядра весьма произвольной. Поэтому для компенсации отрицательного смещения необходимо задание резонансов при отрицательных энергиях.

Кроме того, что отрицательные сечения рассеяния и сами по себе могут порождать вычислительные проблемы, что они искажают и полное сечение, которое определяет прохождение нейтронов через вещество, что может быть источником серьезных ошибок. Возможно, более важен тот факт, что даже когда сечение рассеяния остается положительным, оно порой слишком занижается из-за того же эффекта. Поскольку эта

¹⁵ M.R.Bhat, BNL-50296(ENDF 148) ENDF/B Processing Codes for Resonance Region, June, 1971
April 2001

погрешность проявляется и в полном сечении, она сказывается и на расчете поглощения нейтронов. Для того, чтобы компенсировать эффект отрицательного смещения вблизи нижней границы RRR, оценщик должен подобрать подходящие связанные так, чтобы скомпрометировать погрешности одноуровневого приближения заданием подложки в файл 3 (см. [6]).

Для того, чтобы устранить отрицательность внутри RRR необходим многоуровневый формализм, простейшим из которых является MLBW. Хотя MLBW не гарантирует, что сечения будут более точными чем при использовании SLBW, зато гарантируется их положительность (см. следующий параграф) и поэтому использование MLBW предпочтительней, чем SLBW.

Эффект систематического смещения происходит и на верхнем крае области разрешенных резонансов, где он менее заметен, так как в связи с положительностью этого смещения на результаты большинства вычислений оно не оказывает такого воздействия, как на низкоэнергетическом краю. Способ борьбы с этим смещением тот же – включение дополнительных резонансов в RR-область или компенсация погрешности путем задание подложки в файле 3. Последний метод требует введения в файл3 отрицательного вклада, который, будучи физически приемлемым, порождает не желаемые побочные эффекты в некоторых обрабатываемых программах. Поэтому компенсация погрешности путем введения дополнительных резонансов является более предпочтительной. Потребность в использовании одноуровневой формулы для поточечного вычисления сечения рассеяния возникает достаточно редко. Если же это требуется, расчеты, использующие поточечное представление сечений столь сложны, что при подготовке этих сечений вполне оправдано использование многоуровневых формул. Если же рассчитываются многогрупповые сечения, то в рамках точности этого приближения можно пойти, например, на зануление отрицательных сечений рассеяния. Такая процедура должна сопровождаться соответствующим увеличением в *полного* сечения.

2.4.11.2. MLBW–формула (многоуровневая формула Брейта-Вигнера)

Для сечений захвата и деления используются формулы SLBW, которые заведомо положительны. Для сечения рассеяния используется формула, которая представляет собой квадрат модуля, то есть неотрицательна. Использование фиктивных значений $I=J$ (раздел 2.4.7) может нарушить соответствие между формой полного квадрата и расширенной формой, рекомендуемой в Приложении D, и привести к отрицательным сечениям рассеяния. Обеспечивая не отрицательность, MLBW, тем не менее, не устраняет систематическое смещение сечений на краях RRR, если только это смещение не компенсируется дополнительными резонансами или подложкой в файл 3. Об этой компенсации должен позаботиться оценщик.

2.4.11.3. Формула Райха-Мура

Эта формула также выражается в виде квадрата модуля, который не может быть отрицательным. Однако, смещение сечений может иметь место и поэтому всегда нужны дополнительные резонансы или введение подложки в файл 3. Если преобразование райх-муровских параметров в адлеровский формат порождает отрицательные сечения, то адлеровские параметры следует подогнать так, чтобы ликвидировать отрицательность.

2.4.11.4. Формула Адлеров

Хотя и эта формула выведена в форме квадрата модуля и в принципе неотрицательна, на практике ее параметры выбираются так, чтобы описать результаты измерений. При этом те физические и математические ограничения на параметры, которые обеспечивают не отрицательность сечений, утрачиваются, и тогда любые сечения, вообще говоря, могут оказаться отрицательными. Если при оценке используется формула Адлеров, то

положительность восстановленных по формуле сечений должна проверяться. Эффект смещения на границах RRR в этом формализме также имеет место и его следует проверять для полных сечений и сечений рассеяния путем сравнения с экспериментом.

2.4.12. Отрицательные сечения в области неразрешенных резонансов

Р.Прэл (ANL) сообщил об осложнении с моделированием по программе VIM резонансного хода сечений в рамках SLBW - приближения по параметрам неразрешенных резонансов для молибдена (MAT,1287). Осложнение связано с тем, что отрицательная подложка в сечении захвата, заданная в файле 3 иногда ведет к отрицательным сечениям захвата в межрезонансных интервалах. Очевидно, оценщик пытался компенсировать этой подложкой завышение среднего сечения захвата в области неразрешенных резонансов, но не учел осложнения возникающее, когда эти параметры используются для другой цели.

Единственное средство устранить создавшуюся проблему – это отбросить отрицательную подложку в Файле 3 и так подогнать $\langle \Gamma \gamma \rangle$ или энергетическую сетку, чтобы обеспечить согласие с данными, соответствующими низкому разрешению.

Генерирование и использование выборок SLBW-параметров на заданных средних параметрах, возможно, породит тот же краевой эффект смещения и отрицательные сечения рассеяния, которые наблюдаются в области разрешенных резонансов. Хотя само по себе сечение рассеяния может быть не так уж важно, но соответствующее смещение полного сечения будет приводить к искажению вычисляемых скоростей реакций.

2.4.13. Использование двух ядерных радиусов

Два различных ядерных радиуса определяются действующими форматами ENDF:

- а) радиус рассеяния, A_R , и
- б) радиус канала, a .

Радиус рассеяния еще называют «эффективным радиусом рассеяния» или «радиусом потенциального рассеяния». Радиус канала определяют как «радиус черного ядра» или «радиус ядра». Первый из этих радиусов, обозначаемый A_R (в некоторых руководствах эта величина обозначается как a_+ , или \hat{a}), должен задаваться в файле 2 даже в том случае, когда резонансные параметры не приводятся; второй радиус – радиус канала - определяется формулой D.0, приведенной в Приложении D.

В R - матричной теории радиус канала – фундаментальная величина: на этом радиусе сливаются внутренняя и внешняя волновые функции и возникающие в результате фазовые сдвиги выражаются поэтому именно через этот радиус. Для упрощения теоретических выражений, в частности для неявного учета вклада далеких резонансов, целесообразно вместо одного радиуса ввести два, хотя явно в R-матричном формализме входит только один радиус.

В оригинальной версии ENDF/B форматов было предусмотрено задание величины A_M , или "a", хотя всегда требовалось, чтобы оценщики присваивали $A_M=0$, что указывало, что $A_M=A_R$. Сейчас задание A_M устранено. Однако возможно, что в изошранных методах оценки может возникнуть потребность не только в A_M , но в зависимости радиуса рассеяния от квантового числа канала (особенно для высоких энергии).

Согласно теории, радиус рассеяния зависит от всех канальных квантовых чисел и на практике нередко обнаруживается, что для различных значений l (s, p, d,...) и различных значений $J(p^{1/2}, p^{3/2}, \dots)$ требуются различные параметры оптического потенциала. А это и означает, что для каждого из этих состояний требуется задание собственного радиуса рассеяния.

В случае s-волны возможны только два значения J , а именно $l \pm 1/2$, обычно обозначаемые, J_+ и J_- . С ними и связаны обозначения a_+ и a_- .

Рекомендуемая в ENDF/B процедура (начиная с версии ENDF/B-V) состоит в том, чтобы использовать радиус канала для вычисления проникаемости P_l (ka) и факторов сдвига S_l (ka), а радиус рассеяния - для вычисления фаз рассеяния ϕ_l (kAP).

Так как ϕ_l определяют сечение потенциального рассеяния, то оценщик свободен в выборе AP, подбираемом из условия описания измеряемого сечения, не влияя при этом на те программы, которые вычисляют радиус канала через $A^{1/3}$.

В ENDF/B-VI появились новые параметры NRO и NAPS для того, чтобы оценщик больше имел возможностей применения формализмов SLBW, MLBW и RM, используя эмпирическую величину AP везде, где это нужно, и вводить ее энергетическую зависимость (раздел 2.1).

В формализме RML радиус канала может зависеть от всех квантовых чисел канала.

2.4.14. Многогрупповая формулировка Адлера-Гаусса для MLBW

В Приложении D приводятся в явном виде соотношения для MLBW-формализма:

$$\begin{aligned}\sigma_{n,\gamma}^{MLBW}(E) &\equiv \sigma_{n,\gamma}^{SLBW}(E), \\ \sigma_{n,f}^{MLBW}(E) &\equiv \sigma_{n,f}^{SLBW}(E), \\ \sigma_{n,n}^{MLBW}(E) &\equiv \sigma_{n,n}^{SLBW}(E) + \sum_{l=0}^{NLS-1} \sigma_{n,n}^{l,RRI}(E),\end{aligned}\quad (2.2)$$

где RRI означает резонанс – резонансную интерференцию для данного значения l :

$$\frac{\pi}{k^2} \sum_J g_J \sum_{r=2}^{NR_J} \sum_{s=1}^{r-1} \frac{2\Gamma_{nr}\Gamma_{ns}[(E-E'_r)(E-E'_s) + \Gamma_r\Gamma_s/4]}{[(E-E'_r)^2 + (\Gamma_r/2)^2][(E-E'_s)^2 + (\Gamma_s/2)^2]} \quad (2.3)$$

Как известно многим пользователям, вычисление двойной суммы по резонансам может потребовать громадного времени ЭВМ, если к нему подойти неразумно. Так для материала с 200 резонансами получаем ~ 40000 слагаемых, из которых, правда, только 20000 требуют вычисления, поскольку выражение симметрично по r и s .

За последнее время много раз отмечалось, что дроби в формуле (2.3) можно преобразовать к форме с брейт-вигнеровским знаменателем. Не так давно, Де-Сассюр, Олсен и Перец [6], вывели компактную формулу

$$\begin{aligned}\frac{\pi}{k^2} \sum_J g_J \sum_{r=1}^{NR_J} \frac{G_r \Gamma_r + 2H_r(E-E'_r)}{(E-E'_r)^2 + (\Gamma_r/2)^2}, \quad \text{where} \\ G_r = \frac{1}{2} \sum_{s=1}^{NR_J} \frac{\Gamma_{nr}\Gamma_{ns}(\Gamma_r + \Gamma_s)}{(E'_r - E'_s)^2 + \frac{1}{4}(\Gamma_r + \Gamma_s)^2}, \quad s \neq r \\ H_r = \sum_{s=1}^{NR_J} \frac{\Gamma_{nr}\Gamma_{ns}(E'_r - E'_s)}{(E'_r - E'_s)^2 + \frac{1}{4}(\Gamma_r + \Gamma_s)^2}, \quad s \neq r\end{aligned}\quad (2.4)$$

Несмотря на то, что упомянутые авторы рассматривают специальный случай для $l=0$, их результат справедлив для любого набора квантовых чисел. Таким образом, существующая программа SLBW может быть обращена в MLBW путем добавления множителя G_r к симметричной части формулы $\Gamma_{nr}^2 \cos 2\phi_l - 2\Gamma_{nr}(\Gamma_r - \Gamma_{nr}) \sin^2 \phi_l$, и множителя H_r к ее несимметричной части.

Так как G_r и H_r слабо зависят от энергии (только через проницаемость и факторы сдвига), эти зависимости легко аппроксимируются так, что машинное время можно значительно уменьшить по сравнению с формой Брейт-Вигнера с «двойным» знаменателем. Фактически, если для всех резонансов задаются нулевые сдвиги, проницаемость для s - волн пропорциональна \sqrt{E} , и полные ширины принимаются независимыми от энергии, то G_r/k^2 и H_r/k^2 также оказываются независимыми от энергии и требуют незначительно машинного времени. При этом в вычислительном отношении MLBW становится эквивалентным SLBW.

Форма MLBW в виде квадрата модулей, рассматриваемая в 2.4.19, также требует меньших вычислительных затрат.

2.4.15. Замечания по формуле Адлеров

Ниже перечислены вопросы, относящиеся к обработке принятой в ENDF/B формулы Адлеров и рекомендуемые вычислительные процедуры¹⁶:

1. Энергия резонанса μ и полная полуширина ν в формуле Адлеров должны быть одинаковы для всех реакций, могущих иметь место в данном резонансе (несмотря на то, что согласно версии ENDF-102, изложенной на странице D-7, и форматным описаниям на странице 7.9 и N-12 формально допустимы различные значения этих параметров для полного сечения, сечений деления и захвата).

Таким образом, принято решение об обязательном равенстве $DET_N=DEF_N=DEC_N$ и $DWT_N=DWF_N=DWC_N$. Формулы для сечений захвата и деления должны также содержать фазы, отсутствующие в Приложении D.

2. При практическом применении Адлерами своего формализма область разрешенных резонансов делилась ими на подобласти, каждую из которых они анализировать отдельно. Это позволило избежать проблемы вкладов от далеких резонансов, но потребовало в каждой подобласти вводить свой полиномиально описываемый фон. Поскольку формат разрешает вводить только одну область разрешенных резонансов, эта Адлеровская процедура непосредственно использоваться не может.

Если одного набора констант для полиномиального описания плавной подложки недостаточно, дополнительный фон может быть введен в Файл 3 поточечно.

3. Описанный выше формат ENDF/B допускал неполную спецификацию сечений. При LI= 5 приводятся только полные и радиационные ширины, при LI=6 – ширины, отвечающие за деление и за захват, при LI=7 приводятся данные для расчета полного сечения, сечения деления и сечения захвата. Таким образом, при LI=6 остается неопределенным сечение рассеяние (и полное), а LI=5 – недостаточно для делящихся элементов. В настоящее время ENDF/B значение LI=6 не допускается, а LI =5 следует использовать только для неделящихся элементов.

4. Величины G и H разными авторами называются несколько по-разному. Адлеры используют для полного сечения определения:

$$G_t = \alpha \cos(2ka) + \beta \sin(2ka) ;$$

$$H_t = \beta \cos(2ka) - \alpha \sin(2ka) ;$$

которые входят в резонансную формулу в комбинации

$$\nu G_t + (\mu - E) H_t .$$

В параметрах сечений реакции фазы отсутствуют:

¹⁶ В этом параграфе в уточненном виде излагаются замечания Резонансного Подкомитета, содержащиеся в Приложении к итогам его работы в июне 1974г
April 2001

$$vG_c + (\mu - E) H_c \quad (\text{capture});$$

$$vG_f + (\mu - E) H_f \quad (\text{fission});$$

Тем не менее и в этом случае G и H называются «симметричными» и «антисимметричными» параметрами. В этом руководстве заменена α на G_t , а β - на H_t , то есть

$$v [G_t \cos(2ka) + H_t \sin(2ka)] + (\mu - E) [H_t \cos(2ka) - G_t \sin(2ka)]$$

Эти G_t и H_t уже не являются сами по себе симметричной и антисимметричной частями в формуле для полного сечения, хотя в руководстве они таковыми и называются. Основанием для этого переобозначения послужил, видимо, отчет Де-Сассюра и Переца [7], которые в опубликованных ими таблицах G и H , включили в эти параметры адлеровскую константу «с», в остальном оставив формулу без изменений.

Пользователям и оценщикам следует придерживаться определений этого руководства.

5. Значения идентификатора NX , указывающего какие реакции имеют полиномиальные коэффициенты для описания фонового сечения, следует увязывать с LI , так чтобы ширины и фон задавались для одних и тех же реакций, т.е. использовать $NX=2$ с $LI=5$ (полное и захват), $NX=3$ с $LI=7$ (полное, захват и деление). Напомним, что $LI=6$ в ENDF/B ныне не допускается.

2.4.16. Многоуровневые и одноуровневые формулы в областях разрешенных и неразрешенных резонансов

2.4.16.1. В области разрешенных резонансов

Формализм SLBW пригоден для тех вариантов учета резонансных эффектов, которые не требуют поточечного восстановления энергетического хода сечения рассеяния (например, многогрупповой учет замедления). Из-за того, что нередки случаи получения отрицательных сечений рассеяния, обусловленные наложением двух или нескольких отрицательных интерференционных членов, использовать SLBW для вычисления хода сечения рассеяния не следует. Вместо этого рекомендуется использовать формализм MLBW, который является корректным многоуровневым формализмом, хотя и применим лишь тогда, когда Γ/D невелико.

R -матричный формализм, предложенный Райхом и Муром, ведет к точной многоуровневой формуле, которая рекомендуется для оценок делящихся элементов в области энергий, где существенна лишь s -волна. Все сечения в этом случае положительны и единственной сложностью, кроме сложности практической реализации, является оценка подходящего значения параметра R^∞ , учитывающего эффект удаленных уровней. Есть трудность и в определении параметров резонансов при отрицательных энергиях.

Адлеровская форма формализма Капура-Пейерлса также является правильной многоуровневой формулой, но в практических применениях ее параметры таковы, что теоретические ограничения на них уже не действуют, так что любое адлеровское сечение может оказаться отрицательным.

Простейший правильный многоуровневый формализм – это ограниченная R -функция, в которой уничтожаются все каналы, за исключением рассеяния. Это дает хороший способ оценки сечений неделящихся элементов до порога неупругого рассеяния, так как ниже этого порога все неупругие каналы – это обычно просто радиоактивный захват, в котором межуровневая интерференция практически отсутствует. Учет влияния удаленных уровней осуществляется путем замены фаз, соответствующих модели черного ядра, фазами, рассчитанными по оптической модели, и введением соответствующего R^∞ .

Так же можно поступать и выше порога неупругого рассеяния, т.к. во всех реакциях кроме упругого рассеяния интерференционные эффекты невелики.

Для конструкционных материалов и замедлителей могут использоваться и формула Райха-Мура, и R -матрица, так и ограниченная R -функция. Два последних формализма

обеспечивают большую детализацию в описании конкурентоспособных реакций, позволяют рассчитывать угловые распределения и рассматривать резонансы и с $l > 0$ и с $l > 0$.

Оценку сечений легких элементов также целесообразно осуществлять на основе многоуровневой и многоканальной теории, позволяющей принимать со вниманием данные не только по нейтронным, но и по ненейтронным реакциям, идущим с образованием одного и того же составного ядра. Из-за сложности таких вычислений, они могут быть представлены в ENDF/B в виде поточечных сечений в файле 3, хотя для этого случае введен новый формат ограниченной R-матрицы.

2.4.16.2. В области неразрешенных резонансов

Если известны статистические распределения параметров разрешенных резонансов, то для получения средних сечений в области неразрешенных резонансов, вообще говоря, можно использовать любой формализм. В настоящее время в ENDF/B разрешен только SLBW, на том основании, что при правильной работе в рамках SLBW не обнаруживается существенного многоуровневого эффекта.

Если проводится статистическое моделирование сечений без подгонки параметров к данным, полученным с низким разрешением, то между одноуровневым и многоуровневым приближениями обнаруживаются значительные расхождения; нелегко, однако определить, что из них лучше. Если же проводится подгонка параметров, обеспечивающая получение одинаковой измеренных средних сечений сечений, а для делящихся ядер и измеренной величины альфа, то различия между одноуровневым и многоуровневым механизмами не выходят за пределы погрешностей измерения. Вышеизложенный комментарий о многоуровневых эффектах в неразрешенной области резонансов основываются на работе Де-Сассюра и Переца [8].

Как отмечалось в параграфе 2.4.12, использование SLBW для описания резонансной структуры в URR приводит к недостаткам, неизбежно связанным с этим формализмом в любом случае и поэтому его использование не рекомендуется. Для этой цели требуется применять MLBW или более точное приближение.

2.4.17. Предлагаемые формализмы для оцененных данных

1. Легкие ядра: Используйте многоуровневую, многоканальную R-матрицу. Поточечное представление в файле 3.

2. Материалы с незначительными или умеренным многоуровневыми эффектами, и без многоканальной интерференцией: гибридная R-функция, формула Райха-Мура или MLBW. Они эквивалентны по вычислительному времени, и все требуют дополнительной обработки для учета доплеровского уширения, хотя в случае MLBW это можно сделать с помощью себя Ψ , χ – функций (см. раздел 2.4.14). Однако, RM и RML позволяют рассчитывать и угловые распределения упруго-рассеянных нейтронов - возможность, которая в MLBW отсутствует.

3. Материалы с сильными многоуровневыми эффектами, но без многоканальной интерференцией : гибридная R-функция, формула Райха-Мура. Конструкционные материалы не обнаруживают межканальную интерференцию, но межуровневая интерференция в них существенна и в рамках MLBW корректно не описывается .

4. Материалы с заметной канальной интерференцией: Формула Райх-Мур или ограниченная R-матрица. Ранее межканальная интерференция обнаруживалась только при описании сечений делящихся ядер, и это вряд ли изменится впредь. Для представления в ENDF/B параметры Райха-Мура могут быть преобразованы к формату Адлеров. Причина, по которой формализм Райх-Мура предпочтителен формализму Адлеров в качестве основного метода оценки, состоит в его меньшей гибкости и следовательно, лучшей способности выделять

различные типы экспериментальных данных. Однако, формула Райха-Мура требует численного учета доплеровского уширения, тогда как формула Адлеров позволяет делать это с использованием функций ψ и χ . К сожалению, часть этого преимущества практически потеряна, потому что нет простой эквивалентности между формализмом Адлеров и SLBW (см. раздел 2.4.8).

2.4.18. Затраты машинного времени по построению сечений по MLBW- формализму

До сих пор решение проблемы вычислений интерференционных членов MLBW за разумное время решалась путем использования исходной амплитудно-квадратичной формы с последующим численным уширением для учета доплер-эффекта. Проводилась и оптимизация расчетов по внутренним и внешним циклам.

Третье решение – использование многоуровневой формулы Адлера-Гаусса (см. 2.4.14), возможно, с аппроксимацией энергетической зависимости коэффициентов G_r - и H_r . MLWR – формула в форме абсолютного квадрата дана в секции 2.4.19.

2.4.19. MLBW- формула в форме квадрата модуля

Формула MLBW сечения рассеяния, данная в Приложении D и в параграфе 2.4.14, математически идентична фундаментальной форме “квадрата модуля”, данной в Приложении D, уравнениями (5) – (7) параграфа D1.2

Эти уравнения могут быть запрограммированы с использованием комплексного Фортрана или могут быть разложены перед программированием на вещественную и мнимую части. Существенный момент заключается в том, что суммирование по резонансам производится прежде возведения в квадрат. Это позволяет обойти проблему замены двух «линейных» сумм на одну «квадратную». Если изотоп имеет 200 резонансов, обсуждаемая формула содержит две суммы – по 200 слагаемых каждая, в то время стандартная форма ENDF содержит сумму с 40000 членами. Обсуждение этих формул с программистской точки зрения дается в разделе 2.4.23 и 2.4.24.

Основной недостаток этих уравнений – то, что они не допускают доплеровского уширения с использованием ψ и χ - функций, а требуют применения численных методов.

2.4.20. Числа степеней свободы, определяющих распределения параметров неразрешенных резонансов

Резонанс в системе «нейтрон плюс мишень с массой A» соответствует квази-стационарному состоянию составного ядра A+1. Такое состояние может распасться одним или несколькими путями, каждый из которых описывается как «канал». Канал определяется природой испускаемой частицы (в бинарных реакциях), спинами I и i остаточного ядра и испускаемой частицы и орбитальным угловым моментом этой пары l . Вообще говоря, для полного определения канала необходимо в 2 раза больше квантовых чисел, но при рассмотрении неполяризованных частиц магнитные квантовые числа элиминируются из «геометрических» соображений.

Обычно задается спин канала s , который является векторной суммой I и i , и $\vec{J} = \vec{s} + \vec{l}$, так как это способствует ликвидации зависимости от l всех характеристик канала. Важно отметить, что один и тот же набор трех составляющих углового момента, I , i и l , порождает возбуждение нескольких каналов в соответствии с правилами формирования полного углового момента. Резонанс будет распасться по каждому каналу из этих каналов с вероятностью, которая определяется вещественным числом $\gamma_{\alpha liJs}$ - амплитудой приведенной ширины, где α определяет испускаемую частицу, возбужденное состояние дочернего ядра и прочее. Парциальная ширина для канала определяется так:

$$\Gamma_{\alpha i J l s} = 2P_{\alpha i J l s} \gamma_{\alpha i J l s}^2.$$

Проницаемости зависят только от l и для незаряженных частиц приводятся в Приложении D. Для заряженных частиц, их кулоновские аналоги могут быть найдены в литературе, а для гамма-лучей используют обычно $\sqrt{\Gamma\gamma}$, а не γ и P .

Если набор канальных квантовых чисел ($\alpha i J l s$) обозначить c , то полная ширина для уровня будет $\Gamma = \sum_c \Gamma_c$ (\sum_c означает сумму по всем каналам). Вывод из статистической теории составного ядра заключается в том, что γ_c - случайные величины, нормально распределённые с нулевым средним и с одинаковой дисперсией. Рассматриваемая совокупность – это набор для данного канала и всех уровней (или резонансов). Из этого следует, что полная ширина подчиняется χ^2 -распределению с N степенями свободы: это статистическое следствие возведения в квадрат и сложения N нормально распределённых случайных величин. При $N = 1$ это – распределение Портера-Томаса. Для вычисления любой величины, определенной усреднением по всем резонансам, необходимо знать распределение резонансных ширин; следовательно требуется включение чисел степеней свободы, определяющих эти распределения в ENDF/B.

1. Распределение нейтронных ширин определяется величиной AMUN, которая задается для каждого значения l . Обычно выходные каналы резонанса определяются наименьшим из допустимых значений l , хотя форматы допускают задание как s , так и d - волновых ширин для одного и того же резонанса. Так как для данного резонанса существует только одно значение J и мы маркируем l одним значением, то для нейтронов ($i = 1/2$) может быть только 2 канала, определяемые спинами каналов $s = l \pm 1/2$. Если $l = 0$, существует только один канал, $s = i = 1/2$. Следовательно ограничения таковы: $1.0 \leq AMUN \leq 2.0$. В разделе 2.2.2 AMUN обозначается через $\mu_{l,J}$.

Принимается, что средние парциальные ширины для обоих значений спина канала равны друг другу и $\langle \Gamma_n \rangle$ - сумма двух равных средних парциальных ширин. В Приложении D фактор 2 включен в определение $\langle \Gamma_n \rangle$ через использование множественности, которая определяется как число канальных спинов, 1 или 2.

2. Ширина конкурирующего процесса, под которым сейчас понимается только неупругое рассеяние, ведет себя так же, как и ширина для упругого рассеяния, отсчитываемая от иной «нулевой начальной энергии». Следовательно,

$$1.0 \leq AMUN \leq 2.0.$$

Заметим, что не следует задавать $AMUX = 0$, как это рекомендовалось ранее в ENDF-102. Это значение AMUX подразумевает, что конкурирующая ширина не меняется от резонанса к резонансу (при $N \rightarrow \infty$ χ^2 -распределение приближается дельта функции). Обычно, неупругое рассеяния осуществляется через небольшое число каналов и соответствующая ширина должна меняться от уровня к уровню.

По определению $AMUX = \mu_{I_{in}, J}$, где J - спин резонанса, и I_{in} - орбитальный угловой момент неупругого рассеяния нейтронов. Так как дочерние ядра могут иметь спин, отличный от спина ядра-мишени I , I_{in} может отличаться от l , и число канальных спинов $\mu_{I_{in}, J}$ может отличаться от $\mu_{l, J}$.

3. Для радиационных процессов AMUG следует принимать равным 0. Радиационный захват осуществляется через множество каналов и не стоит решать, равняется ли AMUG 30 или 40. (Правда, некоторые ядра, в исключение из правил, имеют ограничение на число каналов радиационного захвата и для них может приводиться, отличное от нуля значение).

4. Для деления должно приниматься $1.0 \leq AMUG \leq 4.0$; нулевое значение будет неправильным. Столь малые значения означает неприменимость для деления предыдущего определения каналов (типа Вигнера); статистические свойства делительных ширин показывает, что каналы деления определяются возможностями туннельного прохождения через барьер деления (каналы Бора).

Число степеней свободы постоянно в области неразрешенных резонансов.

2.4.21. Процедуры для области неразрешенных резонансов

Для того, чтобы определить зависимые от энергии средние параметры разрешается использовать до 250 точек по энергии. Это число, как предполагается, является достаточным, чтобы воспроизвести гросс-структуру сечений в URR. В подсекции для данного изотопа должна использоваться одна и та же энергетическая сетка для всех значений J и l . Для различных изотопов сетки могут различаться. Средние параметры неразрешенных резонансов должны быть приведены во всей области энергий, где может быть важна резонансная самоэкранировка или температурная зависимость структуры сечений. Рекомендуется, чтобы URR простиралась, по крайней мере, до 20 кэВ

Если флаг LSSF (раздел 2.3.1) установлен равным 1, оценщик может определить гросс-структуру сечений в URR на столь детальной сетке по энергии, как он желает: ограничение - 10000 точек. При этой опции, Файл 3 представляет сечение, соответствующее полному разбавлению материала в среде и никакой вклад от Файла 2 к этому сечению добавляться не должен. Файл 2 должен использоваться для вычисления "медленно-изменяющегося" фактора самоэкранировки, на который может быть умножено "быстро-изменяющееся" сечение из Файла 3. Фактор самоэкранировки определен как отношение усредненного экранированного сечения Файла 2 к среднему неэкранированному значению, полученному по тем же самым параметрам. Это отношение должно применяться как множитель к значениям в Файле 3.

Если LSSF установлен равным нулю, Файл 3 интерпретируется так же, как и в области разрешенных резонансов, *то есть*, он будет представлять подложку сечения, которую следует добавить к среднему сечению, разбавленному или заэкранированному, который будет вычислен из Файла 2.

Процедура " факторов самоэкранировки " имеет некоторые преимущества перед "общей" процедурой:

1. Зависимость сечения разбавления от энергии в URR может быть более точно определено, без ограничения 250 точек в Файле 2.
2. Сетки по энергии в Файле 2 и Файле 3 в основном независимы, так чтобы сетка Файла 2 могла быть сделана более грубой и более удобной для обработки.
3. В принципе, результаты могут быть более точны, так как Файл 2 может быть полностью отдан для представления изменений в средних параметрах, которые являются существенными для экранировки. Бремя представления колебаний в величине сечения разбавления полностью определяется Файлом 3.
4. То же самое представление может использоваться программами, требующими таблицы вероятностей. Для этого применения, средние параметры в Файле 2 могут использоваться для получения случайных последовательностей резонансов (ladder'ов), и полученные на их основе сечения могут использоваться для вычисления таблиц вероятностей обычным способом. Однако, вместо того, чтобы использовать таблицы непосредственно, они нормируются делением различные различных сечений на соответствующее среднее. Полученные таким образом вероятности снова преобразуются в сечения путем умножения на поточечное среднее сечение, заданное в Файле 3. Объяснение то же самое, что и для факторов самоэкранировки – сечение, соответствующее бесконечному

разбавлению представляется в формате "слабого разрешения" в Файле 3, в то время как реальная тонкая структура определяется Файлом 2.

Следующее предостережение должно быть отмечено оценщиками в выборе этой опции: Поскольку в Файле 3 предусмотрена энергетическая зависимость сечений, эта зависимость сама по себе приводит к некоторой самоэкранировке сечений. Поскольку Файл 2 также дает экранировку, это может привести к фактически "двойной экранировке". Проблема вероятно может возникнуть вблизи границы между разрешенными и неразрешенными областями, где экспериментальное разрешение может все еще быть достаточным, чтобы проявлялись группы нескольких резонансов.

Можно было бы рассмотреть возможность "исправления" для этого путем коррекции параметров Файла 2, но едва ли это будет эффективно, поскольку степень экранировки зависит от применения. Лучшая процедура должна гарантировать, что каждая существенная структура в Файле 3 фактически представляет собой статистически значимое число резонансов (десять или больше). Если исходные данные не удовлетворяют этому критерию, то оценщиком должно быть применено дополнительное сглаживание, чтобы этому условию удовлетворить. Тогда обработка, предусматривающая использование статистической теории резонансов, будет выполнена корректно.

2.4.22 Процедура вычисления угловых распределений в области разрешенных резонансов

2.4.22.1. Основные положения

Квантовая механическая теория рассеяния, которая лежит в основе всех резонансных формализмов в этой главе, описывает угловое распределение вылетающих частиц, так же как и сечения различных реакций. Если для параметризации матрицы столкновений используется R-матричный формализм – в форме Райха-Мура (см. D.1.3), обобщенной R-матрицы (см. D.1.5.2) или гибридной R-функции (см. D.1.6.1), то имеется возможность описать изменение углового распределения рассеянных нейтронов при прохождении через резонанс. Явное табулирование этого детального поведения углового распределения весьма громоздко и потребовало бы больших объемов памяти и вычислений.

Блатт и Биденхарн [7] упростили общее выражение для углового распределения, являющееся квадратом модуля угловой-зависимой амплитуды, так, чтобы оно представлялось в форме разложения по полиномам Лежандра. Полученное ими выражение в формате GRM и HRF дается в разделах D.1.5.9 и D.1.6.5.

Ранее формула Рейха-Мура использовалась только в области низких энергий для делящихся изотопов, где существенна только s-волна, так что угловые распределения были изотропны. Если бы это использовалось для более высоких энергий и более высоких угловых импульсов, то угловые распределения стали бы анизотропными. Конечно, поскольку формулы определяют распределение в системе центра масс, даже изотропное в этой системе угловое распределение становится анизотропным в лабораторной системе координат.

Конечно формулы для расчета угловых распределений могут быть получены и в рамках формализмов SLBW, MLBW, и формализма Адлеров, но так как они не сформулированы в терминах элементов матрицы столкновения (U_{lsj}), они не сводятся к формулам Блатта и Биденхарна.

Хотя формулы Блатта и Биденхарна известны в течение тридцати пяти лет, и часто использовались в физической литературе по теории рассеяния, они не оценке нейтронных сечений они не находили широкого применения. Файлы ENDF/B наиболее часто содержат или экспериментальные данные или расчетные данные, полученные из оптической модели. И в том и в другом случае происходит "сглаживание" резонансных угловых распределений. В случае эксперимента, сглаживание происходит за счет конечного энергетического разрешения измеряющей аппаратуры и ограничения по числу энергий, в которых могут быть представлены угловые распределения. В случае оптической модели, сглаживание

обусловлено самой природой модели. Ясно, что явная резонансная энергетическая зависимость коэффициентов разложения по полиномам Лежандра, описываемая формулами Блата-Биденхарна, будет отличаться от обоих из вышеупомянутых представлений.

Возникает вопрос, будут ли угловые распределения, рассчитанные по формулам Блата-Биденхарна, после усреднения по энергии лучше или хуже, чем традиционные. Это вопрос рассматривается в следующих параграфах, которые являются скорее "теоретическими", так как нет большого опыта в этой области.

2.4.22.2 Дальнейшее рассмотрение

Во-первых, если в некотором идеальном случае, все спины и четности резонансов были бы точно известны, торасчеты по формуле Блата-Биденхарна будут явно превосходить по точности любое другое представление. Следующий шаг мог бы заключаться в построении последовательности резонансов (ladder'a) в которой резонансы, или антирезонансы ("окна") были бы известны, но некоторые незначительные, узкие резонансы имели сомнительные параметры. В этом случае, можно было бы надеяться, что погрешности в "незначительных" резонансах компенсируют друг друга, приведя к хорошему результату.

Возможно, однако, что погрешности в "незначительных" резонансах и не компенсируются, и их введение лишь ухудшит результат.

Наконец, есть оценки, в которых параметры J и I для многих скомпилированных резонансов определены ненадежно и их погрешности могут как компенсировать, так и усиливать их влияние на угловые распределения. В двух последних случаях, оценщик или может или не может сравнить рассчитанные угловые распределения с экспериментом и принять обоснованное решение о точности представления угловых распределений по Блату-Биденхарну. Признак LAD позволяет ему сообщать программе обработки, действительно ли "безопасно" считать по формулам Блатта и Бейденхарна. Такой признак необходим, потому что Файл 4 ограничен 1200 угловыми распределениями, которых обычно недостаточно, чтобы полностью представить детально угловые распределения, рассчитанные по формуле Блата-Биденхарна. Рекомендованная ENDF/B процедура для оценщика - обеспечить 1200-точечное представление в Файле 4, и сигнализировать пользователям через признак, можно ли независимо рассчитать угловые распределения $\sigma(\theta)$ на более детальной энергетической структуре.

Для представления Файла 4, оценщик должен сгладить данные, чтобы сохранить существенную структуру в первом коэффициенте Лежанра, или μ . Как всегда, слово *существенный* трудно определить точно, но представление Файла 4 должно быть адекватно для большинства обычных реакторов.

В любом случае, пользователь, который желает исследовать влияние тонкой структуры угловых распределений на его собственную работу, может воспользоваться формулой Блата-Биденхарна. Признак LAD сообщает ему, что оценщик одобрил эту процедуру (LAD=1), или что она является сомнительной (LAD=0). В случае LAD=0, оценщик должен указать на это, помещая комментарии в Файл 1 и в соответствующую документацию.

2.4.22.3. Резюме с рекомендациями при оценки

1. Используйте 1200-точечное представление для углового распределения рассеянных нейтронов в Файле 4. Сохраните существенную структуру в μ .
2. Если угловые распределения по Блатту и Бейденхарну не были исследованы, или если они были исследованы и найдены неточным, поставьте LAD=0 в Файле 2. Укажите в Файле 1 и в соответствующей документации, какой случай имеет место.
3. Если детальные по энергии угловые распределения были рассчитаны и считаются точными, указываем LAD=1, и описываем процедуры оценки в документации.

2.4.23. Полнота и сходимость суммы по каналам

Выделяются две возможные ошибки в вычислениях сумм от индивидуальных каналов:

- 1) пропуск каналов, потому что они не содержат никаких резонансов (такие нерезонансные или каналы фазового сдвига (только) должны учитываться, потому что они вносят вклад в потенциальное сечение рассеяния, и
- 2) отказ включать слишком большое количество нерезонансных каналов, полагаясь на то, что и без них сечение рассеяния сойдется в сумме по l даже при высоких энергиях.

Избежать первую ошибку можно При использовании SLBW, MLBW, A-A, и R-M формализмов первый из источников ошибки исключается, т.к. форматы не позволяют оценщику определять пустые каналы явно. Для HRF и GRM формализмов, где такая пустые каналы определяются явно, ответственность за указание полного перечня каналов лежит на оценщике. Избежать второй ошибки всегда может лишь оценщик, так как обрабатывающая программа не может решить, был ли недостаток каналов намеренным или нет.

В представлении канального спина, налетающий спин i складывается со спином ядра-мишени I и дает спина канала s :

$$|I-i| \leq s \leq I+i.$$

Спин канала складывается с орбитальным угловым моментом, и формирует полный угловой момент J :

$$|l-s| \leq J \leq l+s.$$

Если $I > 0$ и $l > 0$, один и тот же спин J может быть получен при каждом из двух спинах канала, $s = I \pm 1/2$, и **каждое** из этих J -состояний должно быть **отдельно суммировано**. Ширина $\Gamma_{l,J}$ есть сумма этих двух компонентов: $\Gamma_{l,J} = \Gamma_{l,s_1,J} + \Gamma_{l,s_2,J}$. В SLBW, MLBW, A-A формализмах используется только эта сумма. В формате Райха-Мура J определяется точно (через использование величины AJ). В формате RML оценщик в этой ситуации должен определить два отдельных канала (два значения s) в пределах той же самой спиновой группы.

Информация относительно канально-спиновой ширины имеется весьма редко, и оценщику трудно понять, как следует распределить полную ширину между этими двумя подканалами. К счастью, большинство нейтронных реакций нечувствительно к этому распределению, так что включая все в один или в другой канал или ширину поровну 50/50, оценщик получает один и тот же результат. Угловые распределения в принципе, более чувствительны, но найти результаты измерений столь высокой точности, чтобы продемонстрировать эффект, обычно не удается.

Сумма по каналам имеет вид:

$$\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{s=|I-\frac{1}{2}|}^{I+\frac{1}{2}} \sum_{J=|l-s|}^{l+s} \chi_{l,s,J}$$

так что возникает вопрос о сходимости этой суммы. Самый простой случай – суммирование членов SLBW по реакциям, как в разделе D.1.6.2, когда каждая сумма охватывает каналы, в которых есть резонансы. В этом случае вопрос о сходимости не встает.

Если рассматривать сумму членов сечения рассеяния, раздел D.1.6.1, то в каждом канале проявляется амплитуда потенциального рассеяния амплитуда, независимо есть резонансы или нет. При нулевой энергии конечна лишь амплитуда s -волны, но при более высоких энергиях становятся существенны амплитуды рассеяния и волн с более высокими l . Критерий сходимости - в том, чтобы дополнение следующей более высокой l -волны приводило к незначительному изменению в сечении при самой высокой энергии,

включенной в резонансную область. В обычной R-матричной трактовке, нерезонансные каналы содержат фазовые сдвиги, чье поведение должно сравниваться с экспериментом.

В формате Райха-Мура NLS определено как число орбитальных моментов, учет которых требуется для обеспечения сходимости. Это отличается от смысла этого параметра в форматах SLBW и MLBW, где NLS - число l -каналов с резонансами. В последнем случае повышается риск пренебречь нерезонансными каналами с высокими значениями l . Такое пренебрежение проявится в неправильном расчете сечения рассеяния между резонансами при высоких энергиях. Заметить этот дефект нелегко.

Если по резонансным параметрам должны быть рассчитаны угловые распределения (см. разделы D.1.5.9 и D.1.6.5), то дело осложняется не только наличием более сложных сумм, но и более широким диапазоном значений l . Максимальное значение l определяется из условия, чтобы при самой высокой энергии в RRR суммы по l в формулах для угловых моментов полностью сошлись. Это требование является более жестким, чем требование сходимости сумм в формулах для сечений, поскольку в угловых распределениях проявляется интерференция волн с высокими и низкими значениями l . Различие в критериях сходимости NLS и NLSC не ведет к противоречию, поскольку вклад в сечение вносит только нулевой момент $l=0$. Все более высокие моменты в интеграле дают нуль. Программы, рассчитывающие такие моменты, должны иметь рекурсивные алгоритмы вычисления зависимых от l членов вплоть до $l=20$.

Для ограниченной R-матрицы в расчетах учитываются те и только те члены, которые указаны оценщиком (то есть, включены в информацию Файла 2).

2.4.24. Спин канала и другие вопросы

В формате ограниченной R-матрицы спин канала определяется явно и оценщик сам должен определить все парциальные ширины, зависящие от s , а вообще говоря, также и от l и J .

Для формализма Адлеров обычная область применения – область низких энергий для делящихся ядер, когда существенно только взаимодействие с $l = 0$. Поэтому в формулах Приложения D для этого формализма спин канала не упомянут.

Для формализма Райха-Мура, в тех случаях, когда возможны два канала деления, спин канала определен знаком параметра AJ . В прошлых оценках, где спин канала не определялся (то есть, где все AJ -положительны), принято, что все резонансы имеют один спин канала, и вклад в фазовый сдвиг от второго канала должен быть добавлен отдельно.

В формализме MLBW квадрат модуля амплитуды разложен и все мнимые члены устранены.

Это привело к нескольким последствиям.

1. Спин канала эффективно устранен, потому что парциальные ширины оказались просуммированными:

$$\Gamma_{IJ} = \Gamma_{I_1 J} + \Gamma_{I_2 J}$$

Так как требуется только сумма, у оценщика нет необходимости определять значения ширин для отдельных каналов s . Таким образом (l, s, J) формализм преобразуется в (l, J) формализм. Тот же эффект достигается, если принять $l=0$ - популярное (часто не обоснованное) предположение принимаемое во многих расчетах по оптической модели.

2. Критерий сходимости более прозрачен, потому что сечение потенциального рассеяния отделяется от резонансного и определяется интерференционными членами

$$\frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2 \phi_l.$$

Несмотря на то, что эти члены гораздо проще выражений для амплитуд из которых они получены, нужно специально позаботиться о том, чтобы число этих членов было достаточным для получения физически правильного результата. Если это не может быть

сделано, то недостающие вклады должны быть учтены в форме подложки, внесенной в Файл 3.

3. Форма резонанса может быть выражена терминах симметрических и асимметричных Брейта-Вигнеровских членов и таким образом доплеровское уширение резонансов может быть учтено с помощью функций ψ , χ . Цена этих трех преимуществ – увеличение вычислительного времени при большом числе резонансов.

Подобные замечания относятся и к SLBW-формализму, который является MLBW формализмом без межрезонансных интерференционных членов. Вычислительное время уменьшается, но в сечении рассеяния возможны большие погрешности (вплоть до отрицательных значений). SLBW применяется в некоторых аналитических и полуаналитических процедурах, но этот формализм не должен использоваться для вычисления поточечного сечения рассеивания.

Отказ от явного задания спинового квантового числа в SLBW формализме, удобный в области разрешенных резонансов, вызывает затруднения в URR. В разделах D.2.2-D.2.4 предпринята попытка разъяснить ситуацию с помощью плотности уровней, силовых функций и спиновой статистики.

2.5. Ссылки

1. P. Greebler and B. Hutchins. *Physics of Fast and Intermediate Reactors*, Vienna, 3-11 August 1961, Vol. III (International Atomic Energy Agency, 1962) p. 121
2. H. Henryson II, B. J. Toppel, and C. G. Stenberg, Argonne National Laboratory report ANL-8144 (1976)
3. M. Beer, *Nuc. Sci. Eng.* 50 (1973) 171
4. C.R. Lubitz, *Equivalent Single-Level Breit-Wigner Resonance Parameters for Adler-Adler Evaluations*, Letter to CSEWG, August 20, 1985
5. G. deSaussure and R.B. Perez, Oak Ridge National Laboratory report ORNL-TM-2599 (1969)
6. G. deSaussure, G. Olsen, and R.B. Perez, *Nuc. Sci. Eng.* 61 (1976) 496
7. D.B. Adler, Brookhaven National Laboratory report BNL 50045 (1967) page 7
8. G. deSaussure and R.B. Perez, *Nuc. Sci. Eng.* 52 (1973) 382
9. A.M. Lane and R. G. Thomas, *Rev. Mod. Phys.* 30 (1958) 257
10. G.F. Auchampaugh, Los Alamos National Laboratory report LA-5473-MS (1974)

11. N.M. Larson, Oak Ridge National Laboratory report ORNL/TM-9179/R6 and ENDF-364 (2003)
12. A.W. Solbrig, *Am. J. Phys.* 24 (1961) 257

3.ФАЙЛ 3. СЕЧЕНИЯ РЕАКЦИЙ

3.1.ОБЩЕЕ ОПИСАНИЕ

В файле 3 приводятся сечения и производные величины виде функции от энергии E , где E - энергия падающей частицы (в эВ) в лабораторной системе. Они представляют собой пары энергия-сечение (или энергия – производная величина). При изменении энергии частицы от данной энергетической точки до следующей, более высокой по энергии, сечение определяется по заданной интерполяционной схеме. Файл 3 делится на секции, содержащие данные для определенных типов реакции (определяемых номером МТ); см. Раздел 0.5 и Приложение В. Секции упорядочены по номерам МТ. Каждая секция начинается всегда с записи HEAD и заканчивается записью SEND. Файл заканчивается записью FEND.

3.2.ФОРМАТЫ

Для файла 3 определены следующие величины:

ZA, AWR стандартные параметры заряда и массы.

QM величина разницы масс Q (эВ): определяется, как разница масс ядра и частицы и массы остаточного ядра в основном состоянии и всех остальных продуктов реакции.

То есть для реакции $a+A \rightarrow b+c+\dots+B$ величина Q определяется, как

$$QM = [(m_a + m_A) - (m_b + m_c + \dots + m_B)](9.315016 \times 10^8),$$

если массы выражены в единицах атомных масс (1/12 массы атома углерода-12) (См.параграф 3.3.2).

QI Величина реакции Q для состояния конечного ядра, определяемого номером реакции МТ. QI есть разность между QM для остаточного ядра в основном состоянии (или промежуточном перед развалом) и энергии возбужденного уровня ядра-продукта. Для реакций, не образующих промежуточных энергетических состояний ядра-продукта и не сопровождающихся дальнейшим его развалом (LR=0) полагается QI=QM. (См. параграф 3.3.2.)

LR Указатель реакции с развалом ядра-продукта.

Указывает, что ядром-продуктом испускаются дополнительные частицы, тип которых номером МТ. Не определяется. См. Разделы 0.5.5 и 3.4.4.

NR,NP,Eint Стандартные параметры записи TAB1.

$\sigma(E)$ Сечение (в барнах) определенной реакции (или вычисленной величины), заданное таблицей пар энергия-сечение в NP точках.

Структура секции следующая

```
[MAT, 3, MT/ ZA, AWR, 0, 0, 0, 0] HEAD
[MAT, 3, MT/ QM, QI, 0, LR, NR, NP/ Eint / σ(E)] TAB1
[MAT, 3, 0/ 0.0, 0.0, 0, 0, 0, 0] SEND
```

3.3. ОБЩИЕ ПОЛОЖЕНИЯ

3.3.1. Сечения, энергетические интервалы и пороги

Нейтронные сечения должны охватывать энергетический интервал от 10^{-5} или от порога, если он выше этой величины, до верхнего предела, который должен равняться, по крайней мере, 20 МэВ. Для остальных реакций под действием других частиц сечения следует задавать от энергии порога (где сечения равно 0.0 барн) и до верхнего энергетического предела.

В случаях, когда выше некоторой заданной энергии представление реакции меняется, например в случае суммирования отдельных парциальных реакций в суммарную реакцию $MT=5$ (и при этом составляющие суммы выше определенной энергии не приводятся) рекомендуется следующая процедура.

Для сечений в нижней области энергий следует дублировать последнюю точку по энергии, в которой сечение не равно 0, в продублированной точке принять нулевое сечение. Аналогично для суммарного сечения в верхней области энергий нужно продублировать первую энергетическую точку, и в ней привести сначала нулевое, а затем - ненулевое. В комментарий (файл MF=1) оценщик должен внести соответствующее указание.

Сечения реакций с вылетом заряженных частиц вблизи порога обычно очень малы (или нижней границы – 10^{-5} эВ) и остаются такими до **эффективного порога**, определяемого значимыми сечениями (порядка 10^{-10}). Оценщику следует затабулировать нулевое сечение в этом интервале так, чтобы избежать проблем с интерполяцией (в логарифмическом масштабе).

Иногда реакции, определенные правилами формата, из-за изменений в представлении различных сечений имеют верхний предел ниже принятой для материала максимальной энергии EMAX. Например, такое случится при объединении сечений возбуждения дискретных уровней в реакцию с возбуждением континуума при суммировании в $MT=5$ сечений различных реакций. В этих случаях обрывающиеся сечения должны быть задублированы в последней энергетической точке, где сечение не равно 0, оборваться в этой точке до нуля и далее приниматься равными нулю вплоть до EMAX. Разрыв служит указателем того, что сечение обратилось в нуль из-за объединения. Для сечения объединенной реакции появится искусственный порог, позволяющий обеспечить непрерывность суммы сечений. Эта непрерывность должна быть обеспечена выбором значения суммарной реакции на этом искусственном пороге.

В Приложении G приводится ограничение на количество точек по энергии (NP), которое допустимо использовать для представления энергетической зависимости сечения. Пользователь не должен использовать больше точек, чем это требуется для точного представления сечений. Для уменьшения количества точек можно использовать представление сечений через резонансные параметры. Оценщику также следует избегать ведения негладких функций, угловых или ступенчатых (кроме разрывов непрерывности на границах резонансных областей или где энергий, при которых меняется представление реакций – введение реакции

возбуждения континуума и т.п.). Такие нерегулярные энергетические зависимости впоследствии не смогут быть корректно усреднены по функции максвелловского распределения при учете температурной зависимости сечений.

3.3.2. Энергии реакции - Q

Точные значения Q должны быть заданы для всех реакций, когда это возможно. Если величина QI точно не определяется принципиально (для уровней MT=91, 649, 699, 749, 799 или 849), используйте значение QI, соответствующее порогу реакции. Аналогично, если величина QM определена не точно (при описании сечений для многоизотопных элементов или при суммировании разнотипных реакций, подобных MT=5), используйте значение QM, которое дает принятый для этой реакции порог. Если порога нет, задавайте и для составных реакций положительное значение Q. Отметим, что некорректно определенные значения QM приведут к погрешностям в расчетах энерговыделения.

В качестве примера для понимания использования QM и QI, рассмотрим реакцию $\alpha + {}^9\text{Be} \rightarrow n + X$. После испускания нейтрона образуется составная система ${}^{12}\text{C}$ с QM=5.702 MeV с возбуждением уровней при 0.0, 4.439, 7.654 и 9.641 МэВ. Основное состояние стабильно к испусканию частиц, первый уровень распадается, испуская фотон, более высокие уровни с большей вероятностью распадаются с испусканием 3-х альфа-частиц (требуется 7.275 МэВ). Это пример можно представить следующей таблицей:

Reaction	QM	QI	EX	MT
${}^9\text{Be}(a,n_0){}^{12}\text{C}$	5.702	5.702	0.000	50
${}^9\text{Be}(a,n_1){}^{12}\text{C}$	5.702	1.263	4.439	51
${}^9\text{Be}(a,n_2){}^{12}\text{C}(3\alpha)$	-1.573	-1.952	7.654	52
${}^9\text{Be}(a,n_3){}^{12}\text{C}(3\alpha)$	-1.573	-3.939	9.641	53
${}^9\text{Be}(a,n_c){}^{12}\text{C}(3\alpha)$	-1.573	-1.573		91

Гамма-квант, испускаемый во второй реакции, здесь явно не представлен в таком виде. Последняя – континуальная - реакция включает вклады всех уровней выше энергии 9.641 МэВ, всех пропущенных уровней и любых прямых распадов на 4-частицы; поэтому порог для MT=91 может быть ниже порога образования ${}^{12}\text{C}$ на 4-м уровне. Обратите внимание на величину, используемую как QI.

3.3.3. Отношение между Файлами 3 и 2

Если файл 2 (Резонансные параметры) содержит параметры разрешенных и/или неразрешенных резонансов (LRP=1), то для того, чтобы получить сечение упругого рассеяния (MT=2), сечение деления (MT=18), сечение радиационного захвата (MT=102), вклады, вычисленные по этим параметрам, должны быть добавлены к соответствующим вкладам файла 3. Резонансные вклады должны также включаться в суммарные реакции, которые включают эти три резонансные реакции (например, MT=1, 3 или 5). Границы резонансной области определяются в

Файле 2. В файле 3 для описания разрывов в сечении используются «двойные точки» на верхних и нижних энергетических границах областей разрешенных и неразрешенных резонансов.

Для некоторых материалов резонансные параметры не задаются, однако, для них в файле 2 приводится радиус рассеяния. Эту величину, иногда, можно использовать для расчета сечения потенциального упругого рассеяния, для расчета эффектов самоэкранировки в других материалах. В этих случаях сечение упругого рассеяния из файла 3 не должно добавляться к сечению потенциального рассеяния, оцененному через радиус рассеяния: так как данные файла 3 всегда характеризуют полное сечение рассеяния.

В некоторых вторичных библиотеках резонансные сечения могут быть восстановлены и описываться поточечно в файле MF=3. Такие файлы должны иметь указатель LRP=0, как было описано в предыдущем параграфе. В другом варианте, когда LRP=2, файл 2 включается полностью вместе с резонансными параметрами и во вторичную библиотеку. В этом случае, однако, резонансные сечения или факторы самоэкранировки, рассчитанные по Файлу 2, **не добавляются** к сечениям файла 3.

3.4. ОСОБЕННОСТИ БИБЛИОТЕК НЕЙТРОННЫХ ДАННЫХ¹

Сечения непороговых реакций для всех материалов должны охватывать энергетический материал от нижней границы 10^{-5} эВ до верхней, по крайней мере, 20 МэВ. Эти же реакции должны задаваться в тепловой точке 0.0253 эВ. Предел по числу энергетических точек для представления парциальных сечений равен 50 000. Оценщику не следует использовать больше точек, чем требуется для точного представления сечений.

Выбор данных для включения в оценку зависит от выбранного приложения. Для нейтронных подбиблиотек могут быть скомпонованы подбиблиотека данных для расчета переноса нейтронов и подбиблиотека данных о реакциях активации. Первую из них можно подразделить на данные для переноса в области низких энергий и переноса быстрых нейтронов².

Оценки сечений активационных реакций включают Файлы 1, 2, 3 и, иногда, Файлы 32 и/или 33. Файл 2 содержит резонансные параметры. Для описания радиоактивных продуктов могут использоваться Файлы 8, 9, 10, 39 и/или 40. В Файле 3 может содержаться одно или несколько нейтронных сечений. Полное сечение в активационных библиотеках определяется некорректно, поскольку может не включать данные по всем типам реакций. Такие ситуации возникают в библиотеках активационных и дозиметрических данных.

Оценки данных для расчета переноса нейтронов низких энергий должны обеспечивать расчеты переноса нейтронов и трансмутации при энергии ниже 6-10 МэВ. Если возможно, в них включаются данные по образованию фотонов и

¹ Этот раздел носит сугубо рекомендательный характер. – М.Н..

² Библиотека РОСФОНД не разделяется на подбиблиотеки активационных данных, данных для расчета быстрых и медленных нейтронов. – М.Н.

ковариационные данные. Типичные оценки должны включать Файлы 1, 2, 3, 4, 5 и иногда Файлы 8, 9, 10, 12, 13, 14, 15, 31, 32, 33, 34, 35, 39 и/или 40. Резонансные параметры обычно задаются так, что можно рассчитать факторы самоэкранировки. Спектры заряженных частиц и их энерго-угловые корреляции (MT=600-849) обычно не приводятся. В Файл 3 включаются все важные реакции в указанном энергетическом интервале, включая полное сечение (MT=1) и сечение упругого рассеяния (MT=2). К другим обычно включаемым реакциям относится это неупругое рассеяния (MT=4, 51—91), радиационный захват (MT=102), деление (MT=18, 19-21, 38), реакции поглощения (MT=103, 104, 105,...) и реакции с испусканием нейтрона, такие как MT=16, 17, 22, 28,... Правила представления для каждой реакции приведены ниже. Примерами оценок такого типа являются оценки данных для актинидов, включающие данные по образованию продуктов деления

Транспортные оценки при высокой энергии должны обеспечивать расчеты переноса нейтронов, трансмутации, образования фотонов, энерговыделения, радиационных повреждений, образования газов, радиоактивности и источников заряженных частиц в области энергий до 20 МэВ. В некоторых случаях верхний предел может равнять 40-100 МэВ. Эти оценки используют Файлы 1, 2, 3, 4, 5, 6, 12, 13, 14, 15 и иногда Файлы 8, 9, 10, 31, 32, 33, 34, 35, 39 и/или 40. И снова Файл 3 должен включать все сечения важных реакций в данном энергетическом интервале, включая MT=1 и 2. Туда будут входить многие из реакций, перечисленных выше, и плюс серия MT=600-849. При высоких энергиях (обычно – выше 20 МэВ) некоторые реакции могут быть объединены в составную реакцию MT=5³. При этом для представления энерго-угловых корреляций при рассеянии нейтронов и расчете энергии продуктов реакции, нужных для расчета энерговыделения и радиационных повреждений, обычно требуется использовать Файл 6. Требуется уделять специальное внимание энергетическому балансу. Оценки при высоких энергиях важны для материалов, которые используются при проектировании реакторов, при расчете защиты и в медицинского радиотерапевтического оборудования (которая включает и части тела человека).

3.4.1. Полное сечение (MT=1)

Полное сечение часто известно лучше всех остальных, оно обычно наиболее важно для защитных материалов. Особое внимание следует уделить оценке этого сечения и тому, как представить его.

Минимумы сечений (потенциальные окна) и Должна быть тщательно изучена и проверена структура полного сечения, особенно наличие в нем глубоких интерференционных минимумов. При их описании должно использоваться достаточное количество энергетических точек, чтобы воспроизвести экспериментальные данные не менее детально, чем они измерены.

Также как и любое парциальное сечение, полное сечение должно быть представлено не более, чем в 50000 энергетических точках. Набор этих точек должен быть объединением всех энергетических точек, используемых для задания

³ В библиотеке РОСФОНД, представляющей нейтронные данные при энергиях до 20 МэВ составная реакция MT=5 нигде не используется.

парциальных сечений. В рамках сформулированных требований необходимо минимизировать число энергетических точек, в которых задается полное сечение. Полное сечение должно быть суммой сечений с $MT=2$ (упругое рассеяние) и с $MT=3$ (суммарное сечение неупругих процессов). Если $MT=3$ не задается, то сечение упругого рассеяния в сумме с сечениями всех неупругих процессов должно равняться полному сечению.

Задание полного сечения в каждой энергетической точке, в которой задано хотя бы одно парциальное сечение, облегчает задачу проверки баланса сечений и выявлять возможные ошибки. В определенных случаях для представления полного сечения в заданном интервале может потребоваться больше точек, чем для соответствующих парциальных сечений. Например, постоянное сечение рассеяние и сечение радиоактивного захвата с поведением $1/v$ могут быть точно определены дважды логарифмическим законом интерполяции ($INT=5$, $\log\text{-}\log$) в заданном энергетическом интервале всего двумя точками, но сумма двух сечений не будет точно линейной ни в этом, ни в любом другом универсальном масштабе. В подобных случаях более точное полное сечение между энергетическими точками, может быть получено из суммы парциальных, чем путем прямой интерполяции из $MT=1$.

3.4.2. Сечение упругого рассеяния ($MT=2$)

Обычно сечение упругого рассеяния обычно известно с меньшей точностью, чем полное сечение. Часто сечение упругого рассеяния получают вычитанием сечения неупругих взаимодействий из полного сечения. Эта процедура может породить ряд проблем. Например, полученное таким образом сечение упругого рассеяния может обладать неестественной структурой. Тому есть несколько причин. Во-первых, обычно сечение неупругих взаимодействий, как и его составляющие, измеряются с худшим энергетическим разрешением, чем полное сечение. Когда сглаженное энергетическим разрешением сечение неупругих взаимодействий вычитается из полного сечения, измеренного с лучшим разрешением, разность оказывается сильно искажена функциями разрешения. Во-вторых, если измеренная или оцененная структура в сечении неупругих взаимодействий неправильно коррелирует со структурой полного сечения, в сечении упругого рассеяния, также проявится нереальная структура.

Часто экспериментальное сечение упругого рассеяния получается интегрированием измеренного распределения упруго рассеянных нейтронов. Эти данные могут не охватывать весь угловой интервал и, кроме того, могут включать вклад от неупруго рассеянных нейтронов. Это обычно и происходит благодаря вкладу неупругого рассеяния на низколежащих уровнях, неразличимому в эксперименте от упругого рассеяния. Следует быть осторожным в использовании таких результатов для получения интегрального сечения упругого рассеяния. Те же проблемы, естественно, возникает и при формировании файла 4.

3.4.3. Сечение неупругих взаимодействий ($MT=3$)

Сечение неупругих взаимодействий в обязательном порядке должно быть задано лишь в том случае, если $MT=3$ используется в файле 12 для представления данных о порождаемых нейтронами фотонах. В этом случае секции с $MT=3$ должна содержаться и в файле 3. Если $MT=3$ определено, тогда набор точек, используемых для получения этого сечения, должен являться объединением наборов точек, используемых для парциальных сечений.

3.4.4. Сечение неупругого рассеяния ($MT=4$)

Полное сечение неупругого рассеяния должно определяться, если задано хотя бы одно из парциальных сечений; оно является суммой сечений возбуждения дискретных уравнений, $MT=51-90$, и континуума уровней - $MT=91$. Набор энергетических точек, используемых для задания полного сечения неупругого рассеяния ($MT=4$) должен являться объединением наборов, используемых для задания парциальных сечений.

Рекомендуется определение сечений возбуждения как можно большего числа уровней. Остальную часть неупругого рассеяния можно рассматривать как сечение возбуждения континуума уровней. Особенно важны вклады прямых взаимодействий в неупругое рассеяние нейтронов для деформированных ядер с

основным состоянием 0^+ , которые следует расширить до верхнего предела (хотя бы до 20 МэВ) в конкуренции с континуумом. Энергетический спектр таких нейтронов более похож на спектр упруго рассеянных нейтронов, чем на спектр испарения.

Задание сечений возбуждения следует начинать с задания нулевого сечения, при пороговой энергии. Если сечение какого-либо уровня не простираются до 20 МэВ, необходимо в наиболее высокоэнергетической точке, для которой сечение имеет ненулевое значение, задать вторую точку при той же энергии с сечением, равным нулю. Далее задается нулевое сечение при 20 МэВ. Это непосредственно указывает на то, что энергетическая зависимость сечения оборвана

Если указатель $LR=0$, парциальное сечение представляет собой сечение $(n, n' \gamma)$ -процесса. Угловые распределения для рассеянных нейтронов должны быть определены в соответствующих секциях Файлов 4 или 6. Если возможно, то в Файлах 6 и 12 также должны присутствовать такие секции для описания угловых распределений фотонов. Если фотоны неупругого рассеяния не могут быть приписаны к определенным уровням, то их можно представить через секцию $MT=4$ в Файлах 6, 12 и 13. Когда фотоны неупругого рассеяния не могут быть разделены от фотонов неупругих взаимодействий, то они могут быть включены в $MF=13$, $MT=3$.

Признак $LR>0$ указывает на то, что ядро, образовавшееся в результате неупругого рассеяния, снимает свое возбуждение которых снижается испусканием частиц или образованием электро-позитронной пары (см. Раздел 0.6)⁴. Если $LR=1$, то в Файле 6 приводятся идентификаторы, выходы и распределения всех частиц и фотонов. Если $LR>1$, то угловое распределение нейтронов должно приводиться в Файле 4, но распределения испущенных частиц не задано. В этом случае, образование фотонов должно оцениваться так же, как в случае $LR=0$.

Если образовавшийся при неупругом рассеянии уровень может распадаться более, чем одним способом, то можно использовать Файл 6 или в Файле 3 для образования этого уровня можно приводить несколько сечений. Рассмотрим случай, в котором возбуждение уровня снимается или испусканием протона, или альфа-частицы. Та часть реакции, которая представляет канал (n, na) должна характеризоваться $LR=22$, другая – со следующим номером MT и с $LR=28$ (n, np) . В файле 4 под двумя номерами MT будет задано одно и то же угловое распределение нейтрона, поскольку они действительно, будут описывать один и тот же нейтрон. Секции должны быть упорядочены по увеличению величины QI (энергии возбуждения).

3.4.5. Сечение деления ($MT=18, 19-21, 38$)

В секции $MT=18$ для делящихся материалов должно указываться полное сечение деления. Должна быть сделана попытка разбить процесс деления на составляющие: деление с первого шанса (n, f) , $MT=19$; деление со второго шанса $(n, n' f)$, $MT=20$; деление с третьего шанса, $(n, 2n' f)$, $MT=21$ и деление с четвертого шанса $(n, 2n' f)$, $MT=38$.

⁴ Значение $LR=31$ все еще допускается - для определения γ -распада, при использовании $MF=3$ и $MF=12$ (или 15) и $MF=4$.

Сечение, представленное в секции MT=18, представляет собой сумму сечений, содержащихся в секциях с MT=19, 20, 21 и 38. Набор энергетических точек, используемый в MT=18, должен быть объединением всех частных наборов.

Если в файле 2 задаются параметры разрешенных и неразрешенных резонансов, то полное сечение деления в резонансной области, рассчитанное по резонансным параметрам, должно быть включено в секции MT=18 и MT=19 файла MF=3.

Величина Q для MT=18, 19, 20, 21 и 38 – это энергия деления без энергии нейтрино. Она должна соответствовать величине, указанной в секции MT=458 Файла 1.

В Файле 4 угловые распределения нейтронов деления обычно изотропны в лабораторной системе. Энергетические распределения задаются в Файле 5. В разделе 5 приводятся общие правила, для парциальных реакций деления.

3.4.6. Нейтронные сечения реакций с испусканием заряженных частиц с возбуждением дискретных уровней и непрерывного их спектра (серии MT=600-849)

Сечение реакции (n,p) может быть представлено суммой реакций на дискретных уровнях (n,p') и континуума (n,p_c) (например, MT=103 может включать MT=600-648 и 649), как в случае с неупругим рассеянием (n,n'), когда MT=4 собирается из MT=51-90 и 91 (см. Раздел 3.4.4). Аналогично, соотносятся MT=104 и 650-699 для реакций (n,d') ; MT=105 и 700 – 749 для реакций (n,t') , MT=106 и 700 -749 для реакций (n, ³He') , MT=107 и 800 -849 для реакций (n, α'). Конечно, реакции MT=600, 650,700 и т.д. представляют реакции образования основных состояний ядер-продуктов и в файлах образования фотонов эти значения MT не будут представлены соответствующими секциями, если только того не потребует значение LR>0 (как в реакции ¹⁰B(n,t)⁸Be).

3.5. ПРАВИЛА ДЛЯ РЕАКЦИЙ С ЗАРЯЖЕННЫМИ ЧАСТИЦАМИ И ФОТОНАМИ

Номера подбиблиотек взаимодействия с частицами и фотонами приведены в Таблице 0.1. Правила для заряженных частиц такие же, как для нейтронов в Разделе 3.4. Исключения описаны ниже.

3.5.1. Полное сечение

Полное сечение для заряженных частиц не определяется. Секция MT=1 следует использовать для полного фотоядерного сечения, а MT=501 – для сечения взаимодействия фотонов с атомами.

3.5.2. Сечение упругого рассеяния

В разделе 6.2.6. будет детально обсуждаться невозможность восстановления интегрального сечения упругого рассеяния с заряженными частицами из-за

Кулоновского члена. Следовательно, σ либо полагается равным 1.0, либо – сумме ядерного и интерференционного рассеяния, рассчитанного с отсечкой по углу. Теоретически эта величина может оказаться равной нулю, и тогда задается малая величина, например 10^{-38} . Первая и последняя энергетические точки, используемые в MT=2 файла MF=3, определяют и область применения представления сечений в Файле 6. Сечение не должно обязательно задаваться во всем интервале от 10^{-5} эВ до 20 МэВ. Для всех заряженных частиц и фотонов для описания упругого рассеяния (резонансная флуоресценция) используется MT=2. Для фотонов, MT=502 и 504 используются, соответственно, для когерентного и некогерентного атомного рассеяния.

3.5.3. Сечение неупругого рассеяния

Правила для неупругого рассеяния на заряженных частицах и фотонах, такие же как и для нейтронов. Используется следующая комбинация в обозначениях.

Incident Particle	MT's for Excited States	MT's for Total Inelastic σ
γ	undefined	102
n	51-91	4
p	601-649	103
d	651-699	104
t	701-749	105
^3He	751-799	106
α	801-849	107

3.5.3. Тормозная способность

Полная тормозная способность для заряженных частиц в эВ×барн задается в MF=3, MT=500. Это в основном атомная характеристика, определяемая экранировкой заряда ядра электронами, должна тем не менее, повторяться для каждого изотопа элемента. Полная тормозная способность, большинстве табличных представлений неявно включает и кулоновское рассеяние на большие углы, которое описывается в Файле 6. Двойной учет этого вклада, вероятно мал и практически не существен.

4. ФАЙЛ 4. УГЛОВЫЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ВТОРИЧНЫХ НЕЙТРОНОВ

4.1. ОБЩЕЕ ОПИСАНИЕ

Файл 4 содержит представления угловых распределений вторичных нейтронов. Он используется только для нейтронных реакций, реакции с другими частицами не рассматриваются. Ясно, что эти распределения должны быть заданы для упругого рассеяния нейтронов и для нейтронов, неупруго рассеянных с возбуждением дискретных уровней. Однако, угловые распределения должны также определяться и для нейтронов, получающихся в результате реакций (n,p' континуум) и (n,2n). В этих случаях угловые распределения должны быть проинтегрированы по конечным энергиям нейтронов. Файл 4 также может содержать угловые распределения заряженных частиц для реакций с выходом одной частицы (MT=600 до 849, см. раздел 3.4.6). Угловые распределения фотонов задаются в Файле 14, когда в файле 4 заданы угловые распределения частиц.

Когда имеет место сильная корреляция между энергетическими и угловыми распределениями испускаемых частиц и вообще когда испускаются заряженные частицы для описания угловых распределений всех испускаемых частиц, включая фотоны, предпочтительнее использовать Файл 6. Тогда Файлы 4 и 14 не используются.

В некоторых случаях, угловые распределения в резонансной области могут быть рассчитаны по резонансным параметрам (см. раздел 2.4.22). В таких случаях эти угловые распределения предпочтительнее распределений, заданных в Файле 4, особенно при расчетах глубокого прохождения. Однако, для многих практических приложений гладкие распределения Файла 4 будут вполне приемлемы.

Угловые распределения для реакции определенного типа (определяющегося номером MT) задаются для набора энергий падающих нейтронов в порядке увеличения этих энергий. Рассматриваемый энергетический интервал должен быть тем же, что и для реакции того же типа в файле 3. Угловые распределения, реакций различных типов, приводимые в файле 4, для одного и того же материала должны задаваться в порядке возрастания номеров MT.

Угловые распределения определяются как распределения вероятностей, нормированных следующим образом:

$$\int_{-1}^1 f(\mu, E) d\mu = 1$$

где $f(\mu, E)d\mu$ - вероятность того, что нейтрон с падающей энергией E будет рассеян в интервале $d\mu$ с углом, косинус которого равен μ . Единицы измерения $f(\mu, E)$ - это (единица косинуса)⁻¹. Так как обычно угловые распределения рассеянных нейтронов имеют азимутальную симметрию, распределение можно представить в виде разложения по полиномам Лежандра

$$f(\mu, E) = \frac{2\pi}{\sigma_s(E)} \sigma(\mu, E) = \sum_{l=0}^{M} \frac{2l+1}{2} a_l(E) P_l(\mu)$$

где

μ	= косинус угла рассеяния либо в лабораторной системе координат, либо в системе центра масс
E	= энергия падающего нейтрона в лабораторной системе
$\sigma_s(E)$	= сечение рассеяния. Оно определяется при энергии E в Файле 3 для определенного типа реакции (МТ).
l	= степень полинома Лежандра,
$\sigma(\mu, E)$	= дифференциальное сечения рассеяния в единицах - барн на стерадиан.
a_l	= l -ый коэффициент разложения по полиномам Лежандра., Понятно, что $a_0 = 1.0$.

Угловые распределения могут быть представлены либо в системе центра масс (СМ), либо в лабораторной системе координат(LAB). Распределения задаются либо таблицами нормированных распределений вероятностей, $f(\mu, E)$, в функции энергии падающих нейтронов (первый способ), либо коэффициентами разложения по полиномам Лежандра, $a_l(E)$, также в зависимости от энергии падающих нейтронов (второй способ)

Абсолютное дифференциальное сечение рассеяния получают объединением данных файлов 3 и 4. Если заданы табличные распределения, абсолютное дифференциальное сечение (барн на стерадиан) вычисляется следующим образом:

$$\sigma(\mu, E) = \frac{\sigma_s(E)}{2\pi} f(\mu, E)$$

где $\sigma_s(E)$ указано в файле 3 (для того же номера МТ), а $f(\mu, E)$ берется в файле 4. Если же угловые распределения представлены полиномиальными коэффициентами Лежандра, то абсолютные дифференциальные сечения определяются формулой:

$$\sigma(\mu, E) = \frac{\sigma_s(E)}{2\pi} \sum_{l=0}^{NL} \frac{2l+1}{2} a_l(E) P_l(\mu)$$

где $\sigma_s(E)$ задается в файле 3 (при том же номере МТ), а коэффициенты $a_l(E)$ определяются в файле 4.

В Файле 4 иногда задается задана матрица коэффициентов перевода коэффициентов разложения по полиномам Лежандра из одной системы координат в другую. Коэффициенты связаны $a_l(E)$, определенные в разных системах, связаны друг с другом через энерго-независимую матрицу преобразования U_{lm} и обратную ей матрицу U^{-1}_{lm} :

$$\mathbf{a}_l^{\text{LAB}}(\mathbf{E}) = \sum_{m=0}^{\text{NM}} \mathbf{U}_{lm} \mathbf{a}_m^{\text{CM}}(\mathbf{E});$$

$$\mathbf{a}_l^{\text{CM}}(\mathbf{E}) = \sum_{m=0}^{\text{NM}} \mathbf{U}^{-1}_{lm} \mathbf{a}_m^{\text{LAB}}(\mathbf{E}).$$

Выражения для матриц U и U^{-1} могут быть найдены в работах Цвайфеля и Гурвица¹ и Амстера².
В современной версии формата задание этой матрицы не предусматривается.

4.2. ФОРМАТЫ

Файл 4 делится на секции, содержащие данные для определенных типов реакций (номер МТ) и упорядоченные в порядке увеличения номеров МТ. Каждая секция всегда начинается с записи HEAD и заканчивается записью SEND. Если секция содержит описание угловых распределений для сечения упругого рассеяния, то матрица преобразования (если она задается) приводится первой, за ней следует представление угловых распределений.

Определяются следующие величины:

- LTT** флаг, указывающий на используемое представление;
LTT=0, все угловые распределения изотропны,
LTT=1, данные задаются коэффициентами разложения по полиномам Лежандра, $a_l(E)$;
LTT=2, данные задаются в виде нормированных распределений вероятностей, $f(\mu, E)$;
LTT=3, нижняя энергетическая область представлена коэффициентами Лежандра; верхняя – табулированными данными.
- LI** флаг, указывающий все ли угловые распределения изотропны
LI=0, не все
LI=1, все распределения изотропны;
- LCT** флаг, определяющий используемую систему координат
LCT=1, лабораторная система координат
LCT=2, система центра масс;
- NE** количество энергетических точек, в которых задаются угловые распределения ($NE \leq 2000$);
- NL** высший порядок полинома Лежандра, который задается при каждой энергии ($NL \leq 64$);
- NM** максимальный порядок полинома Лежандра, который будет необходим ($NM \leq 64$) для описания угловых распределений упругого рассеяния, как в лабораторной системе, так и в системе центра масс. NM должно быть четным числом.
- Vk** элементы матриц преобразования:
 $Vk = U^{-1}_{1,m}$, если LCT=1 (лабораторная система LAB)
 $Vk = U_{1,m}$, если LCT=2 (система центра масс CM)
- NP** число угловых точек (значений косинуса), используемых для задания таблицы распределений вероятностей для каждой энергии ($NP \leq 201$).

¹ P.F.Zweifel, H Hurwitz, Jr., J.Appl.Phys.25,1241 (1954)

² H.Amster, J.Appl.Phys.29,623 (1958)

Другие часто используемые величины определены в Словаре (Приложение А). Структура секции зависит от значения LTT (какое представление используется - $a_l(E)$ или $f(\mu, E)$), однако секция всегда начинается с записи HEAD:

```
[MAT, 4, MT/ ZA, AWR, 0, LTT, 0, 0]HEAD
```

4.2.1. Задание коэффициентов разложения по полиномам Лежандра: LTT=1 и LI=0

Если LTT=1 (то есть угловые распределения заданы в виде коэффициентов разложения по полиномам Лежандра), секция имеет следующую структуру:

```
[MAT, 4, MT/ ZA, AWR, 0, LTT, 0, 0]HEAD (LTT=1)
[MAT, 4, MT/ 0.0, AWR, LI, LCT, 0, 0]CONT (LI=0)
[MAT, 4, MT/ 0.0, 0.0, 0, 0, NR, NE/ Eint]TAB2
[MAT, 4, MT/ T, E1, LT, 0, NL, 0/a1(E1)]LIST
[MAT, 4, MT/ T, E2, LT, 0, NL, 0/a1(E2)]LIST
-----
[MAT, 4, MT/ T, ENE, LT, 0, NL, 0/a1(ENE)]LIST
[MAT, 4, 0/ 0.0, 0.0, 0, 0, 0, 0]SEND
```

Напомним, что T и LT задают температуру (в Кельвинах) и, соответственно, наличие температурной зависимости. Эти величины обычно равны 0.

4.2.2. Задание таблиц распределения вероятности: LTT=2 и LI=1

Если угловые распределения заданы таблицей распределения вероятности (LTT=2), то структура секции будет следующей:

```
[MAT, 4, MT/ ZA, AWR, 0, LTT, 0, 0]HEAD (LTT=2)
[MAT, 4, MT/ 0.0, AWR, LI, LCT, 0, 0]CONT (LI=0)
[MAT, 4, MT/ 0.0, 0.0, 0, 0, NR, NE/Eint]TAB2
[MAT, 4, MT/ T, E1, LT, 0, NR, NP/μint /f(μ, E1)]TAB1
[MAT, 4, MT/ T, E2, LT, 0, NR, NP/μint /f(μ, E2)]TAB1
-----
[MAT, 4, MT/ T, ENE, LT, 0, NR, NP/μint /f(μ, ENE)]TAB1
[MAT, 4, 0/ 0.0, 0.0, 0, 0, 0, 0]SEND
```

T и LT обычно равняются нулю.

4.2.3. Все угловые распределения изотропны: LTT=0 и LT=1.

В случае, когда все угловые распределения для данного номера MT изотропны, структура секции такова:

```
[MAT, 4, MT/ ZA, AWR, 0, LTT, 0, 0]HEAD (LTT=0)
[MAT, 4, MT/ 0.0, AWR, LI, LCT, 0, 0]CONT (LI=1)
[MAT, 4, 0/ 0.0, 0.0, 0, 0, 0, 0]SEND
```

4.2.4. Угловые распределения изотропны в двух энергетических областях: LTT=3 и LT=0.

Если LTT=3, угловые распределения задаются коэффициентами Лежандра в нижней области энергий и вероятностями распределения в верхне-энергетической части. Структура секции в этом случае следующая:

```
[MAT, 4, MT/ ZA, AWR, 0, LTT, 0, 0]HEAD (LTT=3)
[MAT, 4, MT/ 0.0, AWR, LI, LCT, 0, NM]CONT (LI=0)
(Legendre coefficients)
[MAT, 4, MT/ 0.0, 0.0, 0, 0, NR, NE1/Eint]TAB2
[MAT, 4, MT/ T, E1, LT, 0, NL, 0/a1(E1)]LIST
-----
[MAT, 4, MT/ T, ENE, LT, 0, NL, 0/a1(ENE1)]LIST
(Tabulated data)
[MAT, 4, MT/ 0.0, 0.0, 0, 0, NR, NE2/Eint]TAB2
[MAT, 4, MT/ T, E1, LT, 0, NR, NP/μint /f(μ, ENE1)]TAB1
-----
[MAT, 4, MT/ T, ENE, LT, 0, NR, NP/μint /f(μ, ENET)]TAB1
(NET = NE1+NE2-1)
[MAT, 4, 0/ 0.0, 0.0, 0, 0, 0, 0]SEND
```

Отметим, что на границах указываются двойные энергетические точки.

4.3. ПРАВИЛА

Угловые распределения для реакций двух тел следует задавать в системе CM (LCT=2). Рекомендуется, чтобы угловые распределения нейтронов остальных реакциях (таких как континуальное неупругое рассеяние, деление, т.д.) были заданы табличными распределениями вероятности в системе LAB. Все данные по угловым распределениям следует задавать в минимальном числе энергетических точек, которое, однако, должно быть достаточным для описания энергетической зависимости угловых распределений.

В случае, когда угловые распределения представлены в виде коэффициентов разложения по полиномам Лежандра, должны выполняться следующие правила. Должно использоваться достаточное число членов разложения для точного описания рекомендуемого углового распределения в любой энергетической точке так, чтобы интерполированное распределение было всегда положительным. Количество коэффициентов (NL) может меняться от одной энергетической точки до другой; обычно NL увеличивается с увеличением энергии падающих нейтронов.

При получении коэффициентов в промежуточных энергетических точках нужно использовать схему двойной линейной интерполяции (INT =2). Это обеспечивает положительность интерполированного распределения в интервале косинуса от -1.0 до 1.0, кроме того, эта простая схема необходима еще и потому, что некоторые коэффициенты могут быть отрицательными. Значение NL никогда не должно превышать 64. Если для получения неотрицательного распределения нормальным путем требуется более 64 коэффициентов, следует подбирать наилучшее неотрицательное описание не более чем 64 полиномами. Для описания изотропного углового распределения при малых энергиях целесообразно пользоваться NL=1.

В случае, когда угловые распределения представлены в виде таблицы вероятностей, то следует руководствоваться следующими правилами. Нужно задать достаточное число угловых точек (значений косинусов) для точного представления рекомендуемого распределения. Число угловых точек может меняться от распределения к распределению. Интервал косинусов должен быть в пределах от -1.0 до 1.0. Интерполяционная схема для $f(\mu, E)$ в зависимости от μ должна быть log-линейной (INT =4), а для $f(\mu, E)$ в зависимости от E - дважды линейной (INT =2).

Точные угловые распределения для нейтронов тепловых энергий могут быть получены из Файла 7 или детальным расчетом по модели свободного газа. В файле 4 могут быть приведены данные о рассеянии только для неподвижных ядер-мишеней.

Форматы, представленные выше, не допускают заданий энергетической зависимости матрицы преобразования, поэтому для реакций типа неупругого рассеяния матрицы преобразования не могут быть заданы. Если обрабатываемая программа предназначена для преобразования из систем LAB в CM и наоборот угловых распределений, представленных в виде коэффициентов разложения по полиномам Лежандра, то сначала нужно получить распределения в виде таблицы вероятностей, а затем по-точечно преобразовать их в нужную систему. Поточечные угловые распределения затем можно разложить по полиномам Лежандра в новой системе координат.

4.4. ПРАВИЛА ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕННЫХ РЕАКЦИЙ.

4.4.1. Упругое рассеяние (MT=2)

1. Угловые распределения упруго рассеянных нейтронов (как и неупругого рассеянных с возбуждением дискретных уровней) должны представляться коэффициентами разложения по полиномам Лежандра в системе CM. В этом представлении максимальный порядок полинома для каждого значения начальной энергии не должен превышать $l_{\max} \leq 64$ и должен быть четным.

2. При выборе набора значений энергий, при которых задаются угловые распределения упругого рассеяния легких и средних ядер следует позаботиться о том, чтобы энергетическая структура угловых распределений должным образом соответствовала энергетической структуре сечения упругого рассеяния. Сечения и угловые распределения упруго рассеянных нейтронов не могут анализироваться независимо друг от друга. Напомним, что обрабатываемые программы,

перерабатывают данные МТ=2 из файлов 3 и 4. (Структура в полном сечении не учитывается при расчете вероятностей). Лучше обеспечить согласованность в описании структуры данных в файлах 3 и 4, чем описать структуру в одном файле и пренебречь ею в другом.

3. Должна быть обеспечена согласованность между данными об угловых распределениях, заданных для упругого и для неупругого рассеяния. Это относится не только к структурным эффектам, но и к тому, как эти распределения получены.

Нередко оцененные угловые распределения упругого рассеяния основываются на экспериментальных данных, содержащих вклады от неупругого рассеяния на низколежащих уровнях (которые к тому же могут содержать вклад прямых взаимодействий). Если из экспериментальных данных угловых распределений вычитаются неупругие вклады, то эта процедура должна быть выполнена непротиворечиво: вклад неупругого рассеяния вычитать не только из углового рассеяния, но и из интегрального сечения рассеяния. При этом должна быть уверенность в том, что эти вклады в данные для неупругого рассеяния (как в собственном сечении, так и в угловые распределения) включены. Это особенно важно, когда вклад неупругого рассеяния обусловлен прямым взаимодействием, так как в этом случае угловые распределения не изотропны и не симметричны относительно 90^0 и обычно преобладает рассеяние вперед.

4. Нельзя использовать чрезмерное количество энергетических точек для угловых распределений. Необходимое количество определяется степенью сложности углового распределения, но не должно превышать 2000.

5. Задание углового распределения упругого рассеяния при 10^{-5} эВ обязательно. Полезным, но необязательным, будет включение и точки при 0.0253эВ. Обязательно должно быть задано угловое распределение при наибольшей энергии, при которой оно изотропно. Наибольшее значение энергии, при которых задается сечение в файле 3, должно равняться 20 МэВ.

6. Для нейтронов существует соотношение между полным сечением и дифференциальным сечением упругого рассеяния вперед (предел Вика или оптическая теорема):

$$\sigma(0^{\circ}) \geq \sigma_{\pi} = \left(\frac{\sigma_{\Gamma}}{4\pi\lambda} \right)^2$$

$$\sigma_{\pi} = X E_0 \frac{AWR^2}{(1 + AWR)^2} \sigma_{\Gamma}^2 \quad \frac{\text{barns}}{\text{steradian}}$$

где E_0 измеряется в эВ, а σ_{Γ} - барнах. См. Приложение Н о величине X. Следует заботиться о выполнении этого неравенства, особенно при высоких энергиях.

4.4.2. Неупругое рассеяние

1. Для МТ=4 данные об угловых распределениях не задаются.

2. Для $MT=51, 52, 53, \dots, 91$, если они указаны в файле 3, задание угловых распределений обязательно.
3. Данные об угловых распределениях реакций двух тел ($MT=2, 51-90, 701\dots$) на дискретных уровнях должны быть заданы в системе СМ коэффициентами Лежандра.
4. Для всех континуальных реакций, типа $MT=91$, угловые распределения приводятся в лабораторной системе LAB.
5. Изотропные угловые распределения следует использовать до тех пор, пока анизотропия не превышает 5%. Если сечения возбуждения уровня содержат значительный вклад прямого взаимодействия, то корректное описание углового распределения особенно важно.
6. При задании угловых распределений с возбуждением дискретных уровней следует проявлять те же меры предосторожности, что и при описании их энергетической структуры.
7. Не следует переусложнять данные об угловых распределениях. Ограничьтесь числом распределений, минимально необходимым для описания их энергетической зависимости.

4.4.3. Все другие нейтронные реакции

Для всех нейтронных реакций, таких как деление, $(n, n'\alpha)$, или $(n, 2n)$, данные об угловых распределениях должны задаваться в Файлах 4 и 6. Файл 4 имеет смысл, когда распределение полностью изотропно (реакция проходит без образования предравновесных состояний). Рекомендуется использовать табличное представление данных в систем LAB.

4.4.4. Реакции с образованием заряженных частиц

Если необходимо, то распределения заряженных частиц в реакциях двух тел в сериях с номерами 600 могут быть заданы в Файле 4 в система СМ. (В континуальных реакциях с образованием одной заряженной частицы (например, 649, 699 и т.д.) они могут быть представлены в Файле 4 и в системе LAB. Для более сложных реакций предпочтительнее использовать Файл 6.

7.ФАЙЛ. ДАнные О ЗАКОНЕ РАССЕЯНИЯ ТЕПЛОВЫХ НЕЙТРОВ

7.1.ОБЩЕЕ ОПИСАНИЕ

Файл 7 содержит данные о неупругом рассеянии тепловых нейтронов в замедлителях в тепловом энергетическом диапазоне ($E < 5$ эВ). Сечения задаются для упругого (MT=2) и неупругого рассеяния (MT=4). Начиная с ENDF-6, файл 7 обладает внутренней полнотой и для того, чтобы получить полное сечение рассеяния в тепловой области уже не требуется привлекать данные из файлов 3 и 4.

7.2. КОГЕРЕНТНОЕ УПРУГОЕ РАССЕЯНИЕ

Когерентное упругое рассеяние на порошкообразных кристаллических материалах может быть представлено формулой

$$\frac{d^2\sigma}{dE d\Omega}(E \rightarrow E', \mu, T) = \frac{1}{E} \sum_{i=1}^{E_i < E} s_i(T) \delta(\mu - \mu_i) \delta(E - E') / 2\pi \quad (7.1)$$

где

$$\mu_i = 1 - \frac{2E_i}{E} \quad (7.2)$$

В этих формулах

- E = энергия налетающего нейтрона (эВ);
- E' = энергия вторичного нейтрона (эВ);
- μ = косинус рассеяния,
- T = температура замедлителя(К),
- E_i = энергия Брегговских границ (эВ)
- s_i = коэффициенты, пропорциональные структурным факторам (эВ-барн),
- μ_i = характеристический угол рассеяния для соответствующей совокупности плоскостей кристаллической решетки.

Энергия Брегговских границ и структурные факторы могут быть рассчитаны из свойств кристаллической решетки и амплитуд рассеяния для различных атомов в ячейках кристаллической решетки.¹

Величина, заданная в файле, определяется

$$S(E, T) = \sum_{i=1}^{E_i < E} S_i(T) \quad (7.3)$$

которая представляется как ступенчатая функция с разрывами на границах Брегга с использованием гистограммы.

¹ В качестве примера, программа HEXSCAT[1] может быть использована для гексагональных решеток.

7.2.1. Формат для описания когерентного упругого рассеяния

Параметры, используемые для расчета когерентного упругого рассеяния, представлены в секции файла 7 с MT=2. Определяются следующие величины:

ZA, AWR	стандартные параметры заряда и массы.
LTHR	параметр, указывающий какой тип тепловых данных представлен. Для когерентного рассеяния тепловых нейтронов LTHR=1.
Ti	температура (К)
LT	Признак температурной зависимости. Данные для первой температуры задаются в записи TAB1. Данные для последующих температур представляются записями LIST на той же сетке независимой переменной, что и в записи TAB1.
LI	Признак интерполяции между данными для предыдущей и последующей температур. Смысл значений тот же, что и для INT в стандартных записях TAB1.
NR, Eint	Стандартные параметры записи TAB1. Используйте INT=1(гистограмма).
NP	Число границ Брега.

Структура секции следующая:

```
[MAT, 7, 2/   ZA,  AWR, LTHR,  0,  0,  0] HEAD                                LTHR=1
[MAT, 7, 2/   T0, 0.0,  LT,  0, NR, NP/  Eint / S(E, T0) ] TAB1
[MAT, 7, 2/   T1, 0.0,  LI,  0, NP,  0/  S(Ei, Ti) ] LIST
-----
<repeat LIST for T2, T3, ... TLT+1>
-----
[MAT, 7, 0 /  0.0, 0.0,   0,  0,  0,  0] SEND
```

7.2.2. Правила задания данных о когерентном упругом рассеянии

Сечение когерентного упругого рассеяния легко рассчитывается из S(E,T) путем реконструкции соответствующей энергетической сетки и деления S на E в каждой энергетической точке. При каждом значении E_i имеет место разрывность; между границами Брега должна использоваться log-log-интерполяция. Ниже первой границы Брега сечение равно 0.

Функция S(E,T) должна определяться до 5 эВ. Когда границы Брега находятся довольно близко друг другу (выше 1 эВ), то “ступеньки” получаются маленькими. В этом интервале разрешено группировать энергии Брега для того, чтобы уменьшить число ступенек при сохранении среднего сечения рассеяния. Угловая зависимость когерентного упругого рассеяния может быть представлена как дискретными углами, так и разложением по полиномам Лежандра. s_i(T) должны быть получены из S(E,T) путем описания этой функции формой (7.1).

7.3. НЕКОГЕРЕНТНОЕ УПРУГОЕ РАССЕЯНИЕ

Для частично упорядоченных систем как ZrN_x и полиэтилен упругое рассеяние может описываться в некогерентном приближении. Дифференциальные сечения определяются так:

$$\frac{d^2\sigma}{dE d\Omega}(E \rightarrow E', \mu, T) = \frac{\sigma_b}{4\pi} e^{-2EW'(T)(1-\mu)} \delta(E - E') \quad (7.4)$$

где σ_b - характеристическое предельное сечение (барн), W' - интеграл Дебая-Уоллера, поделенный на атомную массу (эВ⁻¹), а все другие переменные имеют прежнее значение. Интегральное сечение равно

$$\sigma(E) = \frac{\sigma_b}{2} \left(\frac{1 - e^{-4EW'}}{2EW'} \right) \quad (7.5)$$

Заметим, что пределом σ при малых E является σ_b .

7.3.1. Формат некогерентного упругого рассеяния

Параметры, используемые для расчета некогерентного упругого рассеяния, представлены также в секции файла 7 с MT=2, потому что когерентное и некогерентное рассеяние не проявляется в материале одновременно. Определены следующие величины:

ZA, AWR	стандартные параметры заряда и массы.
LTHR	параметр, указывающий какой тип тепловых данных представлен. LTHR=2 некогерентное рассеяние.
NP	количество температур.
SB	характеристические граничные сечения(барн)
W'(T)	интеграл Дебая-Уоллера, поделенный на атомную массу (эВ^{-1}), в функции от температуры (K).

Структура секции следующая:

```
[MAT, 7, 2/ ZA, AWR, LTHR, 0, 0, 0] HEAD (LTHR=2)
[MAT, 7, 2/ SB, 0.0, 0, 0, NR, NP/ T_int / W' (T) ] TAB1
[MAT, 7, 0/ 0.0 0.0, 0, 0, 0, 0] SEND
```

7.3.2. Правила для некогерентного упругого рассеяния

Этот формализм можно использовать до 5 эВ.

Для некоторых замедлителей, состоящих из нескольких видов атомов, некогерентное упругое рассеяние рассчитывается как сумма вкладов от двух различных материалов. Например, H в ZrH_x задан в MAT 0007, а Zr в ZrH_x – как MAT 0058.

7.4. НЕКОГЕРЕНТНОЕ НЕУПРУГОЕ РАССЕЯНИЕ

Неупругое рассеяние описывается законом рассеяния тепловых нейтронов, $S(\alpha, \beta, T)$, и определяется для замедляющей молекулы следующим образом

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE'}(E \rightarrow E', \mu, T) = \sum_{n=0}^{NS} \frac{M_n \sigma_{bn}}{4\pi kT} \sqrt{\frac{E'}{E}} e^{-\beta/2} S_n(\alpha, \beta, T) \quad (7.6)$$

где (NS+1) - число типов атомов в молекуле (например, для H_2O NS=1),

M_n число атомов n-ого типа в молекуле,

T температура замедлителя (K),

E энергия падающего нейтрона (эВ),

E' энергия рассеянного нейтрона (эВ),

- B** безразмерная передача энергии $\beta = (E - E')/kT$
 α изменение импульса, $\alpha = (E' + E - 2\mu \sqrt{EE'})/A_0kT$
 A_n масса атома n -ого типа,
 A_0 масса главного рассеивающего атома в молекуле.
 σ_{bn} сечение рассеяния для связанного атома n -ого типа

$$\sigma_{bn} = \sigma_{fn} \left(\frac{A_n + 1}{A_n} \right)^2 \quad (7.7)$$

- σ_{fn}** сечение рассеяния для несвязанного атома того же типа,
 k константа Больцманна,
 μ косинус угла рассеяния (в лабораторной системе координат).

Данные файла 7 для определенного материала включают только данные о законе рассеяния для главного рассеивателя, $S(\alpha, \beta, T)$, т.е. 0-ого атома в молекуле. Эти данные задаются в виде простой табличной функции. Характеристики рассеяния для других типов атома ($n = 1, 2, \dots, NS$) представляются аналитическими функциями. Заметим, что для всех атомов в молекуле характеристики рассеяния могут описываться аналитическими функциями. В этом случае основной рассеивающий атом не выделяется².

В некоторых случаях, рассеивающие свойства других типов атомов в молекуле или кристалле могут описываться $S_0(\alpha, \beta, T)$ для другого материала. Например, H в ZrH_x и Zr в ZrH_x задаются в отдельных МАТ.

При высоких энергиях для расчета дифференциального сечения могут потребоваться значения α и/или β вне области табулирования $S(\alpha, \beta)$. В этих случаях, применяется приближение быстрого столкновения (SCT – Short Collision Time approximation)

$$S^{SCT}(\alpha, \beta, T) = \frac{\exp\left[-\frac{(\alpha - |\beta|)^2 T}{4\alpha T_{eff}(T)} + \frac{|\beta|}{2}\right]}{\sqrt{4\pi\alpha \frac{T_{eff}(T)}{T}}} \quad (7.8)$$

где $T_{eff}(T)$ эффективная температура, а другие символы имеют прежние значения³.

Константы, необходимые для задания закона рассеяния и аналитических представлений на основных рассеивающих атомах, определяются массивом $B(N)$, $N=1, 2, \dots, NI$ где $NI = 6(NS+1)$. Для каждого типа атома определяются шесть констант (одна перфокарта). Первые шесть элементов принадлежат к основному рассеивающему атому, $n=0$. Элементы массива определяются так:

$B(1)$ = $M_0 f_0$, полное сечение для свободного основного рассеивающего атома. Если $B(1) = 0.0$, то основного рассеивающего атома нет, и свойства рассеяния для этого материала полностью описываются аналитическими функциями для каждого типа атома в этом материале.

² Д.Г.Модестов отмечает, что корректнее было бы в формуле (7.6) писать $S_n(\alpha_n, \beta, T)$, где $\alpha_n = (E' + E - 2\mu \sqrt{EE'})/A_n kT$, и суммировать по всем атомам молекулы.

³ Формула (7.8) откорректирована в соответствии с замечанием Д.Г.Модестова об ошибке: (под знаком экспоненты везде стоит модуль β).

V(2) = ϵ , значение E/kT , выше которого применима обычная модель упругого рассеяния (полные характеристики рассеяния могут быть получены из MT=2 файлов 2 и 4 соответствующих материалов).

V(3) = A_0 , отношение массы атома к массе нейтрона, используемого для получения α .

$$\left(\alpha = \frac{E' + E - 2\mu\sqrt{EE'}}{A_0} kT \right)$$

V(4) = E_{\max} , верхний энергетический предел для константы σ_{f0} (максимальная энергия, до которой можно использовать $S_0(\alpha, \beta, T)$).

V(5) = не используется.

V(6) = M_0 , число основных атомов рассеяния в материале (например, $M=2$ для H_2O).

Следующие шесть констант определяют аналитические функции, которые должны использоваться в описании процесса рассеяния первого не основного атома ($n=1$). Например, для H_2O таким атомом будет кислород, если основным атомом считать водород.

V(7) = a_1 , a определяет тип аналитической функции, используемой для этого типа атома.

$a_1=0.0$ использовать атом только при расчетах в SCT – приближении (см. ниже).

$a_1=1.0$, используется закон рассеяния для свободного газа.

$a_1=2.0$, используется закон диффузионного рассеяния

V(8) = $M_1\sigma_{f1}$, полное сечение для свободного атома этого типа.

V(9) = A_1 , эффективная масса для атома этого типа,

V(10) = 0.0, не используется.

V(11) = 0.0, не используется.

V(12) = M_1 число атомов этого типа в молекуле или ячейке.

Следующие шесть констант, **V(13)**, используются для описания второго не основного рассеивающего атома ($n=2$), если это требуется. Эти константы определяются аналогичным образом, как для $n=1$, т.е. **V(13)** – константа того же типа что и **V(7)**.

Иногда задается суммарная функция $S(\alpha, \beta)$. Например для BeO : функция $S(\alpha, \beta)$ для Be в BeO объединена с функцией для O в BeO так, чтобы получить правильное сечение на свободном атоме Be при использовании его массы. Суммарная функция $S(\alpha, \beta)$ используется для основного атома в уравнении (7.6), если $NS=0$. Однако, при расчетах в SCT-приближении должны учитываться все $NS+1$ атомов.

Закон рассеяния представлен таблицей $S(\alpha, \beta, T)$ для набора значений β . Для каждого значения β приводятся таблицы $S(\alpha, \beta, T)$ для каждого значения температуры. Т.е. сначала идет цикл по значениям β , затем по значениям T и, наконец, по значениям α . $S(\alpha, \beta)$ обычно симметричная функция β и данные табулируются только для положительных значений β . Для орто- и пара-водорода и дейтерия это не выполняется. В этих случаях и отрицательные и положительные значения β должны задаваться по возрастанию, а параметр **LASYM** должен быть положен равным 1.

В некоторых случаях можно достигнуть более точного представления температурной зависимости, если в определениях α и β реальную температуру T заменить на константу T_0 ($T_0 = 0.0253$ эВ или эквивалентная величина в единицах Больцмановской константы). В связи с этим для каждого материала задается признак (**LAT**), указывающий какая температура должна быть использована при получении $S(\alpha, \beta)$.

При рассеянии с большой потерей энергии и при для низких температур, β может быть большим и отрицательным. Основной вклад в сечение получается в области $\alpha+\beta=0$. В этих случаях компьютерный расчет может столкнуться с проблемой. Например, при расчете по

формуле (7.6) для воды при комнатной температуре при энергии налетающего нейтрона энергии 4 эВ результат выражается через произведение $e^{80} \times 10^{-34}$. В случае с жидким водородом при температуре 20 Кельвинов и нейтроном 1 эВ – через произведение порядка $e^{300} \times 10^{-130}$. Решение этой проблемы – непростая задача, особенно для 32-битных машин. В таких случаях используется параметр LLN: оценщик хранит $\ln S$ вместо S и соответственно меняет интерполяционную схему (закон log-log меняется на log-lin). В файлах библиотеки ENDF/B-III, стоят на месте чисел, меньших 10^{-32} стоят значения $S=0.0$. Их следует заменить на большую отрицательную величину, такую как -999.

7.4.1. Формат для некогерентного неупругого рассеяния

Параметры некогерентного неупругого рассеяния заданы в секции MT=4 файла 7. Определим следующие величины:

LAT	флаг, указывающий для какой температуры вычисляется α и β . LAT=0, использовалась действительная температура T. LAT=1, использовалась постоянная температура T = 0.025 эВ.
LASYM	указатель симметричности S(α, β) LASYM=0 – симметричная, LASYM=1 – несимметричная,
LLN	указатель формы хранения S(α, β) LLN=0 – записывается непосредственно S LLN=1 – записывается ln S
NS	число типов неосновных атомов рассеяния. Для большинства замедляющих материалов будет (NS+1) типов атомов в молекуле (NS \leq 3).
NI	полное число членов в массиве B(N). NI=6(NS+1)
B(N)	массив констант. Определения констант указывались выше (Параграф 7.1)
NR	число интервалов интерполяции для определенного параметра (либо α , либо β)
LT	Указатель температурной зависимости. Данные для первого значения температуры заданы в записи TAB1, данные для LT последующих температур представляются в записях LIST при тех же значениях α , что и при первой температуре.
LI	Используемый закон интерполяции между двумя температурами. Значения LI такие же как, как для INT в стандартных таблицах интерполяции TAB1.
NT	Полное число заданных температур. Заметим, что NT=LT+1.
Teff0	Таблица эффективных температур (К) для SCT-приближения, заданных в функции температуры замедлителя T(K) для основного атома.
Teff1, Teff2, Teff3	Таблица эффективных температур для первого, второго и третьего неосновного атома. Задается, только когда $a_1=0.0$
NB	общее число значений β .
NP	число значений α , определенных для каждого значения β при первой температуре. Т.е. NP - число заданных пар, α и S(α, β).
$\beta_{int}, \alpha_{int}$	используемые схемы интерполяции

Структура секции следующая:

```

[MAT, 7, 4 / ZA, AWR, 0, LAT, LASYM, 0] HEAD
[MAT, 7, 4 / 0.0, 0.0, LLN, 0, NI, NS/ B(N) ] LIST
[MAT, 7, 4 / 0.0, 0.0, 0, 0, NR, NB/  $\beta_{int}$  ] TAB2
[MAT, 7, 4 / T0,  $\beta_1$ , LT, 0, NR, NP/  $\alpha_{int}$  / S( $\alpha, \beta_1, T_0$ ) ] TAB1
[MAT, 7, 4 / T1,  $\beta_1$ , LI, 0, NP, 0/ S( $\alpha, \beta_1, T_1$ ) ] LIST
-----
<continue with LIST records for T2, T3, ... TLT+1>
-----
[MAT, 7, 4 / T0,  $\beta_2$ , LT, 0, NR, NP/  $\alpha_{int}$  / S( $\alpha, \beta_2, T_0$ ) ] TAB1
-----
<continue with TAB1 and LIST records for remaining values of  $\beta$  and T>
-----
[MAT, 7, 4 / 0.0, 0.0, 0, 0, NR, NT/ Tint / Teff0(T) ] TAB1
-----
<continue with TAB1 records for Teff1, Teff2 and/ or Teff3 if the
corresponding value of a1, a2, or a3 in B(7), B(13), or B(19) is zero>
-----
[MAT, 7, 0 / 0.0, 0.0, 0, 0, 0, 0] SEND

```

Если данные закона рассеяния полностью описываются аналитическими функциями (нет основного рассеивающего атома, т.е. $B(1)=0$), то табличные значения $S(\alpha, \beta)$ отсутствуют, и записи TAB1 и TAB2 опускаются.

7.4.2. Правила для некогерентного неупругого рассеяния

Данные файла 7 MT=4 должны описывать некогерентное рассеяние для энергий налетающих нейтронов до 5 эВ. Табличную функцию $S(\alpha, \beta, T)$ следует задавать так, чтобы минимизировать неоднородность при переходе к SCT-приближению. Выбор β для $S(\alpha, \beta)$ должен осуществляться так, чтобы возможно точно представить рассеивающие свойства материала с минимальным количеством точек по β . Сетка значений α в $S(\alpha, \beta)$ должна быть одинаковой для всех значений β и температуры.

Опыт показывает, что интерполяция $S(\alpha, \beta)$ по температуре ненадежна. Рекомендуется рассчитывать сечения только при заданной температуре. Данные для других температур следует получать через интерполяцию сечений.

REFERENCES

1. Y.D. Naliboff and J.V. Koppel, *HEXSCAT: Coherent Scattering of Neutrons by Hexagonal Lattices*, General Atomic report GA-6026 (1964).

8. ФАЙЛ 8. ДАННЫЕ О РАДИОАКТИВНОМ РАСПАДЕ И ВЫХОДАХ ПРОДУКТОВ ДЕЛЕНИЯ

В этом файле содержится информация, относящаяся к распаду продуктов реакции (любого номера МТ). Кроме того, включены данные о выходах продуктов деления для делящихся материалов (см. Параграф 8.2) и данные о спонтанном, радиоактивном распаде (МТ=457) ядра-мишени (см. Параграф 8.3). Информацию о возбуждении изомерных состояний в различных реакциях можно найти в файлах 9 и 10. Так как результатом реакции может быть не один нестабильный продукт, в файл следует вводить данные для наиболее важного нестабильного продукта.

8.1. ОБРАЗОВАНИЕ РАДИОАКТИВНЫХ НУКЛИДОВ (МТ=453)¹

Для любого изотопа могут быть заданы секции, определяющие характеристики радиоактивных продуктов, образующихся в нейтронных реакциях.

Информация задается для любого МТ определением конечных продуктов данной реакции, идентифицируемых идентификатором ZAP (ZA для продукта) и тем, как они распадаются. Секция содержит минимальную информацию о цепочке распадов, следующей за нейтронной реакцией. Может описываться более чем одно изомерное состояние, как ядра-мишени, так и радиоактивного ядра-продукта.

Определим следующие величины:

ZA	идентификатор исходного нуклида ($ZA=1000Z+A$);
ZAP	идентификатор нуклида, получаемого в реакции ($ZAP=1000Z+A$);
MATP	номер материала для продукта реакции (ZAP);
NS	полное число состояний (LFS) радиоактивного продукта реакции, для которых определяются характеристики распада;
LMF	номер файла, в котором можно найти множественность или сечение для данного МТ;
LIS	номер состояния (включая основное и все уровни) мишени (ZA);
LISO	номер изомерного состояния мишени;
LFS	номер уровня (включая основной и все уровни) состояния ядра-продукта ZAP, полученного в нейтронной реакции (задается в порядке возрастания);
ELFS	энергии возбуждения состояния ядра-продукта ZAP (в эВ выше основного состояния);
NO	указатель того, где находится информация о важном радиоактивном продукте реакции; NO =0, полная цепочка распадов описывается под номером МТ. NO =1, цепочка распадов задается в МТ=457.
ND	количество ветвей распада ядра-продукта ZAP;
HL	период полураспада нуклида ZAP в секундах;

¹ В первой версии библиотеки РОСФОНД файлы MF=8 с секциями МТ=453 отсутствуют.

ZAN Z и массовое число следующего нуклида, получаемого в результате распада;

BR коэффициент ветвления, т.е. вероятность распада по ветви, ведущей к получению нуклида при распаде с определенного уровня;

END максимальное значение энергии частиц или испускаемого кванта (сюда не входит энергия гамма лучей, испускаемых вслед за бета распадом);

CT Детерминатор цепочки, который дает минимальную информацию об образовании и распаде продукта ZAN. Сотые доли CT определяют возбужденный уровень, в котором образуется продукт ZAN.

Если $1.0 \leq CT < 2.0$, значит продукт ZAN образуется в цепочке, возможно, после одного или нескольких гамма распадов.

Если $CT \geq 2.0$, значит ZAN нестабилен и распадается на другие нуклиды. Например, рассмотрим нуклид (ZAP) получаемый, вследствие нейтронной реакции (номер MT), в некотором состоянии (номер LFS), которое затем распадается на некоторый уровень ядра ZAN; номер уровня – это дробная часть детерминатора CT, значение которой учитывает и все неизомерные состояния. Следующие примеры помогут понять использование CT:

CT=1.00 – продукт ZAN образуется в основном состоянии, которое стабильно;

CT=1.06 – продукт ZAN образуется в шестом возбужденном состоянии; это состояние распадается в основное – стабильное – состояние.

CT=2.00 – продукт ZAN образовался в основном состоянии, которое нестабильно. Никакие гамма-кванты, связанные с образованием или распадом этого состояния, не определяются. Следующий распад в цепочке определяется RTYP.

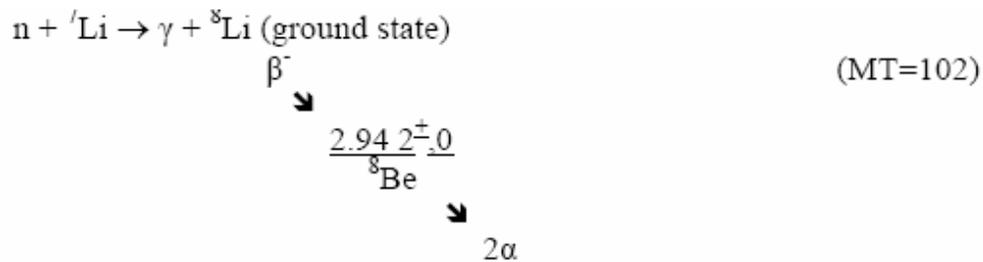
CT=2.11 – продукт ZAN образовался в 11-м возбужденном состоянии, но цепочка не обрывается переходом в основное состояние. Следующее звено в цепочке распада определяется RTYP.

Из выше изложенного становится очевидным, что CT="1" указывает на завершение цепочки на определенном продукте ZAN, а CT= "2" означает, что стабильному состоянию предшествует более чем один распад. Заметим, что стабильное состояние может быть достигнуто одновременно с испусканием одной или нескольких легких частиц.

RTYP вид распада, использующий те же определения, что и в MT=457 (см. Параграф 8.3 этой главы). Например, рассмотрим MT=102. Тогда RTYPE=1.44 расшифровывается так:

первые два знака RTYPE (1.) указывают на β^- -распад ZAP; третья и четвертая цифры (44) говорят о том, что ядро ZAN (образовавшееся при β^- -распаде) затем немедленно испускает две α частицы.

Этот пример представляется следующей реакцией:



Для этого примера:

$$\begin{array}{lll}
 \text{ZA}({}^7\text{Li}) = 3.007+03 & \text{LIS}({}^7\text{Li}) = 0 & \text{LIS}({}^7\text{Li}) = 0 \\
 \text{ZAP}({}^8\text{Li}) = 3.008+03 & \text{LFS}({}^8\text{Li}) = 0 & \\
 \text{ZAN}({}^8\text{Be}) = 4.008+03 & \text{CT}({}^8\text{Be}) = 2.01 &
 \end{array}$$

Так как Be имеет период полураспада порядка времени жизни составного ядра, то задавать распадные данные в MT=457 не требуется, и полная цепь может быть представлена и прочитана просто по информации, изложенной здесь.

8.1.1. ФОРМАТЫ

Структуры каждой секции всегда начинается с записи HEAD и кончается записью SEND. Подсекции содержат данные для определенного конечного состояния продукта реакции (LFS). Число подсекций NS задается в записи HEAD для секции. Подсекции упорядочены по возрастанию величины LFS.

Структура подсекции:

```

[МАТ, 8, МТ/  ЗА,  АWR,  LIS, LISO,  NS,  NO] HEAD

<подсекция для LFS1>
<подсекция для LFS2>
.
.
.
<подсекция для LFSNS>
[МАТ, 8,  0/ 0.0,  0.0,  0,  0,  0,  0] SEND
  
```

Структура подсекции для NO=0:

```

[МАТ, 8, МТ/  ZAP, ELFS,  LMF, LFS,  6*ND, MATP/
  HL1, RTYP1, ZAN1, BR1,  END1, CT1,
  HL2, RTYP2, ZAN2, BR2,  END2, CT2,
  -----
  HLND, RTYPND, ZANND, BRND,  ENDND, CTND] LIST
  
```

Если $NO=1$, то реакция приводит к образованию единственного продукта, радиоактивного в основном состоянии и оценщику достаточно лишь идентифицировать этот продукт. Для описания распада этого продукта оценщик должен ввести данные в секцию $MT=457$ файла $MF=8$. Очевидно, что сечение образования радиоактивного продукта можно найти в файле 3, 6, 9 или 10 в зависимости от значения LMF .

Для случая $NO=1$ структура секции следующая:

```
[MAT, 8, MT/ ZAP, ELFS, LMF, LFS, 0, MATP] CONT
```

8.1.2. ПРАВИЛА

1. Следует задавать данные для всех тех нестабильных состояний ядра-продукта, для которых в файле 3 или 10 определены сечения, либо в файле 6 или 9 – множественности. Для смесей элементов, для молекул, для элементов, состоящих более чем из одного изотопа, информация такого типа приводиться не должна.

2. Для большей общности рекомендуется формировать файл 6 (выходы продуктов) и файл 9 (множественности) или файл 10 (сечения) для каждой реакции (MT).

3. Если файл ENDF/B содержит полную оценку нейтронных сечений также и для образующегося в реакции ядра-продукта (ZAP,LIS), то данные радиоактивного распада для продукта (ZAP,LIS), помещенные в $MF=8$, $MT=457$, должны быть согласованы с данными, приведенными в файле 8 для ядра-мишени.

4. Метод расчета сечения образования нуклида определяется параметром LMF :

$LMF=3$ указывает, что сечение задано непосредственно в соответствующей секции Файла 3.

$LMF=6$ указывает, что сечение образования есть сечение продукта в Файле 3 с выходами в Файле 6.

$LMF=9$ указывает, что сечение образования есть сечение продукта в Файле 3 с множественностями в Файле 9.

$LMF=10$ указывает, что сечение образования находится непосредственно в файле 10 (в барнах).

8.2. ДАННЫЕ О ВЫХОДАХ ПРОДУКТОВ ДЕЛЕНИЯ ($MT=454$ и $MT=459$)

Номера $MT=454$ и 459 выделены для задания энергозависимых данных о выходах продуктов реакции деления, а также спонтанного деления. Полный набор данных о выходах продуктов деления задается для определенного значения энергии падающего нейтрона. Наборы данных должны определяться при достаточном количестве значений энергий нейтрона для того, чтобы полностью охарактеризовать данные о выходах во всей области энергий, в которой определено сечение деления (в файле 2 и 3). Эти данные задаются путем спецификации идентификатора продукта деления и соответствующего выхода.

MT=454 используется для задания независимых выходов (YI), а MT=459 – для кумулятивных выходов (YC). Форматы для MT=459 и MT=454 одинаковы. Независимые выходы (YI) представляют собой непосредственные выходы при делении до испускания запаздывающих нейтронов, бета- и других распадов. Сумма всех независимых выходов должна быть равна приблизительно 2.0 для любого значения энергии падающего нейтрона. Кумулятивные выходы (YC) определяются для того же набора продуктов деления. В них учитываются все цепочки образования каждого данного нуклида, включая испускание запаздывающих нейтронов.

Продукты деления определяются заданием состояния возбуждения (FPS) и идентификатором заряд-масса (ZAFP). Т.о. задаются нуклиды, а не массовые цепочки. Выход той или иной массовой цепочки может определяться более чем одним (Z,A).

Определим следующие величины:

NFP число продуктов деления, образуемых при делении нуклида, для которых при каждом значении энергии задаются выходы (это фактически число троек «идентификатор продукта деления – его выход – погрешность выхода») ($NFP \leq 1250$).

ZAFP идентификатор продукта деления (Z,A), ($ZAFP = (1000.0 * Z + A)$).

FPS идентификатор состояния продукта деления (число с плавающей запятой), FPS=0.0 означает основное состояние, FPS=1.0 – первое возбужденное состояние и т.д.

YI (MT=454) независимый выход определенного продукта деления до распадов.

DYI (MT=454) стандартное отклонение в 1σ .

YC (MT=459) кумулятивный выход.

DYC (MT=459) погрешность, определенная как стандартное отклонение (1σ).

Cn(Ei) массив данных о выходах в i-ой энергетической точке. Этот массив содержит NFP наборов из 4-х параметров, задаваемых в следующем порядке ZAFP, FPS, YI и DYI в MT=454 и ZAFP, FPS, YC и DYC в MT=459.

NN число членов в массиве Cn(Ei), равно $4 * NFP$.

Ei значение энергии нейтрона в i-ой точке (эВ).

LE флаг для определения того, заданы ли энергезависимые выходы продуктов деления.

LE=0 - нет зависимости (задан только один набор данных о выходах продуктов деления);

LE >0 означает, что определяется (LE+1) набор данных о выходах продуктов деления для (LE+1) значений энергии нейтрона.

Ii схема интерполяции (см. Приложение E) выходов по энергии между точками E_{i-1} и E_i .

8.2.1. Форматы

Структура секции всегда начинается с записи HEAD и кончается записью SEND. Наборы данных о выходах продуктов деления определяются в одной или нескольких энергетических точках. Эти наборы упорядочены по увеличению энергии нейтрона. Для определенного значения энергии нейтрона данные представляются параметрами (ZAFP, FPS, YI и DYI в MT=454 и ZAFP, FPS, YC и DYC в MT=459) для всех состояний всех продуктов деления. Данные располагаются сначала по возрастанию значений ZAFP. Если для того же (Z, A) определено более одного выхода, то данные упорядочены по возрастанию индикатора состояний (FPS). Структура секции:

```
[MAT, 8, MT/ ZA, AWR, LE+1, 0, 0, 0] HEAD
[MAT, 8, MT/ E1, 0.0, LE, 0, NN, NFP/ Cn(E1) ] LIST
[MAT, 8, MT/ E2, 0.0, I, 0, NN, NFP/ Cn(E2) ] LIST
[MAT, 8, MT/ E3, 0.0, I, 0, NN, NFP/ Cn(E3) ] LIST
-----
[MAT, 8, 0 / 0.0, 0.0, 0, 0, 0, 0] SEND
```

где MT=454 – для данных о независимых выходах, а MT=459 – для данных о кумулятивных выходах. Всего должно быть (LE+1) записей LIST.

8.2.2. Правила

Наборы данных для выходов продуктов деления следует задавать в том же энергетическом интервале, что и сечения деления в файлах 2 и/или 3. Выходы определяются как относительные величины в каждой энергетической точке, и обычно сложение непосредственных выходов дает 2.0.

Формат предусматривает задание выходов (YI или YC) для каждого возбужденного состояния нуклида ZAFP и, следовательно, предполагает включение данных для многих метастабильных продуктов деления (для которых имеются данные о независимых выходах). Данные о независимых выходах нуклидов массовой цепочки могут задаваться для одного или для нескольких нуклидов. Если данные о независимых выходах задаются более чем для одного нуклида цепочки, то выход для нуклида с наименьшим Z (зарядом) должен совпадать с кумулятивным выходом, заданным в MT=459, а все остальные независимые выходы для этой же цепочки должны быть просто прямыми выходами.

Под прямыми выходами продуктов деления понимаются те, что соответствуют моменту, предшествующему испусканию запаздывающих нейтронов; по этой причине суммирование независимых выходов нуклидов каждой массовой цепочки не обязательно равняется выходу всей изобарной цепочки. Кумулятивный выход для каждого нуклида (ZAFP, FPS) можно определить по данным о коэффициентах ветвления, заданных в MT=457, или непосредственно из MT=459.

Выходы для одних и тех же нуклидов должны рассматриваться при каждом значении энергии. Это облегчит интерполяцию данных о выходах между

энергетическими точками. Рекомендуется использовать дважды линейную схему интерполяции выходов по энергии.

8.3. Данные о радиоактивном распаде(MT=457)²

Секция 457 содержит данные о спонтанном радиоактивном распаде. Эта секция определяется для материалов, представляющих отдельный изотоп в основном или изомерном состоянии. (Изомерное состояние – «долгоживущее» возбужденное состояние ядра). Основная цель MT=457 состоит в том, чтобы описать энергетические спектры продуктов радиоактивного распада, и определить средние параметры для таких приложений, как оценка энерговыделения при распаде, проблема захоронения отходов, расчеты выгорания и накопления радионуклидов, проблемы радиационной защиты и целостности топлива. Вся информация этой секции может быть распределена на три части:

а. Общая информация о материале

- ZA** идентификатор первоначального (радиоактивного) нуклида ($=1000*Z+A$).
- AWR** отношение массы нуклида в состоянии LIS к массе нейтрона.
- LIS** состояние исходного нуклида (LIS=0 – основное состояние, LIS=1 – первое возбужденное состояние и т.д.).
- LISO** изомерные состояния исходного нуклида (LISO=0 – основное состояние; LISO=1 – первое изомерное состояние и т.д.).
- T_{1/2}** период полураспада исходного нуклида (в секундах).
- NC** полное число энергий распада (эВ) (NC=3 или 17).
- E_{„x”}** средняя энергия распада (эВ) с излучением частицы «x», например в приложениях по энерговыделению при распаде. Средние энергии должны задаваться в порядке, указанном в Разделе 8.3.2. Неизвестные средние значения обозначаются -1.0
- SPI** спин нуклида в состоянии LIS.
(SPI = -77.777 – спин неизвестен).
- PAR** четность нуклида в состоянии LIS (± 1.0).

б. Информация о типе распада для каждого типа распада

NDK общее число типов распада (не может быть нулевым).

RTYP тип распада нуклида в состоянии LIS.

Определены следующие типы распадов:

	RTYPE	Тип распада
0.	γ	гамма - излучение (не используется в MT=457)
1.	β^-	бета-распад
2.	e.c.,(β^+)	захват электрона и/или излучение позитрона
3.	IT	изомерный переход (возможен, если

² В первой версии библиотеки РОСФОНД файлы MF=8 с секциями MT=453 отсутствуют.

4.	α	рассматриваемое состояние изомерное). альфа-распад
5.	n	излучение нейтрона (но не распад с испусканием запаздывающего нейтрона)
6.	SF	спонтанное деление
7.	p	излучение протона
10.	-	тип распада неизвестен

Предусмотрено также описание распада на несколько частиц со следующими значениями RTYPE.

	RTYPE	Тип распада
1.5	β^- , n	за бета распадом следует испускание нейтрона (распад с испусканием запаздывающего нейтрона).
1.4	β^- , α	за бета распадом следует испускание альфа-частицы (например, распад ^{16}N).
2.4	β^+ , α	за позитронным распадом следует испускание альфа-частицы

RFS признак изомерного состояния дочернего нуклида.

RFS=0.0 – основное состояние,

RFS=1.0 – первое изомерное состояние и т.д.

Q полная энергия (эВ) рассматриваемого процесса распада. Эта энергия не обязательно есть максимальная энергия излучения. В случае изомерного перехода определяется как энергия изомерного состояния. Для β^+ и β^- распадов Q равняется энергии, соответствующей массовой разности между начальными и конечными атомами).

BR вероятность распада нуклида в состояние LIS, при соответствующем типе распада. Например, если имеет место только β^- распад и в дочернем ядре не возбуждаются изомерные состояния, то для этого β^- -распада BR=1.0

с. Спектры излучения.

NSP общее число типов излучения (STYPE), для которых задается спектральная информация (NSP может равняться нулю).

STYP тип излучения.

Определены следующие излучения распада:

STYPE	Тип распада
0.	γ гамма - излучение
1.	β^- Бета - излучение
2.	e.c.,(β^+) захват электрона и/или излучение позитрона
4.	α альфа-частицы
5.	n нейтроны
6.	SF осколки спонтанное деление
7.	p протоны
8.	e^- дискретные электроны
9.	x x лучи и аннигиляционное излучение (фотоны, испускаемые не при переходах между состоянием ядра).

ER энергия (эВ) излучения (E_γ , E_β , $E_{e.c.}$ и т.д.)
RI интенсивность излучения (относительные единицы).
RP спектр непрерывной компоненты излучения в единицах «вероятность/эВ» (так что $\int RP(E)dE = 1$).
TYPE тип перехода при бета-распаде и захвате орбитального электрона.

Определены следующие типы переходов:

TYPE	Тип спектра
0.0	для данного значения STYP не требуется
1.0	разрешенный, не единственный
2.0	запрещенный, единственный
3.0	дважды запрещенный, единственный

- RICC** полный коэффициент внутренней конверсии (только при STYP = 0.0).
RICK коэффициент внутренней конверсии на K-оболочке (только при STYP =0.0).
RICL коэффициент внутренней конверсии на L-оболочке (STYP=0.0).
RIS коэффициент внутреннего образования пар (STYP=0.0),
 STYP=2.0 позитронная интенсивность,
 STYP=0.0 в иных случаях.
LCON признак непрерывного спектра³.
 LCON = 0 непрерывный спектр не дан.
 LCON = 1 определен только непрерывный спектр.
 LCON = 2 даны и дискретные и непрерывные спектры.
NT количество записей для каждого дискретного значения энергии (ER).
FC нормировочный множитель для непрерывного спектра
 (абсолютная интенсивность/относительная интенсивность).

³ Для спонтанного деления $_{\nu}$ при RTYP=6. и STYP=5., LCON=1 и FC= $_{\nu p}$ и FD= $_{\nu d}$

- FD** нормировочный множитель, фактор нормализации для дискретного спектра (абсолютная интенсивность/относительная интенсивность)¹.
- NER** общее число дискретных значений энергий, заданных для определенного типа спектра (STYP).
- ER_{AV}** средняя энергия испускаемого при распаде излучения⁴.
- NR** число интервалов интерполяции для непрерывного спектра.
- NP** число точек, в которых задается спектральное распределение.
- Eint** схема интерполяции для непрерывного спектра.
- NK** число парциальных энергетических распределений энергии при LCON=5.
- Δ** погрешность той или иной величины.
- LB** Признак, указывающий на смысл чисел в массиве {E_k,F_k}. В настоящее время разрешено только значение LB=2 (см. главу 33).
- NPP** число пар чисел в массиве {E_k,F_k}.

Массив {E_k,F_k} - это пары чисел в E_k-таблице. В каждой E_k-таблице первый член пары – это энергия E_k, второй - это номер F_k, связанный с энергетическим интервалом между двумя энергиями E_k и E_{k+1}.

E_k -таблица должна охватывать полный интервал энергий вторичных частиц. Некоторые значения F_k могут равняться 0, как это должно быть для пороговых реакций ниже порога, а последнее значение F в E-таблице также равняется 0 или пробелу, так как интервал не определяется.

При LB=2 смысл величин F_k в E_k-таблице следующий:

LB=2 – парциальные компоненты спектра, полностью коррелируют во всех интервалах E_k

$$\text{COV}(X_i, X_j) = \sum_{kk'} S_i^k S_j^{k'} F_k F_{k'} X_i X_j$$

где $S_i^k = 1$, когда энергия E_i находится в интервале E_k- E_{k+1},
0, в иных случаях.

Здесь X_i нормированная спектральная плотность частиц, испускаемых с кинетической энергией E_i, взятая из{E,RP}-записи TAB.

8.3.1. Форматы

Структура этой секции всегда начинается с записи HEAD и заканчивается записью SEND. Секция делится на подсекции следующим образом:

⁴ При STYP=2 это средняя энергии позитронов, при STYP=4 – эта энергия включает энергию ядра-отдачи.

```
[MAT, 8, 457/   ZA,   AWR, LIS, LISO,   NST, NSP] HEAD   (NST=0)
[MAT, 8, 457/   T1/2, ΔT1/2, 0,   0, 2*NC,   0/ (Ex", ΔEx")2 / LIST
[MAT, 8, 457/   SPI,   PAR, 0,   0, 6*NDK,   NDK/
RTYP1, RFS1, Q1, ΔQ1, BR1, ΔBR1,
-----
RTYPNDK, RFSNDK, QNDK, ΔQNDK, BRNDK, ΔBRNDK] LIST
```

<Подсекция для спектра 1>

<Подсекция для спектра 2>

<Подсекция для спектра NSP>

```
[MAT, 8, 0/ 0.0, 0.0, 0, 0, 0, 0] SEND
```

Структура подсекции:

```
[MAT, 8, 457/ 0.0, STYP, LCON, 0, 6, NER/
FD, ΔFD, ERAV, ΔERAV, FC, ΔFC] LIST
[MAT, 8, 457/ ER1, ΔER1, 0, 0, NT, 0/
RTYP1, TYPE1, RI1, ΔRI1, RIS1, ΔRIS1,
RICC1, ΔRICC1, RICK1, ΔRICK1, RICL1, ΔRICL1] LIST
-----
ERNER, ΔERNER, 0, 0, NT, 0/
RTYPNER, TYPENER, RINER, RINER, -----] LIST
```

(если LCON=1, эти записи LIST пропускаются)

```
[MAT, 8, 457/ RTYP, 0.0, 0, LCOV, NR, NP/ Eint / RP(E) ] TAB1
```

(если LCON=0)

```
[MAT, 8, 457/ 0.0, 0.0, 0, LB, 2*NPP, NPP/ (Ek, Fk) ] LIST
```

(запись пропускается если LCOV=0 или LCON=0).

8.3.1. Правила

1. Начальное состояние исходного ядра обозначается идентификатором LISO, который равняется 0 для основного состояния и n для n-ого изомерного состояния. В файле 8 при подсчете LISO учитываются только изомерные состояния (в других файлах рассматриваются как изомерные, так и не изомерные состояния).

2. Для расчетов тепловыделения при распаде определяется средняя энергия распада \bar{E}_x , для трех основных типов излучения E_{LP} (для легких частиц), E_{EM} (для электромагнитных излучений) и E_{HP} (для тяжелых частиц). Сумма этих трех величин дает суммарную (кроме энергии нейтрино) среднюю энергию, выделяемую при распаде.

Эти три величины более точно определяются следующим образом:

$$\begin{aligned}\bar{E}_{LP} &= \bar{E}_{\beta^-} + \bar{E}_{\beta^+} + \bar{E}_{e^-} + \dots \\ \bar{E}_{EM} &= \bar{E}_{\gamma} + \bar{E}_{x\text{-ray}} + \bar{E}_{ann.rad.} + \dots \\ \bar{E}_{HP} &= \bar{E}_{\alpha} + \bar{E}_{SF} + \bar{E}_p + \bar{E}_n + \dots\end{aligned}$$

Здесь E_{LP} означает среднюю энергию всех электронных излучений β^- , β^+ и конверсионные электроны, оже-электрон и т.д. Величина \bar{E}_{EM} характеризует среднюю энергию всех электромагнитных излучений: гамма лучи, х-лучи, аннигиляционное излучение. Величина \bar{E}_{HP} - это средняя энергия всех тяжелых заряженных частиц и нейтронов; включает также и энергию ядра-отдачи. Отдельно энергию альфа частицы можно получить с помощью коэффициента $M_R/(M_R + M_{\alpha})$, где M_R и M_{α} – массы остаточного ядра и альфа-частицы, соответственно.

Средняя энергия распада должна приводиться в следующем порядке:

\bar{E}_{LP} - средняя энергия всех легких ядер.

\bar{E}_{EM} - средняя энергия электромагнитного излучения.

\bar{E}_{HP} - средняя энергия всех тяжелых частиц.

\bar{E}_{β^-} - средняя энергия β^- .

\bar{E}_{β^+} - средняя энергия β^+ .

\bar{E}_{Ae^-} - средняя энергия оже-электрона.

\bar{E}_{ce^-} - средняя энергия конверсионных электронов.

\bar{E}_{γ} - средняя гамма энергия.

$\bar{E}_{x\text{-ray}}$ - средняя энергия х-лучей.

\bar{E}_{mB} - средняя энергия тормозного излучения.

$\bar{E}_{ann.rad.}$ - средняя энергия аннигиляционного излучения.

\bar{E}_{α} - средняя α энергия.

\bar{E}_{recoil} - средняя энергия отдачи.

\bar{E}_{SF} - средняя энергия спонтанного деления.

\bar{E}_n - средняя энергия мгновенных и запаздывающих нейтронов.

\bar{E}_p - средняя энергия протонов.

\bar{E}_ν - средняя энергия нейтрино или антинейтрино.

3. Символ RTYP указывает вид распада, как первичного акта. Ядро, претерпевшее бета-распад в возбужденное состояние дочернего ядра с последующим гамма излучением, испытывает в принятой терминологии бета-распад. В секции MT=457 значение RTYP=0.0 употребляться не может (хотя это значение и указано в 8.1).

Изомерное состояние дочернего нуклида, получающегося при распаде родительского нуклида, обозначается идентификатором RFS, согласно правилам, принятым для LISO. Q представляет собой полную энергию процесса распада и

находится как энергетическая разность начального и конечного состояний (которые могут быть изомерными). Коэффициент ветвления BR для каждого вида распада определяется как определенная часть и поэтому сумма этих величин по всем видам распада должна равняться единице.

Описание излучения нескольких частиц также предусмотрено форматом – путем использования комбинации переменных RTYP. Такая ситуация может встречаться при эмиссии частиц из высоко возбужденного состояния родительского ядра, период полураспада которого столь мал, что выделять этот этап распада нет смысла. Это избавляет пользователей и обрабатывающие программы от непереносимого анализа данных о спектрах для определения типа распада и промежуточных состояний. Величина RTYP для описания множественного испускания частиц должна формироваться в порядке испускания этих частиц. (Например, RTYP=1.5 обозначает распад, сопровождаемый излучением нейтронов).

4. Для каждой спектральной линии или непрерывного спектра должен быть определен источник излучения. Источник излучения – это величина с плавающей запятой, соответствующая определению RTYP. Если же источник излучения не известен, то полагают равным RTYP=10.

5. Энергетические спектры, если они известны, должны быть заданы и идентифицированы значением STYP. Для гамма-спектров используется STYP= 0.0. Должны быть также заданы относительные интенсивности и их погрешности. Абсолютная нормировка осуществляется путем умножения на FC и FD. Если задан только дискретный спектр, FD должно равняться единице. Интенсивность излучения должна быть суммой вкладов от всех типов распада, приводящих к испусканию излучения типа STYP и имеющих энергию $E_{\gamma} \pm \Delta E_{\gamma}$.

а. Если для данного перехода не могут быть рассчитаны ни интенсивности испускания электронов внутренней конверсии (x-электроны), ни β^{-} -электронов, ни образования пар, то для гамма-излучения (STYP=0.0) никакой дополнительной информации задавать не требуется. В этом случае задается NT=6.

Объем дополнительной информации зависит от детальности данных предназначенных для включения в STYP=8. или 9. и от числа типов распада. (Эта детальность отражается также и в задании погрешностей в STYP=8, или 9).

Если задается только полное излучение конверсионных электронов, то необходимо определить значения RICC и Δ RICC, а NT при этом принять равным 8. Если же определяются отдельные вклады от K, L и M оболочек, то должны быть заданы конверсионные коэффициенты K и L оболочек и NT должно быть положено 12. В редких случаях (например, при распаде ${}^{16}_7N$), когда включается информация о внутреннем образовании пар, наряду с полным коэффициентом внутренней конверсии должен быть задан коэффициент внутреннего образования пар: RIS и Δ RIS

б. При описании захвата орбитального электрона (STYP=2.), то при условии, что $E_{e.c.} \leq 1.022$ МэВ, величина RIS полагается равной нулю. Если излучение

позитронов энергетически возможно, то обязательно должны быть заданы RIS и Δ RIS (как $I_{\beta+}$ и $\Delta I_{\beta+}$).

с. Спектры упорядочиваются по увеличению значений величины STYP, при этом сначала идут данные о дискретных спектрах, а затем – о непрерывных.

d. Для случая STYP=5 (испускание нейтронов спонтанного деления) полагается LCON=0, NER= 0, а EAV и Δ EAV должны быть заданы обязательно.

e. Для случая STYP=6 (испускание осколков спонтанного деления) LCON=0, NER= 0, а обязательно должны быть заданы \bar{E}_{SF} и $\Delta \bar{E}_{SF}$.

6. Определение погрешностей есть весьма важная процедура, которую нелегко осуществить. Хотя и предполагается, что погрешности определяются величиной стандартного отклонения, 1σ , приводимые данные должны хотя бы качественно отражать то, как точно известна та или иная величина.

Для STYP=8. и 9. ΔE должна отражать детальность, с которой эти величины были получены. Например, если рассчитывается только полное конверсионное излучение, то ΔE - это различие в энергиях К и М -конверсионных электронов. Если же приводимые данные более детальны, то ΔE будет отражать неточности в энергии связи электронов и в энергии переходов.

7. Спектр нейтронов спонтанного деления определяется в файле MF=5 в подбиблиотеке 4 (деление без воздействия частиц).

8. Спин и четность первоначального ядра должны быть определены либо экспериментально, либо исходя из строгих теоретических соображений. Если же спин определить нельзя, то он приравнивается к -777.77 ; а неопределенная четность задается равной нулю.

9. Поскольку непрерывные спектры нормированы, абсолютная ковариационная матрица многокомпонентного нормированного спектра, полученная из этого файла, должна в сумме равняться 0 в каждом столбце и строке. (Обрабатывающие программы должны проверять это). Поскольку ковариации погрешностей спектра продукта радиоактивного распада описываются при LB=2, то сформулированное выше требование сводится к следующему условию для F_k и E_k :

$$\sum_k F_k y_k = 0,$$

где

$$y_k = \int_{E_k}^{E_{k+1}} RP(E) dE$$

т.е. y_k энергетический спектр в тех интервалах, для которых оценены погрешности. Ясно, что

$$\sum y_k = 1.$$

Если заданные значения F_k не соответствует этому условию, то они заменяются откорректированными, определенными как

$$F'_k = F_k - \sum_k F_k y_k$$

Заметим, что в отличии от файла 33, некоторые значения F'_k будут отрицательными. Кроме того вычисленная из приводимых данных мультигрупповая корреляционная матрица корреляции будет обладать некоторыми недиагональными членами, равными +1 или -1.

Если обрабатывающая программа вычисляет абсолютную ковариацию V_{mn} на сетке пользователя E_m , то используется простейшее соотношение

$$V_{mn} = \sigma_m \sigma_n,$$

$$\text{где } \sigma_n = \int_{E_n}^{E_{n+1}} F(E) RP(E) dE$$

Вычисление интеграла несложно, поскольку $F(E)$ – кусочно-непрерывна на сетке E_k . При этой процедуре Мы полагаем, что при этой процедуре условие нулевой суммы для ковариационной матрицы полученного мультигруппового спектра будет обеспечено.

9. ФАЙЛ 9. МНОЖЕСТВЕННОСТИ ОБРАЗОВАНИЯ РАДИОНУКЛИДОВ

9.1. ОБЩЕЕ ОПИСАНИЕ

Нейтронные сечения образования радионуклидов можно получить, используя множественности, заданные в файле 9. Множественность представляет собой часть сечения, ведущую к образованию дочернего ядра в состоянии LFS.

Множественности представляют собой функции энергии E , где E - это энергия падающего нейтрона (в эВ) в лабораторной системе. Они задаются парами: энергия – множественность. Между заданной энергетической точкой и следующей более высокой точкой необходимо определить схему интерполяции.

Файл 9 разделяется на секции, каждая из которых содержит данные для определенного типа реакции (номера MT). Секции упорядочены по возрастанию значений номеров MT. Для данного номера MT внутри секции определяются подсекции для различных конечных состояний дочернего ядра (LFS). Файл 9 используется только для материалов, представляющих собой отдельные изотопы.

9.2. ФОРМАТ

Файл 9 составлен из секций, каждая из которых описывает множественность реакции определенного типа (номера MT). Каждая секция всегда начинается с записи HEAD и заканчивается записью SEND. Для файла 9 вводятся следующие величины:

LIS идентификатор, определяющий номер уровня ядра-мишени.

LFS идентификатор, определяющий номер уровня нуклида (ZAP) (описанного в MF=8), полученного в результате нейтронной реакции (определенной номером MT):

LFS= 0 – конечное состояние является основным.

LFS= 1 – конечное состояние – первое возбужденное состояние

LFS= 2 – конечное состояние – второе возбужденное состояние

.....

LFS= 98 – неопределенное множество конечных состояний.

QM величина разницы масс Q (эВ): определяется, как разница суммы масс ядра и налетающей частицы и суммы масс остаточного ядра в основном состоянии и всех остальных продуктов реакции. То есть для реакции $a+A \rightarrow b+c+\dots+B$

величина Q определяется, как

$$QM = [(m_a + m_A) - (m_b + m_c + \dots + m_B)](amu / eV)^1.$$

QI Значение Q (эВ) для состояния, описанного в подсекции. Для изомерного состояния оно передается разностью QM и энергией возбуждения остаточного ядра изомера. Для основного состояния $QI=QM$.

¹ Коэффициент перевода смотри в Приложении Н.

- ZAP** $1000 \cdot Z + A$ для ядра-продукта
- NS** количество конечных состояний для данного номера реакции MT, для которых задаются множественности
- NR** количество энергетических интервалов. Для каждого интервала может определяться своя схема интерполяции ($NR \leq 20$)
- NP** общее число энергетических точек, используемых для определения данных ($NP \leq 5000$)²
- Eint** схема интерполяции для каждого энергетического интервала (более детально смотри параграф 0.6.2.)
- Y(E)** множественность для определенного типа реакции при значении энергии E (эВ). Данные задаются парами энергия - множественность.

Структура секции следующая:

```
[MAT, 9, MT/ ZA, AWR, LIS, 0, NS, 0] HEAD
<NS подсекций, по одной подсекции для каждого значения LFS>
[MAT, 9, 0/ 0.0, 0.0, 0, 0, 0, 0] SEND
```

Структура подсекции:

```
[MAT, 9, MT/ QM, QI, ZAP, LFS, NR, NP/ Eint / Y(E)] TAB1
```

9.2. ПРАВИЛА

Множественности в файле 9 определяются для тех реакций, которые в файле MF=8 описаны со значением LMF=9 в записи LIST (в подсекции с определенным номером MT и значением LFS)³. В файле 9 множественности описывают часть сечения, которое приводит дочернее ядро в состояние LFS. Для реакции, представляемой резонансными параметрами в файле 2, не может использоваться файл 10; могут быть заданы лишь множественности в файле 9.

Данные файла 9 должны охватывать весь энергетический интервал рассматриваемой в файле 3 реакции, начиная с порога и до 20 МэВ. Таким образом, нельзя в одном энергетическом интервале задавать сечения образования радионуклидов множественностями (файл 9), а на другом – сечениями (файл 10). Для реакции с отрицательными значениями Q первая энергетическая точка должна совпадать с пороговым значением из файла 3. Если QI для подсекции больше, чем в файле 3, то множественность следует приравнять нулю вплоть до энергетической точки, соответствующей пороговому значению для подсекции.

Набор точек или энергетическая сетка, используемая для полного сечения в файле 3, должна объединить все энергетические сетки файла 9 для каждого номера

² Такое же ограничение по количеству точек существует для полного сечения.

³ В библиотеке РОСФОНД файл MF=8 используется только для определения выходов продуктов деления. Сечение реакции, для которой в файле MF=9 приводятся множественности образования радионуклидов, обязательно задается в файле MF=3. По существу, приводимые в файле MF=9 “множественности” являются *вероятностями* образования изомерных состояний ядра-продукта реакции рассматриваемого типа MT.- прим. М.Николаева.

MT. Хотя для полного сечения разрешается 5000 энергетических точек, в файле 9 желательно использовать по возможности меньшее число точек⁴.

Множественности, заданные в файле 9, должны равняться или быть меньше единицы, т.к. сечение образования радионуклида не может превосходить сечения, заданного в файле 3 для рассматриваемого номера MT.

Суммируя сказанное, заметим, что не следует вводить данные в MF=8 для данного MT до тех пор, пока не будут введены множественности в файл 9 (или сечения – в файл 10). Таким образом, каждой секции с номером MT (кроме MT=454, 457 или 459) в файле MF=8, в которой индикатор LMF в записи LIST для подсекции с данным номером MT и данным значением LFS имеет значение LMF =9, должно соответствовать множественности в файле 9⁵.

⁴ В библиотеке РОСФОНД для многих материалов данные файлов MF=9, были получены алгоритмически из данных файлов MF=10. При этом главной целью было формирование соответствующих секций для файла MF=3 и включение их в этот файл. Число энергетических точек, в которых определялись вероятности образования изомеров определялось числом точек в сформированной секции полного сечения реакции. В большинстве случаев для задания вероятности это число являлось избыточным, однако алгоритм переработки не предусматривал оптимизацию сетки, на которой задавались вероятности образования изомеров, так что избыточность, как правило, сохранена.- Прим. М.Николаева

⁵ Отсюда следует, что включение файлов MF=8 в библиотеку РОСФОНД на более позднем этапе является процедурой, логически не противоречивой.- Прим. М.Николаева.

10. ФАЙЛ 10. СЕЧЕНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ РАДИОНУКЛИДОВ

10.1. ОБЩЕЕ ОПИСАНИЕ

В файле 10 задаются нейтронные сечения активации (сечения таких реакций как (n,p) и (n,2n)) и сечения для определенного состояния радиоактивных ядер мишени. Эти сечения определяются в функции энергии E, где E - это энергии падающего нейтрона (в эВ) в лабораторной системе. Они представляют собой пары: энергия – сечение. Между заданной энергетической точкой и следующей, более высокой по энергии, точкой задается схема интерполяции.

Файл 10 делится на секции, каждая из которых содержит данные для определенного типа реакции (номера MT). Секции упорядочены по возрастанию номеров MT. В каждой секции номера MT выделяются подсекции для различных конечных состояний (LFS) полученного дочернего ядра. Файл составляется только для материалов, представляющих собой отдельные изотопы.

10.2. ОБЩЕЕ ОПИСАНИЕ

Файл 10 составлен из секций, каждая из которых содержит нейтронное сечение для определенного типа реакции (номера MT). Каждая секция всегда начинается с записи HEAD и кончается записью LIST. Для файла 10 определяются следующие величины:

LIS идентификатор, определяющий номер уровня ядра-мишени.

LFS идентификатор, определяющий номер уровня нуклида (ZAP), полученного в результате нейтронной реакции номера MT.

LFS=0 конечное состояние соответствует основному состоянию.

LFS=1 конечное состояние – первое возбужденное состояние.

LFS=2 конечное состояние – второе возбужденное состояние.

LFS=98 непрерывный интервал конечных состояний.

QM величина разницы масс Q(эВ): определяется, как разница масс ядра и частицы и массы остаточного ядра в основном состоянии и всех остальных продуктов реакции. То есть для реакции $a+A \rightarrow b+c+\dots+B$ величина Q определяется, как $QM = [(m_a + m_A) - (m_b + m_c + \dots + m_B)](amu / eV)^1$.

QI Значение Q(эВ) для состояния, описанного в подсекции. Для изомерного состояния оно передается разностью QM и энергией возбуждения остаточного ядра изомера. Для основного состояния QI=QM.

NS количество конечных состояний для каждого номера MT, для которых задаются множественности

NR количество энергетических интервалов. Для каждого интервала может определяться своя схема интерполяции ($NR \leq 20$)

¹ Коэффициент перевода смотри в Приложении Н.

- NP** общее число энергетических точек, используемых для определения данных ($NP \leq 5000$)²
- Eint** схема интерполяции для каждого энергетического интервала (более детально смотри параграф 0.4.3.)
- $\sigma(E)$** сечение в барнах для определенного типа реакции при значении энергии E (эВ). Данные задаются парой: энергия – сечение.

Структура секции:

```
[MAT, 10, MT/ ZA, AWR, LIS, 0, NS, 0] HEAD
<NS подсекций, по одной подсекции на каждое значение>
[MAT, 10, 0/ 0.0, 0.0, 0, 0, 0, 0] SEND
```

Структура подсекции:

```
[MAT, 10, MT/ QM, QI, ZAP, LFS, NR, NP/ Eint /  $\sigma(E)$ ] TAB1
```

10.3. ПРАВИЛА

В файле 10 должны определяться сечения образования изомерных состояний для тех реакций, для которых в файле MF=8 в записи LIST для подсекции с теми же значениями MT и LFS задан LMF=10³. Приводимыми данными являются сечения образования дочернего нуклида в определенном конечном состоянии (LFS).⁴ Для реакций, описанных резонансными параметрами в файле 2, пользоваться файлом 10 нельзя; для этих реакций должны задаваться множественности в файле 9.

Данные файла 10 должны охватывать весь энергетический интервал для каждой реакции от порога, определенного в файле 10, и до 20 МэВ. Таким образом, нельзя на одном энергетическом интервале использовать сечения образования радионуклидов (файл 10), а на другом – множественности (файл 9).

Для реакций с отрицательным Q, первое энергетическое значение должно соответствовать порогу, определенному в файле 10, и сечение в этой точке задается равным нулю.

Набор точек или энергетическая сетка, используемая для задания полного сечения в файле 3, должна объединять все энергетические сетки, используемые в файле 10 для каждого номера MT. Хотя для полного сечения разрешается использовать 10000 энергетических точек, по возможности нужно минимизировать количество точек в файле 10.

Приведем пример сечения реакции $^{93}\text{Nb}(n,2n)^{92}\text{Nb}$. В файле 10 для MT=16 приводится только сечение образования изомера ^{92}Nb с периодом полураспада 10.

² Такое же ограничение по количеству точек существует для полного сечения.

³ В библиотеке РОСФОНД файл MF=8 используется только для определения выходов продуктов деления.

⁴ В библиотеке РОСФОНД файл MF=10 используется только для задания сечений образования изомерного состояния (или состояний) или, если рассматриваются данные для изомера, для задания сечения образования основного состояния. Таким образом, в РОСФОНДе файлы MF=10 всегда содержат только одну секцию MT=4. При этом наличие секции MT=4 в файле MF=3 не является обязательным. - прим. М.Николаева.

16 дня со значениями параметров LIS=0 и LFS=1. Сумму всех парциальных сечений реакции (n,2n) можно найти в файле 3 под номером MT=1 (заметим, что для расчета нейтронных полей только полное сечение реакции и необходимо). Следует отметить, однако, что оценщик в рассматриваемом случае может воспользоваться заданием энергозависимых множественностей в файле 9, а не сечений в файле 10.

Сечения, приводимые в файле 10, представляют собой избыточную информацию в том смысле, что они не включаются в проверочную сумму для полного сечения реакции⁵. Сечения файла 10 должны равняться или быть меньше, чем сечения с соответствующим номером MT в файле 3. Заметим, что не следует вводить данные в файл MF=8 для данного номера MT, пока файлы 10 (или 9) не будут заполнены оцененными данными о соответствующем сечении (или множественности). Таким образом, для каждой реакции MT (кроме MT=454, 457 или 459), для которой в записи LIST для подсекции с данными MT и LFS, приводится значение LMF=10, должна существовать соответствующая секция в файле 10.

⁵ Именно поэтому в РОСФОНДе не допускается задания сечений реакций только в файле MF=10, без приведения суммарного сечения в файле MF=3.

11. ФАЙЛ 11. ОБЩИЕ ЗАМЕЧАНИЯ О ДАННЫХ ОБ ОБРАЗОВАНИИ ФОТОНОВ

Данные об образовании фотонов, не представленные в Файле 6, размещаются в четырех отдельных файлах.

Файл	Содержание
12	Множественности образования фотонов и вероятности переходов.
13	Сечения образования фотонов.
14	Угловые распределения фотонов
15	Непрерывные энергетические спектры фотонов
16	Энерго - угловые распределения фотонов.

Кроме файла 12 все остальные файлы по структуре почти повторяют файлы нейтронных данных с соответствующими номерами (MF-10). Назначение файла 12 состоит в том, чтобы предоставить дополнительную возможность для описания энергетической зависимости сечений образования фотонов. Для обозначения типов реакций (номер МТ) используются те же номера, что и для нейтронных реакций в файлах 1-7. Однако, для реакций образования фотонов они могут нести и другие функции, и поэтому в некоторых случаях требуются дополнительные разъяснения.

1. МТ=3 может использоваться в файлах 12-15 для представления составных сечений, то есть сечений образования фотонов в результате суммы реакций различного типа.

2. Вводить для реакций образования фотонов суммарные сечения, как это имело место в файлах нейтронных реакций (например, МТ=3, 4 и т.д.) нет необходимости. O120

бъединение всех секций файлов 6,12, 13 должно соответствовать данным о полном образовании фотонов, т.е. каждая секция этих файлов должна быть независима от других.

3. Используя рисунок 11.1, рассмотрим, как можно представить данные об образовании γ -квантов при неупругом рассеянии. Дифференциальное сечение образования γ -квантов с энергией E_γ в результате возбуждения m_0^{th} -ого уровня ядра-продукта и последующего перехода с j -ого уровня на i -й (с учетом того, что каскады, ведущие к j -ому уровню, могли проходить через любой из (m_0-j) уровней, лежащих выше уровня j) определяется формулой.

$$\frac{d\sigma}{dE_\gamma}(E_\gamma, E, m_0, i, j) = \delta[E_\gamma - (\varepsilon_j - \varepsilon_i)] A_{ji} \sigma_{m_0}(E) \sum_{\alpha=1}^{m_0-j} R_{m_0, j\alpha}, \quad (11.1)$$

где

σ_{m_0} = сечение возбуждения m_0^{th} -ого для энергии нейтрона E , взятое из файла 3 в секции, соответствующей m_0^{th} -ому уровня

$\delta[E_\gamma - (\varepsilon_j - \varepsilon_i)]$ - дельта-функция, определяющая дискретный гамма-квант энергии E_γ , при переходе с уровня j на i .

A_{ji} - вероятность того, что гамма-квант энергии E_γ излучается при переходе с уровня j на i , задается долей перехода $j \rightarrow i$.

$R_{m_0 j \alpha}$ - вероятность того, что ядро сначала возбужденное на уровне m_0 , перейдет на уровень j через α -переходы, где α меняется от 1 до $m_0 - j$ и равняется

$$= \sum_{m_1 = \alpha + (j-1)}^{m_0-1} \sum_{m_2 = \alpha + (j-2)}^{m_1-1} \cdots \sum_{m_{\alpha-1} = j+1}^{m_{\alpha-2}-1} \sum_{m_\alpha}^j \prod_{i=1}^{\alpha} TP_{m_{i-1} m_i}$$

Обычно, $R_{m_0 j \alpha}$ - сумма вероятностей α -переходов (долей), начиная с m_0 -уровня через промежуточные до уровня j . В примере показано начальное возбуждение уровня $m_0=5$ и последующие переходы через уровни 1 и 2.

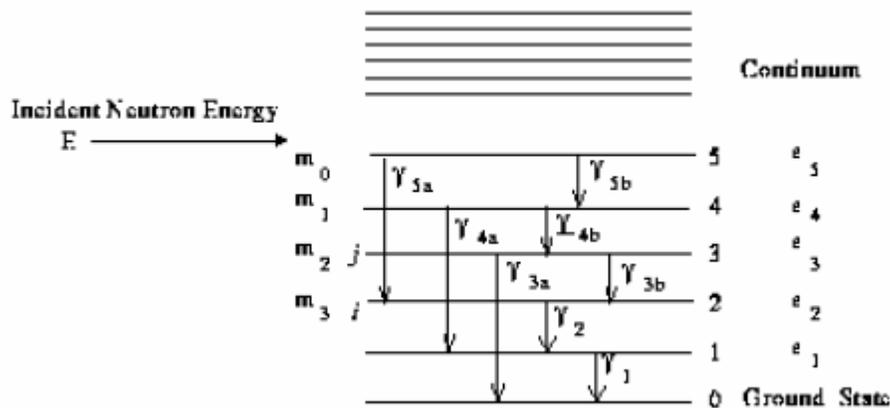
$$R_{m_0 j} = TP_{m_0 j} = TP_{52}$$

$$R_{m_0 j 2} = TP_{m_0 m_1} TP_{m_1 j} + TP_{m_0 m_2} TP_{m_2 j} = TP_{52} \cdot TP_{42} + TP_{53} TP_{32} = 0 + 0 = 0$$

$[E_\gamma = E_{\gamma 2} = (\varepsilon_2 - \varepsilon_1)]$, относительные величины в этом примере определяются

$$R_{m_0 j 3} = TP_{m_0 m_1} TP_{m_1 m_2} TP_{m_2 j} = TP_{54} \cdot TP_{43} \cdot TP_{32}$$

Если m_0 и j отделены многими уровнями, схема получается со многими ступенями.



Видно, что такого рода данные не могут быть однозначно упорядочены в представлении ENDF, в котором для этой цели можно использовать лишь номер секции: сечение образования γ -квантов с энергией E_γ можно упорядочивать и по номерам уровней m_0 и по номерам уровней j . Для решения этой дилеммы просуммируем выражение (1) по всем m_0 :

$$\frac{d\sigma_1}{dE_\gamma}(E_\gamma, E, i, j) = \sum_{m_0=j}^N \frac{d\sigma}{dE_\gamma}(E_\gamma, E, m_0, i, j) \quad (11.2)$$

где N - наивысший уровень, который может возбудиться нейтроном с энергией E (т.е. $\varepsilon_N \leq AWR/(AWR+E)$). Это однозначно определяет сечение возбуждения данного перехода, сопровождающего испусканием γ - кванта данной энергии. Выделение такого сечения удобно при анализе экспериментальных данных. Определяемое таким образом сечение идентифицируется уровнем j . Поступая альтернативно, мы можем просуммировать выражение (11.2) по i и j :

$$\frac{d\sigma_2}{dE_\gamma}(E_\gamma, E, m_0) = \sum_{j=1}^{m_0} \sum_{i=0}^{j-1} \frac{d\sigma}{dE_\gamma}(E_\gamma, E, m_0, i, j) \quad (11.3)$$

Это определяет сечение возбуждение, которое может указывать на определенное состояние возбуждения и иметь преимущество, когда необходимо представить расчетные данные.

Определенное таким образом сечение образования гамма - квантов с энергией E_γ идентифицируется уже уровнем m_0 . Оно может быть удобным при описании данных, полученных расчетным путем. Если просуммировать выражение (11.2) по i и j , а выражение (11.3) – по m_0 , то получим

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{dE_\gamma}(E_\gamma, E) &= \sum_{m_0=1}^N \frac{d\sigma_2}{dE_\gamma}(E_\gamma, E, m_0) \\ &\equiv \sum_{j=1}^N \sum_{i=0}^{j-1} \frac{d\sigma_1}{dE_\gamma}(E_\gamma, E, i, j). \end{aligned} \quad (11.4)$$

Это выражение определяет суммарное сечение образования кванта с энергией E_γ при неупругом рассеянии нейтронов на всех дискретных уровнях.

Для данных, представленных уравнением (11.4), рекомендуется использовать МТ=4, как и в случае возбуждения континуума уровней. Если же используются МТ=51-91, то тогда можно задавать либо сечения, определенные выражением (11.2), либо сечения, определенные выражением (11.3). Совместное применение обоих представлений не разрешается.

Если образование фотонов задается вероятностями переходов и если область, где известны вероятности переходов, не охватывает весь энергетический интервал, то для оставшейся части энергетического интервала в файле 12 для МТ=51-90 следует использовать представление множественностей.

Интегральные сечения, приводимые в файле 13 получают интегрированием уравнений (11.1) – (11.4) по E_γ .

4. Замечания пункта (3) применимы также к описанию дискретного излучения реакций $(n, p\gamma)$, $(n, d\gamma)$, $(n, t\gamma)$, $(n, {}^3\text{He}\gamma)$, $(n, \alpha\gamma)$; в этих случаях рекомендуется использовать номера МТ=103, 104, 105, 106 и 107.

12. ФАЙЛ 12. МНОЖЕСТВЕННОСТИ ОБРАЗОВАНИЯ ФОТОНОВ И ВЕРОЯТНОСТИ ПЕРЕХОДОВ

Файл 12 может использоваться для представления энергетических зависимостей сечений образования фотонов либо через множественности, либо через вероятности переходов. Обработывающие программы получают абсолютные сечения образования фотонов используя сечения нейтронных реакций из файла 2 и/или файла 3.

Множественности используются для представления как сечений образования дискретных фотонов, так и/или интегральных сечений фотонов непрерывного спектра. Номера МТ в файле 12 обозначают те нейтронные сечения (из файлов 2 и/или 3), для которых приводятся множественности. Множественности рекомендуется задавать для описания спектров радиационного захвата (n,γ), конечно, при условии, что в файле 2 и/или 3 содержится сечение реакции (n,γ).

Если схема уровней известна достаточно хорошо, для представления данных о гамма-спектрах реакций типа (n,γ) целесообразно использовать альтернативный метод – задание вероятностей переходов. В этом случае в файле 12 описывается действительная схема межуровневых переходов в ядре-продукте, образующемся в реакции определенного типа (заданного номером МТ). Эта информация может в дальнейшем использоваться вместе с сечениями возбуждения дискретных уровней, почерпнутыми из файла 3 для вычисления сечений образования гамма - квантов дискретного спектра. Очевидно, обсуждаемый метод не подходит для представления интегралов от непрерывных фотонных спектров.

12.1. ФОРМАТ

Каждая секция файла 12 содержит информацию о реакции определенного типа (под номером МТ) – как в случае задания множественности ($LO=1$), так и при задании вероятностей переходов ($LO=2$). Каждая секция всегда начинается с записи HEAD и заканчивается записью SEND.

12.1.1. ВАРИАНТ 1 ($LO=1$): МНОЖЕСТВЕННОСТИ

Зависимость сечений образования фотонов от энергии нейтрона представляется таблицей пар энергия нейтрона – множественность $[E, y_k(E)]$ для каждого дискретного фотона или для непрерывного спектра фотонов¹. Индекс k означает определенный дискретный фотон или же непрерывный спектр. Число значений этого индекса обозначается НК. Множественность или выход вычисляется следующим образом:

¹ Для каждого номера МТ не должно быть более одного непрерывного спектра. Если же необходимо разложение этого спектра на несколько частей, то это можно осуществить в файле 15.

$$y_k(E) = \frac{\sigma_k^\gamma}{\sigma(E)} \quad (\text{photons}) \quad (12.1)$$

где E - энергия нейтрона, а $\sigma(E)$ - сечение нейтрона в файле 2 и/или 3, для которого определена множественность (под номером МТ). Для дискретных фотонов произведение $\sigma_k^\gamma(E)$ - сечение образования фотона для дискретного k -ого фотона. Для непрерывного фотонного спектра $\sigma_k^\gamma(E)$ - сечение, проинтегрированное по энергии фотонов.

В этом случае

$$\begin{aligned} y_k(E) &= \frac{\sigma_k^\gamma(E)}{\sigma(E)} = \frac{\int \frac{d\sigma_k^\gamma(E_\gamma \leftarrow E) dE_\gamma}{dE_\gamma}}{\sigma(E)} \\ &= \frac{\int \sigma(E) y_k(E_\gamma \leftarrow E) dE_\gamma}{\sigma(E)} = \int_0^{E_\gamma^{\max}} y_k(E_\gamma \leftarrow E) dE_\gamma \end{aligned} \quad (12.2)$$

где E_γ - энергия фотона (эВ),

$$\frac{d\sigma_k^\gamma}{E_\gamma}(E_\gamma \leftarrow E)$$

абсолютное распределение фотонов в барнах/эВ, а $y_k(E_\gamma \leftarrow E)$ – относительное распределение энергий в фотоны/эВ. Величина $y_k(E_\gamma \leftarrow E)$ дальше может быть разбита

$$y_k(E_\gamma \leftarrow E) = y_k(E) f_k(E_\gamma \leftarrow E) \quad ,$$

где

$$\int_0^{E_\gamma^{\max}} f_k(E_\gamma \leftarrow E) dE_\gamma = 1$$

Если в файлах 12 или 13 для заданного номера МТ задается возбуждение непрерывного спектра, в файле 15 при том же номере МТ должно быть задано соответствующее нормированное энергетическое распределение. Если $NK > 1$, для каждого номера МТ в таблицу заносится, как проверочная величина, полный выход фотонов:

$$Y(E) = \sum_{k=1}^{NK} y_k(E)$$

Структура сечения для $LO = 1$:

```
[MAT, 12, MT/ ZA, AWR, LO, 0, NK, 0] HEAD (LO=1)
[MAT, 12, MT/ 0.0, 0.0, 0, 0, NR, NP/ Eint / Y(E)] TAB1 2
```

< подсекция для k=1>

< подсекция для k=2>

.....

< подсекция для k=NK>

```
[MAT, 12, 0/ 0.0, 0.0, 0, 0, 0, 0] SEND ,
```

Структура каждой подсекции:

```
[MAT, 12, MT/ EGk, ESk, LP, LF, NR, NP/ Eint / Yk(E)] TAB1,
```

где

NK = количество дискретных фотонов, включая континуум,

ES_k = энергия уровня, порождающего фотон. Если же уровень не известен или если описывается непрерывный фотонный спектра, то ES_k=0.0 .

EG_k = при LP=0 или 1 – энергия фотона; при LP=2 – энергия связи. Для непрерывного энергетического распределения фотонов следует задавать EG_k =0.0.

LP = Признак, определяющий источник образования фотона.

LP= 0, источник фотонов не известен, энергия фотона = EG_k,

LP= 1, для неизвестных спектров; энергия фотона также просто равна EG_k,

LP= 2, для первичных фотонов, энергия которых EG'_k, определяется как

$$EG'_k = EG_k + \frac{AWR}{AWR + 1} E_n .$$

LF = номер закона распределения энергии фотона

LF= 1, нормированная табличная функция (в файле 15)

LF= 2, дискретная фотонная энергия.

12.1.2. ВАРИАНТ 2 (LO =2): ВЕРОЯТНОСТИ ПЕРЕХОДОВ.

В этом варианте необходимо задание энергий уровней, вероятностей переходов между ними и (если нужно) условных вероятностей испускания фотонов. Имея эту информацию легко можно рассчитать энергии фотонов и их множественности. Сечения образования фотонов могут быть затем вычислены для любого заданного уровня с использованием сечения реакции, содержащегося в файле 3, и вероятности соответствующего перехода. Аналогично могут быть получены множественности и сечения образования фотонов всего каскада. В секции для заданного уровня определяются вероятности переходов и вероятности излучения фотонов, испускаемых только с этого уровня; следующие фотоны каскада определяются по данным для нижележащих уровней.

2) Если общее количество дискретных фотонов и континуума равняется единице (K=1), то запись TAB1 опускается.

Введем следующие величины:

- LG** LG=1, простой случай (все переходы сопровождаются испусканием только γ излучения)
 LG=2, сложный случай (происходит внутренняя конверсия и другие процессы),
- NS** количество уровней, находящихся *ниже* рассматриваемого, включая основное состояние. (Рассматриваемый уровень определяется однозначно номером MT и энергией уровня),
- NT** число переходов, для которых данные задаются в последующем списке (т.е. число ненулевых вероятностей переходов), $NT \leq NS$.
- ES_i** энергия *i*-ого уровня, $i=0,1,2,\dots, NS$. В основном состоянии $ES = 0.0$.
- TP_i** $TP_{NS,i}$ вероятность прямого перехода с уровня NS из *i*-й уровень, $i=0, 1, 2,\dots$
- GP_i** $GP_{NS,i}$ вероятность того, что переход с уровня NS на *i*-й уровень, будет сопровождаться испусканием фотонов (т.е. условная вероятность излучения фотонов).
- B_i** массив NT дуплетов или триплетов – в зависимости от значения LG.

Заметим, что каждый уровень можно идентифицировать значением NS. При этом энергия фотона при переходе на *i*-ый уровень вычисляется как $E_\gamma = ES_{NS} - ES_i$, а множественность как $y(E_\gamma \leftarrow E) = (TP_i)(GP_i)$. Предполагается, что вероятность перехода не зависит от энергии падающего нейтрона.

Структура секции для LO =2:

```
[MAT, 12, MT/ ZA, AWR, LO, LG, NS, 0] HEAD (LO=2)
[MAT, 12, MT/ ESNS, 0.0, LP, 0, (LG+1)*NT, NT/B] LIST
[MAT, 12, 0/ 0.0, 0.0, 0, 0, 0, 0] SEND
```

Если LG=1, последовательность B_i состоит из NT дуплетов [ES_i,TP_i]; если LG =2, она включает NT триплетов [ES_i,TP_i,GP_i].

В этом случае индекс *i* пробегает по номерам уровней, лежащих ниже уровня, для которого задается вероятность перехода (т.е. ниже уровня NS). Дублеты и триплеты упорядочены по уменьшению энергии уровня, на который осуществляется переход - ES_i.

12.2. Правила

1. В варианте 1 (множественности) подсекции располагаются в порядке уменьшения EG_k .
2. В варианте 1(множественности) подсекции для непрерывного спектра, если она есть, является последней. В этом случае последнее значение $EG_k(EG_{NK})$, приравнивается к нулю.

3. В варианте 1 (множественности) значения EG_k должны совпадать с точностью до 4-х значащих цифр со значениями EG_k в файле 14, где задаются угловые распределения испускаемых фотонов. Это позволяет перерабатывающим программам и программам «физической» проверки информации для данного материала, поставить и соответственные данные о выходах и об угловых распределениях фотонов.

4. В варианте 1 (множественности) ES_k - это энергия уровня, с которого фотон был испущен. Если значение ES_k неизвестно или несущественно (как для непрерывного фотонного спектра), полагается $ES_k = 0.0$.

5. Если сечения захвата и деления задаются резонансными параметрами в файле 2, то образование фотонов для этих реакций следует задавать в файле 12, используя Вариант 1, а не сечениями образования фотонов в файле 13, т.к. это потребовало бы задания огромного количества данных для описания резонансной структуры, и расчет матриц образования фотонов по этим данным был бы трудно выполним.

6. В варианте 1 (множественности) таблица полного выхода $Y(E)$ должна в точности покрывать энергетический интервал, получаемый объединением энергетических интервалов, в которых заданы все $y_k(E)$. Внутри этого интервала должно выполняться соотношение

$$Y(E) = \sum_{k=1}^{NK} y_k(E)$$

7. В файле 3 должны быть заданы сечения возбуждения всех уровней, для которых приводятся вероятности переходов.

8. Объединение всех секций, вне зависимости от используемого варианта, должно представлять данные для образования фотонов без избыточности. Например, в секции с $MT=4$ не должны описываться фотоны, уже описанные где-нибудь в секциях с $MT=51-91$. Точно так же не должны информационно пересекаться данные файлов 12 и 13.

9. Если в варианте 1 (множественности) задается только одно энергетическое распределение ($NK=1$), то запись `TAB1` для $Y(E)$ опускается, чтобы избежать повторения.

10. В файле 12 не могут определяться данные для тех типов реакций, которые не описаны в файлах 2 и/или 3.

11. В варианте 2 (вероятности переходов) энергии уровней ES_i в последовательности вероятностей переходов упорядочены по уменьшению энергии.

12. Номера MT , для которых определены вероятности переходов, должны соответствовать всей последовательности уровней (начиная с первого уровня) без каких-либо пропусков).

13. Энергии фотонов, рассчитываемые для переходов с уровня на уровень, в пределах 4-х значащих цифр должны совпадать со значениями E_{G_k} , указанными в файле 14. Необходимо, следовательно, позаботиться о задании энергий уровней с достаточным числом знаков.

14. В варианте 2 (вероятности переходов) сумма вероятностей переходов (TP_i) по всем i должна равняться 1.0000 (точнее, эта сумма должна совпадать с единицей с точностью до пяти значащих цифр).

15. Предельное количество энергетических точек в любой таблице $Y(E)$ или $y_k(E)$ составляет 1000 точек. Это верхний предел, который едва ли можно достичь на практике, так как выходы – это обычно гладкие функции энергии падающих нейтронов.

16. Максимальное число интервалов интерполяции – 10.

17. Данные для беспороговых реакций должны задаваться в энергетическом интервале $=10^{-5} \text{ эВ} \leq E \leq 2 \times 10^7 \text{ эВ}$ (как правило). Данные для пороговых реакций должны задаваться от пороговой энергии до $2 \times 10^7 \text{ эВ}$ (как правило).

18. Вероятности переходов для реакции $(n, n'\gamma)$.

а) Использование вероятностей переходов (файл 12, LO=2) – удобный способ описания той части γ -спектра, которая формируется при снятии возбуждения с определенных уровней, на которых ядро-продукт образуется в результате реакций $(n, n'\gamma)$ или других реакций.

б) Для использования такого представления необходимо соблюдение нескольких условий. Сечения возбуждения уровней (данные в файле 3 под номером MT=51,...) должны определяться с пороговых энергий до максимальной энергии – как правило $2 \times 10^7 \text{ эВ}$ – без исключений; должны быть известны схемы распада всех уровней; информация файла 12 должна быть согласованной с данными файла 13.

с) Зачастую эти условия могут быть выполнены не для всех уровней. Если схемы распада известны лишь для нескольких первых уровней, то вероятности переходов можно задавать, конечно, только для них, однако в этом случае сечения возбуждения этих уровней в файле 3 обязательно должны быть заданы вплоть до максимальной энергии. К сожалению, последнему условию редко удается удовлетворить для всех уровней, для которых известны схемы распада. К тому же по историческим причинам сечения возбуждения уровней порой задаются лишь до 15 МэВ.

13. ФАЙЛ 13. СЕЧЕНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ ФОТОНОВ

Назначение файла 13 аналогично назначению файла 12; он используется для представления зависимости сечений образования фотонов от энергии нейтронов и фотонов. Необходимость в «нейтронных» файлах в этом случае отпадает, так как в файле 13 абсолютные сечения (в барнах) задаются в явной форме – таблично.

13.1. ФОРМАТЫ

Как и в файле 12 каждая секция файла 13 несет информацию об определенном типе реакции (под номером МТ). Каждая секция всегда начинается с записи HEAD, а заканчивается записью SEND.

Представление энергетической зависимости сечений осуществляется через таблицу пар значений, энергия нейтрона – сечение, $[E, \sigma_k^\gamma(E)]$ для каждого фотона с дискретной энергией и для фотонов непрерывного спектра. Индекс k указывает на определенную дискретную энергию или на непрерывный спектр общее число фотонов обозначается через НК. Для дискретных линий $\sigma_k^\gamma(E)$ - это сечение образования соответствующего фотона (в барнах). Для непрерывного спектра $\sigma_k^\gamma(E)$ представляет собой интегральное (по энергии фотона) сечение фотонного континуума с индексом k^1 . В последнем случае

$$\sigma_k^\gamma(E) = \int_0^{E_\gamma^{\max}} \frac{d\sigma_k^\gamma}{dE_\gamma}(E_\gamma \leftarrow E) dE_\gamma \quad (\text{barns}) \quad (13.1)$$

где E_γ - энергия фотона (эВ), а $d\sigma_k^\gamma/dE_\gamma(E_\gamma \leftarrow E)$ – абсолютное энергетическое распределение фотонов в барнах/эВ. Энергетическое распределение можно дальше преобразовать следующим образом

$$\frac{d\sigma_k^\gamma}{dE_\gamma}(E_\gamma \leftarrow E) = \sigma_k^\gamma(E) f_k(E_\gamma \leftarrow E), \quad (13.2)$$

что, очевидно, требует выполнения равенства:

$$\int_0^{E_\gamma^{\max}} f_k(E_\gamma \leftarrow E) dE_\gamma = 1.$$

Если в файле 13 для заданного номера МТ используется представление непрерывным спектром, то в файле 15 под тем же номером МТ должен быть задан нормированный энергетический спектр $f_k(E_\gamma \leftarrow E)$.

В качестве проверочной величины выступает полное сечение образования фотонов

¹ Для каждого номера МТ не должно быть более одного непрерывного спектра. Если же необходимо разложение этого спектра на несколько частей, то это можно осуществить в файле 15.

$$\sigma_{tot}^{\gamma}(E) = \sum_{k=1}^{NK} \sigma_k^{\gamma}(E) \quad (\text{barns}), \quad (13.3)$$

которое, тоже приводится в таблице для каждого номера МТ, если имеется более одной подсекции (т.е. NK=1).

Определяются следующие величины:

NK общее число дискретных линий и непрерывного спектра,

ES_k энергия уровня, с которого испущен фотон. Если уровень не известен или несущественен (задается непрерывный спектр), то ES_k=0.0,

EG_k энергия фотона для LP=0 или 1 или энергия связи для LP=2. В случае непрерывного спектра фотонов полагают EG_k=0.0.

LP индикатор, определяющий тип фотона:

LP=0, является ли фотон первичным, не установлено, энергии фотона равна EG_k.

LP= 1, фотон не первичный, его энергия равна всегда EG_k.

LP= 2, фотон первичный, его энергия определяется по формуле

$$EG'_k = EG_k + \frac{AWR}{AWR + 1} E_n$$

LF номер закона распределения фотона по энергии:

LF=1, нормированная табличная функция (в файле 15)

LF=2, дискретная энергия.

Структура секции файла 13:

```
[MAT, 13, MT/ ZA, AWR, 0, 0, NK, 0] HEAD
[MAT, 13, MT/ 0.0, 0.0, 0, 0, NR, NP/ Eint / σtotγ(E)] TAB12
<подсекция для k=1>
<подсекция для k=2>
.....
<подсекция для k=NK>
[MAT, 13, 0/ 0.0, 0.0, 0, 0, 0, 0] SEND
```

Структура каждой подсекции в свою очередь следующая:

```
[MAT, 13, MT/ Egk, Esk, LP, LF, NR, NP/ Eint / σkγ(E)] TAB1,
```

²⁾ Если общее количество дискретных фотонов и континуума равняется единице (K=1), то запись TAB1 опускается.

13.2. ПРАВИЛА

1. Подсекции упорядочены по возрастанию величины EG_k .
2. По соглашению, если есть подсекция для непрерывного спектра, то она является последней. В этом случае $EG_{NK} = 0.0$.
3. Значения EG_k должны совпадать с точностью до 4-х значащих цифр со значениями EG_k в файле 14
4. Значение ES_k суть энергия уровня, с которого испустился фотон, если он известен. В противном - $ES_k=0.0$
5. Если сечения захвата и деления заданы резонансными параметрами в файле 2, файл 13 использовать не следует; вместо этого в файле 12 должны быть заданы множественности образования фотонов (вариант представления данных – 1).
6. Таблица полных сечений образования фотонов $\sigma_{tot}^\gamma(E)$ должна точно охватывать энергетический интервал, получаемый при объединении всех $\sigma_k^\gamma(E)$. В этом интервале должно выполняться с точностью до четвертого знака.

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

Если задается только одно энергетическое распределение ($NK=1$), либо дискретное, либо непрерывное, то запись TAB1 для $\sigma_{tot}^\gamma(E)$ опускается.

7. Объединение всех секций файлов 12 и 13 должно дать описание данных по образованию фотонов без избыточности. Например, в секцию с номером $MT = 4$ не должны включаться фотоны, описанные в секциях с номерами $MT = 51-91$.
8. Для любой подсекции сечений образования фотонов предел по числу энергетических точек в таблице равен 1000. Это верхний предел, но на практике следует использовать минимально-возможное число точек. Если энергетическая структура сечения сложна, то целесообразность использования файла 12 становится сомнительной, так как выходы обычно довольно гладкие функции энергий нейтронов, чем сечения и целесообразнее задать именно их.
9. Максимальное число интервалов интерполяции – 10.
10. Таблицы данных для без пороговых реакций должны охватывать энергетический интервал $10^{-5} \text{ эВ} \leq E \leq 2 \times 10^7 \text{ эВ}$ (как правило). Данные о пороговых реакциях должны начинаться с пороговой энергии до $2 \times 10^7 \text{ эВ}$ (как правило).

13.3. РЕКОМЕНДУЕМЫЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ В ФАЙЛЕ 13.

1. Для реакций $(n, n'\gamma)$ в файле 13 рекомендуется использовать сечения образования фотонов с номером $MT=4$. Все дискретные γ -линии и непрерывный спектр задаются последовательностью подсекций.

2. Сечения образования фотонов, представляемых в файле 13, по существу близки к величинам, непосредственно измеряемым в эксперименте.

3. Использование $MT=4$ позволяет снять проблему определения того, являются ли представляемые данные сечением возбуждения уровня или сечением испускания фотонов при снятии возбуждения (см. Файл 11).

4. Если по какой-то причине используются $MT=51, 52, \dots$, то понятно, что эти данные представляют собой сечения образования гамма – квантов, а не сечения возбуждения уровней (см. выше пункт 3). В файле 3 $MT = 51, 52, \dots$, конечно, используются для задания сечений возбуждения.

5. Одновременное использование $MT=4$ и $MT=51, 52, \dots$ не разрешается.

6. Выше определенной энергии зачастую не удастся выделить отдельные компоненты полного сечения образования фотонов. В этом случае суммарные данные следует задавать в секции $MT=3$.

7. Другие реакции. Данные для других типов реакций должны представлять собой сечения образования фотонов (файл 13) и задаваться в секциях с соответствующими номерами MT . Все правила, изложенные выше, должны соблюдаться и для этих реакций.

14. ФАЙЛ 14. УГЛОВЫЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ФОТОНОВ.

Файл 14 предназначен для представления угловых распределений вторичных фотонов, образованных в нейтронных реакциях. Угловые распределения должны определяться для каждой дискретной фотонной линии и для фотонов непрерывного спектра, представленных в файлах 12 и 13, даже если их распределения изотропны.

Структура файла 14 аналогична структуре файла 4 за исключением признака, указывающего на изотропность (LI). Угловые распределения для определенного типа реакции (номера МТ) задаются для возрастающих значений энергии падающего нейтрона. Рассматриваемый энергетический интервал должен быть тем же, что и в файле 12 или 13 для соответствующего типа реакции. Данные упорядочиваются по возрастанию номеров МТ.

Угловые распределения выражаются через распределения вероятностей, нормированных следующим образом:

$$\int_{-1}^1 p_k(\mu, E) d\mu = 1,$$

где $p_k(\mu, E)$ - плотность вероятности того, что нейтрон с энергией E в реакции МТ породит фотон с дискретной энергией или фотон непрерывного спектра (определяемый индексом k и МТ), будучи рассеянным на угол, косинус которого равен μ . Так как обычно полагают, что угловые распределения фотонов имеют азимутальную симметрию, распределение можно представить в виде разложения по полиномам Лежандра.

$$\begin{aligned} p_k(\mu, E) &= \frac{2\pi}{\sigma_k^\gamma(E)} \frac{d\sigma_k^\gamma(\Omega, E)}{d\Omega} \\ &= \sum_{i=0}^{NL} \frac{2i+1}{2} a_i^k(E) P_i(\mu) \end{aligned} \quad (14.1)$$

где μ = косинус угла рассеяния в лабораторной системе,
 E = энергия нейтрона в лабораторной системе,
 $\sigma_k^\gamma(E)$ = сечение образования фотона с дискретной энергией или непрерывного спектра либо в файле 13, либо в наборе файлов – 2, 3, 12,
 l = порядок полинома Лежандра,
 $d\sigma_k^\gamma/d\Omega$ = дифференциальное сечение образования фотона в барнах на стерадиан,
 $a_i^k(E)$ = i -ый коэффициент разложения по полиномам Лежандра, относящийся к k -ой дискретной линии или к фотону непрерывного спектра (понятно, что $a_0^k(E)=1.0$).

$$a_i^k(E) = \int_{-1}^1 p_k(\mu, E) P_i(\mu) d\mu$$

Угловые распределения в файле 14 могут задаваться либо в виде таблицы значений функции энергии падающего нейтрона $p_k(\mu, E)$, то есть в виде распределения нормированных вероятностей, либо в виде коэффициентов разложения по полиномам Лежандра, $a_i^k(E)$. В формате предусмотрено задание простых признаков, обозначающих изотропию угловых распределений, либо определенной группы фотонов, испускаемых в реакции данного типа, либо всех фотонов этой реакции.

Заметим, что файл 14 предполагает независимость энергетического и углового распределений для фотонов непрерывного спектра. В противном случае вместо файлов 14 и 15 следует использовать файл 16 (аналогичный файлу 6). (Поскольку для дискретных фотонов файл 14 определяет и энерго - угловые распределения, то файл 16 может потребоваться только для непрерывных спектров).

14.1. ФОРМАТЫ

Как обычно, секции упорядочены по возрастанию номеров (MT) типов реакции. Определим следующие величины:

LI LI=0, распределение изотропно, но не для всех фотонов данного типа реакций, а только для некоторых,

LI=1, распределение изотропно для всех фотонов данного типа реакции,

LTT LTT=1, данные представляют собой коэффициенты разложения по полиномам Лежандра; понятно, что $a_0^k(E)=1.0$,

LTT=2, данные заданы таблицей зависимости от косинуса угла рассеяния,

NK количество дискретных фотонов, включая континуум (должно равняться количеству, указанному в файлах 12 и 13),

NI количество изотропных угловых распределений фотонов, в секции (под номером MT) с LI=0 (т.е. в секции, содержащей, по крайней мере, одно анизотропное распределение),

NE число энергетических точек в записи TAB2,

NL_i наибольшее значение l для каждого значения E_i ,

ES_i энергия уровня, с которого испускается фотон. Если уровень неизвестен или описывается непрерывный спектр, то полагают $ES_i=0.0$,

EG_k энергия фотона, совпадающая с заданной в файлах 12 или 13. Для фотонов непрерывного спектра полагают $EG_k=0.0$.

а. LI=1: изотропное распределение

Если LI=1, то все фотоны реакции типа MT испускаются изотропно. Этот флаг достаточен для обрабатывающей программы, и поэтому непосредственные данные об изотропных распределениях являются излишними и не вводятся в файл. В этом случае секция состоит лишь из записей HEAD и SENDS:

```
[MAT, 14, MT/ ZA, AWR, LI, 0, NK, 0] HEAD (LI=1)
[MAT, 14, 0 / 0.0, 0.0, 0, 0, 0, 0] SEND
```

б. LI=0: анизотропное распределение

Если LI=0, то возможны две структуры секции, определяемые значением величины LTT.

а. LTT=1: задаются коэффициенты разложения по полиномам Лежандра

Структура секции при LI=0 и LTT=1 следующая:

```
[MAT, 14, MT/ ZA, AWR, LI, LTT, NK, NI] HEAD (LI=0, LTT=1)
```

```
<подсекция для k=1>
```

```
<подсекция для k=2>
```

```
.....
```

```
<подсекция для k=NK>
```

```
[MAT, 14, 0/ 0.0, 0.0, 0, 0, 0, 0] SEND
```

Структура каждой записи в первой группе из NI подсекций, которые определяют NI изотропных распределений, такова:

```
[MAT, 14, MT/ EGk, ESk, 0, 0, 0, 0] CONT
```

Каждой изотропной линии дискретного спектра фотонов соответствует только одна запись CONT. (Упомянутая группа записей отсутствует, если NI=0). Подсекции упорядочены по возрастанию значения EG_k (т.е. по энергии фотонов), а подсекция для непрерывного спектра, если она присутствует в этой группе, располагается последней со значением EG_k=0.0.

За блоком NI подсекций следует блок NK-NI подсекций, относящихся к анизотропным фотонам. Они тоже располагаются по возрастанию значения EG_k. Если непрерывный спектр анизотропен, то соответствующая секция располагается в конце со значением EG_k=0.0. Структура последних NK-NI подсекций такова:

```
[MAT, 14, MT/ EGk, ESk, 0, 0, NR, NE/ Eink] TAB2
[MAT, 14, MT/ 0.0, E1, 0, 0, NL1, 0/ a1k(E1)] LIST
[MAT, 14, MT/ 0.0, E2, 0, 0, NL2, 0/ a1k(E2)] LIST
```

```
-----
-----
-----
```

```
[MAT, 14, MT/ 0.0, ENE, 0, 0, NLNE, 0/ a1k(ENE)] LIST
```

Заметим, что последовательность коэффициентов $a_l^k(E)$ начинается с $l=1$, так как понятно, что всегда $a_0^k(E)=1.0$.

6. LTT=2: табличное представление угловых распределений

Структура секции в случае LI=0 и LTT=2 имеет следующий вид:

```
[MAT, 14, MT/ ZA, AWR, LI, LTT, NK, NI] HEAD (LI=0, LTT=2)
```

```
<subsection for k=1>
```

```
<subsection for k=2>
```

```
-----
-----
-----
```

```
<subsection for k=NK>
```

```
[MAT, 14, 0/ 0.0, 0.0, 0, 0, 0, 0] SEND
```

Структура первой группы из NI подсекций (где NI может равняться нулю) аналогична структуре этой группы подсекций в случае LI=1, т.е. каждому изотропному

фотону соответствует одна запись CONT. Записи располагаются по возрастанию значения EG_k . Если в группе есть непрерывный спектр, то соответствующая подсекция располагается последней со значением $EG_k = 0.0$.

Структура подсекции из первого блока имеет вид:

```
[MAT, 14, MT/ EGk, ESk, 0, 0, 0, 0] CONT
```

За группой из NI подсекций следует группа из NK-NI подсекций для анизотропных фотонов в порядке увеличения значений EG_k . Если присутствует непрерывный спектр, то соответствующая секция располагается последней с $EG_k = 0.0$.

Структура последних NK-NI подсекций следующая:

```
[MAT, 14, MT/ EGk, ESk, 0, 0, NR, NE/ Eint] TAB2
[MAT, 14, MT/ 0.0, E1, 0, 0, NR, NP/ μint / pk(μ, E1)] TAB1
[MAT, 14, MT/ 0.0, E2, 0, 0, NR, NP/ μint / pk(μ, E2)] TAB1
-----
[MAT, 14, MT/ 0.0, ENE, 0, 0, NR, NP/ μint / pk(μ, ENE)] TAB1
```

14.2. ПРАВИЛА

1. В каждой группе подсекций (изотропной и анизотропной), подсекции следует в порядке увеличения EG_k .

2. По соглашению, непрерывные спектры, если они определены, задаются в конце соответствующей группы. В этих подсекциях $EG_{NK} = 0.0$

3. Значение EG_k должны совпадать с точностью до 4-х значащих цифр со значениями, приведенными в файлах 12 или 13. В файле 12, вариант 2 (вероятности переходов), значения EG_k , неявно определяются энергиями уровней.

4. ES_k – энергия уровня, с которого испускается фотон (если этот уровень известен; в противном случае $ES_k = 0.0$). Для непрерывного спектра всегда полагают $ES_k = 0.0$.

5. Для фотонов, сечения, образования которых не заданы в файлах 12 или 13, в файле 14 данные не определяются. Наоборот, для каждого фотона, сечение образования которого задано в файлах 12 или 13, должно быть определено угловое распределение в файле 14. Энергетический интервал, для которого определяются угловые распределения, должны быть таким же, как и для данных об образовании фотонов в файле 12 или 15.

6. Для $LTT=1$ (задаются коэффициенты разложения по полиномам Лежандра) значение NL должно быть минимальным, но достаточным для точного описания углового распределения, которое везде должно быть положительным. Во всех случаях не должно превышать 20.

7. Записи TAB1 для $p_k(\mu, E_i)$ в подсекции задаются в порядке возрастания энергии нейтрона E_i .

8. Табулированные функции $p_k(\mu, E_i)$ должны быть нормированы на единицу с точностью до 4-х значащих цифр.

9. Схема интерполяции $p_k(\mu, E)$ по E должна быть дважды линейной или \log - линейной (INT=2 или 3) для того, чтобы сохранить нормированность интерполированных распределений. Рекомендуется, чтобы интерполяция по μ была дважды линейной (INT=2).

10. Для LI=1 (изотропное распределение) параметр NK - это число фотонов в этой секции. Он должен равняться сумме значений NK, заданных в файлах 12 или 13.

11. Следует использовать минимальное количество данных, обеспечивающих достаточно точное представление углового распределения в зависимости от m и E .

12. Если в реакции типа МТ все фотоны изотропны, следует использовать LI=1. Использование LI=0 и NI=NK крайне нежелательно. Точно так же, изотропные распределения не должны задаваться явно в табличной форме или в виде разложения по полиномам Лежандра с $a_l^k(E) = 0$ для $l \geq 1$.

13. Угловые распределения для фотонов должны определяться для всех дискретных линий и для непрерывного спектра фотонов. Этого можно добиться либо явным заданием всех распределений, либо используя признак, указывающий, что все фотоны данной реакции (определенной номером МТ) изотропны. Если анизотропия слабее 20%, угловые распределения рекомендуется считать изотропными.

15. ФАЙЛ 15. НЕПРЕРЫВНЫЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ СПЕКТРЫ ФОТОНОВ

Файл 15 предназначен для представления непрерывных энергетических спектров в виде распределения нормированных вероятностей. В файле 15 должны быть заданы непрерывные спектры для всех фотонов, для которых в файлах 12 и 13 были сделаны отметки о непрерывности спектра. Спектры должны задаваться в пределах того же энергетического интервала, в котором заданы множественности или сечения в файлах 12 и 13. Каждая секция файла 15 содержит данные для реакции определенного типа МТ. Данные упорядочиваются по возрастанию номеров МТ.

Энергетические распределения $f(E_\gamma \leftarrow E)$ измеряются в эВ^{-1} и нормируются так:

$$\int_0^{E_\gamma^{\max}} f(E_\gamma \leftarrow E) dE_\gamma = 1 \quad ,$$

Здесь E_γ^{\max} - максимально-возможная энергия фотона, величина, которой зависит от энергии нейтрона и от рассматриваемого ядра¹. Энергетические распределения $f(E_\gamma \leftarrow E)$ можно представить в виде взвешенной суммы парциальных нормированных распределений следующим образом:

$$f(E_\gamma \leftarrow E) = \sum_{j=1}^{NC} p_j(E) g_j(E_\gamma \leftarrow E) \quad (\text{эВ})^{-1} \quad (15.1)$$

где NC - количество парциальных распределений, используемых для представления $f(E_\gamma \leftarrow E)$, $g_j(E_\gamma \leftarrow E)$ - j -ое нормированное парциальное распределение, эВ^{-1} , $p_j(E)$ - вероятность или вес j -ого парциального распределения.

Условие нормировки:

$$\int_0^{E_\gamma^{\max}} g_j(E_\gamma \leftarrow E) dE_\gamma = 1.$$

так что

$$\sum_{j=1}^{NC} p_j(E) = 1.$$

Абсолютное дифференциальное по энергии сечение $\sigma^\gamma(E_\gamma \leftarrow E)$ определяется соотношением

$$\sigma^\gamma(E_\gamma \leftarrow E) = \sigma^\gamma(E) f(E_\gamma \leftarrow E) \quad (\text{б/эВ}),$$

¹ Заметим, что индекс k , используемый в файлах 2 и 3, при описании распределения $f(E_\gamma \leftarrow E)$, здесь опускается, поскольку для каждого номера МТ может быть задан лишь один фотон непрерывного спектра. Индекс k в файле 15 теряет смысл: данные о фотонах непрерывного спектра в файлах 12 или 13 всегда содержатся в NK -й секции.

где $\sigma^\gamma(E)$ - интегральное сечение континуума, заданное либо в файле 13, либо полученное из файлов 2, 3 и 12.

Способ представления непрерывных энергетических распределений фотонов в файле 15 аналогичен способу, примененному в файле 5. В настоящее время, однако, предусматривается задание непрерывного спектра в файле 15 лишь в виде произвольной табулированной функции $g(E_\gamma \leftarrow E)$:

$$g_j(E_\gamma \leftarrow E) = g(E_\gamma \leftarrow E)$$

В перспективе могут быть добавлены новые законы (например, для спектра гамма - лучей деления).

15.1. ФОРМАТ ФАЙЛА 15

Структура секции имеет вид:

```
[MAT, 15, MT/ ZA, AWR, 0, 0, NC, 0] HEAD
      <subsection for j=1>
      <subsection for j=2>
      -----
      -----
      <subsection for j=NC>
[MAT, 15, 0/ 0.0, 0.0, 0, 0, 0, 0] SEND
```

Для случая LF =1 каждая подсекция имеет следующую структуру:

```
[MAT, 15, MT/ 0.0, 0.0, 0, LF, NR, NP/ Eint / pj(E)] TAB1 (LF=1)
[MAT, 15, MT/ 0.0, 0.0, 0, 0, NR, NE/ Eint ] TAB2
[MAT, 15, MT/ 0.0, E1, 0, 0, NR, NP/ Eγ int / g(Eγ-E1)] TAB1
[MAT, 15, MT/ 0.0, E2, 0, 0, NR, NP/ Eγ int / g(Eγ-E2)] TAB1
      -----
[MAT, 15, MT/ 0.0, ENE, 0, 0, NR, NP/ Eγ int / g(Eγ-ENE)] TAB1
```

Поскольку пока предусматривается задание лишь LF =1, то форматы для других законов не определены; в будущем их структуры, вероятно, будут приняты подобными структурам для LF = 5, 7, 9 и 11 в файле 5. При использовании гистограммного представления спектра (интерполяционная схема INT =1) следует применять энергетические интервалы шириной от 0.25 до 0.5 МэВ.

Область энергии нейтронов, для которой приводятся данные о непрерывных фотонных спектрах, должна согласовываться с соответствующей областью в файлах 12 или 13. В остальном правила заполнения файла 15 совпадают с таковыми для файла 5 (LF =1).

15.2. ПРАВИЛА

1. В каждой подсекции значения энергии фотонов E_γ должны следовать в порядке возрастания.

2. Записи TAB1 для $g(E_\gamma \leftarrow E_i)$ в подсекции должны быть расположены по возрастанию значений энергии нейтрона E_i .

3. Табулируемые функции $g(E_\gamma \leftarrow E_i)$ должны быть нормированы на единицу с точностью до 4-х значащих цифр.

4. Интерполяционная схема для $p_j(E)$ должна быть либо дважды линейной, либо \log - линейной ($INT = 1, 2$ или 3) для сохранения вероятностей при интерполяции. Интерполяционная схема для $g(E_\gamma \leftarrow E_i)$ по отношению к E также должна быть дважды линейной или \log - линейной.

5. Сетка значений энергии нейтрона должна являться подмножеством сеток, используемых для задания $\sigma_{NK}(E)$ в файле 12 или для задания $\sigma'_{NK}(E)$ в файле 13; энергетические интервалы, в которых приводятся данные в файле 15 и в файлах 12 или 13, должны полностью совпадать.

6. Если для реакции МТ приводятся данные в файле 12 и в файле 13, то непрерывное энергетическое распределение фотонов ($LF=1$) может быть задано только в одном из этих файлов. Другими словами заданный в файле 15 спектр должен однозначно соответствовать либо множественности, либо сечениям образования фотонов.

7. Следует использовать минимальное количество точек для достаточно точного представления непрерывных спектров в функции как E_γ , так и E . Однако, не следует выбирать слишком редкую сетку для E , даже если распределения представляют собой медленно изменяющиеся функции E , так как интерполированное распределение всегда будет отличным от нуля вплоть до максимальной энергии, при которой отлично от нуля хотя бы одно из опорных распределений.

8. Число точек по энергии нейтронов как для $p_j(E)$, так и для $g(E_\gamma \leftarrow E_i)$ не должно превышать 200, а число точек по энергии фотонов в таблицах для $g(E_\gamma \leftarrow E_i)$ не должно превышать 1000.

ФАЙЛ 30. ВВЕДЕНИЕ К ФАЙЛАМ ДАННЫХ О КОВАРИАЦИЯХ

30.0. Общие замечания

Включение данных о погрешностях в библиотеку оцененных данных является весьма и весьма существенным для любых оценок физических констант поскольку практическое использование «констант» сильно зависит от того, насколько истинное значение каждой величины близко к рекомендуемому наиболее точному значению. В настоящее время признано, что данные о погрешностях должны быть включены в файлы оцененных ядерных сечений для того, чтобы можно было распространить анализ погрешностей на результаты расчетов, выполненных на основе рекомендуемых данных. Файлы погрешностей названы «ковариационными файлами» с тем, чтобы сократить более точное название «файлы погрешностей ядерных данных и корреляций между ними». Наибольший приоритет в разработке форматов представления ковариационных данных придается тем, чувствительности расчетных результатов к которым наиболее велики.

До ENDF/B-IV оценщикам предоставлялась лишь единственная возможность сообщить о погрешностях оцененных ими данных: сообщить о них в документации, сопровождающей оценку. При разработке ENDF/B-IV рабочей группой по оценке сечений (CSEWG) был создан подкомитет по ковариационным данным для координации работ по стандартизованному представлению данных по погрешностям и их корреляциям.

Одной из важных особенностей ядерных данных и, в частности, сечений, является то, что их погрешности благодаря процессу измерений наблюдаемых величин и введению в них ряда поправок для получения микроскопических сечений оказываются сильно скоррелированными. Во многих приложениях при оценке составляющей погрешности расчетного результата, обусловленной погрешностью сечений, корреляции между погрешностями использованных при расчете данных играют определяющую роль.

В принципе, для расчета погрешности расчетного результата достаточно знать погрешности (вариации) каждого элемента использовавшихся при расчете данных и их совместные погрешности (ковариации). На практике в дополнение к составляющей погрешности, обусловленной неточностью исходных ядерных данных, в результаты расчета вносятся и погрешности, связанные с неточностью использованных расчетных моделей. В некоторых случаях «модельная составляющая погрешности» может доминировать над составляющей, обусловленной неточностью ядерных данных; в других модельная составляющая может оказаться пренебрежимо малой. В принципе, совершенствование модели позволяет сократить модельную составляющую погрешности, хотя порой это достается дорогой ценой. Погрешность, обусловленная неточностью ядерных данных, может быть сокращена (обычно дорогой ценой) путем выполнения более тщательных измерений, выполнения экспериментов иного типа, а порой путем более тщательного анализа имеющихся данных.

Одно из требований представления данных о погрешностях состоит в том, чтобы эти данные достаточно легко можно было перевести в ковариации (и вариации) групповых констант или иных «данных» непосредственно используемых в расчетах. В ENDF/B-IV были приняты принципы представления информации о погрешностях в специальных файлах и разработан пробный формализм их переработки. Этот формализм предполагал, что информация представлена в такой форме, что может быть переработана с минимальными переделками уже существующих обрабатывающих программ. В этом формате было подготовлено лишь несколько оценок для ENDF/B-IV. С тех пор была проведена большая работа в попытках квантифицировать ковариационные данные и далее использовать их совместно с данными о чувствительностях для анализа расчетных

погрешностей. Эти работы велись в трех различных направлениях, в каждом из которых ковариационные данные играли решающую роль: использование ковариационных данных для оценки погрешностей расчетных результатов, корректировка оцененных данных на основе анализа интегральных экспериментов и обоснование требований к точности ядерных данных, проистекающих из требований к точности результатов расчетов. В ENDF/B-V возможности представления данных о погрешностях были расширены и распространены на все нейтронные сечения, представляемые в файлах оцененных данных. В ENDF/B-VI существуют уже форматы для представления данных о ковариациях числа нейтронов, испускаемых при делении (представленном в Файле 1), о ковариациях резонансных параметров (представленных в Файле 2), о ковариациях нейтронных сечений (представленных в Файлах 3 и 10), о ковариациях данных об угловых и энергетических распределениях продуктов реакций (представленных в Файлах 4 и 5 соответственно). Предусмотрена также возможность представления ковариаций, получаемых из ковариаций модельных параметров и коэффициентов чувствительности ядерных данных к этим параметрам. Возможности представления данных о ковариациях сечений достаточно полны тогда как представление ковариаций данных других типов связано рядом ограничений. Например, при описании ковариаций данных о неупругом рассеянии с возбуждением континуума уровней требуется ввести в Файлы 3 и 33 искусственные псевдо-дискретные уровни.

Следует отметить, что ковариационные файлы данных, как правило, не полны, и отсутствие данных в формате ENDF-6 отнюдь не означает, что соответствующие компоненты погрешностей равны нулю. Иначе оценщик мог бы непредумышленно включить в файл нулевые погрешности или корреляции между погрешностями и тем самым ввести пользователя в заблуждение.

Основным резонансом для включения в ENDF-6 ковариационных файлов являлась потребность в оценке вклада погрешностей ядерных данных в погрешность результатов расчета ядерных систем, отличающихся широкими спектрами (как правило – нейтронными). Достижение этой цели являлось главной задачей при разработке формата ENDF-6 для ковариаций. Представление этих данных таково, чтобы их можно было переработать в групповое представление любой структуры. Как будет разъяснено более подробно в главе 33, хранимые в формате ENDF-6 величины представляют собой ковариации между погрешностями сечений заданных в энергетических точках (за исключением под-подсекций LB=8). Для упрощения процесса переработки значения этих компонент между опорными энергетическими точками принимаются постоянными. Таким образом, файлы ковариаций имеют гистограммное представление, но если переработанные ковариационные данные предназначаются для использования в существенно иной области, чем первоначально предполагавшаяся оценка погрешностей величин, усредненных по широким спектрам, то результаты переработки могут оказаться некорректно определенными. Например, Файл 33 (кроме под-подсекции LB=8) однозначно предполагает, что погрешности сечений в любых двух точках, лежащих в пределах одного и того же интервала энергетической сетки, полностью коррелируют и, следовательно, погрешность сечения, усредненного по узкому энергетическому интервалу, лежащему внутри интервала энергетической сетки, не будет больше, чем погрешность сечения, усредненного по всему этому интервалу. Новый формат LB=8 позволяет оценщику обойти эту некорректность. В прошлом оценщики, как правило, выбирали для представления ковариаций энергетические сетки достаточно грубые, имея в виду лишь достижение главной цели оценки, без деталей, не оправдываемых имеющейся информацией о погрешностях. Как отмечено выше, главной целью оценки ковариаций в ENDF-6, является возможность переработки этих данных в формы, позволяющие оценить погрешности расчетов в приложениях к системам, характеризующихся широкими нейтронными спектрами. В то же время, пользователь волен интерпретировать

представленные в файле данные по своему усмотрению. Если пользователь модифицирует ковариационные данные так, чтобы они были пригодны для оценки погрешностей величин, усредненных по интервалам, более узким, чем в исходных данных, эти модификации должны выполняться так, чтобы модифицированные данные, будучи свернутыми по первоначальным энергетическим интервалам, соответствовали значениям, указанным оценщиком ковариаций. Адаптация ковариационных данных к более детальной энергетической сетке в прошлом требовалась тем пользователям, которые стремились усовершенствовать оцененные данные путем корректировки, учитывающей «добавление» (в рассмотрение) новых экспериментальных данных и характеризующих их ковариаций. Для минимизации искажений, которые будут вноситься подобными пользователями в ковариационные данные, оценщики этих данных должны были стремиться использовать для их представления по возможности более подробные энергетические сетки. Перекрывающиеся энергетические сетки и прочие ухищрения порой вели к существенным погрешностям в рассчитываемых ковариациях. Новый формат Файла 30 позволяет устранить негативные эффекты, связанные с произвольными энергетическими сетками.

Теперь следует дать соответствующие определения характеристикам погрешностей¹. Каждое сечение или иная связанная с ним характеристика, представленная в файле ENDF, представляет собой физическую величину, определенную несмотря на то, что истинное ее значение неизвестно. Совокупность знаний о каждой такой величине X может быть охарактеризована функцией плотности вероятности $f(X)$, определенной так, что $f(X) \Delta X$ есть вероятность того, что неизвестное истинное значение этой величины отличается от X не более, чем на ΔX . Маргинальная плотность вероятности $f(X)$ усреднена по всем независимым переменным Y, Z, \dots совместной плотности вероятности всех этих величин. Форма функции плотности вероятности зависит от тех экспериментов, которые были выполнены для оценки их значений. По каждой переменной функция плотности вероятности нормирована на единицу. Ожидаемое значение $\langle g(X) \rangle$ любой функции $g(X)$ определяется как величина, усредненная по маргинальной функции плотности вероятности. Простейшим примером является ожидаемое значение самой рассматриваемой величины:

$$\langle X \rangle = \int X f(X) dX$$

На практике один и тот же символ зачастую используется и для самой физической величины и для ее значения в определенной базе данных. В этой главе мы будем писать $X = \langle X \rangle + \delta X$, где $\langle \delta X \rangle = 0$. Таким образом, величины, представленные в ENDF, являются ожидаемыми значениями.

Ширина функции распределения плотности вероятности отражает разброс экспериментальных значений и (или) их погрешностей, приписанных измеренным значениям экспериментаторами. Эта ширина является характеристикой экспериментов, а вовсе не величины сечения, и потому не является “мерой” ковариации собственно ядерных данных. Ширина функции распределения обусловлена неопределенностью, с которой каждый рассматриваемый эксперимент определяет истинное значение измеряемой величины. Эта неопределенность, количественной мерой которой является погрешность, может в зависимости от причины ее возникновения являться “систематической” или “случайной” (“статистической”). В зависимости от нормировки различают “абсолютные” (или “стандартные”) и “относительные” погрешности. Поскольку как систематические, так и случайные погрешности в равной мере влекут за собой уширение функции распределения, оцененная величина ковариации должна

¹ Последующее изложение следует работе R. Peelle, *Sensitivity and Uncertainty Analysis of Reactor Performance Parameters*, **Advances in Nuclear Science and Technology**, Vol. 14, pp 11, Lewins and Becker, Eds., Plenum Press, New York, 1982.

отражать комбинацию вкладов погрешностей обоих типов. Следует отметить, что сложнее поддающиеся оценке систематические погрешности, а результаты современных экспериментов, как правило, вносят больший вклад в суммарную погрешность, чем случайная составляющая, обусловленная статистикой отсчетов.

Форматы ENDF описывают только ожидаемые значения физических величин и вторые моменты их совместных функций распределения, отражающих знания оценщиков об истинном значении вектора ядерных данных. Не нужно предполагать нормальность функции распределения или, другими словами, что можно оценить вероятность того, что истинное значение лежит в определенной близости от ожидаемого. Форматы ковариационных данных ENDF-6 не нацелены на то, чтобы представить некую известную разность между сечениями, заданными в формате ENDF-6, и некоторыми более свежими и "лучшими" оценками, и не могут это сделать. Не могут быть описаны и неточности, связанные с процедурами переработки оцененных данных. Нельзя описать и ширину какого-либо распределения физической величины, например распределения числа вторичных нейтронов деления $P(v)$.

Определим следующие величины, связанные со вторыми моментами функции распределения плотности вероятности. Пусть $\langle X \rangle$ и $\langle Y \rangle$ представляют собой сечения или иные величины, представленные в формате ENDF-6. Функция $f(X, Y)$ есть совместная функция распределения величин X и Y , усредненная по всем возможным значениям остальных переменных (Z, U, \dots). Напомним, что $\delta X = X - \langle X \rangle$. Ковариация погрешностей величин X и Y определена следующим образом:

$$\begin{aligned} \text{Cov}(X, Y) &= \langle \delta X \delta Y \rangle \\ &= \iint (X - \langle X \rangle)(Y - \langle Y \rangle) F(X, Y) dX dY \end{aligned}$$

Дисперсия величины X :

$$\text{Var}(X) = \text{Cov}(X, X) = \langle \delta X^2 \rangle$$

Погрешность величины X или стандартное отклонение

$$s(X) = [\text{Var}(X)]^{1/2}$$

Коэффициент корреляции погрешностей величин X и Y

$$\rho(X, Y) = \text{Cov}(X, Y) / \{s(X) s(Y)\}$$

Часто используется относительные характеристики: относительное стандартное отклонение $s(X) / \langle X \rangle$, относительная дисперсия $\text{Var}(X) / \langle X \rangle^2$, относительная ковариация: $\text{Cov}(X, Y) / (\langle X \rangle \langle Y \rangle)$.

При совместном использовании величин X и Y знание ковариации принципиально важно. Например, стандартное отклонение суммы $X+Y$ лежит между $s(X)+s(Y)$ и $|s(X)-s(Y)|$ и его точное значение зависит от того, насколько скоррелированы погрешности складываемых величин. Ненулевая ковариация двух величин быть обусловлена их частичной взаимозависимостью или зависимостью каждой из них от некоторой третьей неточно известной величины.

30.1. ФАЙЛ 30. КОВАРИАЦИИ ДАННЫХ, ОБУСЛОВЛЕННЫЕ КОВАРИАЦИЯМИ ПАРАМЕТРОВ И ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТЯМИ К НИМ

30.1.1. Общее описание

Файл 30 введен как способ описания ковариаций табулированных сечений, множественностей и энерго-угловых распределений, обусловленных ковариацией набора параметров, через которые эти величины были определены (например, входные параметры теоретической модели ядерных взаимодействий). Предполагается, что оценщик знает ковариации этих параметров и может рассчитать чувствительности рассчитываемых величин к ним. Коль скоро ядерные данные оценены непосредственно с помощью ядерных моделей, ковариации результатов оценки могут быть вполне адекватно и компактно выражены через ковариационную матрицу параметров и набор коэффициентов чувствительности, определяемых как темп увеличения рассматриваемой величины отнесенный к темпам увеличения каждого из параметров модели. Несмотря на то, что введение Файла 30 было мотивировано именно этим приложением, его применимость не ограничена только одной из возможных методик оценки. Этот формат может быть использован для описания ковариаций любого происхождения, если только они формально могут быть представлены через набор параметров с определенной ковариационной матрицей и матрицу чувствительностей к этим параметрам. Потребность во введении ковариационного формата рассматриваемого типа возникла в связи с R-матричным анализом данных о сечениях легких ядер, используемых в качестве нейтронных стандартов. В этих случаях ключевыми параметрами являются параметры нескольких резонансов компаунд-ядра, лежащих при высоких энергиях. Другой ожидаемой областью применения формата является представление ковариаций сечений и энерго-угловых распределений продуктов нейтронных реакций при энергиях 0.1 – 20 МэВ, где данные получаются, прежде всего, на основе оптической модели, статистической модели и теории предравновесной эмиссии. Параметрами в этом случае выступают параметры оптического потенциала, параметры плотности уровней, элементы матрицы предравновесных состояний и радиационные силовые функции.

Ниже буде показано, что многогрупповые чувствительности к параметрам идентичны чувствительностям к параметрам многогрупповых данных. Именно последние и требуются для большинства приложений (см. секцию 30.1.4). Для того, чтобы максимизировать эффект этой эквивалентности информация о чувствительностях представлена в файле 30 в формате максимально приближенном к формату ядерных данных, так что чувствительности могут перерабатываться и интегрироваться с помощью тех же обрабатывающих программ, разве что с минимальной их доработкой.

Следует подчеркнуть, что Файл 30 не предназначен для использования в качестве хранилища полных “оценок параметров”. Фактически оценщики всегда стремятся сократить число параметров и число чувствительностей к каждому из них до минимума, необходимого для описания погрешностей имеющих практическую значимость. Это вызвано и ограничениями на объем файлов и стремлением сократить затраты на переработку ковариационных данных. При определении формата Файла 30 не делалось никаких попыток наложить какие-либо ограничения на определение параметров или на типы теорий ядерных реакций, которые могут оказаться полезными или даже наиболее подходящими для целей оценки. Эти вопросы, конечно, могут быть предметом обсуждения в документации, сопровождающей оценки, но сам по себе формат по необходимости отвечает максимальной общности. Одним из преимуществ этой общности является то, что в этом формате могут быть представлены результаты оценок, полученных с использованием самых различных методологий. Как будет обсуждено ниже в секции 30.1.3, эта общность также облегчает выполнение различных математических операций, таких, например, как диагонализация ковариационной матрицы.

30.1.1.1. Определения

В Файле 30 под термином “чувствительность” понимается производная оцененной величины, обозначим ее σ , по логарифму одного из параметров:

$$\sigma'_i \equiv \frac{\partial \sigma}{\partial (\ln \alpha_i)} = \alpha_i \frac{\partial \sigma}{\partial \alpha_i} \quad (30.1)$$

Преимуществом такого определения является то, что чувствительности σ' имеют ту же размерность, что и σ , вне зависимости от того, представляют ли σ , действительно, сечения или какие-либо распределения (энергетические, угловые, энерго-угловые и т.д.). Это означает, помимо всего прочего, что интегрирование по энергии и углам может быть выполнено с минимальной переделкой обрабатывающих программ. Использование в определении производных по логарифмам параметров отлично согласуется с использованием относительных ковариационных матриц параметров (см. ниже формулу 30.7).

Как будет детально обсуждено в секции 30.1.2.3, *подсекция* каждой секции Файла 30 используется для хранения чувствительностей данных, хранящихся в одной *секции* (так называемой *ссылочной* секции) одного из файлов для рассматриваемого материала. Следует подчеркнуть, что обычно прямого, однозначного соответствия между энергетической или угловой сеткой в подсекции Файла 30 и ссылочной секции не имеется. Отсюда следует, что производные в Файле 30 не являются производными непосредственно хранящихся данных. Совокупность данных в одной такой подсекции, по идее, должна адекватно представлять энергетическую и угловую зависимости соответствующей производной функции при использовании стандартных законов интерполяции.

Файл 30 не позволяет представлять погрешности независимых переменных (вещественных чисел, определяющих энергетические и угловые сетки в соответствующей секции ENDF). Как будет показано ниже, это привело бы к существенному усложнению вычисления погрешностей усредненных величин. В действительности если величина σ , действительно получена в результате модельных расчетов, то значения энергии налетающей частицы и углы вылета определяются пользователем программы, реализующей теоретическую модель, и не характеризуются никакими погрешностями. Далее, в Файле 30 не могут быть представлены неопределенности целых чисел или погрешности фиксированных величин, влияющих на энергетические и угловые сетки (значения масс, энергии реакций Q , границы энергетических областей). Таким образом, следует понимать, что в те структуры, которые в обычных файлах используются для представления данных вероятностной природы (сечения, множественности, нормализованные распределения), в Файле 30 используются для представления данных о производных, тогда как все остальные величины сохраняют свои стандартные (т.е. записанные в Файлах MF≠30) значения.

30.1.1.2 Представление данных различного типа.

Из вышеизложенных общих положений следует, что подсекции Файла 30, описывающие чувствительности сечений (а не множественностей или распределений) могли бы иметь такую же структуру данных, как и секции Файла 3. Конечно, поскольку чувствительности являются производными, в полях представления вещественных чисел появится много больше отрицательных величин, чем это обычно встречается в Файле 3. Представление данных о чувствительностях величины v не отличается от такового для чувствительностей сечений.

Говоря о представлении чувствительностей распределений, например, данных для упругого рассеяния, протабулированных в файле 4, следует отметить интересный момент. Если производные нормированного углового распределения $p(\theta)$ по отношению к

данному параметру велики, они должны быть представлены в подсекции с (MFSEN,MTSEN) = (4,2). Поскольку $p(\theta)$ нормировано на единицу, интеграл от производной по всем углам должен равняться нулю. Следующий важный аспект связан с использованием двух отдельных функций для представления одной, представляющей конечный интерес. Например, дифференциальное сечение упругого рассеяния $\gamma(\theta)$ (в барнах на стерадиан) образуется как произведение:

$$\frac{\partial \gamma(\theta)}{\partial \alpha_i} = \sigma \frac{\partial p(\theta)}{\partial \alpha_i} + p(\theta) \frac{\partial \sigma}{\partial \alpha_i}. \quad (30.2)$$

Так что

$$\frac{\partial \gamma(\theta)}{\partial \alpha_i} = \sigma \frac{\partial p(\theta)}{\partial \alpha_i} + p(\theta) \frac{\partial \sigma}{\partial \alpha_i}. \quad (30.3)$$

Умножая обе части равенства (30.2) на α_i и используя обозначения (30.1), получим:

$$\gamma'_i(\theta) = \sigma p'_i(\theta) + \sigma'_i p(\theta). \quad (30.4)$$

Формула (30.4) показывает как чувствительность $\gamma'_i(\theta)$ конструируется из данных, представленных в двух различных подсекциях (σ'_i и p'_i) Файла 30 плюс данных (σ и p) из Файлов 3 и 4 соответственно. Очевидно, что в более общем случае потребуется обрабатывать три и большее число различных факторов. Чтобы сократить объем хранимой информации и упростить ее обработку оценщик может просто опустить ссылку на ту секцию основного файла оцененных данных для данного материала, которая оказывает слабое влияние на чувствительность к данному параметру. Например, если ссылка на угловые распределения в Файле 30 будет отсутствовать, первый член в правой части равенства (30.4) исчезнет.

В Файле 4 $p(\theta)$ может быть представлено разложением по полиномам Лежандра; точно так же в Файле 30 можно использовать Лежандровское разложение для $p'_i(\theta)$. На самом деле в целях экономии места целесообразно использовать Лежандровское разложение для $p'_i(\theta)$ даже и в том случае, когда $p(\theta)$ представлено в табличной форме. Как отмечалось выше, интеграл от $p'_i(\theta)$ равен нулю; следовательно, нулевой момент $p'_i(\theta)$ должен быть равен нулю, а не единице как у первообразной функции. Проведенное рассмотрение чувствительностей величин, представленных в Файле 4, очевидным образом распространяется на представление чувствительностей к нейтронным спектрам, заданным в Файле 5, изомерным отношениям, заданным в Файле 9, множественностям испускания фотонов, заданных в Файле 12, выходам продуктов деления и т.д.

Рассмотрение дважды дифференциальных данных, представляемых в Файле 6, не порождает принципиально новых проблем. В этом случае p является функцией и конечной энергии и угла рассеяния: $p(E',\theta)$. Единственным усложнением в этом случае является то, что p'_i в (30.4) также является функцией двух переменных: $p'_i = p'_i(E',\theta)$. При этом в производной p'_i корреляции переменных могут быть существенно более сильными, чем в первообразном распределении, и потому представление чувствительностей в формате MFSEN=6 Файла 30 может быть целесообразным и тогда, когда исходное энерго-угловое распределение задано по частям в файлах 4 и 5. В этом случае в Файле 30 даются ссылки и на Файл 4 и на Файл 5. Матричная информация, задаваемая в формате файла 6, требует, как правило, большего объема памяти, чем раздельное представление в файлах 4 и 5; поэтому представление чувствительностей в формате MFSEN=6 должно использоваться только в случае, если в этом, действительно, есть необходимость.

30.1.1.3 Многогрупповые чувствительности

Многогрупповые операции с оцененными данными, содержащимися в файле, могут рассматриваться как выполнение неких взвешенных интегрирований по начальной энергии, по типам вторичных частиц, по их энергиям и углам вылета. Хотя эти операции весьма сложны, нет ничего общего между переменными (или пределами) интегрирования и параметрами, рассматриваемыми в Файле 30. Это облегчает расчет производных многогрупповых констант по этим параметрам. Обозначим через g среднегрупповую величину (например, один из угловых моментов одного из элементов многогрупповой матрицы рассеяния), связанную с дифференциальной величиной γ соотношением

$$g = \int dE dE' d\Omega \gamma_i(E, E', \theta) \omega(E, E', \theta), \quad (30.5)$$

где ω есть весовая функция. Как будет обсуждено ниже, в случаях, когда требуется оценить погрешность величины g , прежде всего следует рассчитать ее производную по параметру α_i :

$$g'_i = \frac{\partial g}{\partial(\ln \alpha_i)} = \alpha_i \int dE dE' d\Omega \frac{\partial \gamma(E, E', \theta)}{\partial \alpha_i} \omega(E, E', \theta),$$

или

$$g'_i = \int dE dE' d\Omega \gamma'_i(E, E', \theta) \omega(E, E', \theta), \quad (30.6)$$

Сравнивая соотношения (30.5) и (30.6), видим, что чувствительность групповой константы по данному параметру представляет собой среднегрупповое значения чувствительности к этому параметру дифференциальной величины γ . Следовательно, программы переработки данных ENDF в групповые константы, вычисляющие интегралы типа (30.5), могут использоваться и для вычисления производных групповых констант по параметрам, выражаемые через интегралы вида (30.6). Требуются лишь минимальные модификации. Как отмечалось выше в общем обсуждении ковариационного формата, именно это обстоятельство и побудило использовать для производных γ'_i форматы, максимально приближенные к форматам представления величин γ .

30.1.2. Форматы

Файл 30 делится на секции, характеризуемые значениями МТ, которые, однако, в Файле 30 не имеют смысла номера реакции. Каждая секция Файла 30 начинается записью HEAD и завершается записью SEND.

30.1.2.1. Оглавление и таблица соответствия (МТ=1)

Первая секция Файла 30, МТ=1, состоит из “содержания” (или директории – directory), в котором какая информация содержится в других секциях Файла 30 и порядок ее следования и, если требуется, из описываемой ниже таблицы соответствия между материалами.

Определим следующие величины

NP Полное число различных параметров

- NDIR** Номер записи CONT в оглавлении Файла MF=30, содержащей “маркерные” записи внутренних блоков данных (они описываются ниже), но не включающей ни таблицу соответствия, ни запись SEND.
- NCTAB** Номер записи CONT в таблице соответствия (не включающей запись SEND).
- MP_i** Номер параметра.
- MFSEN_i**,
MTSEN_i Если отличны от нуля – определяют положение в основном теле оцененных данных той секции, которая содержит данные, чувствительные к параметру MP_i (ссылочные данные).
MFSEN и MTSEN определяют форматы, которые используются для представления энергетических и угловых зависимостей чувствительностей. Например, если ссылочная секция определяет нормированное угловое распределение, MFSEN=4, то форматы, описанные в главе 4 настоящего руководства, будут использованы и для представления производных этого распределения по параметру MP_i.
- NC_i** Число записей, используемых для представления данных о чувствительностях. Эти записи в совокупности образуют подсекции в каждой из последующих секций Файла 30.
- LIBF_i** Число подбиблиотек, на которые имеются ссылки
- MATF_i** Число материалов, на которые имеются ссылки
- MPF_i** Число параметров, на которые имеются ссылки

Секция MT=1 имеет следующую структуру:

```
[MAT, 30, 1/ ZA, AWR, 0, 0, 0, NP] HEAD
[MAT, 30, 1/ 0.0, 0.0, 0, 0, NDIR, NCTAB] CONT
[MAT, 30, 1/ 0.0, 0.0, MP1, MFSEN1, MTSEN1, NC1] CONT
[MAT, 30, 1/ 0.0, 0.0, MP2, MFSEN2, MTSEN2, NC2] CONT
-----
[MAT, 30, 1/ 0.0, 0.0, MPNDIR, MFSENNDIR, MTSENNDIR, NCNDIR] CONT
[MAT, 30, 1/ 0.0, 0.0, MP1, LIBF1, MATF1, MPF1] CONT
[MAT, 30, 1/ 0.0, 0.0, MP2, LIBF2, MATF2, MPF2] CONT
-----
[MAT, 30, 1/ 0.0, 0.0, MPNCTAB, LIBFNCTAB, MATFNCTAB, MPFNCTAB] CONT
[MAT, 30, 1/ 0.0, 0.0, 0, 0, 0, 0] SEND
```

Оглавление служит руководством для обрабатывающих программ и, кроме того, дает наглядную картину того, какие секции в каких файлах содержат данные, существенно зависящие от рассматриваемых параметров. Как видно, эта информация представляется в виде, аналогичном содержанию всего файла оцененных данных (MF,MT) = (1,451).

Как правило, от каждого рассматриваемого параметра зависят данные, находящиеся в нескольких различных секциях, так что один и тот же номер MP может фигурировать (и обычно фигурирует) в нескольких последовательных строках содержания. Номер параметра MP в иерархии ENDF старше, чем номер ссылочного файла MFSEN, который, в свою очередь, старше номера ссылочной секции MTSEN. Таким образом, в Файле 30 MP играет роль номера некоего “субматериала”. Значением первого MP должна быть единица, MP₁=1, следующее не нулевое значение MP должно равняться

двум и т.д. Если не считать маркерных записей, MP, MFSEN и MTSEN должны следовать друг за другом в обычном для ENDF порядке.

В отличие от основного содержания (MF,MT) = (1,451), оглавление Файла 30 содержит внутренние маркеры конца файла и конца субматериала. Именно, в последовательности записей, содержащих информацию для данного параметра MP, вслед за последними данными для данного значения MFSEN в Оглавление вставляется запись MFSEN=0, указывающая на то, что все, что все чувствительности к параметру MP для данного MFSEN уже представлены:

```
[MAT,30, 1/ 0.0, 0.0, MP, 0, 0, 0] CONT
```

Точно так же после последней значащей строки, указывающей на информацию о чувствительностях к данному MP в оглавление вставляется строка с MP=0, служащая признаком конца информации для данного MP:

```
[MAT,30, 1/ 0.0, 0.0, 0, 0, 0, 0] CONT
```

Может случиться, что оцененные данные для двух различных материалов чувствительны к одному и тому же параметру (или зависят от общего набора параметров). Слова “чувствительны к одному и тому же набору параметров” означает, что при оценке данных для обоих материалов использовались одни и те же значения этих параметров. Если использованные параметры характеризуются достаточно существенными погрешностями, это приведет к появлению корреляций между погрешностями данных для разных материалов или, возможно, для данных из разных библиотек. В ряде приложений ковариации такого рода могут быть достаточно существенны (например при анализе погрешностей нейтронных характеристик сред, содержащих несколько материалов). Для того, чтобы описать эти кросс-корреляции оценщик должен включить в заголовочную секцию Файла 30 таблицу соответствия, идентифицирующую те параметры, которые являются общими для разных материалов (или библиотек).

Разумеется, ковариации этих параметров должны быть приведены в файлах оцененных данных для каждого материала и эти ковариации должны быть идентичны. Однако нумерация параметров в оценках для разных материалов может быть различной и установление соответствия между номерами параметров для одного и для другого материала является одной из задач таблицы соответствия.

Целочисленный параметр NSTAB определяет число записей CONT, наличествующих в таблице соответствия для данной оценки (т.е. для данного материала). Если таблица соответствия отсутствует, NSTAB=0. В противном случае указывается число подбиблиотек LIBF, номер материала MATF и число параметров MPF в некой другой оценке, в которой использовались те же параметры, что и в данной оценке. Если эта другая оценка относится к той же подбиблиотеке, полагается LIBF=0. Таблица соответствия упорядочивается в порядке возрастания сначала MP, затем LIBF, MATF и, наконец, MPF. Таблица соответствия не содержит никаких внутренних маркеров.

30.1.2.2. Ковариационная матрица (MT=2)

Вторая секция Файла 30, MT=2, содержит $NP(NP+1)/2$ относительных ковариаций $RCOV(I,J)$ погрешностей i -го и j -го параметров в форме NP отдельных записей типа LIST. Эта форма записи позволяет включить ковариации большого числа параметров нетребую слишком большой памяти компьютера и затрат машинного времени на обработку информации. Для каждого MP вводится одна запись типа LIST. Секция MT=2 имеет следующую структуру.

```

[MAT,30, 2/  ZA,  AWR,  0,  0,  0, NP] HEAD
[MAT,30, 2/  PARM1, 0.0,  0,  0, NCS1, 1/ {RCOV(1,K, K=1,NCS1)} LIST
[MAT,30, 2/  PARM2, 0.0,  0,  0, NCS2, 2/ {RCOV(2,1+K, K=2,NCS2)} LIST
[MAT,30, 2/  PARM3, 0.0,  0,  0, NCS3, 3/ {RCOV(3,2+K, K=3,NCS3)} LIST
-----
[MAT,30, 2/  PARMNP, 0.0,  0,  0,  1, NP/ {RCOV(NP,NP)}] LIST
[MAT,30, 2/  0.0, 0.0,  0,  0,  0,  0] SEND

```

Поскольку заполнение MP-го столбца ковариационной матрицы начинается с диагонального элемента RCOV(MP,MP), число элементов матрицы явно заданных в этом столбце, меньше или равно (NP-MP+1). Если число приведенных элементов меньше указанного максимума, остальные ковариации полагаются равными нулю. Учитывая это, оценщик может сэкономить немало места, если он перечислит параметры в такой последовательности, чтобы они объединялись в сильно коррелирующие группы.

В первом вещественном поле записи LIST приводится значение PARM_{MP} MP-го параметра.

30.1.2.3. Чувствительности (MT=11-999)

Секции 11-999 содержат чувствительности. Секция с определенной величиной MT в своих подсекциях содержит все чувствительности к данному параметру MP. Номер секции MT однозначно связан с номером параметра: MT=MP+10. Ясно, что ограничение числа секций 999 практически не сказывается на свободе оценщика в выборе числа параметров. Секции с MT≥11 имеют следующую структуру:

```

[MAT,30,MT/  ZA,  AWR,  0,  0,  0, NL] HEAD  MT=MP+10
      <subsection for NSUB=1>
      <subsection for NSUB=2>
-----
      <subsection for NSUB=NL>
[MAT,30, 0/ 0.0, 0.0,  0,  0,  0,  0] SEND

```

NL в записи HEAD представляет собой число подсекций в данной секции. Другими словами, NL есть число ссылочных секций для данного параметра. Формат подсекции каждой секции с MT≥11 почти совпадает с форматом ссылочной секции в основной части файла оцененных данных для данного материала; различия минимальны. Были необходимы некоторые изменения “бухгалтерского” характера, например, на позициях MF и MT проставляется 30 и MP+10, а не MFSEN и MTSEN. По необходимости подсекции секции Файла 30 следуют одна за другой, не разделяясь записями SEND или FEND. Для определения границ представления информации следует обращаться к оглавлению Файла 30 (см. Секцию 30.1.2.1.). Например, читая копию оглавления параллельно со считыванием подсекций из секции Файла 30 с MT≥11, обрабатывающая программа может сгенерировать временный файл в формате ENDF, содержащий информацию из секции Файла 30 (базовой секции), сохраняя ее форму, но проставляя на место MF и MT значения MFSEN and MTSEN и включая разделительные маркерные записи SEND, FEND и MEND. В этом временном файле каждая подсекция базовой секции получит полное отражение, по формату во всех деталях совпадающее с форматом ENDF, определенном в настоящем руководстве для данных типа (MFSEN,MTSEN). Правда, временный файл не обязан отвечать требованиям полноты, действующим в основной части оценки (например, тому требованию, что если в файле MF=3 присутствует секция MT=2, то секция с MT=2 должна присутствовать и в файле MF=4: если чувствительности углового распределения к параметрам достаточно малы, то эти чувствительности просто не приводятся).

По причинам, указанным в Секции 30.1.1.2., каждая подсекция секции Файла 30 с $MT \geq 11$ может, в принципе, потребоваться для расчета ковариаций всех многогрупповых констант, включая матрицу межгрупповых переходов и ее угловые моменты; при этом потребуется использовать данные и из секций основной части файла оцененных данных. Полученные NL матриц, будучи просуммированы, определяют полную чувствительность многогрупповых констант к параметру MP (см. соотношение 30.4).

30.1.3. Дополнительные процедуры

30.1.3.1. Связь параметров MP с физическими параметрами

Ясно, что физические параметры, использовавшиеся в оценке, могут различаться при переходе от одной оценки к другой. Поэтому забота о том, чтобы установить соответствие между пронумерованными параметрами MP и физическими параметрами целиком возлагается на оценщика. Оценщик должен также указать, какие из использованных им параметров не учитываются в ковариационном файле.

30.1.3.2. Значения параметров

Поскольку многие теоретические модели нелинейны, целесообразно включить в файл числовые значения параметров, использовавшиеся в оценке, $PARM_n$, с тем, чтобы зафиксировать ту точку в пространстве параметров, в которой производился расчет чувствительностей (см. Секцию 30.1.2.2.). Значения $PARM_n$ при расчете ковариаций никак не используются и единицы, в которых представлены их значения указываются только в сопровождающей оценку письменной документации. Вообще говоря, оценщик может положить значения всех или части этих параметров равными нулю.

30.1.3.3. Представление в собственных числах

Использование представления в собственных числах² позволяет найти линейное преобразование, позволяющее диагонализировать ковариационную матрицу. Это очень удобный метод локализации грубых ошибок (признаком которых служат отрицательные собственные числа) и наличия излишних параметров (на что указывают нулевые собственные числа). Перед тем, как пустить оценку погрешностей в эксплуатацию, весьма рекомендуется осуществить такую проверку. Более того, зная диагоналирующее преобразование, можно в секции $MT=2$ Файла 30 указать только собственные числа ковариационной матрицы параметров, а в секциях $MT \geq 11$ приводить чувствительности к линейно-независимым комбинациям параметров (определяющим собственные векторы). Если этот путь окажется приемлемым для оценщика, он позволит существенно сократить объем хранимой информации и упростить ее обработку.

30.1.3.4. Прореживание данных о чувствительностях

Чувствительности, представленные в определенной подсекции должны давать адекватное представление об энергетической и (или) угловой зависимости соответствующей производной при использовании стандартных законов интерполяции. В целях сокращения объема хранимой информации “прореживание” чувствительностей, т.е. сокращение числа узловых точек, в которых они заданы, приветствуется. Однако это прореживание не должно приводить к искажению интерполируемых значений чувствительностей более, чем на 10%.

30.1.3.5. Межфайловые корреляции

² См. например, процедуру SSIEV, описанную в работе B.T. Smith, et. al., *Matrix Eigenvalue Routines - EISPACK Guide*, 1976.

Информация, содержащаяся в Файле 30, относится к источникам погрешностей, не зависящих от описываемых в Файлах 31 - 40. Следовательно ковариационная матрица групповых констант, полученная на основе Файла 30, должна быть добавлена к матрицам, полученным на основе других ковариационных файлов. Это обстоятельство является единственной связью между Файлом 30 и другими ковариационными файлами.

Сложность учета межфайловых корреляций состоит в том, что могут существовать сильные корреляции между некоторыми сечениями при низких энергиях, оцененных на основе непосредственного анализа экспериментальных данных, и параметрами, используемыми для оценки сечений при высоких энергиях (например, благодаря тому, что первые использовались для нормировки данных при высоких энергиях). Если оценщик считает необходимым, чтобы эти корреляции были учтены при обработке данных, он должен “переместить” ковариации сечений, использовавшихся для нормировки (и иные данные, погрешности которых сильно коррелируют с ними), из Файла 33 в Файл 30. Такое перемещение может быть выполнено, например, если рассматривать данные как произведение хорошо известного опорного сечения на некоторый зависящий от энергии поправочный множитель. Этот множитель может быть представлен значениями на некоторой достаточно редкой энергетической сетке с линейной интерполяцией между точками. В этом случае “параметрами” будут значения поправочного фактора в узловых точках EG_i . Чувствительности “экспериментально оцененных” сечений σ к этим новым параметрам будут представлять собой треугольные функции с вершинами при $\sigma(EG_i)$. Разумеется, могут быть предложены и иные методы.

30.1.4. Многогрупповые приложения ковариаций параметров

Взяв относительные ковариации параметров $RCOV(\alpha_i, \alpha_j) \equiv Cov(\alpha_i, \alpha_j) / \alpha_i \alpha_j$, из секции MT=2 файла MF=30 и вычислив многогрупповые чувствительности g'_{mi} по формуле (30.6), можно непосредственно получить ковариацию групповых констант g_m и g_n . Если эти константы включают вклады нескольких реакций или нескольких материалов, они должны характеризоваться большим числом индексов (см. также Секцию 30.1.2.1). Принимая обычное приближение, что зависимость g_m от параметров не слишком нелинейна, можем разложить эту зависимость в ряд Тейлора и ограничиться первым членом разложения:

$$\begin{aligned} Cov(g_m, g_n) &= \sum_y \frac{\partial g_m}{\partial \alpha_i} \frac{\partial g_n}{\partial \alpha_j} Cov(\alpha_i, \alpha_j) \\ &= \sum_y \alpha_i \alpha_j \frac{\partial g_m}{\partial \alpha_i} \frac{\partial g_n}{\partial \alpha_j} Cov(\alpha_i, \alpha_j) / \alpha_i \alpha_j \quad (30.7) \\ &= \sum_y g'_{mi} g'_{nj} RCOV(\alpha_i, \alpha_j). \end{aligned}$$

Это соотношение позволяет выразить искомую многогрупповую ковариационную матрицу Equation (30.7) через мультигрупповые относительные чувствительности, вычисляемые по формуле (30.6), и данные, непосредственно считываемые из второй секции Файла 30.

Кроме отмеченной возможности прямого расчета погрешностей групповых констант, данные, содержащиеся в Файле 30, могут быть полезны и в других приложениях, не использующих соотношение (30.7). Поскольку эти приложения требуют соответствующего математического обеспечения, их следует обсудить на конкретном примере. В настоящее время можно предвидеть, что число параметров в конкретных оценках будет варьироваться между 10 и 100. Примем в качестве типичного числа

параметров 50. С другой стороны, вполне возможны приложения в которых число групповых нейтронных констант превысит 10000. Например, если для данного материала приводятся сечения 3 пороговых реакции с испусканием нейтронов число групповых констант будет равно произведению 3 реакций×10 исходных групп×80 конечных групп×4 угловых момента= 9600. В этих случаях ковариационная матрица становится чрезвычайно большой (~10⁸ чисел), тогда как матрица чувствительностей g'_{mi} (содержащая 500000 чисел) и ковариационная матрица параметров (2500 чисел) сохраняют разумные размеры. Из (30.7) видно, что эти две матрицы содержат всю информацию, необходимую для расчета огромной ковариационной матрицы погрешностей групповых констант; поэтому в приложениях многогрупповых констант может быть целесообразно только эти две матрицы и хранить.

Другим примером эффективного использования Файла 30 является случай, когда конечной целью является оценка погрешностей некоторого набора функционалов (дозы, радиационных повреждений, коэффициента воспроизводства и т.д.), образующих вектор-столбец y . Типичное число подобных величин также обычно порядка 50. Ковариационная матрица $D(y)$ интегральных функционалов связана (опять же, в рамках приближения первого порядка) с ковариационной матрицей групповых констант $D(g)$, элементы которой определены соотношением (30.7), простой формулой:

$$D(y) = S D(g) S^T \quad (30.8)$$

где S – прямоугольная 50×10000 матрица чувствительностей функционалов y к групповым константам g . Эта матрица может быть получена в результате стандартных нейтронных расчетов. Если мы введем прямоугольную 10000× 50 матрицу R с элементами g'_{mi} , то формулу (30.7) сможем переписать в матричной форме:

$$D(g) = R D(\alpha) R^T$$

Тогда формула (30.8) приобретает вид:

$$D(y) = S [R D(\alpha) R^T] S^T = T D(\alpha) T^T \quad (30.9)$$

Матричное произведение $T = S R$, содержащее прямые чувствительности рассчитываемых функционалов к параметрам ядерной модели весьма компактно, оно имеет почти тот же объем, что и ковариационная матрица параметров $D(\alpha)$. Заметим. Что при вычислении матричных произведений в (30.9) реально никогда не требуется вычислять все 10000 × 10000 элементов ковариационной матрицы групповых констант.

Оценщик может решить часть ковариационных данных описать Файлом 33, а другую часть – Файлом 30. Это не порождает никаких принципиальных проблем: ковариации $D_{33}(y)$, рассчитанные на основе данных Файла 33 просто складываются с ковариациями $D_{30}(y)$, рассчитанными на основе данных Файла 30, поскольку ковариации данных, обусловленных параметрами, и ковариации данных, описываемые другими ковариационными файлами, по определению независимы.

31. FILE 31. КОВАРИАЦИИ СРЕДНЕГО ЧИСЛА НЕЙТРОНОВ ДЕЛЕНИЯ

31.1. Общее описание

Для делящихся материалов Файл 31 содержит ковариации среднего числа нейтронов деления; само это число приводится в Файле 1. В секции MT=452 содержится $\bar{\nu}$, полное среднее число нейтронов деления; в секциях MT=455 и MT=456 содержатся, соответственно, данные о числе мгновенных и о числе запаздывающих нейтронов деления. Среднее число нейтронов деления является функцией энергии нейтронов, вызывающих деление. Эта энергетическая зависимость может быть описана либо таблицей, либо коэффициентами разложения в ряд по энергии нелетающего нейтрона. Как бы то ни было, функция энергии оказывается однозначно определенной и представление числа вторичных нейтронов деления в этом смысле эквивалентно представлению данных в Файле 3. Поэтому проблемы представления ковариаций среднего числа нейтронов деления совершенно таковы же, как и проблемы представления ковариаций сечений в Файле 33.

В подбиблиотеке распадных данных средняя множественность нейтронов деления представлена разложением по энергии с одним лишь нулевым членом этого разложения. Тем самым энергетическая зависимость выпадает из рассмотрения.

31.2. Форматы

Форматы для множественности нейтронов вынужденного деления в Файле 31, MT=452, 455 и 456 полностью аналогичны форматам, принятым в Файле 33 и описанным в Секции 33.2. Для спонтанного деления в Файле 31 в секциях MT=452, 455 и 456 используется несколько иной, модифицированный, формат поскольку в этом случае ни $\bar{\nu}$, ни его компоненты не обладают энергетической зависимостью. Поэтому для спонтанного деления в под-подсекциях типа NC и NI не содержится никаких энергетических переменных.

Под-подсекция типа NC для спонтанного деления при MT=452, 455 или 456 имеет следующую структуру (используются обозначения, определенные в Секции 33.2).

Для LTY=0:

```
[MAT,31, MT/ 0.0, 0.0, 0, LTY, 0, 0] CONT (LTY=0)
[MAT,31, MT/ 0.0, 0.0, 0, 0, 2*NCI, NCI/ {CI,XMTI}] LIST
```

Для LTY=1, 2, или 3:

```
[MAT,31, MT/ 0.0, 0.0, 0, LTY, 0, 0] CONT
[MAT,31, MT/ 0.0, 0.0, MATS, MTS, 4, 1/
----- (XMFS,XLFSS) (0.0, Weight) ] LIST
```

Под-под-секции типа NI в случае спонтанного деления могут иметь LB=0 или LB=1. В любом случае из структура такова:

```
[MAT,31, MT/ 0.0, 0.0, 0, LB, 2, 1/(0.0,F)] LIST
```

Здесь F – абсолютная или относительная ковариация в зависимости от значения LB (см. Секцию 33.2 для разъяснений)

31.3. Процедуры

Все процедуры, описанные в Секции 33.3, касающиеся упорядочивания и полноты секций Файла 33, приложимы и к секциям Файла 31 $\bar{\nu}$ (MAT,31,452), $\bar{\nu}_p$ (MAT,31,455) and $\bar{\nu}_d$

(MAT,31,456). Заметим. Что в Файле 1 \bar{v} (MT=452), \bar{v}_p (MT=455) and \bar{v}_d (MT=456) удовлетворяют условию $\bar{v} = \bar{v}_p + \bar{v}_d$. Следовательно, если одна из этих величин определяется через две других, то допустимо использовать подсекцию NC-типа с признаком LTY=0, указывающим на то, что рассматривается «излишнее, выведенное сечение». См. Секцию 33.2.1, где разъясняется соответствующий формат.

Если в Файле 31 есть секция с MT=456, то должна быть и секция с MT=452.

Если в Файле 31 есть секции с MT=452, 455 или 456 и описывается вынужденное, а не спонтанное деление, то в Файле 33 должна быть секция для ковариаций сечения деления: (MAT,33,18).

Заметим:

1. Поскольку \bar{v}_d всегда много меньше \bar{v}_p , она никогда не определяется по разности $\bar{v} - \bar{v}_p$.
2. Если энергетическая зависимость \bar{v} в Файле 1, MT=452, определяется полиномиальным разложением, в Файле 31 эта зависимость представляется в табличной, а не в полиномиальной форме.
3. Форматы ENDF не предусматривают возможность описания ковариаций величин, представленных в различных подбиблиотеках; исключением является Файл 30. Поэтому невозможно, например, описать ковариации между \bar{v} спонтанного деления ^{252}Cf и \bar{v} для основного топливного материала используя под-подбиблиотеки типа NC с LTY=1,2 или 3.
4. В форматах ENDF не предусмотрена возможность представления погрешностей постоянной распада той или иной группы предшественников в секции MT=455.

32. ФАЙЛ 32. КОВАРИАЦИИ РЕЗОНАНСНЫХ ПАРАМЕТРОВ

32.1. Общее описание

В Файле 32 в секции MT=151 содержатся данные о дисперсиях и ковариациях резонансных параметров, приведенных в секции MT=151 Файла 2. Резонансные параметры, используемые в соответствующих резонансных формулах, позволяют представить сложные энергетические зависимости иссечений в гораздо более компактной форме, чем это можно сделать используя только Файл 3. Точно так же Файл 32 описывая ковариации между отдельными резонансными параметрами, позволяет описать быстрые изменения ковариации в энергетической зависимости парциальных сечений. Ковариационные данные для рассматриваемых сечений включают вклады и от ковариаций, представленных в Файле 32, и от ковариаций, представленных в Файле 33, подобно тому, как сами сечения включают вклады от файлов 2 и 3.

В резонансной области ковариации парциальных сечений часто характеризуются

а) «длинными» компонентами, сказывающимися на ковариациях многих резонансов;

б) «короткими» компонентами, сказывающимися на ковариациях различных парциальных сечений в окрестности рассматриваемого резонанса.

«Длинные» компоненты, как правило, описываются в Файле 33, тогда как «короткие» - в Файле 32.

Если рассматриваемый материал входит в состав среды в низкой концентрации, т.е. разбавлен другими материалами, и его сечения усредняются по энергетическим интервалам, включающим много резонансов, «короткие» компоненты погрешностей взаимно компенсируются и становятся несущественными и ковариации погрешностей усредненных сечений описываются «длинными» компонентами, представленными в Файле 33. Таким образом, в области неразрешенных резонансов ковариации сечений полностью определяются Файлом 33 за исключением случаев, когда в этой области существенен учет резонансной самоэкранировки сечений. Для многих нуклидов такая же ситуация имеет место и в высокоэнергетической части области разрешенных резонансов.

В области разрешенных резонансов учет ковариаций факторов резонансной самоэкранировки существенен для оценки погрешности в Доплер-эффекте. Данные Файла 32 требуются также и при расчете ковариаций групповых констант в случаях, когда ширина группы сравнима с шириной резонанса или группа содержит небольшое число резонансов. Поскольку подобные ситуации имеют место только в низкоэнергетической части области разрешенных резонансов, в Файл 32 не обязательно включать ковариации для всего набора резонансов, представленных в Файле 2. Не учтенные в Файле 32 ковариации учитываются Файлом 33.

Форматы Файла 32 в ENDF-6 имеют структуру, совместимую со структурой форматов ENDF-V, но введены новые возможности, позволяющие описывать ковариации параметров различных резонансов. Введена также возможность описать ковариации между резонансными энергиями и ширинами резонансов. Если в ENDF-V Файл 32 был ограничен формулами Брейт-Вигнера ($LRF=1$ или $=2$), в ENDF-6

ковариации могут быть заданы и для параметров формулы Райха-Мура (LRF=3) или Адлер-Адлера (LRU=4).

Для области неразрешенных резонансов в представлении ковариаций по-прежнему сохраняется ряд ограничений. Сохраняется то правило, что ковариации сечений в резонансной области представляют собой комбинацию вкладов от Файлов 32 и 33 и относительная ковариация сечений, представленная в Файле 33, представляет собой ковариацию сечения, полученного сложением вкладов Файлов 2 и 3 – если эта опция определена в Файле 2 (для LRF=4 имеет место исключение). Поскольку форматы ENDF-6 не требуют задания непрерывной последовательности значений полного углового момента J , представление ковариаций резонансных спинов в ENDF-6 не предусматривается.

Заметим, что форматы Файла 32 сохраняют много ограничений. Например, не предусмотрено представление ковариаций между резонансными параметрами различных материалов или между резонансными параметрами различных изотопов в оценке для многоизотопного элемента. Поскольку в случае, если в файле рассматриваются ковариации между многими резонансами, файл становится чрезмерно громоздким, оценщикам рекомендуется вводить этот файл только для материалов, имеющих достаточно большое практическое значение. Стратегия описания ковариаций в Файле 32 такова же, что и в Файле 33 для плавных энергетических зависимостей сечений: вариация каждого резонансного параметра и ковариация между двумя такими параметрами представляется в виде суммы нескольких компонент. Некоторые из этих компонент жестко связаны с резонансной энергией и типом параметра, и помечаются наименованиями этих величин; другие описывают «длинные» ковариации между параметрами определенного типа для резонансов данного изотопа. Последние помечаются указателями энергетических интервалов и все лежащие в пределах данного интервала резонансы, указанные в Файле 2, характеризуются одной и той же составляющей погрешности рассматриваемого типа. Приписывание параметрам данного типа для всех резонансов, лежащих в определенном энергетическом интервале, одной и той же погрешности не оправдано лишь в определенных пределах. Ограничения связаны с тем, что «длинные» ковариации выходов определенной реакции, вообще говоря, не пропорциональны ковариациям соответствующих ширин. В то же время, радиационные, например, ширины зачастую известны только для нескольких низколежащих резонансов и резонансам, лежащим при высоких энергиях, приписываются средние радиационные ширины. Это побуждает использовать форматы, подобные таковым в Файле 33 с тем лишь исключением, что относительная погрешность в этом случае относится к величинам указанного параметра (в рассматриваемом примере – к Γ_γ) для всех резонансов, лежащих в пределах рассматриваемого интервала. Такой подход позволяет установить «длинные» корреляции во всем энергетическом интервале, в котором используется описание сечений в терминах параметров разрешенных резонансов.

Определения величин, общих с используемыми в Файле 2, даны в описании Файла 2.

32.2. Форматы

Форматы секции MT=151 Файла 32 совпадают с таковыми для секции MT=151 Файла 2 с теми лишь ограничениями, что для разрешенных резонансов (LRU=1) могут использоваться резонансные формулы, определяемые LRF=1,2,3 или 4, а для неразрешенных резонансов (LRU=2) – только LRF=1.

Общая структура Файла 32 такова:

```
[MAT,32,151/ ZA, AWR, 0, 0, NIS, 0] HEAD
[MAT,32,151/ ZAI, ABN, 0, 0, LFW, NER] CONT (isotope)
[MAT,32,151/ EL, EH, LRU, LRF, NRO, NAPS] CONT (range)
<подсекция для первого энергетического интервала первого изотопа>
[MAT,32,151/ EL, EH, LRU, LRF, NRO, NAPS] CONT (range)
<подсекция для второго энергетического интервала первого изотопа>
-----
[MAT,32,151/ EL, EH, LRU, LRF, NRO, NAPS] CONT (range)
<подсекция для последнего энергетического интервала первого изотопа>
-----
[MAT,32,151/ ZAI, ABN, 0, 0, LFW, NER] CONT (isotope)
[MAT,32,151/ EL, EH, LRU, LRF, NRO, NAPS] CONT (range)
<подсекция для первого энергетического интервала последнего изотопа>
-----
[MAT,32,151/ EL, EH, LRU, LRF, NRO, NAPS] CONT (range)
<подсекция для последнего энергетического интервала последнего изотопа>
-----
[MAT,32, 0/ 0.0, 0.0, 0, 0, 0, 0] SEND
[MAT, 0, 0/ 0.0, 0.0, 0, 0, 0, 0] FEND
```

Данные приводятся по всем энергетическим интервалам для данного изотопа, затем по всем энергетическим интервалам для следующего изотопа. Данные для каждого изотопа начинаются с записи CONT (isotope); данные для каждого энергетического интервала – с записи CONT (range). Число изотопов, рассматриваемых в Файле 32, может быть меньше, чем число изотопов, рассматриваемых в Файле 2.

Если запись CONT (range), предшествующая подсекции, содержит NRO≠0 (что указывает на то, что в Файле 2 приводится энергетическая зависимость радиуса рассеяния), то первый сегмент подсекции будет иметь вид:

```
[MAT,32,151/ 0.0, 0.0, 0, 0, 0, NI] CONT
```

< NI под-подсекций, содержащих энерго-зависимые ковариации радиуса рассеяния в формате, определенном в Секции 33.2 >

```
[MAT,32,151/ SPI, AP, 0, LCOMP, NLS, 0] CONT.
```

Если признак совместимости LCOMP=0, NLS представляет собой число значений орбитального момента L, для которых перечень данных о резонансных параметрах дается в форме, совместимой с использовавшейся в ENDF-V (см. Секцию 32.2.1).

Если LCOMP=1, то NLS=0 и форматы подсекции описываются в Секции (32.2.2). Если LCOMP=2, ковариационная матрица представляется в компактной форме, описываемой в Секциях 32.3 и 32.4.

32.2.1 Совместимый формат подсекции разрешенных резонансов.

Этот формат отличается от используемого в ENDF-V только тем. Что ковариации резонансных спинов полагаются равными нулю. Он применим только в области разрешенных резонансов (LRU=1) при использовании формул Брейта-Вигнера (LRF=1 или 2). Определены следующие ковариационные характеристики:

DE^2 – дисперсия резонансной энергии в эВ^2 ;
 DN^2 – дисперсия нейтронной ширины GN в эВ^2 ;
 $DNDG$ – ковариация GN и GG в эВ^2 ;
 DG^2 – дисперсия радиационной ширины GG в эВ^2 ;
 $DNDF$ – ковариация GN и GF в эВ^2 ;
 $DGDF$ – ковариация GG и GF в эВ^2 ;
 DF^2 – дисперсия делительной ширины GF в эВ^2 ;

$DJDN (=0)$ – ковариация спина резонанса J и GN.

$DJDG (=0)$ – ковариация спина резонанса J и GG.

$DJDF (=0)$ – ковариация спина резонанса J и GF

$DJ^2 (=0)$ – дисперсия спина резонанса J.

Полная подсекция при LCOMP=0 имеет вид:

<Если NRO $\neq 0$, контрольная запись и NI под-подсекций с энерго-зависимыми ковариациями радиуса рассеяния>

```
[MAT, 32, 151/ SPI,      AP,      0,  LCOMP,  NLS,      0] CONT (LCOMP=0)
[MAT, 32, 151/AWRI,    0.0,      L,      0, 18*NRS,  NRS/
      ER1,    AJ1,    GT1,    GN1,    GG1,    GF1,
      DE12,  DN12,  DNDG1,  DG12,  DNDF1,  DGDF1,
      DF12,  DJDN1,  DJDG1,  DJDF1,  DJ12,    0.0,
                        (DJDN1, DJDG1, DJDF1=0.0)
```

< 3 записи для каждого из NRS резонансов>] LIST

<аналогичная запись LIST для каждого последующего значения L из NLS возможных>

Заметим, что рассмотренный согласованный формат не позволяет описать ковариации между параметрами разных резонансов даже в случае, если эти резонансы перекрываются.

32.2.2 Общий формат резонансных подсекций.

Вслед за стартовой записью, содержащей спин ядра-мишени и значение LCOMP, в случае, когда LCOMP=1 следующая карта подсекции указывает, что для данного изотопа и энергетического интервала провидится несколько (NSRS) под-подсекций с ковариациями между параметрами данного изотопа и несколько (NLRS) под-подсекций, описывающих «длинные» ковариации между параметрами. Полная структура при LCOMP=1 имеет следующий вид:

<Если NRO ≠ 0, контрольная запись и NI под-подсекций с энерго-зависимыми ковариациями радиуса рассеяния>

```
[MAT,32,151/ SPI, AP, 0, LCOMP, NLS, 0] CONT (LCOMP=1,NLS=0)  
[MAT,32,151/AWRI, 0.0, 0, 0, NSRS, NLR5] CONT  
< NSRS
```

<NSRS под-подсекций, каждая из которых описывает ковариации между определенными параметрами пронумерованного набора резонансов>

<NLR5 под-подсекций, каждая из которых описывает «длинные» ковариации между резонансными параметрами определенного типа в заданном энергетическом интервале>

Формат для под-подсекций типа NSRS.

Этот формат отличается от формата для LCOMP=0 (см. Секцию 32.2.1) тем, что возможно описание ковариаций между параметрами разных резонансов; допустимо описание ковариаций данных при использовании резонансных формул, определяемых LRF=1, 2, 3 и 4; отсутствует упорядочивание по орбитальному моменту L; для каждой под-подсекции определяется число рассматриваемых параметров, главным образом, для того, чтобы избежать табулирования нулевых ковариаций делительных ширин в файлах данных для конструкционных материалов.

Рассматриваемые резонансы должны быть перечислены в Файле 2; но в Файле 32 может рассматриваться лишь часть полного набора резонансов.

В следующих параграфах будут описаны форматы поп-подсекций типа NSRS для различных резонансных формул (разных LRF) для области разрешенных резонансов (LRU=1). Допустимы значения LRF=1, 2, 3 и 4.

LRF=1, 2; LRU=1. Форматы представления ковариаций для этих случаев совпадают. Все резонансы, для которых приводятся ковариации, делятся на блоки. Один и тот же резонанс может быть включен в несколько блоков. Ковариации между параметрами разных резонансов допустимы только если эти резонансы принадлежат одному блоку. Под-подсекция содержит все ковариации для рассматриваемого в ней блока. В пределах каждого такого блока содержатся те резонансы, ковариации параметров которых включены в данную поп-подсекцию. Для ковариационной матрицы резонансных параметров всего блока резонансов принято представление верхней треугольной матрицы. Для каждого блока определено число параметров, MPAR, для каждого резонанса, включенного в блок. Поэтому если, например, рассматривается неделимый нуклид, то делительная ширина не рассматривается и это сокращает объем ковариационной матрицы. Форма под-подсекции типа NSRS для LRF=1, 2 приводится ниже

```
[MAT,32,151/ 0.0, 0.0, MPAR, 0, NVS+6*NRB, .NRB/
```

Далее следуют параметры каждого резонанса, для которых приводятся дисперсии (вариации) и ковариации:

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

...

...

```
ERNRB, AJNRB, GTNRB, GNNRB, GNNRB, GGNRB, GFNRB,
```

Вслед за тем – дисперсии и ковариации всех перечисленных параметров:

```
V11, V12, . . . . V1,MPAR*NRB,
```

```
V22, . . . . ., V2,MPAR*NRB,
```

V₃₃,.....

.....
V_{MPAR*NRB, MPAR*NRB}, 0.0, 0.0] LIST

Подчеркнем, что в записи приводятся сначала все резонансные параметры и лишь затем члены ковариационной матрицы.

MPAR – число параметров, характеризующих один резонанс данного блока (в порядке ER, GN, GG, GF, GX, порядковые номера 1, 2, 3, 4 и 5).

NVS – число элементов ковариационной матрицы, приводимых для рассматриваемого блока

$NVS=[NRB*MPAR*(NRB*MPAR+1)]/2$.

NRB– число резонансов, рассматриваемых в данном блоке

ER_k–энергия k-го (в данном блоке) резонанса,

AJ_k – спин k-го резонанса (вещественное число),

GT_k – полная ширина k-го резонанса,

GN_k – нейтронная ширина k-го резонанса,

GG_k – делительная ширина k-го резонанса,

V_{mn} – дисперсия или “вариация” (при m=n) или ковариация (при m≠n) m-го (столбец m) и n-го параметра (строка n); n≥m. Если обозначить через j ≤MPAR номер параметра для k-го резонанса в блоке, то m=j+(k-1)*MPAR. (Заметим, что, скажем, j=4 означает делительную ширину – см. выше описание нумерации параметров после определения величины MPAR).

LRF=3, LRU=1. Представление ковариаций параметров, входящих в резонансную формулу Райха-Мура совершенно аналогично.

Перечень параметров, для которых приводятся ковариации, в этом случае совпадает с их перечнем в Файле 2:

ER, AJ, GN, GG, GFA, GFB.

Интерпретация индексов элементов ковариационной матрицы для данного блока резонансов соответствует порядковой нумерации величин ER, GN, GG, GFA, GFB, так что максимально возможное значение MPAR при LRF=3 равно 5.

LRF=4, LRU=1. Формула Адлер-Адлера кроме резонансных параметров включает и фоновую константу. Погрешность этой фоновой константы учитывается неявно – так же, как вклад плавной подложки в файле 3. Это значит, что в энергетическом интервале EL-EU для LRF=4 относительная погрешность любой величины, рассчитанная по данным Файла 33, относится к сумме сечения, представленного в Файле 3 и вклада от Адлеровской фоновой константы. Это представление погрешности требует особого внимания если формализм Адлер-Адлера используется в оценке для многоизотопного материала. Существенным предположением для формализма Адлеров является то, что эта ковариация может быть детализирована для тех очень сильных резонансов, вклад которых определяет фоновую константу. Это предполагается, если параметр LI=7. При LRF=4 под-подсекция типа NSRS имеет следующий вид (по возможности сохраняющий прежние обозначения):

[MAT, 32, 151/ 0.0, 0.0, MPAR, 0, NVS+6*NRB, NRB/
DET₁, DWT₁, GRT₁, GIT₁, DEF₁, DWF₁,

Далее следуют параметры каждого резонанса, для которых приводятся дисперсии (вариации) и ковариации:

```
GRF1, GIF1, DEC1, DWC1, GRC1, GIC1,
-----
DETNRB, DWTNRB, GRTNRB, GITNRB, DEFNRB, DWFNRB,
GRFNRB, GIFNRB, DECNRB, DWCNRB, GRCNRB, GICNRB,
```

Вслед за тем – дисперсии и ковариации всех перечисленных параметров:

```
V11, V12, -----, V1,MPAR*NRB, V22,
-----, V2,MPAR*NRB, V33,
-----, VMPAR*NRB,MPAR*NB, 0.0, 0.0] LIST
```

Адлер-Адлеровские параметры отобранных резонансов даны в том же избыточном стиле, что и в Секции 2.2.1.3. Максимальное число параметров MPAR при LRF=4 равно 8 и порядок приведения элементов ковариационной матрицы для данного резонанса следующий:

$\mu = \text{DET} = \text{DEF} = \text{DEC}, \text{DWT} = \text{DWF} = \text{DWD} = \nu,$
 $\text{GRT}, \text{GIT}, \text{GRF}, \text{GIF}, \text{GRC}, \text{GIC}$

Формат под-подсекции «длинных» ковариаций (LRU=1). Здесь описывается формат представления «длинных» (по энергии) ковариаций нескольких параметров данного типа.

Стратегия представления данных здесь та же, что в Файле 33 но относится только к определенному параметру в равной мере для всех резонансов данного изотопа в данном энергетическом интервале. В каждой под-подсекции идентифицируется определенный параметр IDT (представляющий собой Γ_n или Γ_γ , и т.д.), определен энергетический интервал и характер ковариаций (с помощью параметра LB).

Допустимые значения LB описываются ниже. Заметим, что одно из значений LB в Файле 33 не определено, а значения LB=3 и 4 не используются в Файле 32, поскольку использование LB=5, как правило, гораздо удобнее.

Через $\text{COV}[\Gamma_\alpha(i), \Gamma_\alpha(j)]$ обозначается ковариация параметров Γ_α двух разных резонансов – i-го и j-го – одного и того же изотопа.

LB=-1 Относительные дисперсии (вариации) параметров разных резонансов не коррелируют между собой, но имеют одно и то же значение в пределах каждого из NE-1 энергетических интервалов, границы которых определены значениями $E_k, k=1, 2, \dots, \text{NE}$:

$$\text{Cov}[\Gamma_\alpha(i)\Gamma_\alpha(j)] = \delta_{ij} \sum_{k=1}^{\text{NE}-1} S_i^k F_{\alpha k}^{(-1)} \Gamma_\alpha^2(i)$$

Здесь $S_i^k \equiv 1$ если $E_k \leq E_i \leq E_{k+1}$;

$S_i^k \equiv 0$ если $E_i < E_k, E_i > E_{k+1}$

LB=0 Абсолютные ковариации коррелируют только в пределах определенных энергетических интервалов:

$$\text{Cov}[\Gamma_\alpha(i)\Gamma_\alpha(j)] = \sum_{k=1}^{\text{NE}-1} P_{j,k}^{i,k} F_{\alpha k}^{(0)}$$

где безразмерный оператор P определен через операторы S:

$$P_{j,m,n,\dots}^{i,k,l,\dots} \equiv S_i^k S_i^l \dots S_j^m S_j^n \dots ,$$

LB=1 Относительные ковариации коррелируют только в пределах определенных энергетических интервалов:

$$Cov[\Gamma_\alpha(i)\Gamma_\alpha(j)] = \sum_{k=1}^{NE-1} P_{j,k}^{i,k} F_{\alpha k}^{(1)} \Gamma_\alpha(i)\Gamma_\alpha(j)$$

LB=2 Относительные ковариации коррелируют в пределах энергетических интервалов разной ширины:

$$Cov[\Gamma_\alpha(i)\Gamma_\alpha(j)] = \sum_{k,k'=1}^{NE1} P_{j,k'}^{i,k} F_{\alpha k}^{(2)} F_{\alpha k'}^{(2)} \Gamma_\alpha(i)\Gamma_\alpha(j)$$

LB=5 Относительные ковариации описываются верхней треугольной матрицей:

$$Cov[\Gamma_\alpha(i)\Gamma_\alpha(j)] = \sum_{k,k'=1} P_{j,k'}^{i,k} F_{\alpha k k'}^{(5)} \Gamma_\alpha(i)\Gamma_\alpha(j)$$

Заметим, что величины $F^{(-1)}$, $F^{(1)}$, and $F^{(5)}$ имеют смысл относительных ковариаций, величины $F^{(0)}$ представляют собой абсолютные ковариации, а величины $F^{(2)}$ – стандартные отклонения.

Формат под-подсекции при LB=-1, 0, 1 или 2 таков:

[MAT, 32, 151/ 0.0, 0.0, IDP, LB, 2*NE, NE/{E_k, F^(LB)}] LIST

При LB=5 используется следующий формат

[MAT, 32, 151/ 0.0, 0.0, IDP, LB, NT, NE/{E_k, {F_{kk}⁽⁵⁾}]} LIST(LB=5)

Здесь:

LB - признак, указывающий на способ представления ковариаций;

NE - число энергетических точек в таблице параметров в данной подсекции;

NT =NE*(NE+1)/2;

IDP - идентифицирующий номер типа рассматриваемых резонансных параметров. Смысл этого номера зависит от используемой резонансной формулы так, как указано в таблице, приводимой ниже. Порядок следования параметров в этой таблице таков же, как и в под-подсекциях типа NSRS, в которой определяются ковариации между первыми NPAR параметрами из всех, определенных для формулы LRF.

IDP	LRF			
	1	2	3	4
1	E_r	E_r	E_r	$E_r = \mu$
2	Γ_n	Γ_n	Γ_n	v
3	Γ_γ	Γ_γ	Γ_γ	GRT
4	Γ_f	Γ_f	Γ_f	GIT
5	Γ_x	Γ_x	Γ_x	GRF
6				GIF
7				GRC
8				GIC

При $LB=0, \pm 1, 2$, и $LB=5$ значения энергий в таблицах монотонно возрастают и покрывают весь энергетический интервал от E_L до E_H . При $LB=5$ величины F приводятся в верхнем треугольном представлении симметрической матрицы, т.е. по строкам: $F_{11}, F_{12}, \dots, F_{1,NE-1}; F_{22}, F_{2,NE-1}; F_{NE-1,NE-1}$.

32.2.3 Формат подсекции ковариаций в области неразрешенных резонансов (LRU=2)

В области неразрешенных резонансов допустимо упрощенное описание ковариаций. В частности, не предусматривается описание энергетической зависимости относительных ковариаций средних резонансных параметров, несмотря на то, что сами средние резонансные Брейт-Вигнеровские параметры (LRF=2) в Файле 2 могут быть представлены с учетом их энергетической зависимости.

Элементы относительных ковариаций табулируются не так, как это делалось выше. Если оценщик хочет представить относительные ковариации средних резонансных параметров, подсекция для данного изотопа должна иметь следующий вид:

```
[MAT, 32, 151/ SPI, AP, 0, 0, NLS, 0] CONT
[MAT, 32, 151/ AWRI, 0.0, L, 0, 6*NJS, NJS/
D1, AJ1, GNO1, GG1, GF1, GX1,
```

```
-----
DNJS, AJNJS, GNONJS, GGNJS, GFNJS, GXNJS] LIST
```

<для каждого значения L приводится NJS строк в соответствующих записях типа LIST>

```
[MAT, 32, 151/ 0.0, 0.0, MPAR, 0, (NPAR*(NPAR+1))/2, NPAR/
RV11, RV12, -----,
-----, RV1,NPAR, -----, RNNAPR,NPAR] LIST
```

MPAR есть число средних резонансных параметров, для которых приводятся ковариации для данных L и J. Ковариации приводятся в порядке D, GNO, GG, GF, GX, так что максимальное значение MPAR равно 5. Т.е. сначала табулируются ковариации для первого из MPAR параметров для всех комбинаций L и J. Если MPAR=4 и при этом в записи CONT (isotope) LFW=0 то 4 набора ковариаций для всех возможных L и J приводятся для D, GNO, GG, и для GX.

$NPAP = MPAR * (\text{сумма возможных значений NJS для каждого значения L})$.

Признак LSSF определен в Секции 2.3.1¹.

RV_{ij} – относительная ковариация i -го и j -го средних резонансных параметров для рассматриваемого изотопа. Последняя запись типа LIST содержит верхнюю треугольную часть симметрической ковариационной матрицы по строкам.

32.3. Общее описание компактной ковариационной матрицы.

Этот формат придуман для того, чтобы представить ковариационную матрицу резонансных параметров, определенную в результате оценки, в компактной, корректной и приемлемо точной форме в тех случаях, когда использование полного формата представления этой матрицы в формате LCOMP=1 представляется нецелесообразным. Коэффициенты корреляции (принимающие значения от -1 до 1) при компактной записи могут отличаться от точных значений не более, чем на 0.005.

Обозначим ковариацию параметров с номерами i и j через V_{ij} , погрешность параметра номер i – через D_i , а коэффициент корреляции через C_{ij} :

$$D_i^2 = V_{ii} \qquad V_{ij} = D_i C_{ij} D_j$$

C_{ij} варьируются в пределах от -1 до +1; D_i всегда положительны. Диагональные элементы C_{ij} при $i=j$ в точности равны 1.0 и не требуют явного определения. Компактизация недиагональных коэффициентов корреляции осуществляется таким образом:

1. Все C_{ij} имеющие значения от -0.02 до +0.02, опускаются (полагаются равными нулю).
2. Оставшиеся коэффициенты умножаются на 100.
3. Заменяем все положительные коэффициенты корреляции, большие целого числа K , но меньшие $K+1$, на K ;
4. Заменяем все отрицательные коэффициенты корреляции, меньшие целого числа $-K$, но большие чем $-(K+1)$, на $-K$;

Обратное преобразование осуществляется таким образом, чтобы целые числа преобразовывались в точки, лежащие в середине интервалов. Например, положительное целое 87, соответствующее коэффициентам корреляции от 0.87 до 0.88, при обратном преобразовании становится равным 0.875; отрицательное целое -12, соответствующее коэффициентам корреляции от -0.12 до -0.13, при обратном преобразовании станет равным -0.125.

Для представления преобразованных к целым числам коэффициентов корреляции используются записи двух типов. Запись CONT определяет NNN (число параметров) и NM (число последующих однострочных записей типа INTG)

```
[MAT, 32, 151 / 0.0, 0.0, 0, NNN, NM, NM] CONT
```

```
[MAT, MF, MT / II, JJ, KIJ ] INTG
```

```
[MAT, MF, MT / II, JJ, KIJ ] INTG
```

< и так далее пока не будут записаны (или считаны) все NM записей типа INTG>

Информация, записанная в записях INTG, может быть описана следующим образом. Пусть i и j – номера двух параметров из описанного выше списка и пусть $i > j$. В Файле 32 приводятся все не нулевые целые K_{ij} . Нулевые K_{ij} отображаются нулями

¹ Напомним: при LSSF=0 в Файле 3 приводится только подложка под резонансные сечения, определенные в Файле 2; при LSSF=1, в Файле 3 приводятся средние сечения полностью, а Файл 2 используется только для оценки факторов самоэкранировки.

или пробелами и только в тех записях, которые содержат не нулевые величины. Каждая строка (запись) начинается со спецификации ее положения (т.е. определяются i и j , причем $i > j$). Следующие значения K , приводимые в той же записи-строке, соответствуют элементам $(i, j+1)$, $(i, j+2)$, ... $(i, j+17)$ (если $j+17 < i$). Если места для записи всех элементов на строке не хватило, они переносятся на следующую запись-строку (которая также начинается с ненулевого элемента K).

Для кодировки и декодировки коэффициентов корреляции может быть использована следующая FORTRAN- процедура.

```

      DIMENSION K(18), CORR(n,n)
C     Note that n must be greater than or equal to NNN
      READ (LIB,10) NNN, NM, NX, MAT, MF, MT, NS
10  FORMAT (33X, 3I11, I4, I2, I3, I5)
C     The CONT record: NNN is dimension of CORR(NNN,NNN), and
C           NM is the number of lines to follow in the file
      DO I=1,NNN
        DO J=1,I-1
          CORR(J,I) = 0.0

          END DO
          CORR(I,I) = 1.0
        END DO
        DO M=1,NM
          READ (LIB,20) I, J, (K(N),N=1,18), MAT, MF, MT, NS
20  FORMAT (I5, I5, 1X, 18I3, 1X, I4, I2, I3, I5)
C     This is the INTG record
          JP = J - 1
          DO N=1,18
            JP = JP + 1
            IF (JP.GE.I) GO TO 30
            IF (K(N).NE.0) THEN
              IF (K(N).GT.0) THEN
                CORR(JP,I) = (K(N)+0.5)/100.0
              ELSE
                CORR(JP,I) = - (-K(N)+0.5)/100.0
              END IF
            END IF
          END DO
        END DO
30  CONTINUE
      END DO

```

Заметим, что этой процедурой определяется только верхняя треугольная часть матрицы корреляций [CORR(J,I) для $J < I$]. Нижняя часть может быть найдена из условия симметрии [CORR(I,J) = CORR(J,I)].

32.4 Форматы для представления компактизированной ковариационной матрицы

В Файле 32, MT=151 компактное представление ковариаций используется при LCOMP=2 (с LRF=1, 2, 3 и 7) в области разрешенных резонансов (LRU=1). Погрешности приводятся в формате совершенно аналогичном формату представления самих параметров в Файле 2, MT=151. Коэффициенты корреляции даются отдельно.

Общая структура Файла 32 такова же, как описанная в Секции 32.2

```
[MAT, 32, 151 / ZA, AWR, 0, 0, NIS, 0]HEAD
[MAT, 32, 151 / ZAI, AWR, 0, LFW, NER, 0]CONT (isotope)
[MAT, 32, 151 / EL, EH, LRU, LRF, NIS, NAPS]CONT (range)
<подсекция для первого энергетического интервала первого изотопа>
[MAT, 32, 151 / EL, EH, LRU, LRF, NIS, NAPS]CONT (range)
<подсекция для второго энергетического интервала первого изотопа >
-----
-----
[MAT, 32, 151 / EL, EH, LRU, LRF, NIS, NAPS]CONT (range)
<подсекция для последнего энергетического интервала первого изотопа >
-----
-----
[MAT, 32, 151 / ZAI, AWR, 0, LFW, NER, 0]CONT (isotope)
[MAT, 32, 151 / EL, EH, LRU, LRF, NIS, NAPS]CONT (range)
<подсекция для первого энергетического интервала последнего изотопа >
-----
-----
[MAT, 32, 151 / EL, EH, LRU, LRF, NIS, NAPS]CONT (range)
<подсекция для последнего энергетического интервала последнего изотопа >
[MAT, 32, 0 / 0.0, 0.0, 0, 0, 0, 0]SEND
[MAT, 0, 0 / 0.0, 0.0, 0, 0, 0, 0]FEND
```

Форматы подсекций зависят от значения LRF. Они обсуждаются ниже в Секции 32.4.1.

32.4.1 Форматы представления компактизированной ковариационной матрицы в подсекциях для определенного энергетического интервала и изотопа.

В описываемых ниже форматах используются определенные в Секции 2. Погрешности обозначаются так же, как параметры, но с наименованиями, начинающимися с “D”. В остальном обозначения сохранены прежними. Например, ER означает энергию резонанса в лабораторной системе координат в эВ. Следовательно, DER представляет собой погрешность (корень квадратный из вариации) резонансной энергии в тех же единицах, что и ER.

Параметры, не являющиеся переменными (т.е. те, значения которых не определяются в процессе оценки), не характеризуются погрешностями. Например, спин резонанса, AJ, не сопрягается ни с какой погрешностью DAJ. В Файле 32 на месте DAJ проставляется 0.0 (при LRF=1,2,3).

При LRF=1,2 избыточная величина GT (равная GN + GG + GF) не характеризуется явно представленной погрешностью DGT. При нужде DGT может быть рассчитано через DGN, DGG, DGF и коэффициенты корреляции между ними.

В процессе оценки не все параметры определяются на основе исходных данных, имеющих статистическую природу. Например, если данные по сечению захвата отсутствуют, оценщик принимает для всех радиационных ширин одну и ту же величину. Соответствующая погрешность в Файле 32 принимается равной -1.0, что служит указанием на то, что погрешность данного параметра неизвестна. Корректная процедура оценки влияния неточности принятых значений подобных параметров на конечный результат оценки ковариаций представляет собой нерешенную проблему; ее обсуждение выходит за рамки настоящего документа.

Чтобы представить корреляционную матрицу возможно более компактно, резонансные параметры (точнее, те из них, что были определены в процессе оценки) должны быть пронумерованы. За исходную принимается нумерация, которая соответствует порядку представления этих параметров в Файле 2. При LRF=1,2,3 не определяемая в процессе оценки величина AJ, включенная в число параметров, не учитывается в нумерации параметров, для которых приводятся коэффициенты корреляции. То же относится и к избыточной величине GT (при LRF=1 или 2). Параметры, значения которых приводятся, но погрешности которых неизвестны (как отмечалось в предыдущем абзаце) включаются в перечень параметров, для которых приводятся коэффициенты корреляции.

Для неделимых материалов делительные ширины в нумерацию параметров, для которых даны коэффициенты корреляции, не включаются. При использовании LRF=3 в тех случаях, когда оценщик определил только одну из двух возможных в этом представлении делительных ширин, вторая делительная ширина не включается в число параметров, для которых приводятся корреляции.

Дадим определение ранее не встречавшейся величине NRSA – это полное число резонансов с любыми значениями L.

32.4.1.2 Одноуровневая (SLBW) и многоуровневая (MLBW) формулы Брейта-Вигнера (LRU=1, LRF=1 or 2).

Подсекция (в предположении, что NRO=0) имеет следующую структуру:

```
[MAT, 32, 151 / SPI, AP, 0, LCOMP, NLSA, 0] CONT
[MAT, 32, 151 /AWI, QX, 0, 0, 12*NRSA, NRS /
    ER1, AJ1, GT1, GN1, GG1, GF1,
    DER1, 0.0, 0.0, DGN1, DGG1, DGF1,
    ER2, AJ2, GT2, GN2, GG2, GF2,
    DER2, 0.0, 0.0, DGN2, DGG2, DGF2,
    -----
    ERNRS, AJNRS, GTNRS, GNNRS, GGNRS, GFNRS
    DERNRS, 0.0, 0.0, DGNNRS, DGGNRS, DGFNRS ] LIST
[MAT, 32, 151 / 0.0, 0.0, 0, NNN, NM, 0 ] CONT
[MAT, MF, MT / II, JJ, KIJ ] INTG
[MAT, MF, MT / II, JJ, KIJ ] INTG
```

< Записи типа INTG продолжают до тех пор пока все NM таких записей не будут записаны (или считаны) >

Заметим, что NNN есть полное число отдельных резонансных параметров, рассматриваемых здесь, не считая, конечно, AJ и GT. Для делящихся нуклидов $NNN = NRS * 4$; для неделимых $NNN = NRS*3$.

32.4.1.3 Ограниченная формула Райха-Мура² (LRU=1, LRF=7)

Подсекция имеет следующую структуру:

```
[MAT, 32, 151/ SPI, AP, LAD, LCOMP, NLS, NLSC] CONT
[MAT, 32, 151/AWI, 0, 0, 0, 12*NRSA, NRSA /
    ER1, AJ1, GN1, GG1, GFA1, GFB1,
    DER1, 0.0, DGN1, DGG1, DGFA1, DGFB1,
    ER2, AJ2, GN2, GG2, GFA2, GFB2,
    DER2, 0.0, DGN2, DGG2, DGFA2, DGFB2,
    -----
    ERNRS, AJNRS, GNNRS, GGNRS, GFANRS, GFBNRS,
    DERNRS, 0.0, DGNNRS, DGGNRS, DGFANRS, DGFBNRS ] LIST
[MAT, 32, 151 / 0.0, 0.0, 0, NNN, NM, 0 ] CONT
[MAT, MF, MT / II, JJ, KIJ ] INTG
[MAT, MF, MT / II, JJ, KIJ ] INTG
```

< Записи типа INTG продолжают до тех пор пока все NM таких записей не будут записаны (или считаны) >

Заметим, что NNN есть полное число рассматриваемых резонансных параметров (не считая, конечно, AJ). Для неделимых нуклидов $NNN = NRS * 3$; для делящихся $NNN = NRS*4$, если в оценке используется только одна делительная ширина, $NNN = NRS*5$, если используются обе.

32.4.1.3 Ограниченная R-матричная формула (LRU=1, LRF=7)

Структура подсекции следующая:

² В английском оригинале параграф 32.4.1.3, как и в этом переводе, повторяется. Формату LRF=7, описанному в Главе 2, соответствует следующий ниже второй вариант этого параграфа.

```
[MAT,32,151/ 0.0, 0.0, 0, LCOMP, NJS, 0 ] CONT
[MAT,32,151/ 0.0, 0.0, NPP, 0, 12*NPP, 2*NPP/
    MA1, MB1, ZA1, ZB1, IA1, IB1,
    Q1, PNT1, SHF1, MT1, PA1, PB1,
    MA2, MB2, ZA2, ZB2, IA2, IB1,
    Q2, PNT2, SHF2, MT2, PA2, PB1,
```

```
-----
    ANPP, MBNPP, ZANPP, ZBNPP, IANPP, IBNPP,
    QNPP, PNTNPP, SHFNPP, MTNPP, PANPP, PBNPP ] LIST
[MAT,32,151/ AJ, PJ, 0, 0, 6*NCH, NCH/
    IPP1, L1, SCH1, BND1, APE1, APT1,
    IPP2, L2, SCH2, BND2, APE2, APT2,
    IPPNCH, LNCH, SCHNCH, BNDNCH, APENCH, APTNCH ] LIST
-----
```

```
[MAT,32,151/0.0, 0.0, 0, NRS, 12*NX, NX/
    R1, GAM1,1, GAM2,1, GAM3,1, GAM4,1, GAM5,1,
    GAM6,1, ..., GAMNCH,1,
    DER1, DGAM1,1, DGAM2,1, DGAM3,1, DGAM4,1, DGAM5,1,
    DGAM6,1, ..., DGAMNCH,1,
    ER2, GAM1,2, GAM2,2, GAM3,2, GAM4,2, GAM5,2,
    GAM6,2, ..., GAMNCH,2,
    DER2, DGAM1,2, DGAM2,2, DGAM3,2, DGAM4,2, DGAM5,2,
    DGAM6,2, ..., DGAMNCH,2,
    -----
    ERNRS, GAM1,NRS, GAM2,NRS, GAM3,NRS, GAM4,NRS, GAM5,NRS,
    GAM6,NRS, ..., GAMNCH,NRS
    DERNRS, DGAM1,NRS, DGAM2,NRS, DGAM3,NRS, DGAM4,NRS, DGAM5,NRS,
    DGAM6,NRS, ..., DGAMNCH,NRS ] LIST
```

<Приведенные выше две записи типа LIST повторяются до тех пор, пока не будут представлены данные для всех NLS состояний Jⁿ>

```
[MAT, MF, MT / II, JJ, KIJ ] INTG
[MAT, MF, MT / II, JJ, KIJ ] INTG
```

< Записи типа INTG повторяются до тех пор, пока их число не достигнет NM >

В случае LRF=7 (в отличие от других формул) число каналов может меняться при переходе от одного спинового состояния к другому. Число резонансных параметров NNN представляет собой, следовательно, сумму по J (от 1 до NJS) произведений (NCH*NRS).

32.5 Процедуры

Как отмечалось выше, использовать Файл 32 имеет смысл тогда, когда существенна резонансная самоэкранировка сечений или когда в группу попадает небольшое число резонансов. Предполагается, что Файл 32 будет использоваться для представления данных о ковариациях гораздо реже, чем Файл 2 используется для представления данных о самих резонансных параметрах. Во всяком случае, отнюдь не во всех оценках, содержащих Файл 2, будет присутствовать и Файл 32.

Соответствие между Файлами 2 и 31. Полнота Файла 32.

1. Энергетический интервал, рассматриваемый в Файле 32, представляет собой часть интервала, рассматриваемого в Файле 2. Таких интервалов, разделенных записями онца энергетического интервала, может быть несколько. Для каждого изотопа приложимы следующие правила:

а) Наименьшие границы энергетических интервалов, использованных в Файлах 2 и 32, должны совпадать.

б) Наиболее высокая граница энергетического интервала, использованная в Файле 31, не должна превышать верхнюю границу интервала, рассматриваемого в Файле 3.

в) Энергетические интервалы, определенные в Файлах 2 и 32, не должны оставлять зазоры между собой. В области разрешенных резонансов ($LRU=1$) интервалы могут перекрываться, если это не противоречит резонансным формулам ($LRF=1$ или 2).

г) Область неразрешенных резонансов ($LRU=2$) может описываться в Файле 32 только если эта область описана и в Файле 2. В этом случае нижние границы рассматриваемых энергетических интервалов должны совпадать.

2. В подсекции $LCOMP=0$ Файла 32, любая выборка резонансов, приведенная в Файле 2 при $LRF=1$ должна приводиться в порядке возрастания энергии. Резонансные энергии в Файлах 32 и 2 должны совпадать с допустимой погрешностью $<10^{-5}$, с тем, чтобы обеспечить гарантированное соответствие резонансов.

3. В подсекции $LCOMP=1$ Файла 32 любая выборка резонансов, приведенных в Файле 2, при условии соответствия принятой резонансной формуле, может быть перечислена и в под-подсекции типа NSRS. Резонансы в каждом блоке должны приводиться в порядке возрастания их энергии, а сами блоки должны быть упорядочены в порядке возрастания низко-энергетической границы рассматриваемого в них интервала. Один и тот же резонанс может фигурировать более, чем в одном блоке. Резонансные энергии в Файле 32 должны согласовываться с резонансными энергиями, указанными в Файле 2 с относительной погрешностью, меньшей 10^{-5} .

4. Энергии, указанные в каждой под-подсекции типа NSRS, должны покрывать весь энергетический интервал (EL, EH) соответствующей подсекции. При этом некоторые ковариационные компоненты могут быть равны нулю.

5. В подсекциях $LCOMP=1$, $LRU=1$ под-подсекции типа NSRS могут располагаться в любом порядке.

Получение ковариаций используя данные Файлов 32 и 33.

1. Вне области перекрытия комбинации энергетических интервалов, описанных в Файле 32, и резонансной области, охватываемой Файлом 2, ковариации, описанные в

Файле 33, относятся к сечениям, восстановленным по данным Файлов 2 и 3 так, как это предписывается значением признака LSSF.

2. В подсекциях с LCOMP=0 не нулевые вариации или ковариации резонансного спина J (AJ) должны полагаться нулю.

3. При наличии Файла 32 для области разрешенных резонансов (LRU=1) ковариации сечений в этой области должны получаться как комбинация вкладов из Файлов 32 и 33. Должны быть выполнены следующие операции.

а) Ковариационная матрица резонансных параметров формируется путем суммирования вкладов каждого резонанса, представленных в подсекциях Файла 32 с LRU=1.

б) На основе полученной ковариационной матрицы параметров должна быть рассчитана ковариационная матрица сечений, следующая из данных Файла 32. Эта матрица является, вообще говоря, функцией сечения разбавления и температуры). Если рассматривается оценка данных для многоизотопного элемента, вклады различных изотопов суммируются с соответствующими весами.

в) Ковариации полученные на основе Файла 32 суммируются с ковариациями, полученными на основе Файла 33. Имеется, однако одно исключение, касающееся случая, когда ковариации, приведенные в Файле 33 относятся к сечениям, восстановленным по данным Файлов 2 и 3. В этом случае если резонансная структура описывается формулой Адлер-Адлера (LRF=4), относительные ковариации сечений, следующие из Файла 33, должны применяться к сумме сечения, приведенного в Файле 3 и плавной подложки, следующей из резонансных данных.

4. Если Файл 32 содержит данные для области неразрешенных резонансов (LRU=2), ковариации сечений должны быть получены следующим образом.

а) Для оценки ковариаций сечений, соответствующих бесконечному разбавлению следует использовать данные Файла 33.

б) Для получения ковариаций эффективных сечений для материала, разбавленного в среде другими материалами, в случаях, когда существенна резонансная самоэкранировка, эффект ковариаций резонансных параметров, учитываемый по данным Файла 32, должен комбинироваться с данными о ковариациях, содержащихся в Файле 33. То, как следует выполнять эту комбинацию описано в работе [1]. Заметим, однако, что ковариации эффективных сечений, как показал тест, не сильно зависят от погрешностей средних резонансных параметров – см. работу [2].

Пример для MAT=3333

Рассматриваемый в этом примере нуклид обладает разрешенной резонансной структурой, описываемой с LRF=2 1 – 50 эВ. В Файле 2 описано 5 резонансов, один из которых лежит при отрицательной энергии. «Длинные» ковариации приписываются только резонансу при 15 эВ. Файл 2 для этого случая приведен ниже в разделе «Пример 32.1», а Файл 32 – в разделе «Пример 32.2». Файл 32 включает 3 под-подсекции типа NSRS и 4 подсекции типа NLRS. Первая из последних относится только к «отрицательному» резонансу и указывает на наличие следующих вкладов в ковариации параметров, в эВ².

E_r	1.0	-1.5	0	-0.2
Γ_n	-1.5	4.0	0	-1.0
Γ_γ	0	0	0	0
Γ_f	-0.2	-1.0	0	0.8

T

Этот блок указывает на наличие отрицательной корреляции между нейтронной шириной и энергией, приписанной этому гипотетическому резонансу.

Вторая под-подсекция относится только к резонансу при 5 эВ и содержит следующие ковариации

E_r	0.5×10^{-6}	0	0	0
Γ_n		1×10^6	1×10^6	0.2×10^6
Γ_γ		1×10^6	0.0	2.0×10^6
Γ_f		0.2×10^6	2.0×10^6	4×10^6

В 3-м блоке описываются ковариации Γ_n для резонансов при 30 и при 40 эВ. Первая под-подсекция типа NLRS содержит погрешность Γ_γ , общую для всех резонансов.

Ее величина оценена на основе анализа данных только для резонанса при 5 эВ. Заметим, что благодаря скоррелированности погрешностей вариация радиационной ширины для этого резонанса заполняет пустую ячейку в предыдущей таблице (величиной 16×10^{-6}).

Вторая под-подсекция отражает влияние предполагаемых флуктуаций радиационных ширин. Третья и четвертая под-подсекции содержат «длинные» ковариации в Γ_n и Γ_f . Оценка последней для реального нуклида может быть весьма непростой.

Пример 32.1. Файл 2 для примера Файла 32

```

99.280+3  2.70 +2      0      0      NIS=1      0333332151 HEAD
99.280+3  1.00 +0      0      LFW=0     NER=1      0333332151 CONT
  1. +0   5.00 +1     LRU=1     LRF=2     NRO=0     NAPS=0333332151 CONT
  1.0 +0   0.6  +0      0      0      NLS=1     0333332151 CONT
  2.7 +2   0.0  +0      L=0     LRX=0    6*NRS=30   NRS=5333332151
.1.0 +0   1.5  +0   4.04 +0   3.0  +0   0.04 +0   1.0  +0333332151
  5.0 +0   1.5  +0   0.07 +0   0.01 +0   0.04 +0   0.02 +0333332151
  1.5 +1   0.5  +0   0.08 +0   0.01 +0   0.04 +0   0.03 +0333332151
  3.0 +1   1.5  +0   7.04 +0   1.0  +0   0.04 +0   6.0  +0333332151
  4.0 +1   1.5  +0   6.04 +0   5.0  +0   0.04 +0   1.0  +0333332151 LIST
  0.0 +0   0.0  +0      0      0      0      0333332  0 SEND
  0.0 +0   0.0  +0      0      0      0      03333  0  0 FEND

```

Пример 32.2. Пример Файла 32

```

99.280+ 3 2.70 + 2 0 0 NIS=1 0333332151 HEAD
99.280+ 3 1.00 + 0 0 LFW=0 NER=1 0333332151 CONT
1. + 0 5.00 + 1 LRU=1 LRF=2 NRO=0 NAPS=0333332151 CONT
1.0 + 0 0.6 + 0 0 LCOMP=1 NLS=0 0333332151 CONT
2.7 + 2 0.0 + 0 0 0 NSRS=3 NLRS=4333332151 CONT
0.0 + 0 0.0 + 0 MPAR=4 16* NRB=1333332151
-1.0 + 0 1.5 + 0 4.04 + 0 3.0 + 0 0.04 + 0 1.0 + 0333332151
1.0 + 0 -1.5 + 0 0.0 + 0 -0.2 + 0 4.0 + 0 0.0 + 0333332151
-1.0 + 0 0.0 + 0 0.0 + 0 0.8 + 0 0.0 + 0 0.0 + 0333332151 LIST
0.0 + 0 0.0 + 0 MPAR=4 16* NRB=1333332151
5.0 + 0 1.5 + 0 0.07 + 0 0.01 + 0 0.04 + 0 0.02 + 0333332151
0.5 - 6 0.0 + 0 0.0 + 0 0.0 + 0 1.0 - 6 -1.0 -6333332151
-0.2 - 6 0.0 + 0 -2.0 - 6 4.0 - 6 0.0 + 0 0.0 + 0333332151 LIST
0.0 + 0 0.0 + 0 MPAR=2 22* NRB=2333332151
3.0 + 1 1.5 + 0 7.04 + 0 1.0 + 0 0.04 + 0 6.0 + 0333332151
4.0 + 1 1.5 + 0 6.04 + 0 5.0 + 0 0.04 + 0 1.0 + 0333332151
2.0 - 3 0.0 + 0 0.0 + 0 0.0 + 0 1.0 - 3 0.0 + 0333332151
-0.5 - 4 2.0 - 3 0.0 + 0 2.0 - 3 0.0 + 0 0.0 + 0333332151 LIST
0.0 + 0 0.0 + 0 IDP=3 LB=1 2*NE=4 NE=2333332151
-2.0 + 0 1.0 - 2 5.0 + 1 0.0 + 0 0.0 + 0 0.0 + 0333332151 LIST
0.0 + 0 0.0 + 0 IDP=3 LB=-1 2*NE=8 NE=4333332151
-2.0 + 0 1.0 - 2 1.0 + 0 0.0 + 0 1.0 + 1 1.0 - 2333332151 LIST
5.0 + 1 0.0 + 0 0.0 + 0 0.0 + 0 0.0 + 0 0.0 + 0333332151 LIST
0.0 + 0 0.0 + 0 IDP=2 LB=5 NT=6 NE=3333332151
1.0 - 5 2.0 + 1 5.0 + 1 1.0 - 4 1.0 - 4 2.0 - 4333332151 LIST
0.0 + 0 0.0 + 0 IDP=4 LB=1 2*NE=4 NE=2333332151
1.0 - 5 4.0 - 4 5.0 + 1 0.0 + 0 0.0 + 0 0.0 + 0333332151 LIST
0.0 + 0 0.0 + 0 0 0 0 0333332 0 SEND
0.0 + 0 0.0 + 0 0 0 0 03333 0 0 FEND

```

Литература

1. G. DeSaussure and Marable, *Nucl. Sci. Eng.* **101**, 285 (1989)
2. B. L. Broadhead and H. L. Dodds, *Trans. Am. Nucl. Soc.* **39**, 929 (1981)

* *NVS+6*NRB

33. ФАЙЛ 33. КОВАРИАЦИИ НЕЙТРОННЫХ СЕЧЕНИЙ

33.1. Общее описание

Файл 33 содержит данные о ковариациях сечений, представленных в Файле 3. Эти данные отражают погрешности нейтронных сечений и корреляции между ними, но отнюдь не погрешности численного представления этих сечений в формате Файла3. Коль скоро ENDF/B представляет наши знания о микроскопических данных, Файл 33 предназначен для

представления ковариаций этих данных. Следует однако, подчеркнуть, что для большинства практических приложений ковариационные данные должны быть переработаны во многогрупповые ковариационные матрицы. При формировании Файла 33 следует не забывать, что главными задачами является определение

- а) дисперсий (вариаций) групповых сечений;
- б) корреляций между погрешностями сечений соседних групп;
- в) корреляций между погрешностями сечений нескольких групп.

Таблица 33.1 иллюстрирует типичную связь этих ковариаций с экспериментальными погрешностями.

Уровень детальности, с которой информация представляется в Файле 33 определяется принципиальными трудностями численной оценки погрешностей и будет предварительно обсужден в настоящем разделе.

В области разрешенных резонансов некоторые ковариации сечений могут быть выражены через ковариации резонансных параметров в Файле 32. Но и в этом случае «длинные» компоненты ковариационной матрицы, которые могут охватывать много резонансов, могут быть приведены в Файле 33, особенно учитывая, что зачастую именно «длинные» ковариации являются наиболее важными.

Table 33.1

Сопоставление ковариаций, приводимых в одной из секций Файла 33 и погрешностями гипотетического эксперимента¹

Файл 33	Экспериамент	Энергетическая зависимость
«короткие»	Статистические	Быстро меняющиеся
«средние»	Эффективность детектора, Многokrратное рассеяние и т.п.	Медленно меняющиеся
«длинные»	Геометрия,	Более или менее

¹ Как и ко всем аналогиям, к этому сопоставлению следует подходить с осторожностью. Таблица дает лишь качественное представление о возможных причинах и характере корреляций оцененных данных.

	Фон, Нормировка	постоянные
--	--------------------	------------

Пример: Если статистическая погрешность («короткая») составляет 2%, погрешность за счет поправок на многократное рассеяние («средняя») тоже 2%, и погрешность за счет неточности геометрии 1%, погрешность измерения в дискретной точке составит 3% (то же и для группы, охватывающей узкий энергетический интервал); погрешность результатов нескольких подобных измерений составит 2.5%, а среднее по всему энергетическому интервалу не будет ниже 1%.

33.2. Форматы

Файл 33 разделен на секции, идентифицируемые значением МТ. Каждая секция (МАТ, 33, МТ) может содержать несколько подсекций. Каждая секция Файла 33 начинается записью HEAD и завершается записью SEND.

Определяются следующие величины:

ZA, AWR – стандартные параметры, определяющие заряд и массу материала.

MTL – отличное от нуля значение MTL используется как признак того, что реакция МТ является компонентой суммарной реакции MTL (см. ниже обсуждение в конце разделов 33.2 и 33.3). В этом случае для реакции МТ не приводится никаких ковариационных подсекций и NL=0.

NL – число подсекций в секции.

Структура секции такова

The structure of a section is:

```
[МАТ, 33, МТ/ ZA, AWR, 0, MTL, 0, NL] HEAD
```

```
<подсекция для n = 1>
```

```
<подсекция для n = 2>
```

```
<подсекция для n = NL>
```

```
[МАТ, 33, 0/ 0.0, 0.0, 0, 0, 0, 0] SEND
```

33.2.1. Подсекции

Каждая подсекция секции (МАТ, 33, МТ) используется для описания отдельной ковариационной матрицы. Имеется в виду матрица ковариаций сечений, приведенных в секции (МАТ, 3, МТ) и сечений, приведенных в секции

(MAT1,MF1,MT1) той же библиотеки (точнее, содержащихся на той же “ленте” ENDF). Если MF1=0, рассматривается матрица ковариаций с сечением, приведенным в подсекции LFS1 Файла 10: (MAT1,10,MT1.LFS1).

Значения MAT1, XMF1= Float(MF1), а если MF1=0, то и XLFS1=Float(LFS1) приводятся в записи CONT , которой начинается каждая подсекция. Таким образом, в подсекции значения(MAT,MT) и (MAT1,MF1,MT1,[LFS1]) точно зафиксированы, так что каждую подсекцию можно обозначить как (MAT,MT;MAT1,MF1,MT1,[LFS1]).

Каждая подсекция может содержать несколько под-подсекций, которые подразделяются на под-подсекции типа NC и под-подсекции типа NI. Каждая под-подсекция содержит независимую составляющую или компоненту ковариационной матрицы, описываемой в подсекции. Полная ковариационная матрица подсекции является суммой вкладов всех подсекций.

Определяются следующие величины:

XMF1= Float(MF1) – номер файла, содержащего второе сечение из рассматриваемой пары коррелирующих сечений, представленный в форме числа с плавающей запятой. Если MF1=MF, то XMF1 = 0.0 или =”пробел”.

XLFS1 = Float(LFS1) – в случае MF1=10 – записанный в форме числа с плавающей запятой номер конечного состояния ядра продукта второй реакции из рассматриваемой пары; если MF1≠10, то XLFS1 = 0.0 или =”пробел”.

MAT1 – значение MAT для второго сечения из рассматриваемой пары.

MT1 – значение MT для второго сечения из рассматриваемой пары.

NC - число под-подсекций типа NC, следующих за записью CONT

NI - число под-подсекций типа NI, следующих за всеми под-подсекциями типа NC.

Структура подсекции, описывающей ковариационную матрицу сечений, приведенных в секциях ENDF (MAT,3,MT) и (MAT1,MF1,MT1,[LFS1]), такова:

```
[MAT,33,MT/ MF1, XLFS1, MAT1, MT1, NC, NI]CONT
```

```
<под-подсекция для m =1>
```

```
< под-подсекция для m =2>
```

```
-----  
-----
```

```
< под-подсекция для m = NC>
```

```
< под-подсекция для n =1>
```

```
< под-подсекция для n =2>
```

```
-----  
-----
```

```
< под-подсекция для n = NI>
```

33.2.2. Под-подсекции

Под-подсекции типов NC и NI обладают разной структурой. Под-подсекции типа NC используются для указания того, что компонента ковариационной матрицы, описываемой в подсекции, содержится в иной подсекции той же ленты ENDF/B. Цель введения этих под-подсекций в том, чтобы избавиться от необходимости приводить избыточную информацию, чего невозможно избежать при использовании только под-подсекций типа NI. Под-подсекции типа NI используются для явного представления компонент ковариационной матрицы, описываемой в подсекции.

Под-подсекции типа NC

Под-подсекции типа NC используются для описания ковариационных матриц в тех энергетических областях, в которых сечение, представленное в секции (MAT,3,MT) может быть получено (“выведено”) из оцененных сечений других реакций. В контексте Файла 33 и имея в виду цели, которые преследует введение под-подсекций типа NC, мы будем понимать под “оцененным сечением”, сечение, ковариационная матрица которого в рассматриваемом энергетическом интервале полностью определена в соответствующих под-подсекциях типа NI. Ковариационная матрица “выведенного” сечения может быть получена из ковариационных матриц “оцененных” сечений, представленных в других местах Файла 33.

Определим следующие величины.

LTU – признак, определяющий процедуру получения ковариационной матрицы:

а) **LTU=0** – “Избыточные “выведенные” сечения”. Задавая в под-подсекции Файла 33 **LTU=0**, оценщик указывает, что в рассматриваемом энергетическом диапазоне сечение, приведенное в (MAT,3,MT), является линейной комбинацией сечений других реакций, приводимых для того же самого значения MAT для других значений MT. Оцененные ковариации этих сечений даны в Файле 33 в под-подсекциях типа NI. Вообще говоря, линейное соотношение между сечением, определенным в под-подсекции с **LTU=0**, и сечениями других реакций действует не только в пределах рассматриваемого энергетического интервала, а во всей рассматриваемой в оценке области энергий.

Определим следующие дополнительные величины:

E1, **E2** - границы энергетического интервала (в эВ) в пределах которого рассматриваемое сечение, приведенное в секции (MAT,3,MT), представляется в виде линейной комбинации сечений, приведенных в секциях (MAT,3,MTI).

NCI - число пар величин в массиве {CI, XMTI}²

{CI, XMTI} – массив пар, состоящих из коэффициентов CI и номеров реакций XMTI, представленных в форме с плавающей запятой. Этот массив определяет линейную комбинацию, которой определяется сечение MT:

$$\sigma_{MT}^{MAT}(E) = \sum_{i=1}^{NCI} C_i \times \sigma_{MT_i}^{MAT}(E)$$

² Обозначение {AI, BI} означает последовательность A₁, B₁; A₂, B₂; ...; A_i, B_i в записи типа LIST/

(точнее, использование подсекции с $LTU=0$ означает, что оценщик считает возможным представить ковариацию сечения типа МТ так, как если бы это сечение выражалось такой линейной комбинацией)

В записанной формуле C_i означают C_i , а MT_i означают XMT_i . Коэффициенты C_i постоянны в пределах рассматриваемого энергетического интервала (E_1 , E_2) и обычно равны ± 1 .

Под-подсекция типа NC с $LTU=0$ имеет следующую структуру:

```
[MAT,33,MT/ 0.0, 0.0, 0, LTU, 0, 0] CONT (LTU=0)
[MAT,33,MT/ EL, E2, 0, 0, 2*NCI, NCI/ {CI, XMTI}] LIST
```

Замечание: Как правило, в каждой подсекции описывается одна определенная ковариационная матрица. Однако если в подсекции содержится под-подсекция типа NC с $LTU=0$ для вычисления ковариационной матрицы потребуются учет $NCI+1$ компоненты, приводимых в других подсекциях Файла 33 (см. правила описываемые ниже). В этих других подсекциях содержатся только по одной из компонент ковариационной матрицы “избыточного “выведенного” сечения” (например, суммарного сечения)³.

б) $LTU=1, 2$ или 3 , “Ковариация сечений, “выведенных” из измеренных отношений к стандартному сечению”. Многие сечения, описываемые в ENDF/B, определялись из измеренных отношений сечений. Погрешности сечения разных реакций, оцененных на основе таких отношений, могут быть сильно скоррелированными. Это является основной причиной корреляций между погрешностями сечений разных материалов. Ковариации такого рода определяются ковариациями стандартного сечения и ковариациями отношения сечений, оцененного на основе выполненных экспериментов. При практическом использовании многогрупповых ковариаций ковариации отношений сечений зачастую играют определяющую роль, т.к. многие рассчитываемые интегральные характеристики определяются именно через отношения сечений. Для того, чтобы представить в Файле 33 ковариации, сечений, “выведенных” из результатов измерения отношения сечений и сечений “стандарта”, оценщик может в соответствующей подсекции Файла 33 использовать специальные под-подсекции типа NC с $LTU=1.2$ или 3 (в иных случаях для рационального представления ковариационных компонент, обусловленных измерениями отношений сечений оценщику целесообразно обратиться к рекомендациям, данным в литературных источниках⁴)

³ Таким образом, под-подсекции типа NC с $LTU=0$, содержат не компоненты ковариационной матрицы, а ссылки на эти компоненты и коэффициенты, с которыми они должны входить в требуемую ковариационную матрицу – М.Н.

⁴ W. P. Poenitz, "Data Interpretation, Objective Evaluation Procedures, and Mathematical Techniques for the Evaluation of Energy-Dependent Ratio, Shape, and Cross Section Data", **BNL-NCS-51363**, *Conf. on Nuclear Data Evaluation and Techniques*, p. 264, B. A. Magurno and S. Pearlstein, eds. (March, 1981)

R. W. Peele, "Uncertainties and Correlations in Evaluated Data Sets Induced by the Use of Standard Cross Sections", **NBS Special Publication 425**, *Conf. on Nuclear Cross Sections and Technology*, p.173, R. A. Schrack and C. D. Bowman, eds. (1975)

Сначала рассмотрим ковариации, возникающие в случае, когда оценщик получил сечение $\sigma_a(E)$, представленное в секции (MAT,MT) в интервале (E_1, E_2) непосредственно из абсолютного измерения отношения $\alpha(E)$ этого сечения к стандартному сечению $\sigma_s(E)$, представленному в секции (MATS,MTS): $\sigma_a(E) = \alpha(E) * \sigma_s(E)$ для $E_1 \leq E \leq E_2$.

Погрешности оцененного отношения сечений предполагаются не зависящими от погрешностей стандарта. В этом случае

$$Rvar[\sigma_a(E)] = Rvar[\alpha(E)] + Rvar[\sigma_s(E)], \text{ при } (E_1 \leq E \leq E_2)$$

$$Rvar[\sigma_a(E), \sigma_a(E')] = Rvar[\alpha(E), \alpha(E')] + Rvar[\sigma_s(E), \sigma_s(E')], \text{ при } (E_1 \leq E \leq E_2) \text{ и } (E_1 \leq E' \leq E_2)$$

$$Rvar[\sigma_a(E), \sigma_s(E')] = Rvar[\sigma_s(E), \sigma_s(E')], \text{ при } (E_1 \leq E \leq E_2) \text{ и } (E_1 \leq E' \leq E_2)$$

Здесь $Rvar$ и $Rcov$ суть относительные вариации (дисперсии) и относительные ковариации, определенные в Главе 30. В рассматриваемом случае эти величины для сечения, представленного в секции (MAT,MT), зависят и от ковариаций сечения-стандарта и от ковариации оцененного отношения, но только в том энергетическом интервале, в котором оцененное сечение определено из измерений отношения к этому стандарту. Вообще же ковариации погрешностей сечений (MAT,MT) и (MATS,MTS) могут быть или будут отличны от нуля при всех энергиях E' , для которых задано сечение стандарта.

Пусть в энергетическом интервале $(E_1 \leq E \leq E_2)$ рассматриваемое сечение определено из измерений относительно стандарта (MATS,MTS) – назовем результаты этого определения $\sigma_a(E)$, а в энергетическом интервале $(E_1' \leq E \leq E_2')$ то же сечение определено из измерений относительно другого стандарта (MATS',MT') – назовем результаты этого второго способа определения $\sigma_b(E')$. Если относительные измерения выполнены независимо друг от друга, а погрешности сечений-стандартов скоррелированы, то

$$Rvar[\sigma_a(E), \sigma_b(E')] = Rvar[\sigma_s(E), \sigma_s'(E')], \text{ при } (E_1 \leq E \leq E_2) \text{ и } (E_1' \leq E \leq E_2'), \text{ иначе - нулю; } Rvar[\sigma_a(E), \sigma_s'(E')] = Rvar[\sigma_s(E), \sigma_s'(E')], \text{ при } (E_1 \leq E \leq E_2) \text{ и любом } E', \text{ иначе - нулю;}$$

$$Rvar[\sigma_s(E), \sigma_b(E')] = Rvar[\sigma_s(E), \sigma_s'(E')], \text{ при } (E_1' \leq E' \leq E_2') \text{ и любом } E, \text{ иначе - нулю;}$$

Заметим, что записанные соотношения применимы если $\sigma_a(E)$ and $\sigma_b(E')$ относятся к одному и тому же (MAT,MT), т.е. являются сечениями одного и того же процесса, но измеренными в разных энергетических диапазонах относительно разных стандартов.

Существенны и корреляции погрешности сечения $\sigma_a(E)$ возникающие с погрешностями всех других сечений, измерявшихся относительно того же стандарта:

$$Rcov[\sigma_a(E), \sigma_x(E')] = Rcov[\sigma_s(E), \sigma_x(E')], \text{ при } (E_1 \leq E \leq E_2) \text{ и всех } \sigma_s(E'), \text{ иначе - нулю.}$$

Правая часть может быть отлична от нуля для многих реакций (MATX, MTX); при переработке ковариационных данных такого рода может потребоваться принимать специальные меры, чтобы не сгенерировать большое число ненулевых, но практически несущественных многогрупповых ковариационных матриц.

Пусть сечение, представленное в секции (MAT,3,MT) в интервале (E1,E2) непосредственно *выводится* из оценки измеренного отношения к “оцененному” сечению стандарта, представленному в секции (MATS,MFS,MTS,[LFSS]) (при MTS=3 LFSS=0). Тогда для представления в Файле 33 одной из компонент ковариационной матрицы этого сечения в интервале (E1,E2) в подсекции (MAT,MT;MAT,3,MT,0) может быть использована под-подсекция типа NC с LTY=1. Компонента, представляемая под-подсекцией с LTY=1, содержится в Файле (MFS+30) в подсекции (MATS,MTS,[LFSS];MATS,MFS,MTS,[LFSS]) (при MTS=3 LFSS=0). Другая компонента, описывающая ковариации, обусловленные погрешностями оцененного отношения задается явно в интервале (E1,E2) в под-подсекции типа NI подсекции (MAT,MT;MAT,3,MT,0) того же Файла 33. При этом устанавливаются ковариации между погрешностями рассматриваемого сечения в интервале (E1,E2) и сечения-стандарта во всей области его определения. Для указания на это в Файле 33 для материала MAT в подсекции (MAT,MT; MATS, MFS, MTS) описывающей ковариации с погрешностями стандартного сечения, должна содержаться под-подсекция с LTY=2. Под-подсекция с LTY=2 [содержащая ту же самую информацию, что и описанная ранее под-подсекция с LTY=1 в подсекции (MAT,MT; MAT,3,MT,0)] ссылается на другую ковариационную матрицу, чем упомянутая выше под-подсекция с LTY=1, но и та может быть получена из ковариационной матрицы стандартного сечения, содержащейся в Файле MFS+30 в подсекции для стандартного материала MATS.

Наконец, в Файле 33 для материала MATS в подсекции, описывающей ковариации с погрешностями рассмотренного выше сечения, должна присутствовать под-подсекция типа NC с LTY=3. Дополнительные разъяснения будут даны ниже в Замечании А.

Определяются следующие величины.

E1, E2 – границы энергетического интервала, в котором сечение, представленное в секции (MAT,3,MT), получено, в существенной степени, через результаты измерений отношения к “стандартному” сечению.

NEI - число энергий, указывающих границы (NEI-1) энергетических интервалов, в которых это стандартное сечение использовалось в измерениях с весом WEI.

WEI – Вес измерений, выполненных относительно данного стандарта, во всей оценке

Под-подсекции типа NC при LTY=1,2 или 3 имеют следующую структуру⁵:

```
[MAT,33,MT/0.0, 0.0, 0, LTY, 0, 0] CONT
[MAT,33,MT/ E1, E2, MATS, MTS, 2*NEI+2, NEI/
(XMFS,XLFSS), {EI,WEI} ] LIST
```

⁵ Как видно, и под-подсекции с LTY=1, 2 и 3 содержат лишь ссылки на компоненты ковариационных матриц, приведенных в других под-подсекциях (типа NI) – М.Н.

Количество чисел в записи LIST равно $2 \cdot NEI + 2$. Номер файла, содержащего стандартное сечение, есть $MFS = INT(XMFS)$; исключением является случай $XMFS = 0.0$, при котором $MFS = 3$. $XLFS$ отлично от нуля только при $MFS = 10$.

Форматы $LTU = 1, 2, 3$ могут применяться и тогда, когда сечение, определенное в секции (MAT,3,MT) только частично определяется через результаты измерений отношения этого сечения к “стандартному” сечению. В этих случаях список $\{E_i, WE_i\}$ определяет весовые доли каждого из относительных измерений в оценку сечения (MAT,3,MT). Весовая доля, определенная для интервала $E_i \leq E \leq E_{i+1}$, есть WE_i . Первое значение E_1 , приведенное в под-подсекции, равно E_1 , последнее, $E_{NEI} = E_2$.

Замечание А: Под-подсекции с $LTU = 1, 2, 3$ в подсекции используются для представления компонент относительной ковариационной матрицы, обусловленной ковариационными матрицами “стандартных” сечений, представленных в Файлах 33, 31 или 40. Имеется существенная разница между ковариационными матрицами, определяемыми в под-подсекциях с $LTU = 1$, и матрицами, определяемыми в под-подсекциях с $LTU = 2$ и 3. Эта разница следует из данных выше определений. Под-подсекции с $LTU = 2$ и 3 всегда включаются в подсекции, описывающие ковариации между парой сечений, одно из которых использовалось в качестве “стандарта”. Под-подсекция с $LTU = 2$ включается в подсекцию Файла 33 для материала, ковариации сечения которого рассматриваются, тогда как под-подсекция с $LTU = 3$ включается в подсекцию Файла (MFS+30) для материала, сечение которого использовалось в качестве “стандарта”. Под-подсекция с $LTU = 1$ используется в подсекциях, описывающих ковариации между погрешностями “выведенного” сечения. В этих подсекциях под-подсекции с $LTU = 2$ или 3 не используются. Под-подсекции с $LTU = 1$ описывают квадратные ковариационные матрицы, охватывающие энергетический интервал от E_1 до E_2 . Под-подсекции с $LTU = 2$ и 3 описывают, вообще говоря, прямоугольные матрицы, связывающие погрешности “выведенного” сечения в энергетическом интервале от E_1 до E_2 , и погрешности “стандарта” во всем энергетическом интервале. Если сечение, представленное в секции (MAT,3, MT,0) в интервале от E_1 до E_2 “выведено” из отношения к “стандартному” сечению, то в ковариационных файлах должно появиться три под-подсекции типа NC с $LTU = 1, 2$ и 3: под-подсекция с $LTU = 1$ должна быть включена в подсекцию (MAT,MT; MAT,3,MT,0); под-подсекция с $LTU = 2$ должна быть включена в подсекцию (MAT,MT; MATS,MFS,MTS, [LFSS]), описывающую ковариации погрешностей того же сечения MT того же материала MAT; под-подсекция с $LTU = 3$ должна быть включена в подсекцию (MATS, MFS, MTS,[LFSS]; MAT,3,MT,0), содержащуюся в Файле (MFS+30) для материала MATS, сечение MTS которого использовалось в качестве “стандарта”.

Встречаются, однако ситуации (одна из которых рассмотрена ниже в Примере 33.1) когда зависимость от сечения “стандарта” является не прямой, а косвенной. Например, сечение (MAT,3, MT1) может быть “выведено” из измеренного отношения этого сечения к сечению (MAT,3, MT), которое, в свою очередь, было “выведено” из измеренного отношения к “стандарту”. В этом случае под-подсекции с $LTU = 1$ должны быть приведены и в подсекции (MAT,MT1; MAT, MT1) и в подсекции (MAT, MT; MAT, MT1), под-подсекция с $LTU = 2$ должна присутствовать в подсекции (MAT,MT1; MATS, MFS, MTS, [LTSS]) Файла 33 для того же материала MAT, а под-подсекция с $LTU = 3$ – в подсекции (MATS, MTS,[LTSS]; MAT, MT1) в Файле 33 для материала MATS.

Замечание Б: При обсуждении ковариационных матриц сечений, “выведенных” через измеренное отношение, термин “стандарт” или “стандартное

сечение” применяется по отношению к сечению той реакции, от отношению к которой проводились измерения. В качестве подобного “стандарта” может быть использовано сечение любой реакции, оценка которой содержится в ENDF/B, а вовсе не только сечения тех реакций, которые рекомендованы в качестве “рекомендованных нейтронных стандартов”. Использование рекомендованных стандартов, разумеется, предпочтительнее, поскольку это позволяет сократить число элементов ковариационных матриц, получаемых с помощью секций с $LTU=1,2$ и 3. Однако, оценщик далеко не всегда имеет в своем распоряжении результаты измерений отношений сечений к рекомендованным стандартам.

II. Под-подсекции типа NI-type

Под-подсекции типа NI используются для явного задания компонент ковариационной матрицы, представляемой в подсекции. Каждая под-подсекция типа NI характеризуется признаком LB. Этот признак указывает, является ли приводимая ковариационная матрица абсолютной или относительной, указывает на характер корреляций между погрешностями сечения при различных энергиях и определяет структуру под-подсекции.

Определяются следующие величины:

LB – признак, от значения которого зависит смысл висел, приводимых в массивах $\{E_k, F_k\}$ и $\{E_l, F_l\}$.

a) LB= 0, 1, 2, 3 или 4.

Определим следующие дополнительные величины

NP - Общее количество пар чисел в массивах $\{E_k, F_k\}\{E_l, F_l\}$.

NT - Количество чисел в записи LIST. $NT=2*NP$

LT – Количество пар чисел во втором массиве $\{E_l, F_l\}$.

Если таблица содержит только один массив $\{E_k, F_k\}$, $LT=0$;

Если таблица содержит оба массива, то $LT \neq 0$, и первый массив - $\{E_k, F_k\}$ – содержит $(NP-LT)$ пар чисел.

$\{E_k, F_k\}\{E_l, F_l\}$ – два массива из пар чисел, определяющих “ E_k -таблицу” и “ E_l -таблицу”.

В каждой “ E -таблице” первое число пары есть энергия E_n , а второе, F_n , связано с энергетическим интервалом между данными, приводимыми для энергий E_n и E_{n+1} .

При LB от 0 до 4 под-подсекции типа NI имеют следующую структуру

```
[MAT, 33, MT/ 0.0, 0.0, LT, LB, NT, NP/ {Ek, Fk} {El, Fl}] LIST
```

“ E_k -таблица” и “ E_l -таблица”, когда она присутствует, охватывают всю энергетическую область, в которой сечение MT представлено в Файле 3 (в секции (MAT, MT)). Поэтому первое значение энергии в E -таблице равно 10^{-5} эВ или, для пороговых реакций, энергии порога; последнее значение равно верхней границы области,

рассматриваемой в оценке (обычно $20 \cdot 10^6$ эВ). Некоторые значения F_k' или F_l могут равняться нулю, а последнее значение F в E-таблице равно нулю обязательно.

Определим теперь смысл величин F в E-таблицах для различных значений признака LB. Заметим, что единицы, в которых выражаются эти величины, могут быть различными. Пусть X_i относится к сечению, представленному в секции (MAT,3,MT) при энергии E_i , а Y_j относится к сечению, представленному в секции (MAT1, 3, MT1) при энергии E_j . Вклад под-подсекции в ковариационную матрицу $COV(X_i, Y_j)$, в единицах «квадратный барн» для различных значений признака LB определяется следующим образом:

LB=0 - абсолютные компоненты коррелируют только в пределах интервала E_k :

$$Cov(X_i, Y_j) = \sum_k P_{jk}^{i,k} F_{xy;k}$$

LB=1 – Относительные компоненты коррелируют только в пределах интервала E_k :

$$Cov(X_i, Y_j) = \sum_k P_{jk}^{i,k} F_{xy;k} X_i Y_j$$

LB=2 – Относительные компоненты коррелируют по всем интервалам E_k :

$$Cov(X_i, Y_j) = \sum_{k,k'} P_{jk}^{i,k} F_{xy;k} F_{xy;k'} X_i Y_j$$

LB=3 - Относительные компоненты коррелируют в интервалах E_k и E_l :

$$Cov(X_i, Y_j) = \sum_{k,l} P_{jl}^{i,k} F_{x;k} F_{y;l} X_i Y_j$$

LB=4 - Относительные компоненты коррелируют по всем интервалам E_l для каждого интервала E_k :

$$Cov(X_i, Y_j) = \sum_{k,l,l'} P_{jk,l'}^{i,k} F_k F_{xy,l} F_{xy,l'} X_i Y_j$$

При LB=0, 1 и 2 имеем LT=0, т.е. в записи LIST содержится только E_k -таблица. При LB=3 и LB=4 имеем LT≠0, т.е. в записи LIST содержится и E_k -таблица и E_l -таблица.

Безразмерный оператор P выражается через операторы S:

$$P_{j:m,n,\dots}^{i:k,l,\dots} \equiv S_i^k S_i^l \dots S_j^m S_j^n \dots,$$

где

$$S_i^k \equiv 1 \text{ при } E_k \leq E_i \leq E_{k+1}$$

$$S_i^k \equiv 1 \text{ иначе.}$$

b.) LB=5. Матрица межгрупповых ковариаций

Нередко в процессе оценки формируются ковариационные матрицы некоторых сечений, усредненных по определенным энергетическим интервалам. Эти ковариационные матрицы также могут быть записаны в Файле 33. Использование LB=3, в принципе, позволяет это сделать, но весьма неэффективно: матрица будет записываться отдельными порциями по одной строке (или столбцу) в каждой. Для каждой строки (или столбца) потребуется вводить свою под-подсекцию и в каждой такой под-подсекции E_k -таблицы (или E_l -таблицы) будут повторяться. Кроме того, относительные ковариационные матрицы усредненных сечений, как правило, являются симметрическими, а под-подсекции с LB=6 не позволяют учитывать симметричность матрицы, что влечет увеличение объема хранимой информации почти вдвое. Для эффективного представления именно таких матриц и разработаны под-подсекции с LB=5.

В под-подсекциях с LB=5 представляются ковариации следующего вида

$$\text{COV}(X_i, Y_j) = \sum_{k,k'} P_{j,k}^{i,k'} F_{x,y;k,k'} X_i Y_j$$

Для представления энергетических границ интервалов требуется ввести один массив $\{E_k\}$, используемый и для индекса k и для индекса k' . Числа $F_{x,y;k,k'}$ представляют собой относительные ковариации сечений X и Y , усредненные по интервалам с ниже-энергетическими границами E_k и $E_{k'}$. В отличие от под-подсекций с LB<5 в новой под-подсекции с LB=5 нет нужды во введении E_k -таблиц с парами чисел (E_k, F_k) и потому эта под-подсекция имеет иную структуру.

Определим следующие величины:

NT – полное количество чисел в двух массивах $\{E_k\}$ и $\{F_{k,k'}\}$.

NE – Количество чисел в массиве $\{E_k\}$, определяющем границы (NE-1)-го энергетического интервала.

LS – признак симметричности матрицы

Структура под-подсекции с LB=5 такова:

[MAT, 33, MT/ 0.0, 0.0, LS, LB=5, NT, NE/ $\{E_k\}\{F_{k,k'}\}$] LIST.

При LS=0 (матрица асимметрична) матричные элементы $F_{k,k}$, упорядочены по строкам в массиве $\{F_{k,k}\}$:

$$\{F_{k,k}\} \equiv F_{1,1}, F_{1,2}, \dots, F_{1,NE-1}; F_{2,1}, \dots, F_{2,NE-1}; F_{NE-1,1}, \dots, F_{NE-1,NE-1}$$

Массив $\{F_{k,k}\}$ содержит $(NE-1)^2$ чисел и

$$NT = NE + (NE-1)^2 = NE(NE-1) + 1$$

При LS=1 (матрица симметрическая) матричные элементы в массиве $\{F_{k,k}\}$ приводятся также по строкам, но каждая строка начинается с диагонального элемента: Symmetric matrix

$$\{F_{k,k}\} \equiv F_{1,1}, F_{1,2}, \dots, F_{1,NE-1}; F_{2,2}, \dots, F_{2,NE-1}; F_{NE-1,NE-1}$$

Массив $\{F_{k,k}\}$ содержит $NE*(NE-1)/2$ чисел и

$$NT = NE + [NE(NE-1)]/2 = [NE(NE+1)]/2$$

с.) LB=6: Матрица ковариаций между сечениями разных реакций разных материалов, усредненных, вообще говоря, по разным энергетическим интервалам. Формат LB=6 позволяет представить прямоугольную (не квадратную) матрицу в одной записи типа LIST без повторения энергетических сеток.

Ковариационная матрица имеет вид:

$$Cov(X_i, Y_j) = \sum_{k,l} P_{j,l}^{i,k} F_{xy;k,l} X_i Y_j$$

где X_i , как и ранее, относится к сечению при энергии E_i , представленному в секции (MAT,3,MT), а Y_j относится к сечению при энергии E_j , представленному в секции (MAT1,MF1,MT1,[LFS1]). Безразмерный оператор P определен так же, как и при других значениях LB. Единственный массив нижеэнергетических границ интервалов $\{E_{kl}\}$ содержит границы интервалов сначала для первого сечения (E_k) (k – номер строки), а затем – для второго сечения (E_l) (l – номер столбца): ($ER_1, ER_2, \dots, ER_{NER}, EC_1, EC_2, \dots, EC_{NEC}$).

Числа $F_{xy;k,l}$ представляют собой компоненты относительных ковариаций между сечениями, усредненными по интервалам с нижними границами E_k и E_l .

Определим следующие величины:

NT – количество чисел в двух массивах $\{E_{kl}\}$ и $\{F_{k,l}\}$ (см. ниже)

NER – число энергетических границ, соответствующих интервалам усреднения первого сечения (равное числу строк матрицы плюс единица 1)

NEC число энергетических границ, соответствующих интервалам усреднения второго сечения (равное числу столбцов матрицы плюс единица 1) NEC может быть получено из NT и NER.

Структура под-подсекции такова:

[MAT,33,MT/ 0.0, 0.0, 0, LB, NT, NER/ {E_{k,l}} {F_{k,l}}] LIST (LB=6)

В массиве {F_{k,l}} матричные элементы упорядочены по строкам:

{F_{k,l}} = F_{1,1}, F_{1,2}, ..., F_{1,NEC-1}; F_{2,1}, ..., F_{2,NEC-1}; ...; F_{NER-1,1}, F_{NER-1,2}, ..., F_{NER-1,NEC-1}

Всего в массиве {F_{k,l}} (NER-1)(NEC-1) чисел. Таким образом, количество чисел, содержащихся в двух массивах {E_{k,l}} и {F_{k,l}}, равно

$$NT = NER + NEC + (NER-1)(NEC-1) = 1 + NER*NEC.$$

d.) LB=8: представление “коротких” ковариаций.

“Короткие”, т.е. не распространяющиеся на иные энергии, т.е. дисперсионные компоненты погрешностей сечения типа MT, могут быть представлены в подсекции (MAT,MT,0,MT) Файла 33 в специальной под-подсекции с LB=8. Это можно сделать, если известно, что сечение рассматриваемой реакции свободно от влияния какой-либо скрытой структуры (см. подробнее Секцию 33.3.3).

Определим следующие величины:

NP - полное количество пар чисел в массивах {E_k, F_k} и {E_l, F_l}.

NT – Полное количество чисел в записи LIST. NT=2*NP

{E_k,F_k} - массив пар чисел, первое из которых есть энергия E_n, а второе, F_n, связано с энергетическим интервалом между E_n и E_{n+1}.

Формат под-подсекции с LB=8 (как и при LB=0) имеет вид

[MAT,33,MT/ 0.0, 0.0, LT, LB, NT, NP/ {E_k,F_k}] LIST (LT=0,LB=8)

Требуется только одна E_k-таблица. Величины F_k в под-подсекции с LB=8 имеют размерность “квадратный барн”. Значение дисперсии сечения, усредненного по энергетической группе, сильно зависит как от ширины этой группы, так и от значений F, приводимых в подсекции.

В простейшем случае, когда границы групп совпадают с границами интервалов в данной под-подсекции с LB=8 и весовая функция, используемая при усреднении, есть константа, диагональные элементы ковариационной матрицы VAR_{kk} будут совпадать с F_k, а недиагональные – равны нулю. Вообще говоря, каждое значение F_k

представляет собой некоррелирующую составляющую абсолютной дисперсии группового сечения, усредненного по некоторому энергетическому интервалу ΔE_j , часть которого составляет интервал ΔE_k . Вклад интервала ΔE_k в дисперсию сечения, усредненного по интервалу ΔE_j , охватывающему интервал ΔE_k , обратно пропорционален ΔE_j :

$$\text{VAR}_{jj} = F_k \Delta E_k / \Delta E_j, \text{ где } E_k \leq E_j < E_{j+1} \leq E_{k+1}.$$

Заметим, что VAR_{jj} есть дисперсия среднего сечения. Недиагональные элементы ковариационной матрицы под-подсекциями с $LB=8$ не определяются. Если группа целиком содержит несколько интервалов ΔE_k , их вклады в дисперсию складываются.

33.2.3. Ковариации сечений суммарных реакций

В Файле 33 могут быть представлены данные о погрешностях суммарных, “избыточных”, сечений, например, суммы сечений возбуждения отдельных дискретных уровней. Погрешности сечения суммарной реакции, равно, как и ее ковариации с другими реакциями, могут быть представлены в описанных выше форматах. Вопрос состоит в том, как представить вклады в погрешности и ковариации отдельных составляющих суммарного сечения. В Файле 33 в секции для отдельной составляющей МТ суммарного сечения в записи HEAD во втором целочисленном поле проставляется номер реакции MTL, компонентой которой является данная реакция МТ (см. определение записи HEAD в начале описания Файла 33).

```
[MAT, 33, MT/ ZA, AWR, 0, MTL, 0, NL] HEAD (NL=0)
```

Значение MTL должно лежать в пределах от 851 до 870, значений, зарезервированных для спецификации ковариационных данных для суммарных реакций. Эти номера реакций могут и не использоваться в Файлах 3, 4 или 5, так что само сечение суммарной реакции и соответствующая матрица рассеяния могут генерироваться из данных для составляющих реакций в процессе переработки файла.

Список компонент суммарной реакции определен неявно, а именно – путем $egjvzyenjuj$ указания значений MTL в записях HEAD. Эти специальные записи HEAD с $MTL \neq 0$ и $NL=0$

В совокупности и образуют список компонент суммарной реакции, который легко может быть использован обрабатывающей программой для контроля в процессе суммирования.

Помимо потребности оценки ковариаций суммарной реакции путем суммирования вкладов компонент, погрешность этой реакции может быть описана в Файле 33 и непосредственно при $MT = MTL$ с использованием описанных выше форматов представления ковариаций. Ковариации сечений суммарных реакций могут быть представлены также как ковариации “выведенных” сечений с использованием под-подсекций типа NC с $LTU=0$. при этом может быть учтен и вклад

составляющих, которые сами представляют собой суммарные реакции. Однако, если ковариации компонент в Файле 33 не содержатся, ковариации сечения суммарной реакции не может быть представлено как ковариация “выведенного” сечения.

33.3. Правила

Файл 33 не обязательно должен содержать данные для всех реакций, представленных в Файле 3 – требуется представление данных только для реакций, важных для практических приложений.

33.3.1. Упорядочивание секций, подсекций и под-подсекций.

а.) Секции. Секции в Файле 33 располагаются в порядке возрастания номера реакции МТ.

б.) Подсекции. В секции (МАТ,33,МТ), подсекции также жестко упорядочены.

Подсекция Файла 33 однозначно определена номерами (МАТ,МТ;МАТ1,МФ1,МТ1,[LFS1]); Первая пара этих номеров определяет секцию, которой принадлежит эта подсекция; значения остальных номеров продублированы в соответствующих полях записи CONT, которой начинается каждая подсекция, а именно, в полях XMF1, XLFS1, МАТ1 and МТ1 (при МТ≠10, XLFS1=0.0).

1. Подсекции данной секции приводятся в порядке возрастания значений МАТ1. Чтобы подсекцию с МАТ1-МАТ разместить на первом месте, достаточно положить в записи CONT МАТ1=0, что и будет означать, что МАТ1-МАТ.

2. В секциях, содержащих несколько подсекций с одним и тем же МАТ1, эти подсекции приводятся в порядке возрастания значений XMF1. Если МФ1=МФ-30, в поле XMF1 заносится нуль или пробел. Таким образом, подсекция с МФ1=МФ-30 всегда впереди всех подсекций (с другими МФ1) для данного МАТ1.

3. В секциях, содержащих несколько подсекций с одинаковыми значениями МАТ1 и МФ1, эти подсекции располагаются в порядке увеличения значений МТ1, приведенных в записи CONT, которой начинается каждая подсекция.

4. Если МАТ1=0 (что согласно 33.3.1-b-2 означает, что МАТ1=МАТ) и XMF1=0.0, (что означает, что МФ1=МФ-30), приводятся только подсекции с МТ1>МТ.

5. Если содержится несколько подсекций с одинаковыми значениями МАТ1, МФ1=10 и МТ1, эти подсекции располагаются в порядке возрастания LFS1.

с.) Под-подсекции. В подсекциях, содержащих и под-подсекции типа NC и под-подсекции типа NI, первыми, согласно требованию ыормата, должны следовать под-подсекции типа NC.

1. Под-подсекции типа NC. Таких под-подсекций может быть несколько. Если это так, они должны быть упорядочены по возрастанию нижеэнергетических границ энергетических интервалов, определенных в записях типа LIST. Напомним, что если подсекция содержит несколько под-подсекций типа NC с LTY=0, энергетические

интервалы, определенные в этих под-подсекциях не должны перекрываться ни между собой, ни с каким-либо из интервалов, определенных в под-подсекциях с $LTY=1$. Однако, интервалы, определенные в под-подсекциях с $LTY \geq 1$, согласно формату ENDF-6, могут перекрываться при условии, что сумма значений WEI , приводимых в одной под-подсекции, ни при одной энергии не превысит единицу. Признак LTY в под-подсекциях типа NC не влияет на порядок их расположения в подсекции.

2. Подсекции типа NI. Никаких правил упорядочивания под-подсекций типа NI а подсекции не вводится. Однако нередко случается, что весь рассматриваемый в оценке энергетический диапазон охватывается несколькими под-подсекциями и за пределами энергетических интервалов, определенных в E-таблицах, значения F полагаются равными нулю. Считывание данных в этом случае существенно упрощается, если под-подсекции сгруппированы так, что каждая группа покрывает весь интервал энергий, рассматриваемых в оценке.

33.3.2. Полнота

Как уже отмечалось, нет никаких ограничений снизу на число секций и подсекций, представленных в Файле 33. Отсутствие данных в Файле 33 не означает, что соответствующие погрешности равны нулю. Однако, наличие в Файле 33 некоторой подсекции, равно как и некоторых под-подсекций в этой подсекции, предполагает, что в том же самом Файле 33 или в Файлах 33 (или 31 или 40) для других материалов присутствуют соответствующие под-подсекции. Эта необходимость следует из того, что подсекции Файла 33 идентифицируются шестью числами

[MAT,MT; MAT1,MF1,MT1,(LFS1)]

а.) Подсекции с $MAT1=0$. Под ними понимаются подсекции класса (MAT,MT; 0,MF1,MT1,[LFS1]), что, согласно 33.3.1-b-1 означает, что $MAT1=MAT$.

1. Если файл File 33 содержит подсекцию (MAT,MT; 0,MF1,MT1,[LFS1] с $MT1 \neq MT$, для этого материала должны присутствовать еще две подсекции: подсекция (MAT,MT; 0,3,MT,0) в Файле 33 и подсекция (MAT,MT1;0,MF1,MT1,[LMF1]) в файле MF1+30.

Заметим, однако, что если погрешности сечений (MAT,3,MT) и (MAT,MF1,MT1,[LMF1]) не коррелируют между собой, необходимости явно указывать на отсутствие этих корреляций нет (ВТО же время. Следует обратить внимание на желательность явного указания на отсутствие некоторых корреляций, отмечаемую ниже в параграфе 33.3.2.б). Из этого правила и правила 33.3.1-b-4 с необходимостью следует, что каждая секция Файла 33, (MAT,33,MT), должна начинаться с подсекции (MAT,MT; 0,3,MT,0).

2. Подсекция (MAT,MT; 0,3,MT,0) содержащая подсекции типа NC с $LTY=0$, должна содержать перечень всех значений MTI , для которых приведены под-подсекции типа NC.

3. Под-подсекции типа NC с $LTY=0$ могут приводиться только в подсекциях типа (MAT,MT; 0,3,MT,0), т.е. с $MT1=MT$. Подсекции этого типа для выведенного избыточного сечения определяют ковариационные матрицы, связывающие погрешности этого сечения с погрешностями других, непосредственно оцененных, сечений. Получение этих ковариационных матриц является задачей обрабатывающей программы.

4. Если в подсекции (MAT,MT; 0,3,MT,0) содержится под-подсекция типа NC с LTY=1, в этой под-подсекции определяются значения (MATS,MFS,MTS,[LFSS]). Поэтому в том же самом Файле 33 должна содержаться под-подсекция (MAT,MT; MATS,MFS,MTS,[LFSS]). Должен быть и другой материал MATS с Файлом (MFS+30), содержащим подсекцию (MATS, MTS,[LFSS]; 0,MFS,MTS,[LFSS]). Заметим, что согласно правилу 33.3.3., изложенному ниже, значение MATS должно быть отличным от значения MAT, приведенного в под-подсекции типа NC с LTY=1.

5. Если в подсекции (MAT,MT; 0,3,MT,0) содержится под-подсекция типа NC с LTY=1, охватывающая энергетический интервал от E1 до E2, в той же подсекции должна содержаться по крайней мере одна под-подсекция типа NI, содержащая ковариационную матрицу для оцененных значений измеренных отношений сечений. Используя значения веса WEI данного отношения рассматриваемого сечения к определенному стандарту, обрабатывающая программа при вычислении ковариационной матрицы учтет ковариации сечения- стандарта. Оценщик может и сам умножить ковариационную матрицу отношений сечений на WEI^2 перед тем как заносить данные в под-подсекцию типа NI. Заметим, что если в рассматриваемом энергетическом интервале вес не равен единице, ковариации отношений сечений, приведенные в под-подсекциях типа NI, смешиваются.

b.) Подсекции с $MAT1 \neq 0$. Если в Файле 33 есть подсекция (MAT,MT; MAT1,MF1, MT1,[LFS1]) с $MAT1 \neq 0$, то подобно правилу 33.3.2-а-1, в том же Файле 33 должна присутствовать подсекция (MAT,MT;0,3,MT,0). Кроме того, для материала MAT1 в Файле (MF1+30) должны быть определены две подсекции : (MAT1,MT1,[LFS1];0,MF1,MT1,[LFS1]) и (MAT1,MT1,[LFS1]; MAT,3,MT,0) .

33.3.3. Другие правила

- a) Под-подсекции типа NC с LTY=1 могут содержать только $MATS \neq MAT$: под-подсекции этого типа предназначены для описания ковариаций, обусловленных измерением отношений сечений разных нуклидов, т. е. с разными значениями MAT.
- b) Если подсекция содержит только одну под-подсекцию типа NC с LTY=0 и не содержит под-подсекций типа NI, нижнеэнергетическая граница, указанная в под-подсекции, должна равняться 10^{-5} или порогу реакции, а верхняя – $2 \cdot 10^7$ или более высокой верхней границе рассматриваемой в оценке области.
- c) В соответствии с определением под-подсекций типа NC с LTY=0, в под-подсекциях типа NI, если таковые присутствуют в подсекции, значения F в E-таблицах должны равняться нулю во всех интервалах (E1, E2), определенных в под-подсекциях типа NC с LTY=0.
- d) Использование под-подсекций типа NI с LB=0 следует избегать, а для сечений, используемых в качестве стандарта при относительных измерениях, их использование вообще запрещено (следовательно, Файлы 33 для известных стандартных сечений не могут включать под-подсекции типа NI с LB=0). Под-подсекции типа NI с LB=0 предназначены для описания ковариаций быстро флуктуирующих сечений, для которых погрешности в глубоких минимумах не существенны.
- e) Формат Файла 33 позволяет, если требуется, описывать ковариационные данные с большой детальностью. Число под-подсекций типа NI и число пар чисел в E-таблицах зависят от того, сколь детально известна ковариационная

матрица и сколь детально ее следует описывать. В то же время следует тщательно продумывать сколь детально следует представлять оцененные ковариационные матрицы чтобы по возможности минимизировать объем E-таблиц. Важной величиной является суммарное число значений энергий, приведенных во всех E_k- и E_l-таблицах. Несколько сотен представляется разумным верхним пределом для этого числа. Заметим, что ковариации, полученные оценщиком, будут легче всего восприниматься и правильно интерпретироваться программой, рассчитывающей многогрупповые ковариационные матрицы, в случае, если энергии в E_k- и E_l-таблицах совпадают с границами групп. Если в Файле 33 погрешности сечения представлены с использованием LB=0 или LB=1 в интервалах шириной ΔE_i, и этот файл перерабатывается во многогрупповую матрицу с шириной групп ΔE_a, такой, что ΔE_a > ΔE_i, полученные групповые погрешности будут меньше, а межгрупповые корреляции – больше, чем в случае, если бы групповые интервалы совпадали с интервалами в ковариационной E-таблице. Это обстоятельство настораживает некоторых пользователей. Однако, при оценке погрешностей интегральных функционалов, усредненных по широким энергетическим спектрам, это обстоятельство практически не сказывается. Разумеется, обсуждаемый эффект может быть минимизирован при задании оцениваемых ковариаций, представляемых при LB=0 или 1 в более узких интервалах. Этот эффект также снижается, если рассчитываемая многогрупповая матрица получена с использованием нескольких ковариационных файлов с несовпадающими границами энергетических интервалов.

- f) Выше (см. 33.2, под-подсекции с LT=1) указывалось, что если сечение было получено из оцененных отношений сечения к некоторому “стандартному сечению”, в подсекции, описывающей ковариации для этого стандартного сечения, не должно содержаться под-подсекций типа NC с LTY=0 или 1. Отсюда вытекают следующие требования.
1. Оценщики общепринятых стандартных сечений не должны использовать под-подсекции с LTY=0 или 1. Если это требование нарушается по каким-либо физическим причинам или из-за специфики процедуры оценки, Рабочая группа по оценке сечений (CSEWG) должна быть поставлена об этом в известность и в сопровождающей оценку текстовой документации на это обстоятельство должно быть обращено специальное внимание.
 2. Если оцениваемое сечение получено через отношение к сечению другого материала, которое не входит в число рекомендуемых стандартов, оценщик должен проконтактировать с автором оценки опорного сечения, чтобы убедиться в том, что в ковариационном файле для этого сечения не содержится под-подсекций типа NC по крайней мере для рассматриваемой энергетической области. Контакты такого рода требуются во всех случаях – с тем чтобы убедиться, что ковариационные данные для опорного сечения не содержат под-подсекций с LB=0 и содержат требуемые под-подсекции с LTY=3. Переписку оценщиков по этому поводу следует направлять для сведения и в CSEWG.
- g.) Форматы ENDF-6 позволяют оценщику рассматривать частичные зависимости оцениваемого сечения от сечения-стандарта. Это означает, что в ковариационных файлах могут быть описаны ковариации сечений, полученных частично из абсолютных измерений, а частично – из измерения отношений к одному или нескольким опорным (стандартным) сечениям. Использование

этой возможности предполагает, что информация о ковариациях может быть представлена в соответствующей форме. В связи с усложнением переработки таких данных, оценщикам рекомендуется использовать эту возможность с осторожностью и, во всяком случае, не выражать сечение в данном энергетическом интервале через отношения более, чем к двум разным стандартам.

- h.) Обсуждавшиеся ковариационные члены, обусловленные определением оцененного сечения из относительных измерений, предполагают, что в оценке использовались только “абсолютные” измерения отношений. Использование измерений формы энергетической зависимости сечения или его отношения к стандарту, порождают дополнительные ковариации, которые оценщик ковариаций должен учесть в под-подсекциях типа NI для “выводимого” сечения.
- i.) В случаях когда сечение A коррелирует с сечением B и сечение C коррелирует с сечением B, тогда как сечения A и B друг с другом непосредственно не связаны, оценщик должен включить в файл сегмент, отражающий отсутствие этих непосредственных ковариаций чтобы рецензенты и пользователи обратили внимание на эту нестандартную ситуацию. Это как раз тот исключительный случай, когда следует отступить от правила, согласно которому нулевые корреляции в явной форме не описываются.
- j.) Рассмотрение суммарных реакций для цели описания ковариаций обычно используется по отношению к реакциям неупругого рассеяния с возбуждением дискретных уровней. Однако этот подход может использоваться и для описания ковариаций таких реакций, как $(n, n'p)$, (n, n') , и $(n, n' \text{ continuum})$.
- k.) Для того, чтобы полезная ковариационная информация не была утрачена, суммируемые реакции должны обладать сходными характеристиками. Как правило, энергии уровней, сечения возбуждения которых складываются, не должны отличаться более, чем на 30-40%, а их угловые распределения должны быть сходны друг с другом.
- l.) Компоненты складываемых реакций не обязательно должны иметь соседние номера MT.
- m.) Номера MT компонентам складываемых реакций должны присваиваться последовательно начиная с 851. Номер MTL, указываемый в записи HEAD для первой реакции-компонента, должен быть 851, следующей может быть присвоен номер MTL=852 и т.д.
- n.) Могут рассматриваться суммарные реакции только с одной компонентой. Это рекомендуется делать, например в случаях, когда сечения возбуждения части уровней рассматриваются отдельно, а части соседних с ними уровней – совместно. Ковариации отдельно рассматриваемых уровней и соседних с ними “суммарных уровней” могут размещаться вместе в секциях 851 – 870.
- o.) Под-подсекции с LB=8 включаются в каждую подсекцию (MAT, MT, 0, MT) если известно, что сечение не подвержено неразрешенной структуре⁶.
Доплеровское уширение резонансов, важное для реакторных приложений приводит к сглаживанию нейтронных сечений по интервалам, слишком узким

⁶ Например, если в Файле 33 представлять ковариационные данные о рассеянии нейтронов на водороде, трудно ожидать, чтобы какая-либо из компонент могла быть удовлетворительно представлена в под-подсекции с LB=8. ковариационные данные такого типа лучше представить в Файле 30.

для их представления в под-подсекциях LB=8. Эти под-подсекции должны покрывать всю область энергий, в которой задано сечение (от порога до, по меньшей мере, 20 МэВ). Нулевых значений F_k в какой-либо части этой области следует избегать, поскольку это может привести к появлению нефизических полных корреляций между погрешностями сечений, усредненных по соседним узким группам, т.е. к появлению проблемы, которую формат LB=8 как раз и призван решить. Формат LB=8 не может быть использован для представления ковариаций погрешностей разных реакций. Заметим, что процедуры обработки данных, представленных в формате LB=8, ориентированы на расчет дисперсий средне-групповых сечений, а не дисперсий сечений, заданных поточечно. Если в исходной оценке получить ковариации узко-групповых сечений, а затем эти сечения свернуть с постоянной весовой функцией в сечения, усредненные по интервалам, заданным в E_k -таблице, то полученные компоненты дисперсий как раз и будут те, которые представляются значениями F_k . (Заметим, что из мультигрупповой ковариационной матрицы нельзя корректно получить ковариационную матрицу для более детального группового разбиения; для этого необходимо перерабатывать ковариационные данные, представленные в более детальных форматах ENDF-6). Значения F_k могут быть определены оценщиком так, чтобы они учитывали и влияние статистических флуктуаций резонансных ширин и расстояний на сечения, усредненные по узким группам. Эти величины могут также отражать и неточности оцененных сечений для узких энергетических интервалов, в которые попало мало экспериментальных данных или таковые вообще отсутствуют и процедура сглаживания заведомо содержит погрешности. Под-подсекции с LB=8 помогают преодолеть математические трудности при расчете ковариационных матриц для группового разбиения, более детального, чем то, что использовал оценщик ковариаций, но при этом значения F_k должны быть выбраны весьма тщательно, с тем, чтобы избежать существенного "разбавления" ковариационной картины, представленной в других под-подсекциях. Если для выбора F_k нет достаточного физического базиса, их значения могут быть приняты равными 1% от комбинации вкладов всех других подсекций в дисперсии сечений, усредненных по выбранным оценщикам интервалам. Эти величины будут достаточно малы, чтобы не оказывать деструктивного влияния на результаты оценки других составляющих ковариаций, и в то же время достаточно велики чтобы рассчитываемая ковариационная матрица была положительно определена для любого энергетического разбиения (если она положительно определена для разбиения, определенного оценщиком). Поскольку в формате LB=8 представляются абсолютные ковариации, он становится неприменимым вблизи порога реакции. Например, если порог реакции лежит при 0.1 МэВ, представление LB=8 не может быть использовано при энергиях ниже 1 МэВ.

33.4. Примеры

Мы проиллюстрируем здесь использование форматов Файла 33 на двух конкретных примерах.

- а. Использование под-подсекций с LTY=1 и LTY=2.

Рассмотрим гипотетическую оценку для ^{239}Pu с $\text{MAT}=1264$. Допустим, что решено представить в Файле 33 ковариации только для сечений деления и захвата. Следующие методы были использованы при выполнении гипотетической оценки.

1. Сечение деления, $\text{MT}=18$.

Пусть X_i означает сечение деления ^{239}Pu при энергии E_i .

а) От 10^{-5} эВ до энергии ES сечения X_i оценены на основе “прямых” или “абсолютных” измерений, A_i . Это дает основания полагать, что X_i и их погрешности не зависят от каких-либо других сечений. В этом энергетическом интервале $X_i=A_i$.

б) От ES до 20 МэВ X_i оценены через измеренные отношения R_i сечения деления плутония-239 к сечению деления урана-235 и значения последнего, взяты из оценки для ^{235}U с $\text{MAT}=1261$. В этом интервале $X_i=R_i Y_i$.

2. Сечение захвата, $\text{MT}=102$.

Пусть Z_i означает сечение захвата ^{239}Pu при энергии E_i . Примем, что во всей лобласти энергий это сечение определено, через оцененные отношения сечения захвата к сечению деления, a_i . Следовательно, $Z_i = a_i X_i$.

В рассматриваемой оценке использованы только 3 оценивавшиеся величины: A_i в интервале от 10^{-5} эВ до энергии ES , R_i в интервале от ES до 20 МэВ и a_i в интервале от 10^{-5} эВ до 20 МэВ. В результате оценок этих величин получены три оцененных ковариационных матрицы $\text{COV}(A_i, A_j)$, $\text{COV}(R_i, R_j)$ и $\text{COV}(a_i, a_j)$. Примем дополнительно, что результаты оценки этих величин совершенно независимы, так что перекрестными ковариациями, такими, как $\text{COV}(A_i, a_j)$, например, можно пренебречь. Обозначим относительные ковариации, например, $\text{COV}(A_i, A_j)/(A_i A_j)$ через $\langle dA_i, dA_j \rangle$ (и аналогично для других матриц). В интервале от 10^{-5} эВ до ES , где $X_i = A_i$ и $Z_i = a_i X_i$, имеем:

$$\begin{aligned}\langle dX_i, dX_j \rangle &= \langle dA_i, dA_j \rangle \\ \langle dX_i, dZ_j \rangle &= \langle dA_j, da_j \rangle \\ \langle dZ_i, dZ_j \rangle &= \langle da_i, da_j \rangle + \langle dA_i, dA_j \rangle\end{aligned}$$

В интервале от ES до 20 МэВ, где $X_i = R_i Y_i$ и $Z_i = a_i X_i$, имеем:

$$\begin{aligned}\langle dX_i, dX_j \rangle &= \langle dR_i, dR_j \rangle + \langle dY_i, dY_j \rangle \\ \langle dX_i, dZ_j \rangle &= \langle dR_i, da_j \rangle + \langle dY_i, dY_j \rangle \\ \langle dX_i, dY_j \rangle &= \langle dY_i, dY_j \rangle \\ \langle dZ_i, dZ_j \rangle &= \langle da_i, da_j \rangle + \langle dR_i, dR_j \rangle + \langle dY_i, dY_j \rangle \\ \langle dZ_i, dY_j \rangle &= \langle dY_i, dY_j \rangle\end{aligned}$$

Здесь мы выразили ковариационные матрицы сечений ^{239}Pu через ковариационные матрицы оцененных величин и ковариационную матрицу сечения деления ^{235}U . Для иллюстрации форматов нам не потребуется знать детали представления ковариационных матриц $\langle dA_i, dA_j \rangle$, $\langle dR_i, dR_j \rangle$ и $\langle da_i, da_j \rangle$. Они должны быть представлены E_k -таблицах одной или нескольких под-подсекциях типа NI или, по крайней мере, могут быть в них представлены. Сейчас, для иллюстрации формата, мы символически представим каждую из этих матриц в терминах отдельной под-подсекции типа NI с одной E_k -таблицей:

$$\begin{aligned}\langle dA_j, dA_j \rangle &\rightarrow \{E_k^A, F_k^A\} \\ \langle dR_j, dR_j \rangle &\rightarrow \{E_k^R, F_k^R\} \\ \langle da_j, da_j \rangle &\rightarrow \{E_k^a, F_k^a\}\end{aligned}$$

Каждая из E_k -таблиц может быть представлена в виде

$$\{E_k^A, F_k^A\} = \{1.0E-5, F_1^A; \dots; E_k^A, F_k^A; \dots; ES, 0.0; 2.0E+7, 0.0\},$$

$$\{E_k^R, F_k^R\} = \{1.0E-5, 0.0; ES, F_k^R; \dots; E_k^R, F_k^R; \dots; 2.0E+7, 0.0\},$$

$$\{E_k^a, F_k^a\} = \{1.0E-5, F_1^a; F_k^a; \dots; E_k^a, F_k^a; \dots; 2.0E+7, 0.0\},$$

Значения E и F, фигурирующие в этих таблицах, соответствуют данному выше описанию рассматриваемого примера. В приводимом ниже листинге примера Файла 33 для MAT=1264 для каждой из матриц $\langle dA_i, dA_j \rangle$, $\langle dR_i, dR_j \rangle$ и $\langle da_i, da_j \rangle$ приводится по одной под-подсекции. Значение ES везде равно $2 \cdot 10^5$ эВ.

Замечание: В Файле 33 для материала MAT=1261 в подсекции (1261,18; 1264,18) и (1261, 18; 1264,102) должны быть включены под-подсекции типа NC с LTY=3, соответствующие под-подсекциям типа NC с LTY=2 в примере 33.2.

Пример 33.1. Файл 33 с под-подсекциями типа NC с LTY=1

```

9.42390+4 2.36999+2 0 0 0 NL=3126433 18 HEAD
0.00000+0 0.00000+0 MAT1=0 T1=18 NC=1 NI=2126433 18 CONT
0.00000+0 0.00000+0 0 LTY=1 0 0126433 18 CONT
2.00000+5 2.00000+7 MATS=1261 MTS=18 NT=6 NE=2126433 18 LIST
0.00000+0 0.00000+0 2.00000+5 1.00000+0 2.00000+7 0.00000+0126433 18 <dYi×dYj>
0.00000+0 0.00000+0 LT=0LB=1 NY=14 NE=7 126433 18 LIST
1.00000-5 0.00000+0 1.00000+0 2.50000-3 3.00000+2 3.60000-3126433 18 <dAi×dAj>
3.00000+4 4.90000-3 1.00000+5 6.40000-3 2.00000+5 0.00000+0126433 18
2.00000+7 0.00000+0 126433 18
0.00000+0 0.00000+0 LT=0 LB=1 NT=6 NE=3126433 18 LIST
1.00000-5 0.00000+0 2.00000+5 4.00000-4 2.00000+7 0.00000+0126433 18 <dRi×dRj>
(1264,18;0,102)
0.00000+0 0.00000+0 MAT1=1261 MT1=18 NC=1 NI=0126433 18 CONT
0.00000+0 0.00000+0 0 LTY=2 0 0126433 18 CONT
2.00000+5 2.00000+7 MATS=1261 MTS=18 NT=6 NE=2126433 18 LIST
0.00000+0 0.00000+0 2.00000+5 1.00000+0 2.00000+7 0.00000+0126433 19 <dYi×dYj>
0.00000+0 0.00000+0 0 0 0 0126433 0 SEND
(1264,102;0,102)

```

```

9.42390+4 2.36999+2      0      0      0      NL=2126433102 HEAD
0.00000+0 0.00000+0      MAT=0  MT1=102  NC=1      NI=2126433 18 CONT
0.00000+0 0.00000+0      0      LTY=1      0      0126433 18 CONT
2.00000+5 2.00000+7  MATS=1261  MTS=18  NT=6      NE=2126433 18 LIST
0.00000+0 0.00000+0 2.00000+5 1.00000+0 2.00000+7 0.00000+0126433 18 <dYi×dYj>
0.00000+0 0.00000+0      LT=0      LB=1      NT=14      NE=7126433 18 LIST
1.00000-5 0.00000+0 1.00000+0 2.50000-3 3.00000+2 3.60000-3126433 18 <dAi×dAj>
3.00000+4 4.90000-3 1.00000+5 6.40000-3 2.00000+5 0.00000+0126433 18
2.00000+7 0.00000+0      126433 18
0.00000+0 0.00000+0      LT=0      LB=1      NT=6      NE=3126433 18 LIST
1.00000-5 0.00000+0 2.00000+5 4.00000-4 2.00000+7 0.00000+0126433 18 <dRi×dRj>
(1264,18;1261,18)
0.00000+0 0.00000+0      MAT1=0  MT1=102  NC=1      NI=3126433102 CONT
0.00000+0 0.00000+0      0      LTY=1      0      0126433102 CONT
2.00000+5 2.00000+7  MATS=1261  MTS=18  NT=6      NE=2126433102 LIST
0.00000+0 0.00000+0 2.00000+5 1.00000+0 2.00000+7 0.00000+0126433102 <dYi×dYj>
0.00000+0 0.00000+0      LT=0      LB=1      NT=14      NE=7126433102 LIST
1.00000-5 0.00000+0 1.00000+0 2.50000-3 3.00000+2 3.60000-3126433102 <dAi×dAj>
3.00000+4 4.90000-3 1.00000+5 6.40000-3 2.00000+5 0.00000+0126433102
2.00000+7 0.00000+0      126433102
0.00000+0 0.00000+0      LT=0      LB=1      NT=6      NE=3126433102 LIST
1.00000-5 0.00000+5 2.00000+5 4.00000-4 2.00000+7 0.00000+0126433102 <dRi×dRj>
0.00000+0 0.00000+0      LS=1      LB=5      NT=21      NE=61254331-2 LIST
1.00000-5 2.53000-2 9.00000-2 2.50000-1 1.00000+0 2.00000+7126433102 <dai×daj>
2.21000-3 4.84000-4 3.62000-4 3.56000-4 0.00000+0 4.84000-4126433102
3.10000-4 3.04000-4 0.00000+0 6.25000-4 2.30000-4 0.00000+0126433102
2.21000-3 0.00000+0 0.00000+0 0.00000+0 0.00000+0 0.00000+0126433102
(1264,102;1261,18)
0.00000+0 0.00000+0  MAT1=1261  MT1=18  NL=1      NI=0126433102 CONT
0.00000+0 0.00000+0      0      LTY=2      0      0126433102 CONT
2.00000+5 2.00000+7  MATS=1261  MTS=18  NT=6      NE=2126433102 LIST
0.00000+0 0.00000+0 2.00000+5 1.00000+0 2.00000+7 0.00000+0126433102 <dYi×dYj>
0.00000+0 0.00000+0      0      0      0      0126433 0 SEND

```

b. Использование под-подсекций типа NC с LTY=0

Рассмотрим гипотбетическую оценку ¹²C, MAT=1274. Принято решение представить в Файле 33 ковариационные данные для MT=1, 2, 4, 102 и 107. Используем обозначения, введенные в предыдущем примере. Следующие методы оценки использованы в этом примере:

1. Полное сечение (Mt=1)

Use of LTY=0, "NC-type" sub-subsections

Let us consider a hypothetical evaluation of ¹²C, MAT=1274. The decision is made that in File 33 the MT values 1, 2, 4, 102 and 107 shall have covariances represented. We shall use

the notation developed in the previous example. The following method was used in this evaluation:

1. Total cross sections (MT=1), σ_1^T оценено во всей энергетической области с ковариационной матрицей:

$$\langle d\sigma_1^T \cdot d\sigma_j^T \rangle \rightarrow \{E_k^T, F_k^T\},$$

где

$$\{E_k^T, F_k^T\} = \{1.0E-5, F_1^T; \dots; E_k^T, F_k^T; \dots; 2.0E+7, 0.0\},$$

2. Сечение упругого рассеяния (MT=2), σ_1^E до 8.5 МэВ "выведено" up to 8.5 MeV из "оцененных" сечений:

$$\sigma_1^E = \sigma_1^T - \sigma_1^I - \sigma_1^C - \sigma_1^{\alpha}.$$

Выше 8.5 МэВ сечение упругого рассеяния и его ковариации оценивались непосредственно:

$$\langle d\sigma_i^E \cdot d\sigma_j^E \rangle \rightarrow \{E_k^E, F_k^E\},$$

где

$$\{E_k^E, F_k^E\} = \{1.0E-5, 0.0; 8.5E+6, F_k^E; \dots; E_k^E, F_k^E; \dots; 2.0E+7, 0.0\}.$$

3. Сечение неупругого рассеяния (MT=4), σ_1^I , оценено от порога при 4.8 МэВ до 8.5 МэВ непосредственно:

$$\langle d\sigma_i^I \cdot d\sigma_j^I \rangle \rightarrow \{E_k^I, F_k^I\},$$

где

$$\{E_k^I, F_k^I\} = \{1.0E-5, 0.0; 4.8E+6, F_k^I; \dots; E_k^I, F_k^I; \dots; 8.5E+6, 0.0; 2.0E+7, 0.0\},$$

Выше 8.5 МэВ это сечение "выведено" следующим образом:

$$\sigma_1^I = \sigma_1^T - \sigma_1^E - \sigma_1^C - \sigma_1^{\alpha}.$$

4. Сечение захвата (MT=102), σ_1^C оценено во всей энергетической области:

$$\langle d\sigma_i^C \cdot d\sigma_j^C \rangle \rightarrow \{E_k^C, F_k^C\},$$

где:

$$\{E_k^C, F_k^C\} = \{1.0E-5, F_1^C; \dots; E_k^C, F_k^C; \dots; 2.0E+7, 0.0\},$$

5. Сечение реакции (n,α) (MT=107), σ_1^{α} оценено от порога при 6.18 МэВ до 20 МэВ:

$$\langle d\sigma_i^{\alpha} \cdot d\sigma_j^{\alpha} \rangle \rightarrow \{E_k^{\alpha}, F_k^{\alpha}\},$$

где

$$\{E_k^{\alpha}, F_k^{\alpha}\} = \{1.0E-5, 0.0; 6.18E+6, F_k^{\alpha}; \dots; E_k^{\alpha}, F_k^{\alpha}; \dots; 2.0E+7, 0.0\},$$

В приводимом ниже листинге примера 33.2 Файла 33 для MAT-1274 мы приводим только одну под-подсекцию типа NI для каждой оцененной ковариационной матрицы. Предположено также, что между погрешностями непосредственно оцененных величин никаких корреляций нет. Описанный выше пример весьма подобен тому, как оценка данных для ^{12}C выполнялась на самом деле. Главное различие состоит в том, что непосредственно оценивалось не суммарное сечение неупругого рассеяния, а отдельно данные для MT=51 и для MT=91.

Коль скоро мы хотим проиллюстрировать некоторые правила, действующие в Файле 33, рассмотрим дополнение описанного выше содержания Файла 33 ковариационными матрицами для MT=51 и MT=91.

a. MT=51

Сечение неупругого рассеяния с возбуждением первого уровня σ_1^{51} до 8.5 МэВ совпадает с полным неупругим рассеянием. Следовательно, до 8.5 МэВ можно считать σ_1^{51} “выведенным” из σ_1^I : $\sigma_1^{51} = \sigma_1^I$. Это допустимо, поскольку в рассматриваемом энергетическом диапазоне ковариации σ_1^I представлены только в одной под-подсекции NI

От 8.5 МэВ до 20 МэВ сечение σ_1^{51} оценивалось непосредственно:

$$\langle d\sigma_i^{51} \cdot d\sigma_j^{51} \rangle \rightarrow \{E_k^{51}, F_k^{51}\},$$

где

$$\{E_k^{51}, F_k^{51}\} = \{1.0E-5, 0.0; 8.5E+6, F_k^{51}; \dots; E_k^{51}, F_k^{51}; \dots; 2.0E+7, 0.0\},$$

b. MT=91

От 8.5 до 20 MeV, сечение возбуждения континуума “выведено” как разность:

$$\sigma_i^{91} = \sigma_i^I - \sigma_i^{51}$$

Однако мы не можем непосредственно воспользоваться этим соотношением в Файле 33 поскольку в рассматриваемом энергетическом диапазоне сечение неупругого рассеяния само является “выведенным” сечением. Поэтому мы должны записать

$$\sigma_i^{91} = \sigma_i^T - \sigma_i^E - \sigma_i^{51} - \sigma_i^C - \sigma_i^a,$$

что позволяет при определении ковариаций σ_i^{91}

ссылаться только на ковариации только тех сечений, для которых имеются под-подсекции типа NI. Таким образом Файл 33 может быть дополнен более детальной информацией.

Пример 33.2. Файл 33 с под-подсекцией типа NC с LTY=0 .

```
(1274.1;0.1)
6.01200+3 1.18969+1      0      0      0      1112733 1 HEAD
0.00000+0 0.00000+0      0      1      0      1112733 1 CONT
0.00000+0 0.00000+0      0      1      6      3112733 1 LIST
1.00000-5 5.00000-5 2.00000+6 2.50000-5 2.00000+7 0.00000+0 112733 1
0.00000+0 0.00000+0      0      0      0      0112733 0 SEND
```

```

(1274,2;0,2)
6.01200+3 1.18969+1 0 0 0 1112733 2 HEAD
0.00000+0 0.00000+0 0 2 1 1112733 2 CONT
0.00000+0 0.00000+0 0 0 0 0112733 2 CONT
1.00000-5 8.50000+6 0 0 8 4112733 2 LIST
1.00000+0 1.00000+0 1.00000+0 4.00000+0-1.00000+0 1.02000+2 112733 2
-1.00000+0 1.07000+0 112733 2
0.00000+0 0.00000+0 0 1 8 4112733 2 LIST
1.00000-5 0.00000-0 8.50000+6 8.00000-6 1.50000+6 2.50000-5 112733 2
2.00000+7 0.00000+0 112733 2
0.00000+0 0.00000+0 0 0 0 0112733 0 SEND

(1274,4;0,4)
6.01200+3 1.18970+1 0 0 0 1112733 4 HEAD
0.00000+0 0.00000+0 0 4 1 1112733 4 CONT
0.00000+0 0.00000+0 0 0 0 0112733 4 CONT
LIST
1.00000+0 1.00000+0-1.00000+0 2.00000+0-1.00000+0 1.02000+2 112733 4
-1.00000+0 1.07000+2 112733 4
0.00000+0 0.00000+0 0 1 8 4112733 4 LIST
4.80000+6 1.00000-3 6.00000+6 1.00000-4 8.50000+6 0.00000-0 112733 4
8.50000+6 2.00000+7 0 0 8 4112733 4
2.00000+7 0.00000+0 112733 4
0.00000+0 0.00000+0 0 0 0 0112733 0 SEND

(1274,102;0,102)
6.01200+3 1.18969+1 0 0 0 1112733102 HEAD
0.00000+0 0.00000+0 0 102 0 1112733102 CONT
0.00000+0 0.00000+0 0 1 6 3112733102 LIST
1.00000-5 3.60000-3 1.00000+3 4.00000-2 2.00000+7 0.00000+0 112733102
0.00000+0 0.00000+0 0 0 0 0112733 0 SEND

(1274,107;0,107)
6.01200+3 1.18969+1 0 0 0 1112733107 HEAD
0.00000+0 0.00000+0 0 107 0 1112733107 CONT
0.00000+0 0.00000+0 0 0 8 4112733107 LIST
6.18000+6 1.00000-5 6.32000+6 1.00000-4 7.36000+6 2.00000-4 112733107
2.00000+7 0.00000+0 112733107
0.00000+0 0.00000+0 0 0 0 0112733 0 SEND

```

Пример 33.3. Дополнительные секции Файла 33 для примера 33.

```

(1274,51;0,51)
6.01200+3 1.18969+1 0 0 0 1127433 51 HEAD
0.00000+0 0.00000+0 0 51 1 1127433 51 CONT
0.00000+0 0.00000+0 0 0 0 0127433 51 CONT
1.00000-5 8.50000+6 0 0 2 1127433 51 LIST
1.00000+0 4.00000+0 127433 51
0.00000+0 0.00000+0 0 1 6 3127433 51 LIST
1.00000-5 0.00000+0 8.50000+6 2.50000-3 2.00000+7 0.00000+0 1127433 51
0.00000+0 0.00000+0 0 0 0 0127433 0 SEND

(1274,91;0,91)
6.01200+3 1.18969+1 0 0 0 1127433 91 HEAD
0.00000+0 0.00000+0 0 91 1 0127433 91 CONT
0.00000+0 0.00000+0 0 0 0 0127433 51 CONT
8.50000+6 2.00000+7 0 0 10 5127433 51 LIST
1.00000+0 1.00000+0-1.00000+0 2.00000+0-1.00000+0 5.10000+1 1127433 51
-1.00000+0 1.02000+2-1.00000+0 1.07000+2 127433 51
0.00000+0 0.00000+0 0 0 0 0127433 0 SEND

```

34. Файл 34. КОВАРИАЦИИ УГЛОВЫХ РАСПРЕДЕЛЕНИЙ ВТОРИЧНЫХ ЧАСТИЦ

34.1. Введение

Файл 34 содержит ковариации угловых распределений вторичных частиц. Предполагается, что погрешности требуется знать не для всех величин, приводимых в Файле 4. Прежде всего, встает вопрос о том, скоррелированы ли погрешности угловых распределений с погрешностями сечений или достаточно рассматривать только ковариации параметров угловых распределений при различных энергиях. Принято, что ковариации между сечениями и угловыми распределениями существенны лишь в том случае, если оценка в основном или в значительной мере основана на теоретических расчетах. Методика описания ковариаций, предлагаемая ниже для подобных случаев, состоит в том, чтобы выражать ковариации между коэффициентами Лежандра с коэффициентом a_0 , невзирая на то, что по определению $a_0 \equiv 1$.

Поскольку описать ковариации между коэффициентами Лежандра много проще, чем между точками нормированных распределений вероятности, ниже предполагается рассмотрение ковариаций между коэффициентами Лежандра и для тех случаев, в которых угловые распределения в Файле 4 заданы таблицами $p(\mu)$.

В форматах ENDF-6 не предусматривается возможность описания ковариаций между погрешностями угловых распределений для разных материалов, и хотя место для записи MAT1 резервируется, на этом месте проставляется нуль.

34.2. Форматы

Общая структура Файла 34 следует общему правилу, согласно которому информация представляется в секциях с возрастающими значениями MT. Признак LTT в Файле 33 имеет несколько иной смысл, чем в Файле 4.

Определяются следующие величины.

ZA,AWR – стандартные параметры заряда и массы ядра-мишени.

LTT – признак типа представления, использованного в Файле 34:

LTT=1 - данные представлены в виде энергетических зависимостей коэффициентов Лежандра для ковариаций, начинающихся с коэффициента a_1 (или коэффициента более высокого порядка)

LTT=3 - данные представлены в виде энергетических зависимостей коэффициентов Лежандра для ковариаций, начинающихся с коэффициента a_0 (как будет показано ниже, эта информация избыточна, но ее введение желательно, т.к. ее наличие служит предохраняющим признаком).

LTT=3 – если во всей секции L1 (или любой другой коэффициент Лежандра) равен нулю.

NMT1 – Второй параметр подсекции в Файле 34, $NMT1 \geq MT$.

A section of File 34 for a given MT has the form:

```
[MAT, 34, MT/ ZA, AWR, LVT, LTT, 0, NMT1] HEAD (LVT=0)
```

<подсекция для MT1 = MT>

<NMT1-я подсекция для максимального значения MT1>

[MAT,34,0/ 0.0, 0.0, 0, 0, 0, 0] SEND

Каждая подсекция начинается с записи CONT, в которой определяется реакция MT1 и указываются NL и NL1 - числа коэффициентов Лежандра, представляющих реакцию MT и реакцию MT1>MT.

Определяются следующие величины:

MT1 – номер “другой” реакции; подсекция содержит ковариации $COV[a_L(E_1), a_{L1}(E_2)]$ между

L-м коэффициентом Лежандра для реакции MT при энергии E_1 и L1-м коэффициентом Лежандра для реакции MT1 при энергии E_2 .

NL – Число коэффициентов Лежандра, рассматриваемых для реакции MT (оно должно быть одним и тем же во всех подсекциях данной секции). Если LTT=3, первым коэффициентом является a_0 , если LTT=1, первым коэффициентом является a_1 .

NL1 – число коэффициентов Лежандра, рассматриваемых для реакции MT1.

L – Номер коэффициента Лежандра для реакции MT, рассматриваемый в данной под-подсекции. Заметим, что под-подсекции не обязательно приводятся для всех пар значений L и L1.

L1 – номер коэффициента Лежандра для реакции MT1, рассматриваемой в этой под-подсекции.

NI- Число записей LIST в данной под-подсекции.

LS – При LB=5 является признаком симметричности матрицы (LS=1 – матрица симметрическая, LS=0 – не симметрическая).

LB – признак способа представления ковариационной матрицы. Допустимы значения LB=0, 1, 2, 5 и 6; смысл обозначаемых представлений описан в Секции 33.2 в описании Файла33.

NT – полное количество чисел в представлении ковариационных данных: при LB=0, 1, 2 $NT=2*NE$; при LB=5 NT зависит от NS, так, как это описано в Секции 33.2.; при $NT=1+NER*NEC$.

{Data} – при LB=5, последовательность $\{E_k\} \{F_{k,k}\}$; при LB=6, последовательность $\{E_k\} \{F_{k,l}\}$ (как в Файле 33).

Подсекция имеет следующую форму:

```
[MAT,34,MT/ 0.0, 0.0, MAT1, MT1, NL, NL1] CONT (MAT1=0)
[MAT,34,MT/ 0.0, 0.0, L1, L11, 0, NI1] CONT1
[MAT,34,MT/ 0.0, 0.0, LS1, LB1, NT1, NE1/ {Data1}] LIST
```

```
-----
[MAT,34,MT/ 0.0, 0.0, LSN11, LBSNI1, NTSNI1, NENI1/ {DataNI1}] LIST
-----
```

```
-----
[MAT,34,MT/ 0.0, 0.0, LNSS, L1NSS, 0, NINSS ] CONT
[MAT,34,MT/ 0.0, 0.0, LS1, LB1, NT1, NE1/ {Data1}] LIST
-----
```

```
-----
[MAT,34,MT/ 0.0, 0.0, LSNINSS, LBNINSS, NTNINSS, NEINSS/ {DATAININSS}] LIST
```

¹ В этой первой под-подсекции L и $L1$ суть наименьшие значения из всех NL или, соответственно, $NL1$ возможных.

Число под-подсекций NSS для данного $MT1$ равно $NL * NL1$ и они следуют в порядке $(L, L1) = (1, 1), (1, 2), \dots, (NL, NL1)$. При этом могут быть учтены не все значения моментов. При $MT1 = MT$ избыточность устраняется путем приведения только подсекций с $L1 \geq L$. В этом случае $NSS = NL * (NL + 1) / 2$.

34.3. Правила

Настоятельно рекомендуется минимизировать максимальный порядок моментов. Для которых приводятся ковариации.

В случаях, когда форма угловых распределений существенно коррелирует с величиной сечения (например при описании n -р-рассеяния), ковариации между сечениями (проинтегрированными по всем углам) приводятся в Файле 33 и в Файле 34 они повторяться не должны, т.е. под-подсекции с $L=L1=0$ в этом файле должны содержать нулевые ковариационные компоненты. Это правило соответствует общему положению, что полная ковариационная матрица получается суммированием вкладов из различных частей файла ENDF для данного материала. Заметим, что в случае скоррелированности погрешностей сечения рассеяния и углового распределения возможно введение в Файл 34 под-подсекций с Mt , соответствующим сечению, получаемому по разности между полным сечением и сечением рассеяния (только при $L=0$).

35. ФАЙЛ 35. КОВАРИАЦИИ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ РАСПРЕДЕЛЕНИЙ ВТОРИЧНЫХ ЧАСТИЦ

35.1. Введение

Файл 35 содержит ковариации энергетических распределений вторичных частиц, приведенных в Файле 5. Данные в Файле 5 приводятся в лабораторной системе координат и представлены нормированными распределениями плотности вероятности.

Поскольку информация, полагаемая в основу оценки энергетических распределений, обычно весьма фрагментарна, погрешности этих данных при разных энергиях налетающих частиц сильно коррелируют между собой. Предполагается поэтому, что для каждого значения МТ в Файле 35 для описания всей рассматриваемой области энергий будет достаточно привести небольшое число ковариационных матриц (не более четырех или пяти) вне зависимости от того, как описываются распределения по вторичным энергиям, разбиваются они в Файле 5 на отдельные компоненты или нет и т.п. При предпринимаемой здесь первой попытке описания ковариаций энергетических спектров вторичных частиц не предусматривается описание ковариаций данных при разных энергиях налетающих частиц. Не предусматривается и описание ковариаций данных для различных реакций или различных материалов¹. Более того, не предусматривается описание ковариаций между спектральными характеристиками и сечениями, представленными в Файле 5 или $\nu(E)$, представленным в Файле 1.

35.2. Форматы

Каждая подсекция описывает ковариации для определенного интервала энергий падающих частиц; вся энергетическая область покрывается НК подсекциями. Поскольку в Файле 35 естественно использовать абсолютные, а не относительные ковариационные матрицы, вводится новое значение признака LB, LB=7. Формат подсекции с LB=7 аналогичен формату подсекции с LB=5, но подсекция при LB=7 содержит абсолютные, а не относительные ковариации.

Определяются следующие величины:

NK – число подсекций.

E₁ – низнеэнергетическая граница интервала, для которого приводятся ковариационные данные в рассматриваемой подсекции.

E₂ – верхнеэнергетическая граница этого интервала. Эта граница должна совпадать с E₁ для следующего интервала или с верхней границей всей рассматриваемой области.

LS=1 – признак, указывающий на симметричность приводимой ковариационной матрицы.

LB=7 – признак, указывающий на то, что приводятся абсолютные ковариации.

NT – полное количество чисел в записи LIST: $NT = [NE * (NE + 1)] / 2$.

NE – количество чисел в массиве $\{E'_k\}$

¹ Необходимость учета корреляций между спектрами групп запаздывающих нейтронов для различных делящихся материалов, возникающая при использовании универсального 8-группового описания запаздывающих нейтронов, несмотря на это ограничение решается тривиально, поскольку в этом случае пользователю известно, что и спектры и их ковариации для всех делящихся ядер одинаковы и не обязательно этот факт отражать в формате ENDF. Проблема состоит в оценке погрешностей этих спектров. - М.Н.

$\{E'_k\}$ – массив, определяющий NE-1 энергетический интервал вторичных энергий. E'_1 в этом массиве должно соответствовать самой низкой энергии, возможной при начальной энергии E_1 ; E'_2 должно соответствовать максимально возможной энергии, представленной в Файле5.

$\{F_{k,k'}\}$ - ковариационная матрица, упорядоченная по строкам, каждая из которых начинается с диагонального члена:

$$\{F_{k,k'}\} \equiv F_{1,1}, F_{1,2}; F_{2,2}, F_{2,3}, \dots, \dots; F_{NE-1,NE-1} \cdot$$

Секция Файла 35 имеет следующую структуру:

```
[MAT, 35, MT/ ZA, AWR, 0, 0, NK, 0] HEAD
      <подсекция для k=1>
      <подсекция для k=NK>
[MAT, 35, 0/ 0.0, 0.0, 0, 0, 0, 0] SEND
```

Структура подсекции такова:

```
[MAT, 35, MT/ E1, E2, LS, LB, NT, NE/{E'_k}, {F_{k,k'}}] LIST (LS=1, LB=7)
```

В терминах безразмерных операторов, описанных в Секции 33.2, ковариации между двумя точками по конечной энергии в нормированном распределении плотности вероятности определяются так:

$$Cov(p(E \rightarrow E'_i), p(E \rightarrow E'_j)) = \sum_{k,k'} P_{j,k'}^{i,k} F_{k,k'}$$

Где $E_1 \leq E \leq E_2$ и значения P отличны от нуля только при $E'_k \leq E'_{i'} \leq E'_{k+1}$ и $E'_k \leq E'_{j'} \leq E'_{k+1}$.

35.3. Правила

Поскольку распределения плотности вероятности должны сохраняться нормированными, ковариационные матрицы в Файле 35 помимо того, что они должны быть симметрическими, должны удовлетворять этому условию. А условие это означает, что суммы элементов каждой строки (а, следовательно, и каждого столбца) должна равняться нулю. Отсюда следует, что независимыми элементами матрицы, построенной для n интервалов конечной энергии, являются только $n-1$ элемент, а оставшийся элемент может быть определен из условия нормировки. Сумма элементов матрицы для энергетической сетки оценщика должна быть меньше, чем 10^{-5} . Это же условие должно выполняться и для конечной многогрупповой матрицы после переработки исходной.

Если $F_{k,k'}$, описывающие ковариации значений Y_k нормированного распределения плотности вероятности в узлах сетки $\{F_{k,k'}\}$, заданной оценщиком, условию сохранения нормировки не удовлетворяют, они могут быть заменены откорректированными ковариациями, определенными следующим образом:

$$\bar{F}_{k,k'} = F_{k,k'} - S_k Y'_k - S'_k Y_k + Y_k Y'_k \sum_j S_j$$

где

$$S_k = \sum_i F_{i,k}$$

В описанном выше формате могут быть представлены, в частности, данные о погрешностях распределений вторичных частиц, оцененные методом «горячо-холодно», развитым Герстлом

(см. ссылки ниже). В этом случае для каждой начальной энергии задается ковариационная матрица 2×2 .

Литература

1. S. A. W. Gerstl, "Uncertainty Analyses for Secondary Energy Distributions", *A Review of the Theory and Application of Sensitivity and Uncertainty Analysis: Proceedings of a Seminar-Workshop, August 22-24, 1978*, C. R. Weisbin, et al., Eds, Radiation Shielding Information Center report, Oak Ridge National Laboratory **ORNL/RSIC-42** (1978) p. 219.
2. S. A. W. Gerstl, R. J. LaBauve, and P. G. Young, *A Comprehensive Neutron Cross-Section and Secondary Energy Distribution Uncertainty Analysis for a Fusion Reactor*, Los Alamos Scientific Laboratory report **LA-8333-MS** (1980).

40. ФАЙЛ 40. КОВАРИАЦИИ ДАННЫХ ОБ ОБРАЗОВАНИИ РАДИОНУКЛИДОВ

Текст этого раздела не переводился, т.к. ни в одной известной авторам библиотеке подобных данных не содержится. Приводим, однако, английский текст этого раздела.

40.1. General Description

File 40 contains the covariances of neutron activation cross-section information appearing in File

10. This file is based on File 33, which should be consulted for further information, and on File 10.

40.2. Formats

The following quantities are defined:

ZA,AWR Standard material charge and mass parameters.

LIS Level number of the target.

NS Number of subsections; one for each LFS.

QM Mass-difference Q-value based on the ground state of the residual nucleus

QI Reaction Q-value (eV). (See Chapter 10.)

LFS Level number of the nuclide (ZAP) produced in the neutron reaction of type MT.

NL Number of subsections.

Section

File 40 is divided into sections identified by the value of MT. Each section of File 40 starts with

a HEAD record, ends with a SEND record, and has the following structure:

```
[MAT,40, MT/ ZA, AWR, LIS, 0, NS, 0] HEAD
```

```
<NS subsections, one for each LFS>
```

```
[MAT,40, MT/ 0.0, 0.0, 0, 0, 0, 0] SEND
```

Subsection

Each subsection has the following structure:

```
[MAT,40, MT/ QM, QI, 0, LFS, 0, NL] CONT
```

```
<sub-subsection for L=1>
```

```
-----  
-----
```

```
<sub-subsection for L=NL>
```

Sub-subsections

Each sub-subsection is used to describe a single covariance matrix, the covariance matrix of the

energy-dependent cross section given in section (MAT, 10, MT) with given final state (LFS) and the

energy-dependent cross sections given in section (MAT1, MF1, MT1) (and for a given final state

(LFS1), if MF1=10). The values of MAT1, MF1, MT1, and LFS1 are given in the CONT record

that begins every sub-subsection.

Each sub-subsection may contain several sub-sub-subsections. Each sub-sub-subsection

describes an independent contribution to the covariance matrix given in the sub-subsection. The total covariance matrix in the sub-subsection is made up of the sum of the contributions of the individual sub-sub-subsections.

April 2001 40.1

The following additional quantities are defined:

XMF1 Floating point form of MF1 (the file number for the 2nd cross section to which the covariance data relates).

XLFS1 Floating point form of LFS1 (the index of the final state for the 2nd cross section to which the covariance data relates).

MAT1 MAT for the 2nd cross section to which the covariance data relates.

MT1 MT for the 2nd cross section to which the covariance data relates.

NC Number of "NC-type" subsections which follow the CONT record.

NI Number of "NI-type" subsections which follow the "NC-type" subsections.

The structure of a sub-subsection describing the covariance matrix of the cross sections given in

(MAT, 10, MT) LFS and (MAT1, MF1, MT1) LFS1 is:

```
[MAT,40,MT/ XMF1, XLFS1, MAT1, MT1, NC, NI] CONT
```

```
<sub-sub-subsection for nc = 1>
```

```
-----  
-----
```

```
<sub-sub-subsection for nc = NC>
```

```
<sub-sub-subsection for ni = 1>
```

```
-----  
-----
```

```
<sub-sub-subsection for ni = NI>
```

The formats of the sub-sub-subsection for File 40 are exactly the same as the formats for the

sub-subsections for File 33.

40.3. Procedures

The procedures for File 40 are the same as for File 33 except that File 40 has one more level of

indexing corresponding to the LFS and LFS1 flags and as noted below.

40.3.1. Ordering of Sections, Subsections, Sub-subsections, and Sub-sub-subsections

a. Sections: The sections in File 40 are ordered by increasing value of MT.

b. Subsections: Within a section, (MAT,40,MT), the subsections are ordered by increasing value of LFS.

c. Sub-subsections: A sub-subsection of File 40 is uniquely identified by the set of numbers (MAT,MT,LFS; MAT1,MT1,MF1,LFS1); the first two numbers indicate the section, the third indicates the subsection, while the last four indicate the sub-subsection.

1. The sub-subsections within a subsection are ordered by increasing value of MAT1. The value of

MAT1=0 shall be used to mean MAT1=MAT.

2. When there are several sub-subsections with the same value of MAT1 in a subsection, these

sub-subsections shall be ordered by increasing values of XMF1. When MF1=MF, the XMF1

field shall be entered as blank or zero. Therefore, within a given subsection, the sub-subsections

for $MF_1=MF$ will always appear before those for other MF_1 values.

40.2 April 2001

3. When there are several sub-subsections with the same value of MAT_1 and MF_1 in a subsection,

these sub-subsections shall be ordered by increasing values of MT_1 . If $MAT_1=MAT$ and $MF_1=MF$, then only those sub-subsections for $MT_1 \leq MT$ shall be given.

4. When there are several sub-subsections with the same value of (MAT_1, MT_1, MF_1) in a subsection, these sub-subsections shall be ordered by increasing values of LFS_1 . If $MAT_1=MAT$, $MF_1=MF$, and $MT_1=MT$, then only those sub-subsections for $LFS_1 \leq LFS$ shall be

given. ($LFS_1=0$ implies the ground state of the product and does not imply $LFS_1=LFS$).

40.3.2. Completeness

There are no minimum requirements on the number of sections, subsections, and sub-subsections

in File 40. However, the presence of certain data blocks in File 40 implies the presence of others,

either in File 33 or 40 of a referenced material. In what follows, we shall identify the sub-subsections of File 40 by

$(MAT, MT, LFS; MAT_1, MT_1, MF_1, LFS_1)$.

The presence of this data block with $MAT_1 \leq MAT$ or $MF_1 \leq MF$ implies the presence of appropriate

data in:

- a. $(MAT, MT, LFS; MAT, MT, MF=10, LFS)$, in File 40 of MAT ;
- b. $(MAT_1, MT_1, LFS_1; MAT_1, MT_1, MF_1, LFS_1)$, in File (MF_1+30) of MAT_1 ;
- c. $(MAT_1, MT_1, LFS_1; MAT, MT, MF=10, LFS)$, also in File (MF_1+30) of MAT_1 .