Ядерные данные для расчёта реакторов и защиты

Издание второе, расширенное

Николаев М.Н., Синица В.В.
1.12.2024

Оглавление

ВВЕДЕНИЕ

26 февраля 1896 года французский физик Анри Беккерель открыл явление радиоактивности урана. В 1909 Ханс Гейгер и Эрнст Марсден, по инициативе Эрнста Резерфорда, провели эксперименты по изучению рассеяния излучаемых ураном альфа-частиц на тонкой золотой фольге, которые выявили случаи рассеяния на большие углы. Это противоречило предсказаниям господствовавшей в то время модели атома Томсона, и подтвердили планетарную модель, предложенную Эрнстом Резерфордом, о чем и было доложено в классической статье в 1911 году. Начались интенсивные исследования строения атома. В 1919 году, облучая альфа-частицами атомы азота, Резерфорд выдвинул гипотезу, что ядра состоят из протонов, поскольку по своей массе они были кратны массе водорода. После тщательного анализа своих опытов, он нашёл в них ошибки, указывающие на наличие другой частицы с близкой массой, обнаружить которую ему не удалось. Это смог сделать Джеймс Чедвик в 1932 году, облучая альфа-частицами бериллий. Обнаруженная частица, не имеющая электрического заряда и поэтому без труда сталкивающаяся с положительно заряженными ядрами, была названа нейтроном. Во всём мире стали исследовать радиоактивность и взаимодействие нейтронов и протонов с ядрами. Физические журналы интенсивно пополнялись всё новыми ядерными данными.

В конце 1941г. лейтенант Г. Флёров был направлен в Военно-Воздушную академию в Йошкар-Олу. По пути туда он улучил момент побывать в библиотеке и обнаружил, что журналы перестали публиковать ядерные данные. Будучи опытным физиком (годом раньше он вместе с К.Петржаком открыл спонтанное деление), он сообразил, что это означает развёртывание за рубежом работ по военному применению ядерной энергии и написал письмо И.В.Сталину, отметив необходимость возобновления прерванных войной ядерно-физических исследований. Его обеспокоенность была подтверждена и другими источникам, ядерно-физические исследования были продолжены. В результате трагедия Хиросимы и Нагасаки для советского руководства не явилась неожиданностью. В 1949 г. атомная бомба была удачно испытана и в СССР, а в 1953 г. была пущена первая в мире атомная электростанция. В результате в 1955 г. прошла первая международная конференция по мирному использованию атомной энергии, положившая начало возобновлению международного обмена ядерными данными.

Во второй половине 20-го века дорогостоящие установки для измерения ядерных данных были сооружены во многих станах и результаты измерений ядерных данных полились рекой. В 60-х годах в МАГАТЭ был организован сбор всех опубликованных экспериментальных данных и указанием их погрешностей в единой компьютерной базе данных EXFOR. Однако результаты экспериментов зачастую (а точнее – как правило) различаются между собой больше, чем это можно было бы ожидать из приписанных им погрешностей. Кроме того, измерению обычно подлежат не сами ядерные данные, а их отношения, в результате чего их экспериментальные погрешности оказываются сложным образом скоррелированными. Всё это сильно затрудняет оценку ядерных данных – т.е. усреднение результатов всех измерений с учётом установленных теоретических закономерностей. В результате оказалось, что в разных государствах, развивающих атомную энергетику, (или в группах таких государств) в инженерных расчётах используются разные варианты оцененных ядерных данных. Имеющиеся расхождения в характеристиках распада радионуклидов и данных о взаимодействии гамма-квантов с веществом («распадные» и «гамма-данные») для инженерных расчётов практически несущественны, а вот расхождения в «нейтронных данных» -

характеристиках взаимодействия нейтронов с атомными ядрами - весьма заметны. Выбрать из них лучший - дело не простое, поскольку каждый вариант оцененных нейтронных данных, проверялся на согласование результатов расчётов с результатами экспериментов на действующих реакторах или их прототипах- критических сборках и, как правило, все они обеспечивают приемлемое согласие. Таким образом, потребности разработчиков атомной энергетики были практически удовлетворены; утратили интерес к получению новых данных, и физики-теоретики что привело к тому, что в 21 веке интенсивность экспериментальных исследований стала стремительно угасать. Однако это отнюдь не означает, что отпала потребность в знании и в использовании уже оцененных ядерных данных для безопасной эксплуатации действующих объектов атомной энергетики и, особенно для разработки новых технологий. Следовательно, необходим справочник, позволяющий ознакомиться с ядерными данными, а также с тем, как можно использовать их в расчётных программах. В прошлом веке в СССР было издано два варианта[1,2] таких справочников, в которых энергетические зависимости нейтронных данных представлялись результатами усреднения по 26 и по 28 энергетическим интервалам (группам) групповых приближениях. Первая из этих систем констант стала называться за рубежом ABBN, а в СССР – БНАБ. Обе системы констант были поочерёдно внедрены в расчётную практику. К концу века вычислительные возможности резко возросли, и была создана и внедрена в расчётную практику система констант с 299 группами нейтронов и 127 гамма-группами названная БНАБ-93. Из-за большого объёма она была доступна только в электронном виде. Использованная в ней библиотека оцененных нейтронных данных была названа ФОНД. В 2007 ей на смену пришла новая версия, составленная, как и прежняя, с учётом экспериментальных данных из базы данных EXFOR и доступных к тому времени зарубежных библиотек оцененных данных. После корректировок эта библиотека была представлена в формате ENDF-6 и передана в МАГАТЭ под названием ROSFOND-2010. Однако для непосредственного использования в расчётных программах и для визуального ознакомления с приводимыми данными формат ENDF не пригоден. Для получения на основе библиотек ФОНД и РОСФОНД систем 299-групповых констант БНАБ-93 и БНАБ-РФ использовалась процессинговая система NJOY с последующей доработкой и другими программами для получения не предусмотренных в NJOY форм групповых констант. Использовались, порой вручную, и иные источники ядерных данных. В 2021 г. на сайте “ядерныеданные.рф” в качестве справочных данных в форме текстовых таблиц была представлена библиотека констант БНАБ-РФ, дополненная данными о детальных энергетических зависимостях нейтронных данных, позволяющими использовать справочные данные не только в программах многогрупповых расчётах, но и в современных программах с детальным слежением за энергией нейрона, названная COLIBRY (combined library) или, в русском написании, КОЛИБРИ.

Настоящий справочник представляет собой второе - расширенное издание. В номенклатуру данных добавлены: парциальные вклады в таблицы энерговыделений и

[1] Л.П.Абагян, Н.О.Базазянц, И.И.Бондаренко, М.Н.Николаев, Групповые константы для расчёта реакторов. Атомиздатиздат, 1964.
[2] Л.П.Абагян, Н.О.Базазянц, М.Н.Николаев, А.М.Цибуля. Групповые константы для расчёта реакторов и защиты. М. Энергоиздат, 1981.

образования гамма-квантов, образующихся непосредственно в момент протекания реакции и в последующих процессах распада образующихся радиоактивных продуктов (в предыдущем издании были только суммарные таблицы, что делало невозможным установить источники различий); детальные данные о распределении вероятностей сечений в области неразрешённых резонансов; сечения, выходы нейтронов, матрицы вероятностей их образования при фото-ядерных взаимодействиях.

Существенным расширением справочника является включение в него библиотек COLIBRY, полученных не только из ROSFOND-2010, но и из зарубежных библиотек оцененных ядерных данных: американской ENDF/B-VIII.0, западноевропейской JEFF-3.3, японской JENDL-5.0, китайской CENDL-3.2[3]. Результаты расчётов реакторных характеристик, выполненных на их основе, позволяет оценить погрешности, сравниваемых данных, обусловленные неточностями результатов измерений и процедур их оценки. То есть реалистично оценить современное положение дел с ядерными данными. Для облегчения поиска причины различий справочник дополнен приложением АТЛАС, в котором приведены графики сравнений сечений, полученных из разных библиотек, вместе с их отклонениями относительно данных ROSFOND-2010.

Справочник также дополнен разделом «Пакет программ и процедур ГРУКОН», в который помещён архив с пакетом процессинговых программ GRUCON и командными процедурами, осуществляющими переработку оцененных данных из библиотек ENDF в библиотеку COLIBRY. Включение этого раздела обеспечивает возможность воспроизвести все вычислительные работы, выполненные при подготовке Справочника. Документация по справочнику размещена в разделе “СПРАВОЧНИК”. Она состоит из четырёх pdf-файлов, содержащих:

1. “Ядерные данные” - теоретические основы, необходимые для понимания проблемы обеспечения ядерными данными и подходов к её решению. Документ состоит из пяти глав.
   В 1-й главе рассказывается, какие ядерные данные требуются для расчета реакторов и защиты и как они используются в расчётах.
   Глава 2 содержит сведения о библиотеках оцененных данных, на основе которых формировались библиотеки COLIBRY.
   3-я глава посвящена описанию формата представления ядерных данных в библиотеках COLIBRY.
   В 4-й главе объясняется содержание графиков сравнения некоторых данных из библиотек COLIBRY, приведенных в разделе АТЛАС.
   В главе 5 даётся описание подхода к переработке ядерных данных, реализованных в пакете GRUCON, с помощью которой осуществлялась переработка оцененных данных из раздела ENDF в таблицы раздела COLIBRY, а также его рабочей среды, находящейся в разделе GRUCON.
2. “GRUCON. Руководство пользователя” – сведения, необходимые для практического освоения процессинговой системы;
3. “Описание формата ENDF-6” - перевод отдельных глав из описания формата ENDF-6 от 2005 года, выполненный Забродской С.В. под редакцией Николаева М.Н.;
4. “Обоснование РОСФОНД” – описание оценок, включённых в российскую библиотеку оцененных ядерных данных ROSFOND-2010.

[3] Эти библиотеки в формате ENDF-6 приводятся в разделе справочника «Исходные национальные библиотеки оцененных данных». Полученные на их основе библиотеки COLIBRY приведены в разделе «Версии библиотек КОЛИБРИ».

1. ЯДЕРНЫЕ ДАННЫЕ

1.1. Основные задачи расчёта реакторов и защиты, требующие знания ядерных данных и умения обращаться с ними

1.1.1. Определение размеров и составов зон реактора, при которых в нём может (будет) развиваться стационарная самоподдерживающаяся цепная реакция деления (определение критических параметров реактора). Разумеется, реактор должен содержать зоны, в состав которых входят нечётные изотопы урана и(или) плутония, делящиеся при взаимодействии с нейтронами. При делении, кроме осколков, уносящих большую часть энергии, выделяемой при делении, мгновенно испускается еще 2 – 3 нейтрона (в среднем 2.4 - 2.8), один из которых необходим для того, чтобы вызвать деление, которое породит следующее поколение цепной реакции; остальные должны либо вылететь из реактора наружу, либо поглотиться в нём, не вызывая деления. Время жизни нейтрона в реакторе ничтожно мало и поэтому, если критичность обеспечивается точным балансом между числом вновь образующихся нейтронов деления и числом нейтронов, поглощаемых без деления и улетающих наружу, то она называется мгновенной критичностью или критичностью на мгновенных нейтронах. Определение условий реализации критичности и является первоочередной задачей нейтронно-физического расчёта. Мерой критичности является коэффициент размножения – отношение числа нейтронов, рождённых в предыдущем поколении к числу нейтронов, рождённых в рассматриваемом поколении.

1.1.2. Управлять цепной реакцией в условиях мгновенной критичности совершенно невозможно и мирное использование атомной энергии оказалось возможным благодаря тому, что часть образующихся при делении нейтронов испускается не мгновенно, а через некоторое время после образования некоторых осколков – предшественников дополнительных (запаздывающих) нейтронов. Доля запаздывающих нейтронов мала (при делении урана-235 0,66% ; при делении плутония-239 0,23%). Невелико и время запаздывания (период полураспада наиболее долгоживущего предшественника запаздывающих нейтронов – Br^{87} – составляет всего 55,7сек.). Поэтому важнейшей характеристикой реактора является эффективная доля запаздывающих нейтронов – различие между коэффициентами размножения, вычисленным с учётом запаздывающих нейтронов (определяющим условие критичности на запаздывающих нейтронах) и коэффициентом размножения на мгновенных нейтронах. Поскольку спектр запаздывающих нейтронов мягче спектра нейтронов деления, эффективная доля запаздывающих нейтронов ($\beta_{эфф}$) не равна отношению их полного числа к числу нейтронов деления; она меняется в зависимости от типа реактора и подлежит расчёту.

1.1.3. Управление цепной реакцией осуществляется с помощью органов регулирования, слегка меняющих состав и геометрию реактора. Эффективность органа регулирования определяется тем, насколько его перемещение изменяет коэффициент размножения. Эту эффективность (реактивность) принято измерять в единицах $\beta_{эфф}$. Для оперативного управления используются органы регулирования с эффективностью существенно меньшей $\beta_{эфф}$, чтобы случайно не вывести реактор в состояние мгновенной критичности. Для компенсации больших, но медленных изменений критичности (например, в результате выгорания топливных нуклидов) используются более эффективные органы регулирования, конструкция которых не позволяет по нечаянности быстро ввести их в действие. ***Необходимым атрибутом ядерного реактора является наличие автоматизированной аварийной защиты, срабатывание которой <u>гарантированно</u> гасит цепную реакцию. Недопустимость каких-либо операций на критическом реакторе с заблокированной аварийной защитой должна быть обеспечена технологически**** . Расчёт реактивности органов управления является очень важной, но и сложной задачей в связи с тем, что влияние этих органов на рассчитываемый коэффициент размножения очень мало. Расчёт реактивности органов аварийной защиты также необходим, но он всё же проще. Необходим также расчёт реактивности, вносимой теми или иными изменениями в конструкцию или состав реактора (температурный, мощностной, плотностной эффекты реактивности, эффект выгорания и др.)

1.1.4. Поскольку энерговыработка является основной задачей энергетического реактора, то расчёт распределения энерговыделения является неотъемлемой задачей. При этом важно учитывать как мгновенное энерговыделение под действием нейтронных реакций, так и энерговыделение, обусловленное распадом образованных в этих реакциях радионуклидов. Перенос энергии гамма-квантами, образованными при делении или распаде радионуклидов, обычно не учитывается – принимается, что их энергия выделилась там, где эти кванты образовались. Однако в некоторых случаях, в частности при расчёте реакторов с тяжелым жидкометаллическим теплоносителем, гамма-излучение переносит непосредственно в теплоноситель до 10% выделяемой в реакторе энергии и это желательно рассчитывать и принимать во внимание. Учёт вылета гамма-квантов за пределы реактора важен и при расчёте его радиационной защиты.

1.1.5. Необходим и расчёт изменения изотопного состава топлива в процессе выгорания и влияние этого изменения на коэффициент размножения. При этом важно оценивать и повреждения конструкционных материалов, вносимые длительным облучением в реакторе.

1.1.6. Безопасный вывод реактора в критическое состояние обеспечивается использованием метода обратного умножения. В реактор, заведомо находящемся в подкритическом состоянии, вводится внешний источник нейтронов или используется собственный естественный источник нейтронов спонтанного деления. Нейтроны этого источника, частично размноженные в реакторе за счёт цепной реакции, регистрируются детектором. По мере приближения к критическому состоянию размножение усиливается, и скорость счёта возрастает. Величина, обратная скорости счёта, по мере приближения к критическому (на запаздывающих нейтронах) состоянию возрастает. Одна тысячная обратного умножения (1 тоу) служит удобной мерой отличия реактора от критичности. В единицах тоу на подкритическом реакторе можно измерить и эффективность органов регулирования, а затем с их помощью осторожно вывести реактор в строго критическое состояние. Эта процедура обеспечит безопасное достижение критичности – особенно если она ещё до пуска реактора будет аккуратно просчитана и измеренные тоу совпадут с расчётными.

1.1.7. Чтобы реактивности, измеренные в тоу, перевести в $\beta_{эфф}$, требуется определить временную зависимость снижения уровня мощности критического реактора, если в него ввести отрицательную реактивность в n тоу. Эта кривая, будучи сравненной с кривой,

---

* Выделенное курсивом предложение является аксиомой, т.е. утверждением, не требующим доказательств (во всяком случае, после чернобыльской катастрофы)

рассчитанной с учётом запаздывающих нейтронов, и позволит определить реактивность органов регулирования в $\beta_{эфф}$.

1.1.8. Целью расчёта радиационной защиты реактора является определение степени допустимости доз испускаемого реактором излучений для работы эксплуатационного персонала. Требуемая точность расчёта при этом далеко не столь высока, как при расчёте критических характеристик реактора (допустимые дозы облучения установлены с солидным запасом), но задача усложняется целым рядом факторов. Во-первых, радиационная защита реактора должна обеспечить снижение потока нейтронов и образуемых ими гамма-квантов на много порядков, т.е. градиенты потоков должны быть максимально велики; это и необходимость учёта образования и переноса гамма-квантов усложняет расчёты. Во-вторых, в отличие от реактора, имеющего, обычно, компактную геометрию, геометрия и состав отдельных частей радиационной защиты, как правило, сложен. Ведь защитить от радиации требуется не только управляющий персонал, но и целый ряд расположенных вблизи реактора технологических устройств – инфраструктуру теплоотвода, разгрузочно-загрузочное устройство, внутри-реакторное хранилище выгруженного топлива и др. Учёт проникновения излучения через зазоры между частями защиты сильно усложняет расчёт.

Оценка радиационных условий при работе с элементами конструкции реактора, снимаемого с эксплуатации, разгрузке-перегрузке отработавшего топлива и, особенно, при его переработке требует надёжного знания содержащихся в них радионуклидов, и представления об образующих их нейтронных реакциях.

1.2. Нейтронные реакции и их характеристики

1.2.1. Лишенный заряда нейтрон легко проникает через электронные оболочки атомов и, если попадёт, сталкивается с их ядрами. Вероятность столкновения зависит, конечно, от концентрации ядер в среде, через которую пролетает нейтрон. Эта концентрация (число ядер в см^3) равна $\rho = Aw * d/M$ ядер/см^3, где d – плотность элемента, содержащего интересующие Вас ядра, в составе среды (г/см^3); M –атомный вес этого элемента– масса, выраженная в а.е.м. – атомных единицах массы (или в молях); $Aw = 6{,}02214076*10^{23}$ – число Авогадро. Кроме того эта вероятность зависит от площади поперечного сечения атомного ядра. Поскольку взаимодействие нейтрона с ядром определяется сложными квантово-механическими законами, эта площадь оказывается сильно зависящей не только от самого ядра, но и от энергии налетающего на него нейтрона. Площадь ядра, как оно «видится» нейтрону с энергией E_n, называют эффективным полным сечением ядра и обозначают $\sigma_{tot}(E_n)$.

Полное сечение измеряется сравнительно просто. Коллимированный пучок нейтронов регистрируется детектором, определяющим его интенсивность N_0, затем пучок перегораживается тонкой пластинкой, содержащей ρ атомов исследуемого элемента в см^3, и измеряется интенсивность перегороженного пучка N_1. Если толщина пластинки – t – мала, доля площади сечения пучка, перегороженная ядрами, будет равна $\rho * \sigma_{tot}(E_n) * t$ и если каждый столкнувшийся нейтрон выбывает из пучка, то будем иметь $N_1/N_0 = \rho * \sigma_{tot}(E_n) * t$, что позволяет определить полное сечение по измеренному пропусканию N_1/N_0. Если толщина недостаточно мала, требуется учитывать самоэкранировку (одни ядра закрывают другие на пути пучка). В этом случае пропускание равно $1 - \exp[-\rho * \sigma_{tot}(E_n) * t]$.

1.2.2. Существует два типа взаимодействия нейтрона с ядром. Первым является потенциальное упругое рассеяние, когда нейтрон, отскакивая от ядра как от шарика, передаёт ему часть кинетической энергии и импульса. Энергия рассеянного нейтрона E' определяется законами сохранения энергии и импульса, и может быть вычислена по формуле

$$E'/E= 1-2A(1-\mu_0)/(A+1)^2 \qquad (1.1)$$

где μ_0 – косинус угла рассеяния в системе координат центра инерции, связанный с μ – косинусом угла рассеяния в лабораторной системе координат– соотношением

$$\mu_0=\left[\mu\sqrt{A^2+1+\mu^2}+\mu^2-1\right]/A \qquad (1.2)$$

Таким образом, энергетический спектр упруго рассеянных нейтронов определяется их угловым распределением. При низких энергиях нейтрона угловое распределение в системе центра инерции изотропно и спектр нейтронов равномерно распределён по энергии от максимального значения E'=E, до минимального $E'=E[1-2A/(A+1)^2]$, достигаемого при лобовом соударении. С увеличением энергии нейтрона возрастает вероятность того, что он «ударит ядро в бок» и, рассеявшись на меньший угол, передать ему меньшую энергию. При энергии нейтрона несколько МэВ угловое распределение упругого рассеяния становится весьма сложным и для оценки спектра рассеянных нейтронов его надо знать. Вероятность потенциального рассеяния, умноженная на полное сечение, называется сечением потенциального рассеяния. Это сечение является плавной функцией энергии нейтрона.

1.2.3. Вторым типом взаимодействия нейтрона с ядром является образование составного ядра – ядра, поглотившего нейтрон. Полное сечение можно описать как сумму сечения потенциального рассеяния и сечения образования составного ядра. Масса составного ядра всегда меньше суммы масс ядра-мишени и нейтрона. Разность этих масс – энергия связи нейтрона – определяет минимальную энергию возбуждения составного ядра; полная энергия возбуждения включает в себя ещё и кинетическую энергию поглощённого нейтрона. Как известно, ядра, состоящие из многих протонов и нейтронов, обладают множеством относительно стабильных возбуждённых состояний. Если энергия нейтрона такова, что в сумме с энергией связи нейтрона в составном ядре близка к энергии одного из уровней составного ядра, вероятность образования составного ядра резко возрастает. Поэтому в энергетической зависимости сечения образования составного ядра наблюдаются резкие всплески – резонансы.

1.2.4. Возбуждённое составное ядро не может существовать бесконечно долго – ему надо избавиться от энергии возбуждения. Это может быть осуществлено разными способами и тот способ, который ядро выберет, определяет характер и наименование нейтрон-ядерного взаимодействия – нейтронной реакции. Очевидно возможный способ - это переход возбуждённого составного ядра в основное состояние путём испускания одного или нескольких гамма-квантов. Такая нейтронная реакция называется радиационным захватом и обозначается (n,γ). При поглощении нейтрона ядром водорода – реакция $H^1(n,\gamma)D$ – образуется дейтон (ядро дейтерия), энергия связи нейтрона в котором равна 2,2246 МэВ. Дейтон не имеет возбуждённых состояния и поэтому единственная возможность перейти ему в основное состояние состоит в испускании гамма-квантов с энергией 2,2246 МэВ. При поглощении нейтрона ядром урана-238– реакция $U^{238}(n,\gamma)\ U^{239}$ – образуется U-239, в котором энергия связи нейтрона равна 6,5382МэВ. Между этой энергией возбуждения и основным состоянием ядро U-239 обладает несколькими тысячами возбуждённых состояний, на каждое из которых образовавшееся при захвате нейтрона возбуждённое ядро «имеет право» перейти путём испускания гамма-кванта. Далее следует цепочка гамма-переходов в нижележащие состояния пока не будет достигнуто основное состояние. Таким образом, энергетический спектр гамма-квантов, испускаемых при радиационном захвате нейтронов ураном оказывается очень сложным, хотя суммарная энергия гамма-квантов равна, конечно, 6,5382МэВ плюс энергия поглощённого нейтрона E_n. Радиационный захват характеризуется сечением реакции $\sigma_c(E_n)$ и суммарной энергией, уносимой гамма-квантами, а, для того чтобы можно было учесть перенос этой энергии квантами на некоторое расстояние от точки реакции, надо знать сколько каких квантов испускается (множественность и энергетический спектр гамма-квантов).

1.2.5. Другой всегда возможный способ избавиться от энергии возбуждения составное ядро имеет путём испускания нейтрона той же энергии, с которой он был поглощён, однако время, достаточное чтобы сделать такой выбор, составное ядро имеет только если оказалось, что энергия возбуждения близка к одному из естественных для этого ядра возбуждённых состояний. Так у U-239 имеется относительно стабильное возбуждённое состояние при энергии, превышающей энергию связи на 6,6735 эВ. Нейтроны с энергиями 6,66 – 6,68 эВ поглощаются ядром с гораздо большей вероятностью, чем нейтроны с энергией 8 – 15 эВ или 0,1 - 6 эВ. С точки зрения физики реакторов упругое рассеяние с образованием составного ядра отличается от потенциального рассеяния только энергетической зависимостью вероятности соответствующего процесса, и поэтому ниже будет говориться просто об упругом рассеянии. Отношение вероятности упругого рассеяния к сумме процессов потенциального рассеяния и образования составного ядра, умноженное на полное сечение, именуется сечением упругого рассеяния, обозначаемым $\sigma_{el}(E_n)$ или $\sigma_e(E_n)$. Вероятность радиационного захвата, умноженная на полное сечение, именуется сечением радиационного захвата. Разность между полным сечением и сечением потенциального рассеяния есть сечение образования составного ядра, которое в отличие от сечения потенциального рассеяния, плавно зависящего от энергии нейтрона, претерпевает резкие всплески, если энергия нейтрона попала в резонанс с энергией возбуждения ядра-мишени. Спектр упруго рассеянных нейтронов однозначно определяется их угловым распределением, таким образом, эта реакция характеризуется не только энергетической зависимостью сечения, но и угловым распределением $P_e(\mu, E_n)$.

1.2.6. Если нейтрон обладает энергией, более высокой, чем энергия первого уровня ядра-мишени, образованное им составное ядро может испустить нейтрон меньшей энергии и превратиться, как и при упругом рассеянии, в ядро-мишень, но только не в основном, а в возбуждённом состоянии. Затем это состояние обычно немедленно распадается в основное – происходит реакция (n,n'γ) – неупругое рассеяние (с возбуждением первого уровня). С ростом энергии нейтрона становятся возможными и, действительно, происходят реакции с возбуждением всё более высоких уровней, в результате которых нейтрон теряет всё большую энергию. С реакторно-физической точки зрения не важно, какие именно уровни возбуждаются при неупругом рассеянии. Важно знать суммарное сечение неупругого рассеяния, обозначаемое $\sigma_{in}(En)$, и суммарный спектр неупруго рассеянных нейтронов. Надо иметь представление и об угловом распределении испускания этих нейтронов. Разумеется, полезно знать и множественность и энергетический спектр гамма-квантов, порождаемых неупругим рассеянием. Порогом неупругого рассеяния, начиная с которого его сечение становится отличным от нуля, является энергия первого возбуждённого уровня ядра-мишени. Для U-235 порог неупругого рассеяния равен 77эВ, для U-238 – 4500 эВ, для основного изотопа железа Fe^{56}– 0,85 МэВ. С реакторно-физической точки зрения неупругое рассеяние чрезвычайно важно, т.к. является основным процессом, в результате которого нейтроны деления теряют свою энергию.

1.2.7. При очень высоких энергиях ядро, оставшееся после неупругого рассеяния, оказывается способным испустить ещё один нейтрон – реализуется реакция (n,2n). Пороги реакции (n,2n) равны для U-235 5,3 МэВ, для U-238 – 6,2 МэВ, для основного изотопа железа Fe^{56}– 11,4 МэВ. В спектре деления нейтронов, способных реализовать реакцию (n,2n) мало и её учёт обычно осуществляется путём присоединения сечения этой реакции к сечению неупругого рассеяния и приписывания полученному сечению неупругих взаимодействий σ_{non} множественности у – среднего числа испускаемых в результате этих взаимодействий нейтронов. Разумеется, данные о неупругих взаимодействиях помимо сечения и множественности должны сопровождаться усреднённым энерго-угловым распределением испускаемых в этих взаимодействиях нейтронов $q_{non}(E,E',\mu)$.

Помимо испускания гамма-квантов и нейтронов составные ядра могут «разряжаться» и путём испускания заряженных частиц: протонов – (реакция (n,p)), дейтонов – (реакция (n,d)), альфа-частиц – (реакция (n,α)) и др. Обычно при расчёте реакторов сечения **всех** этих реакций объединяются с сечением радиационного захвата в суммарное сечение поглощения $\sigma_a(E)$. Реакции испускания заряженных частиц после неупругого рассеяния ((n',p), (n',α) и т.п.) имеют высокие пороги и в реакторных расчётах обычно включаются в суммарное сечение неупругих взаимодействий.

1.2.8. Реакция деление является одним из способов снятия возбуждения тяжелым составным ядром. Из двух природных изотопов урана – U-238 и U-235– нейтронами любых энергий делится только U-235, точнее не он, а образующееся при захвате нейтрона возбуждённое составное ядро U-236. U-238 эффективно делится только под нейтронов с достаточно высокой энергией – выше, примерно,1 МэВ.

Деление ядра происходит на два (изредка на три) осколка, по которым распределяются протоны исходного ядра. Реализуется множество способов распределения протонов между ядрами осколков, но, как бы то ни было, число протонов в каждом осколке меньше, чем в исходном ядре и их ядерной силы не хватает, чтобы удержать все нейтроны делящегося ядра. Поэтому-то деление и сопровождается мгновенным испусканием нескольких «лишних» для осколков нейтронов. Несмотря на это облегчение ядра осколков остаются перегруженными нейтронами и вынуждены избавляться от них путём бета-распада, т.е. распада одного из нейтрона на протон и электрон, который, естественно, выбрасывается из положительно заряженного ядра. Получающееся в результате бета-распада ядро со значением зарядового числа Z на единицу больше, может оказаться стабильным, но чаще всего перегрузка нейтронами сохраняется, и цепочка бета-распадов продолжается пока не образуется стабильный или долгоживущий изотоп. Порой в этой цепочке образуется изотоп, в котором энергия возбуждения, обусловленная лишним нейтроном, превосходит энергию связи нейтрона в нём и он избавляется от возбуждения путём испускания этого лишнего нейтрона. Это и есть механизм испускания запаздывающих нейтронов. Запаздывание определяется временем реализации бета-распада ядра-генератора запаздывающего нейтрона (или всей цепочки бета-распадов ведущей к его образованию). Известным примером является Br-87, который с периодом 55,7 с вероятностью 97,4% распадается в основное состояние радиоактивного криптона-87, а с вероятностью 2,6% - в столь возбуждённое его состояние, что оно испускает нейтрон и превращается в стабильный Kr-86 (происходит βn-распад). Источником этих запаздывающих нейтронов называют Br-87,а генератором является продукт его распада Kr-87. Сам Br-87 может образоваться и как продукт деления и как продукт β-распада Se-87, имеющего период полураспада 5,8 с. При этом с вероятностью 0,0004% Br-87 может образоваться в столь сильно возбуждённом состоянии, что он сам станет генератором запаздывающего нейтрона, предшественником которого будет Se-87. Число предшественников запаздывающих нейтронов весьма велико, а путей их образования при делении и последующих β-распадах ещё больше. Поскольку роль запаздывающих нейтронов в обеспечении безопасной эксплуатации ядерных реакторов очень высока, выбор не слишком сложного, но достаточно точного описания времени их запаздывания и спектра запаздывающих нейтронов является важной задачей подготовки имеющихся данных к использованию в инженерных расчётах.

1.2.9. Реакция деления под действием нейтронов возможна на всех ядрах-актинидах с зарядовым числом Z от 90(торий) до 99 (эйнштейний). Актиниды с Z<40 и Z>99 в ядерных реакторах практически не образуются, а если и образуются, то живут недолго и разделиться не успевают. Для остальных же делящихся актинидов для реакторных расчётов должны быть определены сечения деления $\sigma_f(E)$, число мгновенных нейтронов деления $\nu(E)$, характеристики запаздывающих нейтронов, энерговыделение, множественность и спектр испускаемых нейтронов и гамма-квантов.

1.3. Уравнение переноса нейтронов

1.3.1. Важнейшие величины, с которыми специалистам названных направлений приходится иметь дело, представляют собой, говоря языком математики, функционалы полей радиоизлучений – нейтронного и фотонного. Другими словами, они представляют собой интегралы от плотности потока излучения $\Phi(\vec{r},\vec{\Omega},E,t)$, умноженного на заданную функцию Q_r тех же переменных – координат $\vec{r}$, направления потока излучения $\vec{\Omega}$, энергии E и времени t:

$$R = \int_{V_j} d\vec{r} \int_{4\pi} d\vec{\Omega} \int_0^{\infty} dE \int_{t_1}^{t_2} dt \; Q_r(\vec{r},\vec{\Omega},E,t) \;\; \Phi(\vec{r},\vec{\Omega},E,t) \,. \tag{1.3}$$

Функционалом R может быть коэффициент размножения нейтронов в реакторе заданной геометрии и состава; реактивность регулирующего стержня (изменение коэффициента размножения в результате ввода или вывода стержня); количество накопленного в реакторе радионуклида (например, Pu^{239} в топливе или C^{14} в замедлителе РБМК); дозы нейтронного и гамма-излучений в определённом месте за защитой и т.д. и т.п. Вычисление функций Q_r требует знания определённых ядерных данных (дозовых факторов для определения доз; сечений образования радионуклидов для вычисления интенсивности их накопления; числа вторичных нейтронов, образуемых при делении того или иного ядра в заданном месте в реакторе). Необходимо также знание плотности потока рассматриваемого излучения $\Phi(\vec{r},\vec{\Omega},E,t)$- числа нейтронов или фотонов с энергией E, пересекающих единичную площадку (1 см^2), расположенную в точке $\vec{r}$ перпендикулярно вектору $\vec{\Omega}$ в направлении этого вектора в момент времени t.

1.3.2. Плотность потока определяется путём решения уравнения переноса, которое в физически наиболее ясной интегральной форме имеет вид

$$\Phi(\vec{r},\vec{\Omega},E,t)=\int_0^{X_{\max}(-\vec{\Omega})}P(E,\vec{r},\vec{r}-\vec{\Omega}x)*S(\vec{r}-\vec{\Omega}x,\vec{\Omega},E,t-a/\sqrt{E})dx \qquad (1.4)$$

Здесь $S(\vec{r}-\vec{\Omega}x,\vec{\Omega},E,t-a/\sqrt{E})$ - функция источника (или просто – источник), т.е. число нейтронов или γ- квантов с энергией Е, ежесекундно испускаемых в направлении $\vec{\Omega}$ из единицы объёма в точке $\vec{r}-\vec{\Omega}x$, во время $t-x/a\sqrt{E}$. Здесь a≈1.39*10^7– коэффициент, позволяющий выразить скорость нейтрона с энергией Е МэВ в метрах/секундах, так что $x/a\sqrt{E}$ - это время пролёта нейтрона от источника до точки наблюдения $\vec{r}$. $X_{\max}(-\vec{\Omega})$ - максимальное расстояние до точки источника, испускающей нейтроны рассматриваемой энергии Е в интересующем нас направлении $\vec{\Omega}$. Такую же форму имеет и уравнение переноса гамма-излучения, только скорость перемещения гамма-квантов от источника до точки наблюдения равна скорости света и от энергии не зависит. Скорость нейтрона при энергии 0.025 эВ, соответствующей его средней энергии при тепловом равновесии со средой при комнатной температуре (300^{0}К) равна 2200 м/с, т.е. время его свободного пролёта через весь реактор измеряется миллисекундами. На самом деле длина свободного пролёта нейтрона измеряется сантиметрами, а порой и миллиметрами. За такое время в реакторе ничего не успевает измениться (если он не взрывается) и потому учётом времени пролёта (переноса нейтрона от точки испускания до точки наблюдения) в дальнейшем будет рассматриваться стационарное уравнение переноса (с независящими от времени параметрами).

1.3.3. $P(E,\vec{r},\vec{r}-\vec{\Omega}x)$ – вероятность нейтрону, вылетевшему из источника, долететь до точки $\vec{r}$ не испытав столкновения. На этом пути нейтрону, возможно, предстоит пролететь несколько (скажем, К) зон разного состава, так что $P(E,\vec{r},\vec{r}-\vec{\Omega}x)=\prod_{k=1}^{K}P_k(E)$,

где $P_k(E)=\exp[-l_k*\sum_i\rho_{i,k}\sigma_i(E)]$ (функция пропускания через зону k) Здесь l_k – длина нейтронной траектории, лежащей в зоне k; $\sigma_{t,i}(E)$ - полное сечение ядра нуклида* i; $\rho_{i,k}$ - плотность ядер i-го нуклида; $\rho_{i,k}=\mathrm{A}w*d_{i,k}/A_i$, где $d_{i,k}$ - масса нуклида i в единице объёма зоны k, A_i – атомный вес этого нуклида (в единицах 1/12 массы атома углерода); Aw=0,602214082*10^{24} - число Авогадро. Площадь поперечного сечения ядер принято измерять в барнах (1 барн=10^{-24} см^2), поэтому если $d_{i,k}$ - масса нуклида в см^3, то при вычислении $\rho_{i.k}$ следует принять равным Aw=0,602214082.

$\Sigma_{t,k}(E)=\sum_i\rho_{i,k}\sigma_i(E)$ принято называть макроскопическим полным сечением. Средняя длина свободного пробега нейтрона в зоне k равна $1/\Sigma_{t,k}(E)$.

---

* Под нуклидом мы будем понимать или изотоп определённого элемента, либо естественную смесь стабильных изотопов – в зависимости от того, с каким объектом произошло столкновение нейтрона.

1.3.4. Источник излучения, фигурирующий в формуле (4), состоит из нескольких составляющих. Первой составляющей является упругое рассеяние нейтронов с энергией E’>E, которые в результате рассеяния приобретают энергию E. Эта составляющая зависит от потока рассматриваемого излучения с энергией E’ и от характеристик тех ядер, с которыми происходит столкновение этих нейтронов:

$$S_{el}(\vec{r}',\vec{\Omega},E) = \int_{\mathrm{Emin}}^{\infty}\int_{4\pi} d\Omega'\Phi(\vec{r}',\vec{\Omega}',E')\sum_i \rho_i(\vec{r}')\sigma_{el,i}(E')q_{el,i}(E',E,\mu)\,dE' \qquad (1.5)$$

Здесь $\sigma_{el,i}$(E') – сечение упругого рассеяния. $q_{el,i}(E',E,\mu)$ – энерго-угловое распределение упруго рассеянных нейтронов ($\mu = \Omega\Omega'$ - косинус угла рассеяния). Если E не слишком мало, зависимость от энергии E здесь можно опустить, т.к. имеет место однозначно определяемая связь между косинусом угла рассеяния и изменением энергии нейтрона (см. формулы (1.1) и (1.2)); E_{min} в этом случае равно E.

В области низких энергий скорость движения нейтрона может оказаться сравнимой или даже ниже скорости ядра, с которым он сталкивается. В этой («тепловой») области энергий (ниже ~1 эВ) возможно упругое рассеяние, в результате которого нейтрон может в результате столкновения с движущимся ядром не потерять, а приобрести энергию. В этой – термализационной – области энергий при расчёте рассеяния требуется использовать специальный *закон рассеяния* $q_{m,i}(E',E,\mu)$, устанавливающий связь между всеми тремя переменными E, E’ и μ. Этот закон зависит от энергии связи атома нуклида i в молекуле или кристалле, в состав которого он входит. m – номер этого состояния (газ, жидкость, какой-либо кристалл или молекула) находится вещество, содержащее ядра, рассеяние на которых рассматривается. Таким образом, в тепловой области энергий Emin в формуле (1.5) должно быть равным нулю.

1.3.5. Вторая составляющая обусловлена совокупностью неупругих взаимодействий:

$$S_{non}(\vec{r}',\vec{\Omega},E) = \int_0^{\infty}\int_{4\pi} d\Omega'\Phi(\vec{r}',\vec{\Omega}',E')\sum_i \rho_i(\vec{r}')\sigma_{non,i}(E')q_{non,i}(E',E,\mu)y_{non,i}\,dE' \qquad (1.6)$$

$\sigma_{non,i}(E')$ – суммарное сечение неупругих взаимодействий, $q_{non,i}(E',E,\mu)$ - энерго-угловое распределение вторичных нейтронов, $y_{non,i}(E')$ - их среднее число.

1.3.6. Третьей составляющей является источник нейтронов деления (если рассматриваемая зона содержит делящиеся ядра):

$$S_f(\vec{r}',\vec{\Omega},E) = \int_0^{\infty} dE'\int_{4\pi} d\Omega'\Phi(r',\Omega',E') * \sum_i \rho_i(r')\sigma_{f,i}(E')\chi_i(E',E)\nu_i(E')/4\pi \qquad (1.7)$$

Здесь $\sigma_{f,i}(E')$ - сечение деления i=го ядра; $\nu_i(E')$ - среднее число мгновенных нейтронов, испускаемых при делении; $\chi_i(E',E)$ - энергетический спектр этих нейтронов. Важны два отличия источника нейтронов деления от источника рассеянных нейтронов. Первое состоит в том, что число вторичных нейтронов $\nu_i(E')$ значительно превышает единицу: для основных топливных материалов оно равно, примерно 2,5 – 3 нейтрона на деление. Второе состоит в том, что часть нейтронов, испускаемых при делении, имеют энергию, превышающую энергию нейтрона, вызвавшего деление. Если в рассчитываемом объекте делящихся ядер нет или их концентрация пренебрежимо мала, нейтроны в нём могут появиться только благодаря внешнему источнику.

1.3.7. Четвёртая составляющая – это внешний (т.е. независящий от плотности потока источник), введенный в рассчитываемый объект– $S_0(\vec{r}\,',\vec{\Omega},E)$. При расчёте нейтронных полей в качестве внешнего источника могут использоваться, например, нейтроны, образующиеся при попадании альфа-частиц полония или другого альфа-излучателя в бериллий (Be^9), что ведёт к его развалу на две альфа-частицы и нейтрон; нейтроны спонтанного деления топливных изотопов, или специально введенного в реактор Cf-252, обладающего периодом полураспада 2,645г. в 3,1% случаев претерпевая спонтанное деление. При расчёте защиты реактора источник нейтронов обычно задаётся на поверхности её соприкосновения с реактором (он оценивается при расчёте реактора). Источник гамма-излучения в этом случае, как правило, обусловлен поглощением в защите влетевших в неё нейтронов.

1.3.8. Для решения уравнения переноса необходимо ещё задать граничные условия. Внешние границы с пустотой отмечаются просто как «внешние границы», при пересечении которых нейтрон исчезает. Если за внешней границей находится материальная зона, не включённая в состав зон реактора или защиты, на границе с ней должно быть определено граничное условие S_{gran}(E, E'), указывающее, что испускание нейтрона с энергией E за пределы границы влечёт за собой возвращение нейтрона с энергией E'. Строго говоря, в число аргументов этой функции должны бы входить координаты точки вылета и точки влёта с векторами их направлений. Для этого, достаточно «просто» включить прилегающую зону в состав реактора или защиты, что, разумеется, усложнит решение уравнения переноса. Поэтому если по оценкам поток излучения на этой границе мал, отражением от окружающей среды либо вовсе пренебрегается (определяется внешняя граница), либо не границе с ней определяется граничное условие (как правило, определённое в предварительных расчётах).

1.3.9. Выше (с целью не слишком загружать и так громоздкие выражения) в качестве переменной, от которой зависят коэффициенты уравнения, не была указана температура. Между тем от температуры, конечно, зависят и ядерные плотности ρ_i и законы рассеяния тепловых нейтронов, да и размеры тоже. Зависят от температуры и энергетические зависимости нейтронных сечений. При решении уравнения переноса это обстоятельство, конечно, надо иметь в виду.

1.3.10. При расчёте защиты реактора источник нейтронов обычно задаётся на поверхности её соприкосновения с реактором (он оценивается при расчёте реактора). Источник гамма-излучения в этом случае, как правило, обусловлен поглощением в защите влетевших в неё нейтронов. Для его учёта параллельно с расчётом источника нейтронов неупругих взаимодействий требуется рассчитывать и источник порождённых в этих взаимодействиях гамма-квантов $S_\gamma(\vec{r}\,',\Omega,\mathrm{E}_\gamma)/4\pi$ (испускание гамма-квантов в неупругих взаимодействиях можно считать изотропным). Формула для вычисления $S_\gamma(\vec{r}\,',\Omega,\mathrm{E}_\gamma)/4\pi$ отличается от формулы (1.6) заменой $q_{non,i}(E',E,\mu)y_{non,i}(\mathrm{E}')$ на $q_{\gamma,i}(E',\mathrm{E}\gamma,\mu)y_{\gamma,i}(\mathrm{E}')$- вероятность испускания гамма-кванта с энергией $\mathrm{E}\gamma$ при неупругом взаимодействии нейтрона с энергией E’ с ядром i в направлении Ω ,таким, что $\Omega\Omega'=\mu$; $y_{\gamma,i}(E', E\gamma, \mu)$ – число таких квантов.

1.4. Метод поколений и однородное уравнение переноса

1.4.1. При расчёте заведомо подкритического реактора целью расчёта, как правило, является определение показания детектора нейтронов $N=\int_0^\infty dE\int_{4\pi} d\vec{\Omega}\Phi n(\vec{r},\vec{\Omega},E)Sens(E)$. Здесь Sens(E) – чувствительность детектора, $\vec{r}$ - координаты его местоположения. При сборке критического состояния реактора, показание детектора возрастает, и обратное умножение N_0/N служит мерой приближения реактора к критическому состоянию. Предварительное вычисление снижения обратного умножения по мере сборки реактора весьма полезно, т.к. позволяет проверить надёжность оценки критической конфигурации по обратному умножению. При расчёте умножения решение уравнения переноса производится поэтапно. Сначала решается уравнение (1.4), в котором принимается во внимание только внешний источник $S_0(\vec{r}',\vec{\Omega},E)$; источник нейтронов деления в исходном состоянии не учитывается. Если в исходном состоянии делящихся веществ нет, то полученное решение – поток нейтронов первого поколения $\Phi_1(\vec{r},\vec{\Omega},E)$ позволяет вычислить обусловленное этими нейтронами показание детектора N_0. Если в исходном состоянии реактор содержит делящиеся нуклиды, то требуется учесть в N_0 вклады нейтронов делений, вызванных нейтронами источника. Знание $\Phi_1(\vec{r},\vec{\Omega},E)$ позволяет вычислить по формуле (1.7) источник нейтронов второго поколения $S_{f1}(\vec{r}',\vec{\Omega},E)$, порождённых первым поколением нейтронов. Отношение

$$k_1 = \iiint S_{f1}(\vec{r}',\vec{\Omega},E)d\vec{r}'d\vec{\Omega}dE / \iiint S_0(\vec{r}',\vec{\Omega},E)d\vec{r}'d\vec{\Omega}dE \qquad (1.8)$$

– это коэффициент размножения нейтронов в первом поколении. Чтобы учесть вклад второго поколения, т.е. решается неоднородное уравнение с внешним источником $S_{f1}(\vec{r}',\vec{\Omega},E)$ в пренебрежении их размножения при делении и определяется источник нейтронов третьего поколения $S_{f2}(\vec{r}',\vec{\Omega},E)$ и коэффициент размножения нейтронов во втором поколении – k_2 . Затем вычисляются k3, k4 и т.д. Пространственно-угловые и энергетические распределения S_0 и S_{f1}, естественно, различаются, а вот пространственно-угловые и энергетические распределения S_{fn-1} и S_{fn} при достаточно большом номере поколения n практически не различаются и потому коэффициенты k_n перестают зависеть от n. Таким образом, полное число нейтронов, порождённых одним нейтроном внешнего источника, равно $k=k_1+k_1k_2+\ldots+k_1k_{2\ldots}k_n(1+\sum_{m+1}^{\infty}k_n^m) = k_1+\ldots+k_1k_{2\ldots}k_{n-1}+k_1k_{2\ldots}k_n/(1-kn)$. В каждом поколении требуется вычислять и вклад этого поколения в показание детектора и суммировать эти вклады. Сумма этих вкладов и определит исходное показание детектора N_0 в размножающем нейтроны реакторе. Таким образом, итерационная процедура завершается после того, как будет установлено, что kn отличается от k_{n-1} на приемлемо малую величину. Отличие найденного значения k от единицы является мерой отличия реактора от критического состояния – **реактивностью**.

При сборке критического реактора исходное состояние пополняется добавкой в реактор ещё одной или нескольких тепловыделяющих сборок (ТВС), и итерационная процедура вычисления показателя детектора повторяется. Показание увеличивается, скажем, вдвое. Если в реактор добавить ещё столько же ТВС, расчётное показание детектора увеличится, но уже не в 2, а в 4 – 8 раз или более за счёт того, что каждая порция ТВС будет размножать не только нейтроны внешнего источника и рождаемые в ней самой, но и нейтроны, образованные во второй порции ТВС. Ясно, что третья добавка ТВС должна быть меньше предыдущих, иначе велик риск, что реактор станет надкритичным: в итерации поколений обнаружится, что в одном из них k оказалось большим единицы и итерации завершить не удастся («взрыв» расчётного реактора). Если осторожность соблюдена и показание детектора оказалось в 500 раз превышающим N_0 (обратное умножение 0,002–два тоу), следующую добавку следует минимизировать – добавить, скажем 1 ТВС. Если при этом оказалось, что обратное умножение равно 0,0005, (реактивность ТВС=1,5 тоу), то следующую ТВС в такой реактор добавлять нельзя: он станет надкритичным. Для достижения критичности на этом этапе необходимо оценить вклад в реактивность предусмотренного конструкцией органа регулирования (обычно это поглощающий стержень, вводимый в активную зону реактора). Если погружение стержня повышает обратное умножение, скажем, на 2 тоу, то при добавке последней ТВС реактор сохранит свою подкритичность и вывести его в критическое состояние можно будет путём постепенного извлечения поглощающего стержня.

1.4.2. При проектных расчётах целесообразно расчётным путём определить его критическую конфигурацию, не прибегая к моделированию процедуры вывода реактора в критическое состояние. Для этого рассматривается однородное уравнение переноса в состоянии, близком к критичности. Это то же уравнение (1.4), но без источника (S_0=0) (однородное уравнение). Это уравнение имеет одно очевидное решение $\Phi(\vec{r},\vec{\Omega},E)=0$. Нетривиальное решение возможно только в том случае, если $\Phi(\vec{r},\vec{\Omega},E)$, определённое из уравнения (1.4) при S_0=0 позволяет определить по формуле (1.7) тот самый источник нейтронов деления $S_f(\vec{r},\vec{\Omega},E)$ который использовался при расчёте $\Phi(\vec{r},\vec{\Omega},E)$. Это и есть

случай критического реактора. Из п.4.1. следует, что можно только подобраться к определению критических условий, т.е. найти только функцию $S_f(\vec{r},\vec{\Omega},E)$, более-менее похожую на ту, что соответствует критическому реактору. Тем не менее, и при использовании этой функции можно найти нетривиальное решение однородного уравнения переноса, если подправить число нейтронов, испускаемых при делении, т.е. решить условно-критическое однородное стационарное уравнение

$$\Phi(\vec{r},\vec{\Omega},E)=\int_0^{X_{\max}(-\vec{\Omega})} P(E,\vec{r},\vec{r}-\vec{\Omega}x)[S_{el}(\vec{r},\vec{\Omega},E)+S_{non}(\vec{r},\vec{\Omega},E)+S_f(\vec{r},\vec{\Omega},E)/k_{eff}]\mathrm{dx} \qquad (1.9)$$

Здесь k_{eff} (k-эффективное) величина, при которой уравнение (9) при фиксированных параметрах реактора (граничных условиях, размерах, температурах и составах зон) имеет нетривиальное решение. Этот параметр определяется путём итераций поколений нейтронов. В первом поколении полагается k=1. Если в первом поколении оказалось k1<1, в уравнении (9) k заменяется на k_1 и расчёт повторяется, пока искомое значение k не будет найдено с приемлемой точностью. После этого в параметры реактора вводятся корректировки, обеспечивающие равенство k-эффективного единице. Это и будут искомые критические параметры.

1.4.3. Мгновенные нейтроны деления размножаются в реакторе практически мгновенно (время жизни нейтрона от рождения до поглощения пренебрежимо мало). Однако, как отмечалось выше, часть нейтронов, рождаемых при делении, испускается при бета-распаде некоторых продуктов деления – предшественников запаздывающих нейтронов. При расчёте реакторов эти предшественники делятся на несколько групп, каждая из которых характеризуется своей суммарной долей в общем числе нейтронов деления и усреднённым по группе периодом полураспада. Первоначально деление на 6 групп было проведено для описания запаздывающих нейтронов, выделяемых при делении урана-235. Затем это же представление запаздывающих нейтронов стали использовать для урана-238 и плутония-239 и других актинидов, у которых доли запаздывающих нейтронов существенно отличны от таковой для U-235 (для U-238 в 2,5 раза больше; для Pu-239 – вдвое меньше); менялись лишь выходы групп. В 2002 г. группой специалистов из США и России было предложено универсальное для всех делящихся ядер деление всех предшественников на 8 групп, которое после проверки его пригодности на критическом стенде БФС было принято в библиотеке РОСФОНД и, естественно, в настоящем справочнике.

Для использования в инженерных расчётах необходимо оценить эффективные доли групп запаздывающих нейтронов, которые должны учитывать отличие спектра каждой группы от спектра мгновенных нейтронов деления. Обычно это проводится путём решения уравнения (1.9) (желательно не условно критического, а точно критического – с k_{eff}=1) с заменой S_f на $S_{f,j}$

$$S_{f,j}(\vec{r}',\vec{\Omega},E) = \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d\Omega' \Phi(r',\Omega',E') * \sum_i \rho_i(r')\sigma_{f,i}(E')\chi_j(E')\nu_i(E')\beta_{i,j}(E')/4\pi \qquad (1.10)$$

Здесь $\beta_{i,j}(E')$ - выход j-й группы запаздывающих нейтронов при делении i-го нуклида нейтронами с энергией E', $\chi_j(E')$ - энергетический спектр этой группы нейтронов. Рассматривается только одно поколение нейтронов. Полученный в этом поколении коэффициент размножения k_j' будет отличаться от k_{eff}, поскольку спектр любой группы запаздывающих нейтронов существенно мягче спектра мгновенных нейтронов деления. Отношение $\beta_j^{eff} = k_j'/k_{eff}$ является эффективной долей j-й группы с периодом полураспада $T_{1/2,j}$. Эти параметры и используются для описания временной зависимости потока нейтронов в реакторе после быстрого изменения его параметров, ведущему к изменению k_{eff}. Если изменённое значение k_{eff} окажется больше единицы, поток нейтронов в реакторе будет неудержимо возрастать, но если его превышение над единицей будет ниже β_1^{eff} рост будет определяться периодом полураспада первой, самой долгоживущей, группы $T_{1/2,1}$=55,6 сек, что даст оператору реактора время чтобы ввести отрицательную реактивность, компенсирующую избыточное превышение k_{eff} над единицей. Если изменённое значение k_{eff} окажется меньше единицы, реактор постепенно будет увеличивать свою мощность, переходя на более высокий уровень. Временная зависимость этого перехода позволит определить внесённую изменением реактивность в единицах $\beta^{eff} = \sum_j \beta_j^{eff}$ (путём сравнения с рассчитанной специалистами по динамике реактора).

1.5. Перенос гамма-излучения

Уравнение переноса гамма-квантов отличается от уравнения переноса нейтронов тем, что гамма-кванты если и порождают при взаимодействии с ядрами вторичные гамма-кванты, их энергия всегда меньше энергии рассеянного кванта, т.е. цепная реакция размножения гамма-квантов невозможна. Поэтому в уравнении переноса гамма-излучения всегда присутствует внешний источник. Как правило, им являются гамма-кванты, излучаемые радионуклидами, образованными в нейтронных реакциях (либо долгоживущими, извлечёнными из реактора, либо короткоживущими, испускаемые непосредственно в реакторе). При расчёте гамма-полей в реакторе важным источником являются гамма-кванты, практически мгновенно испускаемые ядрами, возбуждёнными в результате неупругого рассеяния, радиационного захвата или деления. В любом случае, если задача расчёта реакторов решена, источники гамма-излучения определены. Типов взаимодействия гамма-излучения с веществом, которые необходимо учитывать при инженерных расчётах (целью которых в большинстве случаев является расчёт доз облучения попавших в гамма-поле людей) немного. Это когерентное рассеяние, при котором квант меняет направление движения, но сохраняет энергию; некогерентное рассеяние, при котором квант меняет и энергию и направление (энергия и импульс уходят на ионизацию атомов), рождение электрон-позитронной пары (в результате которой вместо исходного кванта возникает квант, обусловленный аннигиляцией позитрона) и фотопоглощение (когда вся энергия гамма-кванта уходит на ионизацию) При торможении образующихся в этих взаимодействиях электронов образуется тормозное рентгеновское излучение, которым в большинстве инженерных расчётов пренебрегается. Сечения названных процессов и энерго-угловые распределения вторичных квантов хорошо известны. Во всех рассмотренных случаях речь шла о взаимодействии гамма-излучения с атомами. Взаимодействие гамма-излучения с атомными ядрами возможно лишь при энергии фотонов порядка энергии связи нейтрона (протона или альфа-частицы). Столь высокоэнергичных гамма-квантов и в нейтронных реакциях и в при распаде радионуклидов образуется немного, и потому фотоядерные реакции при инженерных расчётах обычно не учитываются. Это не значит, что фотоядерные реакции не имеют практического значения. До середины 60-х годов прошлого века в экспериментах достаточно широко использовались фотоядерные источники, в которых реализовалась реакция (γ,n) на ядрах дейтерия или Be^9, в которых энергия связи нейтрона невелика. Это позволяло получить почти моноэнергетические источники нейтронов:
($Sb^{124}+Be^9 \rightarrow$ 0,024 МэВ; La^{140} + D2O→ 0.15 МэВ; La^{140} + $Be^9 \rightarrow$0.62 МэВ).

1.6. Методы решения уравнения переноса и используемые в них ядерные константы

1.6.1. В 20-м веке по мере развития физики реакторов, пополнения знаний ядерных данных и расширения вычислительных возможностей, связанных с созданием и совершенствованием ЭВМ, было разработано и опробовано немало различных методов решения уравнения переноса излучений, из которых к настоящему времени активно используются только три – метод Монте-Карло, Sn-метод и диффузионное приближение. Вычислительные программы, реализующие эти методы, используют ядерные данные в форме, адаптированном для удобного использования в соответствующем методе. Библиотеки числовых данных, представленных в этих форматах, называют библиотеками констант – фиксированных данных, на которые удобно ссылаться при сравнении расчётных результатов, полученных в разное время, разными методами. Приведенная в настоящем справочнике библиотека, названная КОЛИБРИ, ориентирована на использование в вышеупомянутых методах.

1.6.2. Метод Монте-Карло – метод расчётного моделирования траекторий нейтронов и (или) гамма-квантов– является самым простым в объяснении, но и наиболее трудоёмким методом. Под трудоёмкостью здесь понимается объём математических операций, выполнение которых необходимо для получения результата. Поскольку в нашем веке эти операции выполняют вычислительные машины, труд расчётчика состоит лишь в формулировке расчётного задания. Достоинством метода Монте-Карло является возможность сколь угодно детального описания геометрии рассчитываемого реактора или защиты и нуклидного состава гомогенных зон и столь детального описания энергетических и энерго-угловых зависимостей необходимых для расчёта ядерных данных, сколь точно они известны заказчику – расчётчику. Неизбежным недостатком является статистическая погрешность (среднеквадратичное отклонение от точного результата) определяется числом N разыгранных траекторий, внесших вклад в рассчитываемый результат, и пропорционально $1/\sqrt{N}$. Таким образом, для получения погрешности 0,1% требуется разыграть не менее миллиона траекторий.

Допустим, решается стационарная задача определения нейтронных потоков в некотором объекте, содержащем заданный внешний источник нейтронов $S_0(\vec{r},E,\vec{\Omega}) = R(\vec{r}) * g(E)/4\pi$, т.е. предполагаем, как это обычно и бывает, что нейтроны испускаются источником изотропно, а спектр не зависит от того, в какой точке источника испущен нейтрон. Точка испускания нейтрона, траектория которого моделируется, выбирается случайным образом в его объёме (области, где $R(\vec{r})$>0). Для случайного выбора энергии нейтрона целесообразно задавать не интенсивность испускания нейтронов с энергией E, а функцию $G(E) = \int_0^E g(E')dE' \Big/ \int_0^\infty g(E')dE'$. Тогда энергия E определяется из условия G(E)=ξ, где 0≤ξ ≤1 - величина, определённая генератором случайных чисел, встроенным в компьютер*. Случайным образом определяются и косинусы углов, определяющих направление испускания нейтрона. После этого вычисляется макроскопическое полное сечение $\Sigma_{t,0}(E) = \sum_i \rho_{i,0}\sigma_{t,i}(E)$ для материала источника (k=0). Полные сечения каждого изотопа, входящего в состав зоны источника, определяются из соответствующих таблиц: отыскивается минимальный номер j точки задания полного сечения, при котором Ej≥E и сечение $\sigma_{t,i}(E)$ определяется путём линейной интерполяции

* Далее при каждом упоминании случайного числа ξ будет иметься в виду новое его значение.

между табличными значениями $\sigma_{t,i}(E_j)$ и $\sigma_{t,i}(E_{j+1})$. Затем определяется длина свободного пробега нейтрона в рассматриваемой зоне $l_0 = -\ln\xi/\Sigma_{t,0}(E)$. Если окажется, что l_0 больше, чем расстояние от точки испускания нейтрона до границы зоны источника, значит, нейтрон вылетел в зону №1, окружающую источник, и требуется вычислить макроскопическое полное сечение для этой зоны и проверить, не вылетел ли нейтрон из неё. Процедура определения полных макроскопических сечений продолжается до тех пор, пока нейтрон не испытает столкновения в некой зоне с номером k (или не вылетит наружу). В точке столкновения требуется определить, с ядром какого нуклида i произошло столкновение. В качестве такового выбирается первый нуклид, для которого выполняется условие $\sum_{i'}^{i}\rho_{k,i'}(E)\sigma_{t,i'}(E)\Big/\Sigma_{t,k}(E) > \xi$. Затем проверяется, не поглотился ли нейтрон при этом столкновении. Нейтрон считается поглотившимся, если $p_{a,i}(E) = (1-\sigma_{t,i}(E))/\sigma_{t,i}(E) < \xi$. $p_{a,i}(E)$ определяется из таблицы вероятностей поглощения. Если поглощение произошло, траектория обрывается, и начинает рассматриваться траектория следующего нейтрона. Если нуклид, в котором поглотился нейтрон, делящийся, в «банке делений» запоминаются координаты точки, в которой произошло поглощение, энергия поглощённого нейтрона и среднее число нейтронов деления, которое могло бы испуститься в результате поглощения $\eta_i(E) = \nu_i(E)\sigma_{f,i}(E)/\sigma_{a,i}(E)$. Если поглощения не произошло, требуется определить тип рассеяния. Снова вычисляется случайное число ξ и если $\xi < p_{0,i}(E)$, значит, произошло упругое рассеяние; иначе – неупругое взаимодействие. Далее требуется определить энергию и направление движения рассеянного нейтрона. При упругом рассеянии достаточно определить косинус угла рассеяния μ, разыграв его, используя формулы (1.1) и (1.2), определить энергию рассеянного нейтрона. Если произошло неупругое взаимодействие, в используемой библиотеке констант требуется найти энерго-угловое распределение q_{non}(E,E’,μ) и, используя его, определить энергию рассеянного нейтрона и косинус угла рассеяния и среднее число вторичных нейтронов y_{non}(E), на который умножается «вес» нейтрона, первоначально равный единице.

Библиотека может содержать данные о сечениях (или вероятностях рассеяния) с возбуждением всех известных уровней возбуждения ядра-мишени, и тогда необходимо случайным образом выбрать один из возможных уровней и косинус угла рассеяния, после чего энергия рассеянного нейтрона однозначно определяется формулой, следующей из законов сохранения энергии и импульса при рассеянии с известным возбуждением ядра-мишени (аналогичной формулам (1.1), (1.2)). Далее следует проверить не реализовалась ли при неупругом взаимодействии реакция (n,n'p), (n,n’α), (n,2n) и т.п. а затем найти в библиотеке данные, позволяющие определить косинус угла вылета вторичного нейтрона и его энергию. Если реализовалась реакция (n,2n) или (n,3n) вес умножается на 2 или, соответственно, на 3.

После этого розыгрыш траектории нейтрона продолжается до тех пор, пока он не поглотится или не вылетит наружу, после чего приступают к розыгрышу следующей нейтронной траектории, пока не будет завершено рассмотрение заданного числа этих траекторий. Если объект содержит делящиеся нуклиды, но не представляет собой критический реактор, то после розыгрыша всех нейтронов, испущенных из внешнего источника (нейтронов первого поколения), разыгрываются траектории нейтронов деления, используя данные, накопленные в упомянутом выше банке делений (нейтроны второго поколения). Поскольку $\eta_i(E) > 1$ из каждой зарегистрированной в банке точки деления испускается несколько нейтронов – до тех пор, пока не будет набрано заданное число нейтронов в поколении.

Если оказалось, что рассчитываемая конструкция реактора надкритична, число нейтронов, испускаемых из точек деления, зарегистрированных в банке, будет неограниченно возрастать от поколения к поколению. Однако отношение числа нейтронов в поколении к числу нейтронов в предыдущем поколении – коэффициент размножения k>1 через несколько поколений стабилизируется. Для определения критической конфигурации, требуется внести в конструкцию реактора изменение, снижающее реактивность. Так же следует поступать, если реактор оказался подкритическим: k<1. В этом случае в конструкцию реактора следует внести изменение, повышающее реактивность.

Конечно, определённое в поколении число делений имеет определённую статистическую погрешность, относительная величина которой равна, примерно $1/\sqrt{N}$, где N – число разыгрываемых в поколении траекторий. Таким образом, при розыгрыше ста миллионов траекторий погрешность рассчитанного коэффициента размножения будет составлять примерно 0,01%, что существенно меньше доли запаздывающих нейтронов. Столь высокая точность расчёта требуется только при расчёте очень близких к критичности конфигураций, когда рассчитываются разности в $k_{эфф}$, обусловленные небольшими изменениями конфигурации (реактивности) или, например, при расчёте $\beta_{эфф}$ – эффективной доли запаздывающих нейтронов, т.е. обусловленного ими вклада в $k_{эфф}$. Для решения задачи повышения точности расчёта малых изменений $k_{эфф}$ обычно при розыгрыше нейтронных траекторий оценивается её «вес», т.е. вероятность того, что эта траектория могла бы реализоваться в изменённом реакторе (т.е. если бы температура топлива была бы чуть повыше или если бы испущенный нейтрон деления принадлежал заданной группе запаздывающих нейтронов). Разность между $k_{эфф}$ для основного состояния реактора и $k_{эфф}$, оцененного с «весом» внесённого изменения (возмущения) и является оценкой искомой реактивности. Погрешность этой оценки будет зависеть от того, какая доля разыгрываемых траекторий почувствует внесённое возмущение. Траектории нейтронов высоких энергий не почувствуют изменения доли запаздывающих нейтронов и погрешность расчёта $\beta_{эфф}$ будет выше погрешности $k_{эфф}$. Оценить реактивность возмущения малого объёма, в который разыгрываемые траектории залетают редко, ещё труднее, но и тут имеются специальные вычислительные приёмы. Однако, в любом случае расчёты методом Монте-Карло являются весьма трудоёмкими.

1.6.3 Выше не упоминалось об оценке функционалов нейтронного потока при расчётах методом Монте-Карло (не считая оценки $k_{эфф}$ и $\beta_{эфф}$). Если рассчитываемый функционал имеет «ядро» $Q_j(\vec{r},E)$, пропорциональное сечению какого-либо нуклида (например, наработка плутония в результате захвата нейтронов в U^{238}), значение функционала оцениваются в процессе розыгрыша траекторий. Суммируются случаи поглощения нейтронов в U^{238}, умноженные на отношение сечения захвата к сечению поглощения; эта сумма, делённая на суммарное число делений, определяет коэффициент воспроизводства ядерного топлива. Если $Q_j(\vec{r},E)$ зависит от энергии плавно (дозовые факторы, например), то функционал можно вычислить после того, как будет известен поток излучения (в рассматриваемом случае – нейтронов). При этом знание детальной зависимости потока нейтронов от энергии не требуется (да и оценить эту зависимость в расчётах Методом Монте-Карло проблематично). Поток нейтронов оценивается в групповом приближении – учитываются потоки нейтронов, лежащие в пределах заданных энергетических интервалов. Для оценки потоков в зонах реактора используются обычно три метода: оценка по поглощениям (число поглощений нейтронов данной группы делится на макроскопическое сечение поглощения); оценка по столкновениям (число столкновений, делится на макроскопическое полное сечение) и оценка по пробегам (сумма длин пробега нейтронов рассматриваемой группы делится на макроскопическое полное сечение). Таким образом, для оценки потоков никаких дополнительных ядерных данных не требуется.

1.6.4. Важной задачей является расчёт энерговыделения. Энергия заряженных продуктов деления (ядер отдачи, продуктов деления) выделяется практически в той точке, в которой произошла реакция. Та часть энергии, которая уносится образованными при реакции гамма-квантами, выделяется ими на расстоянии от точки реакции порядка средней длины пробега. Если этим «растеканием» выделяемой энергии можно пренебречь, энерговыделение может быть оценено в процессе розыгрыша нейтронных траекторий. Однако, например, в быстрых реакторах со свинцовым теплоносителем заметная часть энергии, выделяемой в нейтронных реакциях, выделяется гамма-квантами непосредственно в теплоносителе, а не переносится через стенки тепловыделяющих элементов. Чтобы учесть этот эффект при расчётах энерговыделения методом Монте Карло при каждом столкновении, сопровождающимся испусканием гамма-квантов, розыгрыш нейтронной траектории следует прекратить, рассмотреть траектории всех испущенных гамма-квантов (при этом оценивая энерговыделение, обусловленное их взаимодействием со средой) и только после этого вернуться к розыгрышу прерванной нейтронной траектории (если гамма-кванты образовались в процессе непругого рассеяния) или к рассмотрению траектории очередного нейтрона деления. Можно, разумеется, просто запоминать координаты точек испускания гамма-квантов, их энергии и интенсивности и рассматривать их траектории после завершения одной или нескольких нейтронных траекторий. Разумеется, учёт переноса энергии гамма-квантами несколько обременяет процедуру розыгрыша нейтронных траекторий несмотря на то, что сечения взаимодействия гамма-излучения с веществом – функции несравненно более плавные, чем нейтронные сечения и для их описания вполне может использоваться многогрупповое приближение – описание энергетических зависимостей гистограммами с заданными границами энергетических интервалов. В частности, в данном справочнике приводятся константы, позволяющие описать зависимости сечений гамма-квантов в 127-групповом приближении.

1.6.5. Многогрупповое приближение может быть использовано и для описания нейтронных полей. Ось энергий (обычно в логарифмическом масштабе) делится на множество частей. Нейтроны, энергии которых лежат в пределах определённой части, образуют группу, членам которой приписываются одинаковые – средне-групповые – сечения взаимодействия с ядрами.

Средне-групповые нейтронные сечения определяются путём усреднения по спектру нейтронов внутри рассматриваемой группы: $\sigma_g = \int_{E_g}^{E_{g-1}} \sigma(E)\tilde{\Phi}(E)dE \Big/ \int_{E_g}^{E_{g-1}} \tilde{\Phi}(E)dE$. Здесь σ - любое усредняемое сечение, $\tilde{\Phi}(E)$ - спектр усреднения, заведомо неизвестный. Для его оценки можно принять трёх-групповое приближение, которое применялось в физике реакторов ещё в 50-х годах 20 века: в области быстрых нейтронов (способных делить уран-238) принимается спектр нейтронов деления $\tilde{\Phi}(E) \approx Const * \exp(-E)\sinh\sqrt{2E}$ - спектр Уатта; при более низких энергиях – спектр нейтронов, замедляющихся в непоглощающей среде – спектр Ферми: $\tilde{\Phi}(E) \approx Const / \sqrt{E}$; в области тепловых энергий (ниже 0.2 – 0.1эВ) – спектр Максвелла: $\tilde{\Phi}(E) \approx Const * \sqrt{E}$ exp(-E/kT) (при комнатной температуре kT≈0.025 эВ). При достаточно большом числе групп это приближение (использование “стандартного спектра») приемлемо и сейчас при условии, что сечение плавно зависит от энергии.

Это условие, однако, соблюдается только в области высоких энергий, вообще же энергетическая зависимость нейтронных сечений большинства ядер чрезвычайно сложна и для поточечного описания этих зависимостей требуются сотни тысяч энергетических точек, так что если даже число групп довести до нескольких тысяч, сечения в пределах многих из них будут меняться на порядки и предложить универсальный непрерывный спектр $\tilde{\Phi}(E)$ невозможно. О характере зависимости нейтронных сечений от энергии можно судить по рис. 1, на котором приведена энергетическая зависимость полного сечения природного железа при энергиях выше 0,5 МэВ. Следует отметить, что при энергиях 3 – 5 МэВ структура полного сечения ещё сложнее изображенной на рисунке, т.к. не все резонансные всплески сечений удалось экспериментально разрешить. Выше 5 МэВ лежит область неразрешенных резонансов, структура сечений в которой не менее сложна, чем в области 4 – 5 МэВ, но детально не известна.

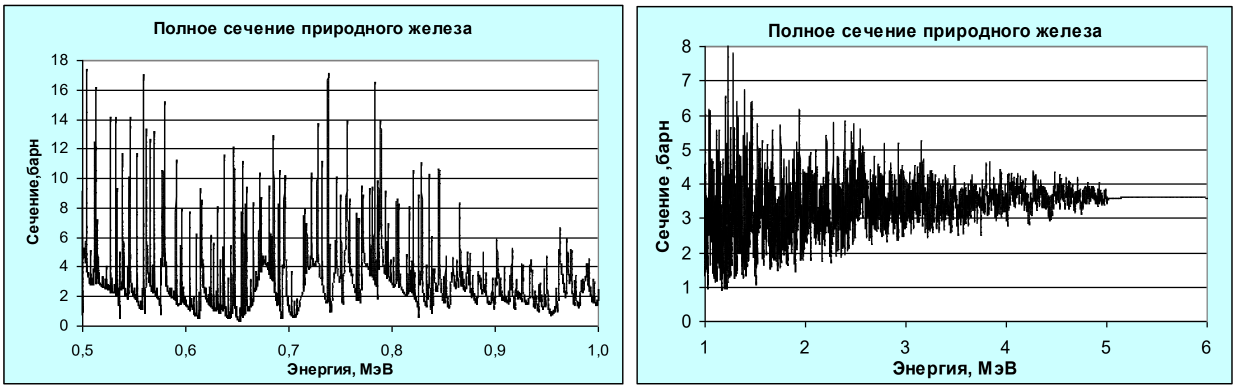


Рис.1. Полное сечение природного железа

1.6.6. Приближенная оценка формы спектра нейтронов, необходимая для усреднения нейтронных сечений по групповым интервалам энергии, выполняется исходя их следующих соображений. Поток нейтронов будем считать независящим от времени (стационарная задача). Будем считать, что пространственная область, занимаемая рассматриваемой средой, намного больше длины свободного пробега и в пределах этой области искомый внутригрупповой спектр не зависит от координат. Тогда уравнение (1.4) приобретёт вид

$$\Phi(\vec{\Omega}, E) = \int_0^{l_{\max}(-\vec{\Omega})} \exp[-l_k * \sum_i \rho_{i,k} \sigma_i(E)] * S(l, \vec{\Omega}, E) dl \qquad (1.11)$$

Источником нейтронов с энергией E могут быть нейтроны деления, спектр которых обладает плавной энергетической зависимостью и нейтроны, рассеянные при более высоких энергиях. Источник рассеянных нейтронов от энергии зависит довольно плавно, т.к. даже если единственным типом рассеяния является упругое рассеяние, интеграл по начальной энергии берётся по интервалу шириной $E*4A/(A+1)^2$ (для железа этот интервал составляет, примерно,7% от энергии нейтрона, т.е. много больше ширин резонансных особенностей в ходе сечений, изображенных на рис.1). Итак, оценку структуры спектра нейтронов проведём в предположении, что нейтроны, попадающие в резонансную область, плавно распределены по энергии. Пренебрежем и угловой зависимостью источника рассеянных нейтронов, которая, если и имеется, от энергии рассеянных нейтронов зависит плавно. Таким образом, в формуле для плотности потока нейтронов сохранилась лишь координатная зависимость источника $\overline{S}(\vec{r} - x\vec{\Omega}, E)$, усреднённого по всем энергиям и направлениям движения первичных нейтронов:

$$\Phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) = \int_0^{X_{\max}(-\vec{\Omega})} P(E, \vec{r}, \vec{r} - \vec{\Omega}x) * \overline{S}(\vec{r} - \vec{\Omega}x, E) dx \qquad (1.12)$$

Для упрощения задачи оценки спектра нейтронов, проинтегрированного по всем направлениям $\vec{\Omega}$ приближенно представим пространственную зависимость потока в окрестности рассматриваемой точки $\vec{r}$ в направлении $\vec{\Omega}$ в виде

$$\overline{S}(\vec{r} - \vec{\Omega}x, E) \approx \overline{S}(\vec{r}, E) + \vec{\Omega}x \frac{d\overline{S}(\vec{r}, E)}{dx}. \qquad (1.13)$$

Подставив это выражение в формулу (1.12) и проинтегрировав по всем направлениям, получаем

$$\Phi_0(\vec{r}, E) = \int_{4\pi} \Phi_0(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) d\vec{\Omega} = \int_0^{X_{\max}(-\vec{\Omega})} \exp(-x\Sigma_t(E)) * \overline{S}(\vec{r}, E) dx = \overline{S}(\vec{r}, E) / \Sigma_t(E) \qquad (1.14)$$

(если расстояние до границы $X_{\max}(-\vec{\Omega})$ много больше длины свободного пробега). Таким образом, усреднённый по всем направлениям нейтронный поток имеет структуру, обратную макроскопическому полному сечению, т.е. при тех энергиях, при которых в полном сечении наблюдаются резонансные пики, в нейтронном потоке имеют место провалы. Поскольку сечения поглощения и деления сосредоточены именно в пиках, да и сечение рассеяния в резонансах резко возрастает, усреднение сечений с весом, обратным полному макроскопическому сечению, приводит к уменьшению усреднённых сечений по сравнению с результатом усреднением по группе с весом плавно зависящего от энергии стандартного спектра. Этот эффект называют эффектом самоэкранировки и в физике реакторов он играет весьма большую роль.

Заметим теперь, что поскольку источник нейтронов зависит от направления, от направления будет зависеть и структура нейтронного потока. Выберем, например, направление градиента потока нейтронов, в котором $\frac{d\bar{S}(\vec{r},E)}{dx}$ максимально. Для потока нейтронов в этом направлении получим оценку

$$\Phi(\vec{r},\vec{\Omega},E)=\bar{S}(\vec{r},E)/\Sigma_t(E)-\frac{d\bar{S}(\vec{r},E)}{dx}\Big/\Sigma_t^2(E) \qquad (1.15)$$

(знак минус указывает, что в направлении, противоположном вектору градиента поток нейтронов уменьшается). При рассмотрении противоположного направления знак в формуле (1.10) изменится на обратный, так как со стороны градиента, где источник $\bar{S}(\vec{r}\,',E)$ интенсивнее, в рассматриваемый единичный объём втекает больше нейтронов. Для того, чтобы в многогрупповых расчётах учесть угловую зависимость структуры потока нейтронов усреднять групповые константы требуется и с весом $1/\Sigma_t(E)$ и с весом $1/\Sigma_t^2(E)$.

1.6.7. При решении уравнения переноса детерминистическими методами искомая функция $\Phi(\vec{r},\vec{\Omega},E)$ представляется в той или иной параметрической форме. Зависимость от энергии представляется, как правило, в групповом (т.е. кусочно-постоянном) приближении. Зависимость же от угловых и пространственных координат в зависимости от метода представляется то в виде разложения по известным ортогональным функциям (метод сферических гармоник), то в поточечном представлении (метод дискретных ординат); используется и немало иных представлений. Подстановка выбранного представления в уравнение переноса позволяет получить систему уравнений для определения численных значений параметров. Коэффициенты этих уравнений определяются геометрическими характеристиками рассчитываемого объекта и макроконстантами, зависящими от состава и нейтронных данных. Таким образом, для обеспечения программ решения уравнения переноса детерминистическими методами никаких специальных констант готовить не требуется: в уравнении для первой гармоники, имеющей смысл потока, усреднённого по всем направлениям, используется первый набор групповых констант (усреднённых по спектру потока, т.е. с весом $1/\Sigma_t(E)$); в уравнениях для первой гармоники – тока нейтронов - используется второй набор констант (усреднённых по спектру тока нейтронов, т.е. с весом $1/\Sigma_t^2(E)$).

Однако это не всегда так. При расчёте реакторов широко используется ячеечное представление пространственной зависимости нейтронного потока. Весь объём реактора разбивается на достаточно (с практической точки зрения) мелкие ячейки, в пределах которых пространственной зависимостью плотности потока пренебрегается. Перетечка нейтронов из одной ячейки в соседнюю принимается пропорциональной разности средних потоков в этих ячейках. Важно корректно определить коэффициент пропорциональности. Очевидно, что наиболее корректно это можно сделать, предварительно рассчитав потоки нейтронов во всех ячейках методом Монте-Карло для некоторого фиксированного состояния реактора, определить коэффициенты пропорциональности и затем использовать их для расчётов нейтронных полей в реакторе при иной мощности, глубине выгорания и т.п. О том, как может быть учтена угловая зависимость сечений при выполнении многогрупповых расчётов методом Монте-Карло будет сказано ниже.

1.6.8. Чтобы иметь возможность рассчитать многогрупповые макроконстанты для сред различного состава и различных температур, необходимо на основе данных о детальной структуре нейтронных сечений готовить и микроконстанты отдельных нуклидов, усреднённые разными способами. Эта задача решается с помощью факторов самоэкранировки (за рубежом часто называемые факторами Бондаренко по имени главного автора первой системы групповых констант, в которой они были введены).

Групповые сечения нуклидов $\bar{\sigma}_{i,r,g}$ должны быть определены так чтобы получить правильные значения макроскопических сечений, т.е. чтобы выполнялось условие

$$\Sigma^0_{r,g,m} = \sum_i \rho_{i,m}\bar{\sigma}_{i,r,g} = \sum_i \rho_{i,m} \left\langle \frac{\sigma_{i,r}(E)}{\sum_j \rho_{j,n}\sigma_{t,j}(E)} \right\rangle_g \Bigg/ \left\langle \frac{1}{\sum_j \rho_{j,n}\sigma_{t,j}(E)} \right\rangle_g \tag{1.16}$$

Здесь i – номер нуклида, g – номер группы, r – символ реакции: r=s – сечение рассеяния; r=f – сечение деления, r=c – сечение захвата без деления, r=t – полное сечение. Угловые скобки означают усреднение по всем энергиям группы n с весом заданного стандартного спектра. Вычисление групповых микроконстант, входящих в формулу (1.16), проводится итерационно. Сначала для каждого нуклида i рассчитываются среднегрупповые сечения $\bar{\sigma}^0_{i,r,g} = \langle \sigma_{i,r}(E) \rangle_g$.Затем вычисляются «сечения разбавления» всеми остальными $\sigma_{0,i,n}$ = $\sum_{j \neq i} \rho_{j,n}\sigma^0_{j,t,g} / \rho_{i,n}\sigma^0_{i,t,g}$. После этого $\bar{\sigma}_{i,r,g}$ рассчитываются в предположении, что сечения остальных нуклидов постоянны и равны $\bar{\sigma}^0_{i,r,g}$:

$$\bar{\sigma}_{i,r,g} = \left\langle \frac{\sigma_{i,r}(E)}{\sigma_{i,t}(E) + \sigma_{0,i,g}} \right\rangle \Bigg/ \left\langle \frac{1}{\sigma_{i,t}(E) + \sigma_{0,i,g}} \right\rangle = \bar{\sigma}^0_{i,r,g}\, f^0_{i,t,g}(\sigma_{0,i,g}) \tag{1.17}$$

Здесь $f^0_{i,t,g}(\sigma_{0,i,g})$ - фактор самоэкранировки сечения реакции r на нуклиде i в группе g при сечении разбавления рассматриваемого нуклида в среде, равном $\sigma_{0,i,g}$. После того, как факторы самоэкранировки для всех нуклидов получены в первом приближении, сечения разбавления пересчитываются, так что для второго приближения получаем $\sigma_{0,i,g} = \sum_{j \neq i} \rho_{j,n}\sigma^0_{j,t,g} f^0_{j,t,g} / \rho_{i,g}\sigma^0_{i,t,g} f^0_{i,t,g}$, где используются факторы самоэкранировки для сечения разбавления, найденного в предыдущем приближении.

Поскольку резонансная структура сечений зависит от температуры среды (с ростом температуры из-за теплового движения атомов резонансы в сечениях взаимодействия с их ядрами размываются), факторы самоэкранировки также оказываются зависящими от температуры.

Для корректного учёта токов требуется и подготовка данных для расчёта полного сечения, усреднённого с весом $1/\Sigma_t^2$, т.е. факторы $f_{i,t,g}^1(\sigma_{1,k},T_l)$, которые определяются так, чтобы обеспечить выполнение условия

$$\Sigma_{r,g,m}^1=\sum_i \rho_{i,m}\bar{\sigma}_{i,r,g}^0 f_{i,r,g}^1(\sigma_{1,i,g})=\sum_i \rho_{i,m}\left\langle \frac{\sigma_{i,r}(E)}{[\sum_j \rho_{j,n}\sigma_{t,j}(E)]^2}\right\rangle_g \Bigg/ \left\langle \frac{1}{[\sum_j \rho_{j,n}\sigma_{t,j}(E)]^2}\right\rangle_g \tag{1.18}$$

из которого для факторов $f_{i,t,g}^1(\sigma_{0,k},T_l)$ получаются соотношения

$$\bar{\sigma}_{i,r,g}=\left\langle \frac{\sigma_{i,r}(E)}{[\sigma_{i,t}(E)+\sigma_{1,i,g}]^2}\right\rangle \Bigg/ \left\langle \frac{1}{[\sigma_{i,t}(E)+\sigma_{1,i,g}]^2}\right\rangle=\bar{\sigma}_{i,r,g}^0 f_{i,r,g}^1(\sigma_{1,i,g}) \tag{1.19}$$

Сечения разбавления для 1-й гармоники $\sigma_{1,i,g}$ рассчитываются итерационно так же, как и $\sigma_{0,i,g}$, но с использованием в итерациях факторов $f_{i,t,g}^1(\sigma_{1,k},T_l)$.

Таким образом, набор данных для получения среднегрупповых сечений в резонансной области энергий должен состоять из таблиц «неблокированных сечений» $\bar{\sigma}_{i,r,g}^0$ и таблиц факторов самоэкранировки $f_{i,t,g}^0(\sigma_{0,k},T_l)$ и $f_{i,t,g}^1(\sigma_{1,k},T_l)$, где $\sigma_{0,k}$,$\sigma_{1,k}$ и T_l- наборы сечений разбавления и температур, для которых рассчитаны факторы.

Строго говоря, требовалось бы рассчитывать факторы самоэкранировки для второй и более высоких гармоник потока нейтронов, однако, обычно обходятся приближением, в котором эти факторы принимаются теми же, что и для первой гармоники – тока нейтронов.

При розыгрыше нейтронных траекторий во многогрупповом приближении при расчёте длины пробега следует использовать полные сечения, усреднённые с весом тока нейтронов, т.к. именно они обеспечивают максимально корректную оценку средней длины пробега. При расчёте же вероятностей процессов при столкновении нейтрона следует использовать отношения этих вероятностей, оцененных на основе сечений процессов, усреднённых с весом потока, т.е. усреднённых по всем направлениям, с которых прилетели нейтроны.

1.6.9. Альтернативой методу факторов самоэкранировки является метод подгрупп. Идея его состоит в следующем. Разобьём рассматриваемую энергетическую группу на несколько (2,3,…5) подгрупп и припишем каждой из них некую долю $a_{i,g,k}$ и некое значение полного сечения $\sigma_{t,i,k}$ данного нуклида i. Подбор следует провести таким образом, чтобы подгрупповое приближение позволяло с приемлемой точностью воспроизвести групповую кривую пропускания, усреднённую по стандартному спектру $\tilde{\Phi}(E)$:

$$T_{g,i}(x)=\int_{\Delta E_g}\tilde{\Phi}(E)\,\exp[-x\sigma_i(E)]\,dE\approx\sum_k^{K_i} a_{i,g,k}\exp\left[-x\sigma_{t,i,g,k}\right] \tag{1.20}$$

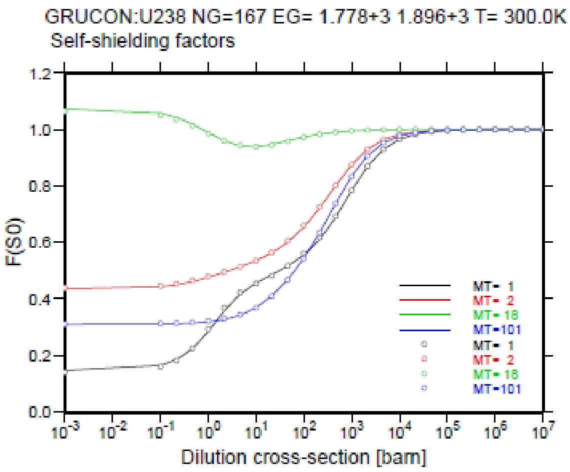
при условии, что $\sum_k^{K_i} \mathrm{a}_{\mathrm{i,g,k}} = 1$. Следует определить и парциальные подгрупповые параметры, такие, что $\sum_k^{K_i} \mathrm{a}_{\mathrm{i,g,k}}\, \sigma_{r,i,g,k} = \langle\sigma_{r,i,g}\rangle$, $a \sum_r \sigma_{r,i,g,k} = \sigma_{t,i,g,k}$

Удовлетворяющие этим условиям подгрупповые параметры обеспечивают сохранение средне-группового полного сечения $\langle\sigma_{t,i,g}\rangle = -\frac{T_{g,i}}{dx}$ и средних значений обратных степеней полного сечения $\langle\frac{1}{\left(\sigma_{t,i\,g}+\sigma_{0,i\,g}\right)^{-m}} = \sum_k^{K_i} \mathrm{a}_{\mathrm{i,g,k}} \int_0^\infty \exp\left[-x(\sigma_{t,i,g,k} - \sigma_{0,i\,g})\right] dE\rangle$ при любых степенях m>0 и сечениях разбавления $\sigma_{0,i\,g}$,а также средних значений отношений $\langle\sigma_{r,i\,g}/(\sigma_{t,i\,g} + \sigma_{0,i\,g})^{-m}\rangle$, т.е. обеспечивают сохранение факторов самоэкранировки при любых сечениях разбавления. Важно, однако, не только то, что подгрупповое описание структуры сечений позволяет компактнее представить данные о факторах самоэкранировки, но, главное - то, что расчёт, в котором группа g разделена на K_i подгрупп, позволяет учитывать резонансную самоэкранировку i-го нуклида не только в протяженной среде, для которой оправдано применение факторов самоэкранировки (функции пропускания интегрируются до бесконечного числа длин свободного пробега), но и в любой части небольшой зоны, содержащей нуклид i (например, Pu-239) с резонансными сечениями. Правда, если эта зона содержит два или три резонансных изотопов, при расчёте макроконстант группу придётся разбивать на K_1*K_2 или на K_1*K_2*K_3 подгрупп. При выполнении расчётов сеточными методами это может показаться обременительным, но при моделировании траекторий в расчётах методом Монте-Карло с использованием микроконстант нуклидов это не проблема.

1.6.10. Историческая справка. Метод подгрупп был предложен в 1961 г. на основе анализа зависимости кривых пропускания нейтронов от толщины мишени в области неразрешённых резонансов, что позволило учитывать влияние резонансной структуры на перенос нейтронов в области, где измерить детальную зависимость сечений от энергий не удается по причине недостаточного экспериментального разрешения[4]. В 1972 г. в США независимо был предложен «метод вероятностных таблиц»[5], отличающийся от метода подгрупп тем, что для получения параметров, аналогичных подгрупповым, использовались поточечные наборы сечений, генерируемые из средних резонансных параметров в небольшом диапазоне энергий, содержащим 50-100 резонансов, обеспечивающим адекватный учёт эффектов интерференции и перекрытия резонансов. Существенное отличие этих двух подходов состояло в том, что метод подгрупп позволяет учесть резонансную структуру при числе подгрупп, на порядок меньше, чем метод таблиц вероятностей, благодаря возможности оптимизации под факторы самоэкранировки (от 2 до 5 подгрупп, вместо 20-50, получаемых в таблицах вероятностей). Это даёт возможность использовать подгрупповые параметры в детерминистических расчётах, требующих подготовки макросечений, время подготовки которых факториально зависит от числа подгрупп, в то время как таблицы вероятностей могут быть использованы только в расчетах методом Монте-Карло, использующих микроскопические сечения. На основе подгруппового/вероятностного подходов моделирования резонансной структуры сечений

[4] Бондаренко И.И.,Николаев М.Н.,Филиппов В.В., Атомная энергия **11**, №5, (1961) с.335
[5] L.B.Levitt. Nucl. Sci. Eng. **49** (1972) 450

впоследствии были развиты методы расчетов переноса нейтронов [6,7] и обобщены на область разрешённых резонансов посредством дополнения таблиц подгрупповых параметров матрицами вероятностей подгрупповых переходов при рассеянии на широких резонансах (обобщёнными подгрупповыми параметрами)[8]. Параллельно с программами решения уравнения переноса методом подгрупп, развивались и совершенствовались методы получения подгрупповых параметров. В частности, при подготовке подгрупповых параметров для библиотеки КОЛИБРИ использовались алгоритмы, основанные на методе моментов[9] и рациональной аппроксимации *Padé-II*[10,11] , реализованных в процессинговой системе GRUCON. В настоящем справочнике приводятся подгрупповые параметры, вычисленные с использованием этих алгоритмов. Полученные параметры позволяют с достаточно хорошей точностью воспроизводить факторы самоэкранировки при любых сечениях разбавлениях (Рис.2). Полный набор сравнения факторов с их подгрупповыми аппроксимациями приводится в приложении АТЛАС.



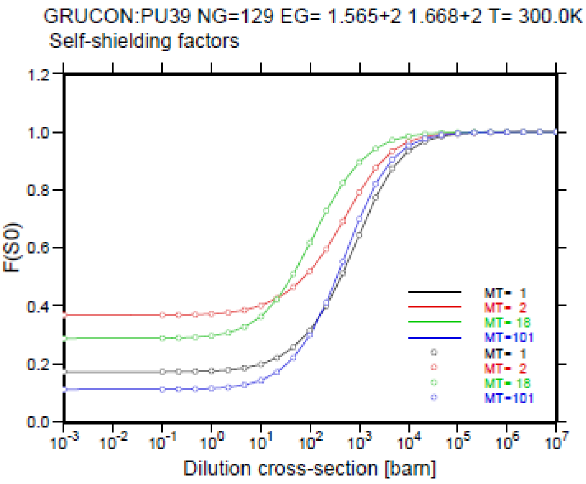


Рис.2. Воспроизведение подгрупповыми параметрами факторов резонансной самоэкранировки U-238 (слева) Pu-239 (справа) в групповых интервалах с сильно выраженной резонансной структурой: сплошные линии – детальный расчёт, кружки – подгрупповая аппроксимация. Обозначения реакций: MT=1 - полное сечение, MT=2 – упругое рассеяние, MT=18 - деление, MT=101 - поглощение.

1.6.11 Как и при расчётах факторов самоэкранировки, при использовании метода подгрупп обычно предполагается, что потеря энергии при упругом рассеянии превышает расстояние между резонансами и поэтому вероятность нейтрону группы g, принадлежащему подгруппе k и попавшему снова в ту же группу g, попасть в подгруппу k' равна $a_{k'}$ независимо от исходной подгруппы k. При использовании метода подгрупп при

[6] Николаев М.Н.,Игнатов А.А.,Исаев Н.В,Хохлов В.Ф., Атомная энергия, часть I, 29 №1, (1970) 11-16; часть II, 30 №5, (1971) 426-430
[7] D.E.Cullen Nucl.Sci.Eng. 55 (1974) 387-400
[8] Тебин В.В.,Юдкевич М.С., Атомная энергия 59 №2 (1985) 96-101
[9] Синица В.В., Николаев М.Н., Атомная энергия 35 № 6 (1973) 429;
[10] Бадиков С.А., Гай Е.В., Работнов Н.С., Синица В.В., Атомная энергия, 60 №1 (1986) 29-34
[11] Бадиков С.А., Гай Е.В., Синица В.В., Атомная энергия, 70 №2 (1991) 146-150

расчёте нейтронно-физических параметров реакторов на тепловых нейтронах это приближение становится неоправданным, поскольку потери энергии при рассеянии нейтронов в электрон-вольтной области энергий становятся меньше не только расстояний между резонансами, но порой и ширин отдельных резонансов. Устранить этот недостаток позволяет введение матриц вероятностей переходов между подгруппами. «Простейший» путь состоит в том, чтобы зная детальную структуру сечений в группе, вычислить спектр нейтронов, испытавших в ней упругое рассеяние и оставшихся в пределах группы. Перед рассеянием нейтроны можно считать равномерно распределёнными подгруппе, т.к. они попадают туда, главным образом, из более высокоэнеретических групп, в результате рассеяния на ядрах замедлителя. Далее, для спектра рассеянных нейтронов следует рассчитать функцию пропускания, а затем подобрать подгрупповые доли, позволяющие описать эту функцию с использованием исходных подгрупповых полных сечений. В соответствии с этими долями и можно распределять по подгруппам k' рассеянные в подгруппах k нейтроны.

1.6.12. При расчёте спектров в реакторах на тепловых нейтронах необходимо учитывать, что при низких энергиях скорость нейтрона становится сравнимой со скоростью теплового движения атомов (а, следовательно, и их ядер). Учёт теплового движения ядер приводит к изменению формы спектра нейтронов, испытавших упругое рассеяние; нейтрон, рассеянный на быстро движущемся ядре, может даже увеличить свою энергию. В системе констант КОЛИБРИ учёт теплового движения ядер производится при энергиях ниже 4.64159 эВ (группа 227). Вероятности межгрупповых переходов при рассеянии, как правило, вычислены в приближении свободно движущихся атомных ядер. Исключение составляют матрицы межгрупповых переходов при рассеянии на ядрах замедлителей, входящих в состав молекул или кристаллов. Так, например, различаются матрицы межгрупповых переходов при рассеянии на металлическом(кристаллическом) бериллии и на бериллии, входящем в состав окиси бериллия. Матрицы межгрупповых переходов при рассеянии на кислороде, входящем в состав окиси бериллия и в состав UO2 также различаются.

В расчётах методом Монте-Карло вероятности изменения энергии при рассеянии на свободно движущихся ядрах могут быть оперативно вычислены алгоритмически. Связь ядер в молекулах и кристаллах при большом числе групп может быть учтена в групповом приближении.

1.6.13. В заключение этого раздела упомянем ряд практически важных задач, для решения которых знания нейтронных и гамма-констант недостаточно. В первую очередь к ним относятся задача оценки нуклидного состава отработавшего ядерного топлива (ОЯТ). После того, как топливо в реакторе отслужит свой срок, оно будет содержать, кроме остатков невыгоревших топливных изотопов, продукты деления и так называемые минорные актиниды, образовавшиеся в результате нейтронных реакций на ядрах основных топливных изотопов. Необходимо также располагать данными о характеристиках их радиационного распада и о выходах продуктов деления.

. При расчётах радиационной защиты требуется располагать данными о допустимых уровнях потока излучений за защитой. При выборе конструкционных материалов надо располагать данными об их радиационной стойкости.

1.7. Погрешности ядерных данных

Справочные данные принято сопровождать погрешностями приводимых числовых значений. Обоснованные погрешности, определённые по разбросу результатов множества их измерений, могли бы быть приведены для характеристик радиоактивного распада ядер. Однако, погрешности результатов расчёта характеристик реакторов и защиты от погрешностей этих характеристик зависят достаточно слабо: основной вклад в погрешности этих результатов вносят погрешности в нейтронных данных. В библиотеках оцененных нейтронных данных оценки погрешностей этих данных приводятся, однако, в отличие от периодов полураспада или вероятностей типа распада, основные нейтронные данные – сечения реакций – являются функциями энергии и погрешность сечения реакции r для нуклида i при энергии E может коррелировать с погрешностью этого сечения при любой другой энергии. Погрешности оцененных значений нейтронных сечений этой возможностью широко пользуются: в большинстве экспериментов измеряются отношения сечений. Более того, измеряемыми величинами, как правило, являются отношения сечений разных нуклидов. Таким образом, погрешности $\delta\sigma_{r,i,}(E_n)$ для всех R реакций r, всех I изотопов i, при всех N энергиях (или групп) n определяется симметричной ковариационной матрицей размерностью $(R*I*N)^2$, диагональ которой содержит дисперсии сечений $d_{r,i,n} = <\delta^2(r, i, (E_n))>$, а внедиагональные элементы содержат коэффициенты корреляции между погрешностями

$$C_{r,i,n,r',i',n'} = \frac{<\delta\sigma(r,i,(En))*\delta\sigma(r',i',(En'))>}{\sqrt{d_{r,i,n}*d_{r',i',n'}}} \qquad (1.21)$$

Здесь угловые скобки означают усреднение по всем возможным случайным отклонениям от среднего значения. Несмотря на чрезвычайную громоздкость характеристик погрешностей нейтронных сечений библиотеки оцененных данных сопровождаются ковариационными данными, которые могут быть преобразованы в групповую форму системами переработки. Сравнение независимых оценок погрешностей нейтронных сечений демонстрирует приемлемое согласие этих оценок. Проблема, однако, в том, что независимые оценки сечений различаются много больше, чем это должно было быть исходя из ковариационных данных.

В качестве примера приведём сравнение погрешностей и расхождений между оцененными данными для плутония-239. Погрешность числа вторичных нейтронов деления, согласно оценкам, варьируется в зависимости от энергии от примерно 0,2% при низких энергиях до 0,5% при энергии несколько МэВ. Максимальные расхождения между рассмотренными оценками в 2 -3 раза больше (Рис.3). Расхождения в оценках сечения деления при высоких энергиях вдвое превышают оценки погрешностей, а в электрон-вольтной области различия на порядок выше (Рис.4). Таковы же расхождения и для сечений захвата (Рис.5). Изложенное поясняет, почему авторы справочника не взяли на себя ответственность за рекомендацию той или иной ковариационной матрицы с целью её использования для оценки погрешностей расчётных результатов. Более реалистичная оценка константной составляющей расчётной погрешности может быть получена путём сравнения результатов расчётов по различным более или менее независимым оценкам нейтронных данных, использованных для формирования представленных в настоящем справочнике библиотек КОЛИБРИ.

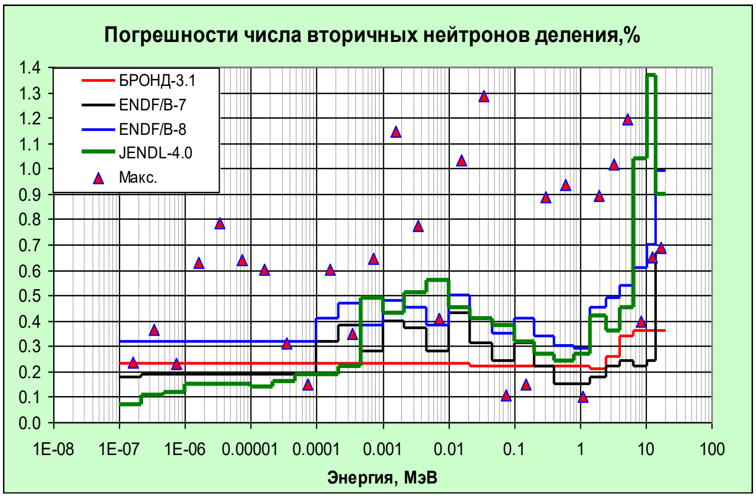


Рис.3. Погрешности числа вторичных нейтронов Pu-239 (%)

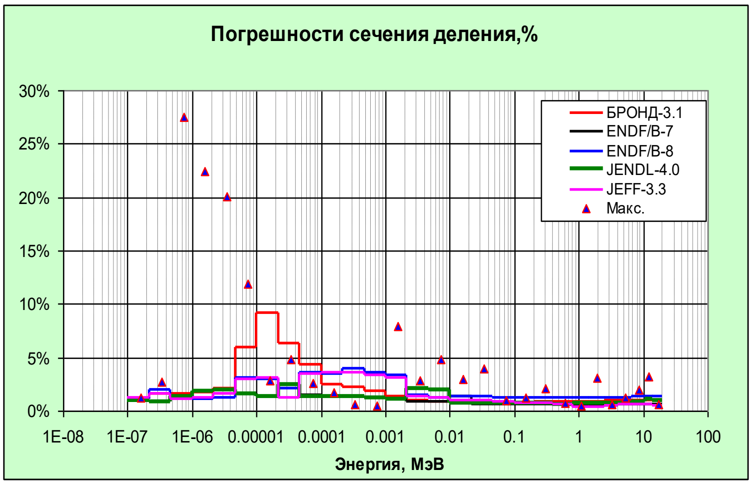


Рис.4. Погрешности сечения деления Pu-239 (%)

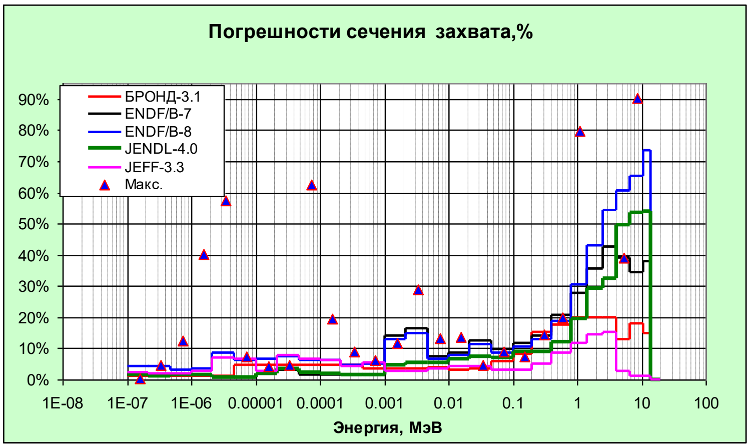


Рис.5. Погрешности сечения захвата Pu-239 (%)

Имеющийся опыт показывает, что различия в k-eff, рассчитанных по перечисленным системам констант, от экспериментальных данных, как правило, сравнимы с погрешностями, приписанным этим данным. В расчётах коэффициентов реактивности, коэффициентов воспроизводства различия могут быть существеннее и оценка погрешности результатов расчёта на основе их разброса актуальнее.

2. ИСХОДНЫЕ НАЦИОНАЛЬНЫЕ БИБЛИОТЕКИ ОЦЕНЕННЫХ ДАННЫХ

В разделе справочника «ENDF» собраны файлы оцененных данных современных национальных библиотек в формате ENDF-6[12], настроенные на переработку процедурами GRUCON. Настройка состояла в присвоении файлам нуклидов стандартизованных имен и устранении ошибок и противоречий в представлении данных, выявленных модулем GRUCON/ENDF. Оригинальные файлы сохранены и помещены в папку _Corrections, вместе с исправленными, чтобы дать возможность убедиться в обоснованности и корректности внесённых редакций. Как правило, необходимость исправлений возникала из-за несогласованности областей определения данных из разных секций материала, к которым алгоритмы GRUCON оказывались чувствительными. Реже – явные ошибки в представлении данных - немонотонность в табличных представлениях, потеря порядка и пр. Для проверки исправлений достаточно сравнить исходный файл с исправленным с помощью команд сравнения, имеющихся в любой операционной системе

2.1. ROSFOND10_1

Библиотека ROSFOND10_1 подготовлена из российской библиотеки ROSFOND-2010[13], выпуск 2010 года, путем присвоения стандартных имён, коррекции девяти файлов 001H_001, 007N014, 048Cd106, 050Sn118, 054Xe134, 063Eu153, 092U_233, 092U_234, 094Pu239 и дополнения данными специального назначения, которые требовались для получения полного набора таблиц КОЛИБРИ, а именно: выходами продуктов деления, характеристиками распада радионуклидов, данными о фото-атомных и фото-ядерных взаимодействиях. Недостающие данные были взяты из соответствующих подбиблиотек ENDF/B-VIII.0. Для того, чтобы избежать дублирования данных, в папку ROSFOND10 включены только подбиблиотеки из ROSFOND-10 – остальные при переработке данных извлекаются из папки ENDFB8_0.

Число материалов	Тип данных
322	нейтронные данные общего назначения для изотопов
62	нейтронные данные общего назначения для актинидов
299	активационные данные
14	данные по рассеянию тепловых нейтронов
31	выходы продуктов деления
3821	характеристики распада
100	данные фото-атомных взаимодействий
163	данные фотоядерных взаимодействий

[12] ENDF–6 Formats Manual: Data Formats and Procedures for the Evaluated Nuclear Data Files ENDF/B–VI, ENDF/B–VII and ENDF/B–VIII, ed. A. Trkov, M.Herman and D. A. Brown, CSEFG Document ENDF–102, Report BNL–203218–2018–INRE, SVN Commit: Revision 215, February 1,2018, доступен на сайте https://www-nds.iaea.org/exfor/x4guide/manuals/endf-manual.pdf

[13] https://www-nds.iaea.org/public/download-endf/ROSFOND-2010/

2.2.ENDFB8_0

Библиотека ENDFB8_0 подготовлена из американской библиотеки ENDF/B-VIII.0[14], выпуск 2017-го года, путем присвоения стандартных имён и коррекции шести файлов 020Ca042, 020Ca043, 020Ca044, 020Ca046, 020Ca048, 078Pt192.
Состав библиотеки ENDFB8_0:

Число материалов	Тип данных
471	нейтронные данные общего назначения для изотопов (активационные данные включены)
86	нейтронные данные общего назначения для актинидов (активационные данные включены)
16	данные по рассеянию тепловых нейтронов
31	выходы продуктов деления
3821	характеристики распада
100	данные фото-атомных взаимодействий
163	данные фотоядерных взаимодействий

2.3.JEFF3_3

Библиотека JEFF3_3 подготовлена из западноевропейской библиотеки JEFF-3.3[15], выпуск 2018-го года, путём присвоения стандартных имён и коррекции пяти файлов 001H_002, 057La138, 072Hf176, 072Hf178, 092U_239. Поскольку данные об образовании радионуклидов включены в материалы общего назначения (для их указания используется файл MF8), подбиблиотека активационных данных, заданная в формате EAF, при подготовке библиотеки COLIBY не использовалась.

Число материалов	Тип данных
494	нейтронные данные общего назначения для изотопов (активационные данные включены)
68	нейтронные данные общего назначения для актинидов (активационные данные включены)
7	данные по рассеянию тепловых нейтронов
20	выходы продуктов деления
3852	характеристики распада
100	данные фото-атомных взаимодействий
163	данные фотоядерных взаимодействий

[14] https://www.nndc.bnl.gov/endf-b8.0/download.html
[15] https://www.oecd-nea.org/dbdata/jeff/jeff33/

2.4. JENDL5_0

Библиотека JENDL5_0 подготовлена из японской библиотеки JENDL-5[16], выпуск 2021-го года, путем присвоения стандартных имён и коррекции файла 059Pr141.
Состав библиотеки JENDL5_0:

Число материалов	Тип данных
710	нейтронные данные общего назначения для изотопов
86	нейтронные данные общего назначения для актинидов
794	активационные данные
16	данные по рассеянию тепловых нейтронов
34	выходы продуктов деления
4070	характеристики распада
100	данные фото-атомных взаимодействий
2684	данные фотоядерных взаимодействий

2.5. CENDL3_2

Библиотека CENDL3_2 подготовлена из китайской библиотеки CENDL-3.2[17], выпуск 2020-го года, путём присвоения стандартных имён. Состав библиотеки:

Число материалов	Тип данных
238	нейтронные данные общего назначения для изотопов
34	нейтронные данные общего назначения для актинидов

При переработке этой библиотеки дополнительные данные не привлекались, поэтому директории библиотеки COLIBRY 08.Fission_product_yield, 127-group_gamma_data, Decay_data пустые, а данные по образованию гамма-квантов и энерговыделению получены без учета вклада радиоактивных продуктов реакций.

[16] https://www.ndc.jaea.go.jp/jendl/j5/j5.htm
[17] https://www-nds.iaea.org/public/download-endf/CENDL-3.2/

3. ВЕРСИИ БИБЛИОТЕК КОЛИБРИ

3.1. Структура раздела «COLIBRY»

Этот раздел содержит пять директорий с библиотеками КОЛИБРИ (директории 0-го уровня), названия которых соответствуют библиотекам оцененных данных, из которых они получены: ROSFOND10_1, ENDFB8_0, JEFF3_3, JENDL-5.0, CENDL3_2.

Директории хранятся в виде zip-архивов, размер которых указан на Web-странице справочника. Каждая из директорий 0-го уровня состоит из шести директорий 1-го уровня с данными определённого типа, обозначенными на Рис.1 именами:

- Common library data
- Content
- 299-group neutron data
- 127-group gamma data
- Decay data
- Point-wise energy data

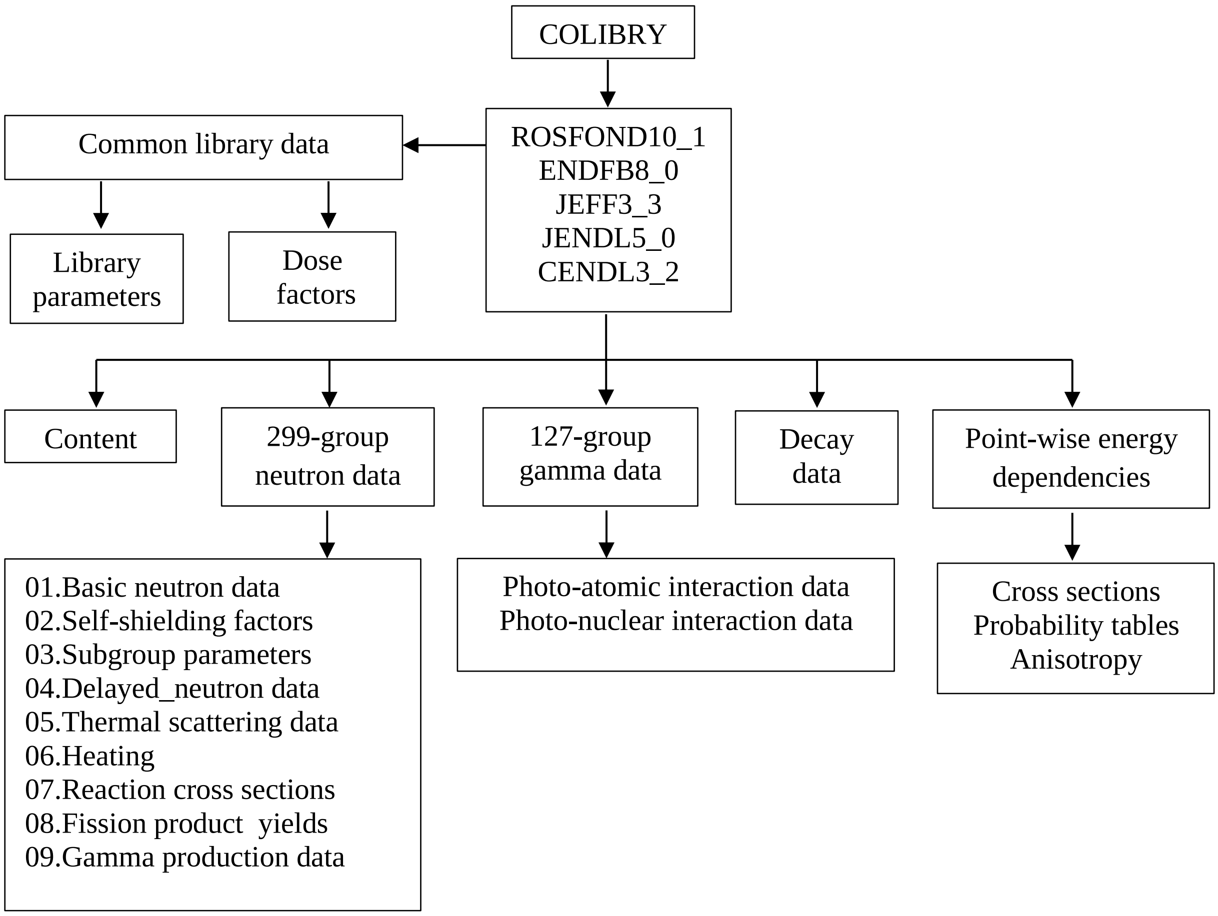


Рис.1 Структура раздела COLIBRY

Данные библиотеки КОЛИБРИ представлены в виде таблиц в едином формате, который имеет смысл рассмотреть прежде, чем приступить к описанию содержания директорий следующих по рангу уровней.

3.2. Формат таблиц

Формат КОЛИБРИ представляет собой формат БНАБ с увеличенными размерами полей заголовочных карт для обеспечения единообразного представления не только групповых, но и детальных данных.

Каждая таблица КОЛИБРИ представляет собой набор строк трёх типов.

1-й тип – параметры таблицы;

2-й тип – собственно табличные данные;

3-й тип – строки комментариев.

Строки комментариев при обработке данных игнорируются. Признаком того, что строка является строкой комментариев, служит символ «*» в первой позиции строки.

Параметры таблицы всегда размещаются на первых двух строках, имеющих строго фиксированный формат.

Первая строка характеризует нуклид и тип представленных в таблице данных. Строка обрабатывается по формату

READ (NTAPE, ‘(4X, A8, 5X, A6, 2(5X, I3), 2(6X, E11.0))’) NAM, LIB, MF, MT, PAR1, PAR2

Здесь:

NAM - символьное “имя” (наименование) материала, данные для которого содержатся в таблице (не более 8 символов). В таблицах, относящихся к изотопам, NAM – это “имя” изотопа, данные для которого содержатся в определенном файле библиотеки РОСФОНД (например, NAM=Fe56, NAM=Am242m и т.п.).

Таблицы матриц рассеяния нейтронов в тепловой области энергий на связанных атомах именуются “именами” этих атомов с сокращенным указанием типа связи (например, NAM=D_D2O содержит данные о рассеянии медленных нейтронов на дейтерии, входящем в состав тяжелой воды, NAM=Be_met - данные для металлического бериллия и т.п.).

Таблицы данных для естественных смесей изотопов, а также данные фото-атомных взаимодействиях используют в качестве NAM обозначение химического символа элемента (например, NAM=Ni).

Имена NAM в таблицах каталогов образуются из названий директорий, которым эти каталоги принадлежат, сокращенных до 8 символов и переведенных в заглавные буквы (например, NAM=ACTINIDE – для директории Actinides).

Имена NAM в таблицах данных, общих для всех библиотек, образованы в соответствии с типом данных; для параметров библиотек это:

NAM=EGN - характеристики нейтронных групп (Neutron Group Energies),

NAM=EGG - характеристики групп гамма-квантов (Gamma Group Energies),

NAM=DCS - значения сечений разбавления (Dilution Cross Sections),

NAM=TEM - значения температур (Temperatures);

NAM=NDF - дозовые факторы для нейтронов (Neutron Dose Factors),

NAM=GDF - дозовые факторы для гамма-квантов (Gamma Dose Factors).

LIB - символьное “имя” (наименование) библиотеки, данные которой содержатся в таблице; образуется сокращением названия директории с данными, полученными из соответствующей библиотеки оцененных данных, до 4-символов:

LIB=ROSF - для библиотеки ROSFOND10_1,

LIB=ENDF - ENDFB8_0,

LIB=JEFF - JEFF3_3,

LIB=JEND - JENDL5_0,

LIB=CEND - CENDL3_2.

Для общих данных и параметров библиотек используется традиционная аббревиатура LIB=ABBN.

MF - идентификатор типа данных (см. ниже).

MT - идентификатор типа взаимодействия (см. ниже).

PAR1 - первый вещественный параметр, характеризующий приводимые в таблице данные или материал, к которому они относятся (например, атомная масса материала). В некоторых таблицах этот параметр может отсутствовать или не использоваться.
PAR2 - второй вещественный параметр, служащий для тех же целей. В некоторых таблицах этот параметр также может отсутствовать.
Вторая строка характеризует объем и форму представления последующих табличных данных.
Она обрабатывается по формату

READ (NTAPE,'(3X,I3,10X,I7,2(5X,I3),5X,A48)') LV, LT, LC, LS, FORM

Здесь обозначены:
LV - идентификатор, определяющий типы данных таблицы: LV=LI*10+LH, где LI – число столбцов типа INTEGER, LH - число столбцов типа CHARACTER; число столбцов REAL определяется разностью LR=LC-LI-LH;
LT - число не комментированных строк в таблице (не считая первых двух заголовочных строк);
LC - полное число столбцов в таблице данных;
LS - максимальное число столбцов в строке, используется в случае переноса данных на другую строку. В таблицах КОЛИБРИ данные задаются одной строкой, LS=LC;
FORM – текстовая констант - тело оператора FORMAT для чтения величин, размещенных в одной строке таблицы.

Табличные данные – LT строк, следующих за второй заголовочной строкой, считываемых по формату FORM. Величины, хранимые в таблицах КОЛИБРИ, могут быть трех типов - REAL, INTEGER или CHARACTER

3.3. Данные общего назначения

Директория первого уровня **Common_library_data** содержит две директории 2-го уровня: Library parameters и Dose factors.

3.3.1. Library parameters содержит 4 таблицы:

3.3.1.1. Таблица 299_Neutron_group_structure.tab с заголовком
*   299-GROUP STRUCTURE OF NEUTRON ENERGIES
*   AND WEIGHT FUNCTION PARAMETERS
параметрами LV=10, LT=299, LC=LS=7
и значениями в столбцах
NG - номер группы,
EL, EH - нижняя и верхняя энергетические границы (эВ),
DU - ширина группы в единицах летаргии,
R - параметры стандартного спектра усреднения,

R=T_f =1.40E+06 – температура (в эВ) спектра деления $\sqrt{E} \cdot e^{-E/T_f}$,

R=n= -1 – параметр спектра E^n (1/E – спектр Ферми);

R= T_m =0.025 – температура T_m спектра Максвелла $E \cdot e^{-E/Tm}$.

<1/V> - средне-групповая обратная скорость нейтрона (сек/м),
EAV - средне-групповая энергия в эВ).

3.3.1.2. Таблица 127_Gamma_group_structure.tab с заголовком
*   127-GROUP STRUCTURE OF PHOTON ENERGIES
-*   AND WEIGHT FUNCTION PARAMETERS
и параметрами LV=10, LT=127, LC=LS=5 содержит в столбцах:

NG - номер группы,
EL, EH - нижняя и верхняя энергетические границы (эВ),
R - параметр весовой функции, $\varphi(E)=E^R$;
EAV – средне-групповая энергия.

3.3.1.3. Таблица Dilution_cross_sections.tab с заголовком
*   DILUTION CROSS SECTION VALUES SET
и параметрами LV=10, LT=26, LC=LS=2 содержит 26 значений сечений разбавления для факторов резонансной самоэкранировки сечений.

3.3.1.4. Таблица Temperatures.tab с заголовком
*   TEMPERATURE VALUES SET
и параметрами LV=10, LT=6, LC=LS=2 содержит значения температур для зависящих от температуры констант - факторов самоэкранировки, подгрупповых параметров, матриц рассеяния нейтронов на свободных ядрах в области термализации.

3.3.2. Dose factors содержит две таблицы с дозовыми факторами.

.**3.3.2.1. Таблица Gamma_dose_factors,tab** с заголовком
*   PHOTON effective DOZE (1.E-12*ZV*CM**2)
и параметрами LV=10, LT=127, LC=LS=7 содержит 127-групповые значения эффективной дозы (в единицах 10^{-12} зиверт на см^2) при облучении кожи, тела и глаз параллельным и изотропным потоком излучения в соответствии с нормами радиационной безопасности НРБ-99.

3.3.2.2. Таблица Neutron dose factors.tab с заголовком
*   THE BODY NEUTRON DOZE FACTORs (1.E-12*ZV*CM**2)
и параметрами LV=10, LT=299, LC=LS=3 содержит 299-групповые значения эффективной дозы в тех же единицах при облучении тела параллельным и изотропным потоком нейтронов.

3.4. Каталоги библиотек

Директория первого уровня «Content» содержит восемь файлов с расширением tab, в которых находятся таблицы с каталогами данных:
Isotopes.tab – каталог данных неделящихся изотопов,
Actinides.tab – каталог данных актинидов,
Bounds.tab – каталог данных ядер атомов, входящих в состав молекул или кристаллов (“связанных” атомов);
Elements.tab – каталог данных много-изотопных естественных смесей (“элементов”),
Reactions.tab – каталог данных нуклидов, для которых приведены списки нейтронных реакций и продуктов этих реакций (кроме продуктов деления, задаваемых отдельно);
Decay.tab – каталог данных с характеристиками распада радионуклидов и спектрами гамма квантов, образующихся в результате распада;
PHA.tab - каталог данных фото-атомных взаимодействий;
PHN.tab - каталог данных фото-ядерных взаимодействий.

3.4.1. Каталог Isotopes.tab содержит характеристики данных изотопов. Параметры таблицы: LV=72, LC=LS=13; значение параметра LT равно числу нуклидов данного типа, содержат. В столбцах таблицы заданы:
NN – порядковый номер нуклида;
NIN – номер нижней по энергии группы с неупругим рассеянием;

NRH – номера верхней и
NRL – нижней по энергии групп, для которых приводятся факторы самоэкранировки;
NUH – номера верхней и
NUL – нижней по энергии групп, принадлежащих области неразрешённых резонансов;
ZAS – признак заряд-масса-состояние, определяемый, как ZAS=MZ*10000+MA*10+MS;
NAME – наименование нуклида;
AWR – отношение массы нуклида к массе нейтрона;
AM(C12) – масса нуклида в единицах C^{12};
ABUNDANCE – содержание изотопа в естественной смеси;
T1/2 – период полураспада, в единицах, указанных в следующем столбце
TU – единицы, в которых задан период полураспада: S - секунды, M - минуты, H – часы, D – сутки, Y –годы.

3.4.2. Каталог Actinides.tab – таблица с параметрами LV=72, LC=LS=13 и значением LT, равным числу нуклидов данного типа. В столбцах таблицы заданы:
NN – порядковый номер нуклида;
NIN – номер нижней по энергии группы с неупругим рассеянием;
NRH – номера верхней и
NRL – нижней по энергии групп, для которых приводятся факторы самоэкранировки;
NUH – номера верхней и
NUL – нижней по энергии групп, принадлежащих области неразрешённых резонансов;
ZAS – признак заряд-масса-состояние, определяемый, как ZAS=MZ*10000+MA*10+MS;
NAME – наименование нуклида;
AWR – отношение массы нуклида к массе нейтрона;
AM(C12) – масса нуклида в единицах C^{12};
ABUNDANCE – содержание изотопа в естественной смеси;
T1/2 – период полураспада, в единицах, указанных в следующем столбце
TU – единицы, в которых задан период полураспада: S - секунды, M - минуты, H – часы, D – сутки, Y –годы.

3.4.3. Каталог Bound.tab - таблица с параметрами LV=21, LC=LS=3+NT и значением LT, равным числу атомов, для которых определены законы рассеяния нейтронов. В столбцах таблицы заданы:
NN – порядковый номер данных,
NAME – имя, определяющее атом и тип связи,
NT – число температур,
TEM(NT) – значения температур, заданные в следующих NT столбцах.
Значения температур взяты из файлов ENDF подбиблиотеки оцененных данных по рассеянию нейтронов в тепловой области энергий Thermal.

3.4.4. Каталог Elements.tab - таблица с параметрами LV=51, LC=LS=8 и значением LT, равным числу естественных смесей в библиотеке; столбцы таблицы содержат:
NN – порядковый номер элемента;
NIN – номер нижней по энергии группы с неупругим рассеянием;
NRH – номера верхней и
NRL – нижней по энергии групп, для которых приводятся факторы самоэкранировки;
ZAS – признак заряд-масса-состояние, определяемый, как ZAS=MZ*10000+MA*10+MS;
NAME – наименование нуклида;
AWR – отношение массы нуклида к массе нейтрона;
AM(C12) – масса нуклида в единицах C^{12}.

3.4.5. Каталог Reactions.tab – таблица с параметрами LV=22, LC=LS=8 и значением LT, равным числу нуклидов, для которых приведены выходы продуктов реакций; в столбцах таблицы заданы:
NN – порядковый номер данных;
ZAS – признак заряд-масса-состояние, определяемый, как ZAS=MZ*10000+MA*10+MS;
NAME – наименование нуклида;
AWR – отношение массы нуклида к массе нейтрона;
AM(C12) – масса нуклида в единицах C^{12}.

3.4.6. Каталог Decay.tab – таблица с параметрами LV=32, LC=LS=9 и значением LT, равным числу нуклидов, для которых приведены характеристики распада; столбцы таблицы содержат:
NN – порядковый номер данных;
ZAS – признак MZ*10000+MA*10+MS, где MZ -заряд ядра, MA -массовое число, MS - состояние возбуждения- номер уровня, с которого происходит распад;
NAME – наименование нуклида, включающее признак метастабильного состояния (m,n,o,…для 1-го,2-го, 3-го,… метастабильного состояния, соответственно)
AWR – отношение массы нуклида к массе нейтрона;
AM(C12) – масса нуклида в единицах C^{12};
ABUNDANCE – концентрация в естественной смеси (для стабильных изотопов, для нестабильных поле оставлено пустым);
T1/2 – период полураспада в единицах, указанных в следующем столбце;
TU – единицы, в которых задан период полураспада: S -секунды, M- минуты, H-часы, D – сутки, Y –годы
RTYP - последовательность целых чисел - признаков типов распадов:
1 – бета распад,
2 – позитронный распад или захват орбитального электрона;
3 – изомерный переход;
4 – альфа-распад;
5 – эмиссия нейтрона,
6 – спонтанное деление,
7 – эмиссия протона.

3.4.7. Каталог PHA.tab – таблица с параметрами LV=21, LC=LS=5 и значением LT, равным числу атомов, для которых приведены данные фото-атомных взаимодействий; столбцы таблицы содержат:
NN – порядковый номер данных;
ZA – признак атома, определяемый по аналогии с признаком ядра: MZ*10000;
NAME – наименование атома;
AWR – отношение массы атома к массе нейтрона;
AM(C12) – масса атома в единицах C^{12}.

3.4.8. Каталог PHN.tab – таблица с параметрами LV=21, LC=LS=5 и значением LT, равным числу нуклидов, для которых приведены данные по образованию нейтронов в фотоядерных взаимодействиях; столбцы таблицы содержат:
NN – порядковый номер данных;
ZAS – признак заряд-масса-состояние, определяемый, как ZAS=MZ*10000+MA*10+MS;
NAME – наименование нуклида;
AWR – отношение массы нуклида к массе нейтрона;
AM(C12) – масса нуклида в единицах C^{12}.

3.5. 299-групповые нейтронные данные

Директория первого уровня **«299-group_neutron_data»** содержит 9 директорий второго уровня. Ниже приводится описание структуры и содержания этих директорий.

3.5.1 Директория второго уровня «01.Basic_neutron_data» содержит 3 директории 3-го уровня: «Actinides», «Elements» и «Isotopes», каждая из которых содержит файлы с именами нуклидов с расширением MLT. Перечни нуклидов приведены в директории _Content. Каждый файл содержит пять таблиц, различающихся значениями MF и MT. Данные, содержащиеся в этой директории, необходимы для расчёта нейтронных полей вне зависимости от того, какова цель этого расчёта, что и послужило основанием для их размещения в одной директории.

3.5.1.1. Таблица MF=301, MT=0 с заголовком
* THE MAIN 299-GROUP NEUTRON CONSTANT SET
и параметрами LV=10, LT=299, LC=LS=8 содержит столбцы с данными:
N – номер группы,
TOTAL – полное сечение,
CAPTURE -- сечение захвата,
FISSION – сечение деления или нули, если деление отсутствует,
ELASTIC – сечение упругого рассеяния,
INELASTIC – сечение неупругих взаимодействий - все реакции, кроме упругого рассеяния и деления, не приводящие к потере нейтрона: (n,n’), (n,2n), (n,3n,), (n,n'p), (n,n'α) и др.
YN – среднее число нейтронов, испускаемых в неупругих взаимодействиях,
NU – полное число нейтронов деления, включая запаздывающие нейтроны, или нули, если деление отсутствует.

3.5.1.2. Таблица MF=302, **MT=0** с заголовком
* INELASTIC SCATTERING GROUP TRANSITION PROBABILITIES P(N <- K)
содержит матрицу вероятностей групповых переходов для неупругих процессов рассеяния (определение см. в описании таблицы MF301). Параметры матрицы: LV=10; число столбцов LC=LS=NGI, где NGI – число групп, в которых рассеиваются нейтроны; число строк LT=NGO - число групп, в которые попадают рассеянные нейтроны.
В столбцах таблице приводятся:
N -- номер группы, в которую попадают рассеянные нейтроны в результате неупругих процессов,
K – номер группы, из которой происходит рассеяние.
Сумма элементов каждого столбца по определению равна единице.

3.5.1.3. Таблица MF=302, **MT=1** с заголовком
* INELASTIC SCATTERING AVERAGE COSINES FOR N <- K GROUP TRANSITIONS
по формату совпадает с предыдущей, но вместо вероятностей переходов в ней приведены средние косинусы угла рассеяния нейтронов в неупругих процессах рассеяния в лабораторной системе координат.

3.5.1.4. Таблица MF=303, **MT=0** с заголовком
* ELASTIC SCATTERING GROUP TRANSITION PROBABILITIES AND LEGENDRE COEFFICIENTS (LCS)
содержит матрицу вероятностей групповых переходов упругом с параметрами анизотропии – коэффициентами разложения по полиномам Лежандра в лабораторной системе

координат. Параметры таблицы: LV=20, LC=LS=8, (NL+3, где NL =5- число моментов разложения); число строк LT равно числу всех переходов.
В таблице приводятся данные по столбцам:
N – номер группы, в которой произошло упругое рассеяние,
K – номер группы, в которую попал упруго рассеянный нейтрон,
P(N->K) – вероятность перехода нейтрона из группы N в группу K;
Столбцы с 4 по 8 содержат коэффициенты разложения угловых распределений в лабораторной системе координат по полиномам Лежандра, с L=1 (равного среднему косинусу рассеяния). Таким образом, угловое распределение нейтронов, осуществляющих определённый межгрупповой переход, задаётся в P5- приближении.
Для каждой группы N приводится столько строк, в какое число различных групп возможно замедление.

3.5.1.5. Таблица MF=303, **MT=1** с заголовком
* ELASTIC SCATTERING GROUP TRANSITION PROBABILITIES AND DISCRETE COSINES (CMS)
содержит матрицу вероятностей групповых переходов упругом с параметрами анизотропии, заданными дискретными косинусами в системе центра масс. Параметры таблицы: LV=20, LC=LS=8 (2*NC+2, где NC= 3- число дискретных косинусов)
Формат таблицы совпадает с MF=303, MT=0, но, в отличие от неё, содержит угловые распределения нейтронов заданные вероятностями рассеяния для трёх дискретных значения косинуса угла рассеяния в системе центра масс. Значения дискретных косинусов $\mu 1$, $\mu 2$ и $\mu 3$ и вероятностей рассеяния на первые два угла $\Omega 1$ и $\Omega 2$ таковы, что в точности сохраняют все пять угловых моментов индикатрисы рассеяния; Значение $\Omega 3$ не задаётся, поскольку определяется из условия нормировки вероятностей $\Omega 3=1-\Omega 1-\Omega 2$. Это представление ориентировано на программы расчёта нейтронных полей методом Монте-Карло. Формат таблицы следующий:
N – номер группы, в которой произошло упругое рассеяние,
K – номер группы, в которую попал упруго рассеянный нейтрон,
P(N->K) – вероятность перехода нейтрона из группы N в группу K,
OMEGA1 – вероятность рассеяния с косинусом угла $\mu 1$,
MU1 – значение $\mu 1$,
OMEGA2 – вероятность рассеяния с косинусом угла $\mu 2$,
MU2 – значение $\mu 2$,
MU3 – значение $\mu 3$.

3.5.1.6. Таблица MF=304, **MT=0** с заголовком
* TOTAL FISSION NEUTRON PRODUCTION PROBABILITY MATRIX KG -> IG, KG=1, … ,299
содержит полную матрицу вероятностей образования нейтронов деления. Параметры таблицы: LV=10,
LC=LS=KGM+1, где KGM – номер группы, начиная с которой вероятности перестают зависеть от начальной группы. Число строк равно числу нейтронных групп LT=299.
Матрица деления для актинидов задаётся вероятностями попадания из группы KG, в которой произошло деление, в группу IG. Из условия нормировки вероятностей, сумма элементов каждого столбца равняется 1. В целях экономии, столбцы с номерами KG > KGM таблицах они не приводятся. Для получения полной матрицы нужно при чтении строки повторить значение последнего столбца LT-LC+1 раз.

3.5.1.7. Таблица MF=304, MT=1 с заголовком
* PROMPT FISSION NEUTRON PRODUCTION PROBABILITY MATRIX KG -> IG, KG=1, … ,299
содержит матрицу вероятностей образования мгновенных нейтронов деления.
Формат таблицы совпадает с форматом полной матрицы MF304 MT=0. Таблица создаётся в случае, если в файле оцененных данных приведены либо спектры мгновенных нейтронов, либо спектры запаздывающих нейтронов. Если спектра мгновенных нейтронов нет, он определяется по разности между полным спектром (который для актинидов есть всегда) и спектром запаздывающих нейтронов.

3.5.2 Директория второго уровня «02.Self-shieding_factors»
содержит 3 директории 3-го уровня: «Actinides», «Elements» и «Isotopes», с файлами, поименованные стандартным именем нуклида с расширением SSF. Файл для каждого нуклида содержит таблицу

3.5.2.1. Таблица MF=305 с заголовком
* RESONANCE SELF-SHIELDING FACTORS
содержит факторы резонансной самоэкранировки с признаком MT при температуре, указанной на поле PAR2. Размерные параметры таблицы: LV=20, LC=LS=NSIGZ+1, где NSIGZ – число сечений разбавления, NSIGZ=26. Признак MT имеет следующий смысл:

-1 – фактор самоэкранировки полного сечения по спектру тока (усреднение с весом $1/(\sigma_{tot}+\sigma_0)^2$)
1 – фактор самоэкранировки полного сечения по спектру потока (усреднение с весом $1/(\sigma_{tot}+\sigma_0)$)
2 – фактор самоэкранировки сечения упругого рассеяния по спектру потока;
102 – фактор самоэкранировки сечения захвата по спектру потока;
18 – фактор самоэкранировки сечения деления по спектру потока (приводится только для актинидов).

Число строк таблицы LT равно числу групп с факторами, превышающими при минимальном разбавлении значение FMIN=0.995.
В столбцах задаются факторы самоэкранировки для 26 стандартных значений сечения разбавления σ_0, которые указаны и в закомментированной строке, предшествующей строке с данными. Факторы приводятся относительно средних сечений при реперной температуре T=300°K, вследствие чего асимптотические значения факторов при $\sigma_0 \to \infty$ стремятся к единице только для этой температуры. При других температурах факторы стремятся к пределу, равному отношению средних сечений при заданной температуре к реперной. Таким образом, последний столбец таблицы задаёт зависимость средних сечений от температуры.

3.5.3 Директория второго уровня «03.Subgroup_parameters»
содержит 3 директории 3-го уровня - «Isotopes», «Elements» и «Actinides», с файлами со стандартным именем нуклида и расширением SUN. В каждом файле находится 6 таблиц (по числу температур).

3.5.3.1. Таблица MF=306, MT=1 с заголовком
* SUBGROUP PARAMETERS
содержат подгрупповые параметры при температуре, указанной на поле PAR2.
Размерные параметры таблицы: LV=10, LC=LS=NR+2, где NR-число реакций, равное 3 для изотопов и 4 для актинидов. Число строк LT определяется суммарным числом подгрупп в группах, для которых имеются факторы резонансной самоэкранировки.

Строки таблицы разделенных на секции. Число строк в секции равно числу подгрупп, на которые разбита группа. В строке задаются:

N – номер группы, задается только на первой строке секции; в других строках секции номер не указывается.

Появление в первом столбце номера группы служит признаком начала новой секции.

Число строк в секции задаёт число подгрупп. Последующие столбцы содержат:

prob - долю подгруппы в рассматриваемой группе,
total – параметры полного сечения,
elastic - параметры упругого рассеяния,
capture – подгрупповые параметры захвата,
fission – параметры деления (задаётся при наличии реакции деления).

Подгрупповые сечения нормированы на среднее сечение, поэтому сумма долей в каждой группе, а также сумма произведений долей на параметры структуры сечений, равны единице.

3.5.4 Директория 2-го уровня «04.Delayed neutron data»

содержит данные о спектрах и выходах запаздывающих нейтронов. Вопреки рекомендациям использовать для спектров запаздывающих нейтронов 8-групповое представление, в котором спектры не зависят от нуклида, в отдельных файлах даже одной библиотеки оцененных данных встречаются отличающиеся для разных нуклидов спектры в 6-групповым представлении. Для того, чтобы упростить логику обращения с данными, спектры приводятся всегда, даже если они повторяются. Файлы директории поименованы стандартными именами актинидов с расширением 313 (согласно идентификатору таблицы MF). Отдельный файл может содержать одну или две таблицы, в зависимости от наличия спектров. Если спектры отсутствуют, приводится таблица

3.5.4.1. Таблица MF=313 MT=0 содержит доли запаздывающих нейтронов.

Значения параметров таблицы: LV=10, LC=LS=NDG+2, где NDG – число групп запаздывающих нейтронов, для которых имеются спектры.

Заголовок таблицы отражает наличие спектров: при наличии спектров (NDG>0) приводится строка - комментарий

*DECAY CONSTANTS (LAMBDA, 1/SEC)

после, которой, начиная с 3-го столбца – NDG значений констант распада. При этом полное число строк становится равным числу нейтронных групп +1: LT=300.

Затем, после заголовка

* NU-DEL TO NU-TOT RATIO (BETA) AND FRACTIONAL PARTS

начиная со второго столбца, приводятся значения долей запаздывающих нейтронов, полного (BETA) и парциальных, для каждой группы.

Если данные о группах запаздывающих нейтронах отсутствуют, приводится укороченный заголовок

* NU-DEL TO NU-TOT RATIO

после которого следуют строки со столбцами

N -номер группы,
BETA – доля запаздывающих нейтронов.

При этом структурные параметры равны LV=10, LT=299, LC=LS=2.

3.5.4.2. Таблица MF=313 и **MT> 0** содержит характеристики групп запаздывающих нейтронов, где значение MT=NDG - число групп (6 или 8).

Таблица содержит дополнительную строку с подзаголовком:

*   GROUP DECAY HALF-TIME (SEC)

в которой, начиная со второго столбца, задаются периоды полураспада групп запаздывающих нейтронов;

Затем следует заголовок

*   DELAYED NEUTRON ENERGY SPECTRA

и приводится NG строк, в которых значения спектров хотя бы для одной группы не равен нулю. Таким образом, параметрами таблицы являются

LV=10, LT=NG+1, LC=LS=NDG+1

Содержание столбцов:

N - номер нейтронной группы в последующих столбцах - значения спектров DG запаздывающих нейтронов

DN1 - 1-й группы,

DN2 - 2-й группы,

DN3 - 3-й группы,

DN4 - 4-й группы,

DN5 - 5-й группы,

DN6 - 6-й группы;

если число запаздывающих групп равно 8, дополнительно задаются:

DN7 - 7-й группы,

DN8 - 8-й группы.

3.5.5. Директория 2-го уровня «05.Thermal_scattering_data»

содержит 4 директории 3 уровня **«Actinides», «Elements», «Isotopes»** и **«Bound»,** в которых приводятся матрицы вероятностей межгрупповых переходов при рассеянии нейтронов в области термализации (группы от 227 до 299).

Первые три директории содержат файлы с данными по рассеянию нейтронов в области термализации на свободных ядрах, поименованные стандартным именем с расширением FG. Каждый файл содержит шесть пар таблиц (по числу температур в стандартном наборе, значение температуры приведено в PAR1).

3.5.5.1. Таблица MF=307 MT=0 - первая таблица в паре, с заголовком

*   FREE GAS THERMAL SCATTERING CROSS SECTION AND

*   GROUP TRANSITION PROBABILITIES P(IG => KG,...,KG+NG-1)

Значения параметров: LV=30, LC=LS=3+NG, где NG - максимальное число групп, в которые попадают нейтроны; LT=73 (число групп в области термализации).

В столбцах таблицы заданы:

IG – номер группы, в которой произошло столкновение,

KG – номер верхней по энергии группы после столкновения,

NG – число групп, в которое попали нейтроны в результате рассеяния.

В последующих столбцах приводятся:

XS – сечение рассеяния и

P(IG->KG) – NG вероятностей переходов, начиная с группы KG.

3.5.5.2. Таблица MF=307 MT=1 - вторая таблица в паре, с заголовком

*   FREE GAS THERMAL SCATTERING CROSS SECTION AND

*   GROUP TRANSITION AVERAGE COSINES MU(IG => KG,...,KG+NG-1)

По структуре совпадает с первой, но вместо вероятностей перехода в ней задаются средние косинусы угла рассеяния при переходе (в лабораторной системе координат).

В директории «Bound» содержатся файлы с матрицами вероятностей межгрупповых переходов при рассеянии нейтронов на связанных атомах. Файлам присвоены имена, состоящие из “имени” атома и условного обозначения типа связи, с расширением THM.

Например, файл с данными для кислорода в тяжелой воде имеет имя O_D2O.THM, для металлического железа - Fe_met.THM. Структура файлов идентична файлам FG, но число и значения температур берутся из файла оцененных данных, которые задаются параметром PAR1.

3.5.5.3. Таблица MF=307 MT=0 с заголовком

* BOUND ATOM THERMAL SCATTERING CROSS SECTION AND

* GROUP TRANSITION PROBABILITIES P(IG => KG,...,KG+NG-1)

содержит сечения и вероятности переходов, получаемые суммированием неупругого некогерентного рассеяния с сечениями когерентного или некогерентного упругого рассеяний (если они имеются)

3.5.5.4. Таблица MF=307 MT=1

* BOUND ATOM THERMAL SCATTERING CROSS SECTION AND

* GROUP TRANSITION AVERAGE COSINES MU(IG => KG,...,KG+NG-1)

содержит сечения и средние косинусы переходов, полученные из сумм первых моментов неупругого некогерентного рассеяния и когерентного или некогерентного упругого рассеяний (если они имеются).

<u>3.5.6. Директория 2-го уровня «06.Heating»</u>

содержит три таблицы MF=308 с данными об энерговыделении в нейтронных реакциях: полного энерговыделения:

3.5.6.1. Таблица MF=308 MT=0 с заголовком

* ENERGY RELEASE IN NEUTRON REACTIONS

* WITH DECAY PRODUCTS CONTRIBUTION (MeV)

с данными полное энерговыделения (сумма мгновенного и остаточного, в результате распада радиоактивных продуктов реакций

Параметры таблицы: LV=10, LC=LS= 6 для изотопов и элементов, LC=LS=8 для актинидов

Содержание столбцов, в порядке их следования:

N -номер нейтронной группы,

E-EL – локальное энерговыделение при упругом рассеянии (обусловленное торможением ядер отдачи),

E-C – локальное энерговыделение при захвате (обусловленное торможением заряженных продуктов реакций захвата),

T-C – полное энерговыделение (с учётом энергии, уносимой образуемыми гамма-квантами),

E-IN – локальное энерговыделение в неупругих процессах,

T-IN – полное энерговыделение в неупругих процессах;

и для актинидов, дополнительно:

E-F – локальное энерговыделение при делении,

T-F – локальное энерговыделение при делении

3.5.6.2. Таблица MF=308 MT=1 с заголовком

* ENERGY RELEASE IN NEUTRON REACTIONS (MeV)

имеет тот же формат, что и таблица с MT=0, но содержит данные мгновенного энерговыделения, т.е. выделяемого в момент прохождения реакции.

3.5.6.3. Таблица MF=308 MT=2 с заголовком

* REACTION PRODUCT DECAY ENERGY RELEASE (MeV)

имеет тот же формат, что и таблица с MT=0, но содержит данные энерговыделение в результате распада радиоактивных продуктов реакции.

Вклад E-EL в таблицы энерговыделения при распаде продуктов (MT=2), естественно, равен нулю. Радионуклиды, давшие вклады в E-C, N-C, E-IN и T-IN перечисляются в закомментированных строках заголовка с указанием номера реакции MT в номенклатуре ENDF-6. Для реакции деления вклад продуктов не выделяется. Энерговыделение приводится в единицах МэВ.

3.5.7. Директория 2-го уровня «07. Reaction_cross_sections»
содержит две директории 3-го уровня**: «Actinides» и «Isotopes»**, в которых приводятся файлы с таблицами с значениями сечений реакций образования ядер-продуктов реакций и их метастабильных состояний. Файлы поименованы стандартным наименованием нуклида с расширением REA.

3.5.7.1. Таблица MF=500, MT=0 с заголовком
* REACTION CROSS SECTIONS
содержит данные по образованию продуктов реакций
Параметры таблицы: LV=10, LT=NG+3 (NG=299-число групп), LC=LV=NR+1, где NR – число реакций с образованием нуклидов.
В первых трёх строках, начиная со второго столбца, приводятся
MT - идентификаторы нейтронных реакций принятые в формате ENDF-6,
ZAS идентификатор продукта реакции (для деления ZAS полагается равным 0),
Q – энергия реакции (МэВ).
В последующих строках в первом столбце приведен номер нейтронной группы, в остальных – соответствующие ей сечения реакций.

3.5.8. Директория 2-го уровня «08.Fission_product_yields»
содержит файлы данных о выходах и периодах полураспада продуктов деления для отдельных актинидов. Файлы поименованы наименованием актинида с расширением NFY. Файл содержит 2 таблицы.

3.5.8.1. Таблица MF=314, MT=454
содержит независимые выходы продуктов деления непосредственно в момент прохождения реакции (значение MT соответствует принятому в формате ENDF-6).
Параметры таблицы: LV=31, LT = числом продуктов деления + 1, LC = число опорных энергий + 5.
После заголовка
* REFERENCE ENERGIES
начиная с 4-го столбца, в таблице приводятся значения опорных энергий (эВ).
Затем, после заголовка
* FISSION PRODUCTS HALF-TIME AND INDEPENDENT YIELDS
задаются по столбцам:
N - порядковый номер продукта,
HZAS – текстовое имя продукта,
MZAS – признак продукта MZ*1000+MA*10+MS (заряд-масса-состояние)
IT - признак единицы измерения периода полураспада продукта
(1 – секунды, 2 – минуты, 3 – часы, 4 – сутки, 5 – годы)
T1/2 - период полураспада продукта в указанных единицах,
и, начиная с 6-го столбца – значения выходов для каждой опорной энергии.
Сумма выходов нормирована на 2.

3.5.8.2. Таблица MF=314, MT=459
содержит накопленные выходы продуктов деления (значение MT соответствует принятому в формате ENDF-6).
Параметры таблицы: LV=31, LT = числом продуктов деления + 1, LC = число опорных энергий + 5.
После заголовка
* REFERENCE ENERGIES
начиная с 4-го столбца, в таблице приводятся значения опорных энергий (эВ).

После строки - комментария
* FISSION PRODUCTS HALF-TIME AND CUMULATIVE YIELDS
задаются по столбцам:
N - порядковый номер продукта,
HZAS – текстовое имя продукта,
MZAS – признак продукта MZ*1000+MA*10+MS (заряд-масса-состояние)
IT - признак единицы измерения периода полураспада продукта
(1 – секунды, 2 – минуты, 3 – часы, 4 – сутки, 5 – годы)
T1/2 - период полураспада продукта в указанных единицах,
и, начиная с 6-го столбца – значения выходов для каждой опорной энергии.

3.5.9 Директория 2-го уровня «09.Gamma_production_data»

содержит три директории третьего уровня **«Actinides», «Isotopes»** и **«Elements»** в которых приводятся файлы данных с матрицами образования гамма-квантов в нейтронных реакциях как в момент столкновения нейтрона с ядром, так и в результате распада образовавшихся ядер. Файлы поименованы стандартным наименованием нуклида.

В случае, если имеется полный набор данных, файлу присваивается расширение 310, по номеру первой таблицы, с данными и суммарных энергиях и выходах гамма-квантов.
В противном случае файлам присваивается расширение, соответствующее типу данных, имеющихся в наличии: MF=311- для данных гамма-квантов в момент столкновения (мгновенных), или MF=312 - для данных гамма-квантов, образующихся в результате распада продуктов реакций.
Таблицы следуют в последовательности:

3.5.9.1. Таблица MF=310 MT=3 с заголовком
* GAMMA ENERGIES AND YIELDS IN NONELASTIC REACTIONS WITH DECAY CONTRIBUTION
содержит данные об энергиях гамма-квантов в реакциях, отличных от упругого рассеяния, с учётом вклада гамма-квантов от распада радиоактивных продуктов реакций. Задаётся в группах, в которых эти процессы разделить не удаётся. Параметры таблицы: LV=30, LT=NGN – число нейтронных групп; LC=LS=6+NGM, где NGM – максимальное число гамма-групп, в которое попадают образующиеся гамма-кванты. В столбцах задаются:
IG – номер группы, в которой произошло столкновение нейтрона,
KG – номер верхней по энергии группы, в которой образовались гамма-кванты
NG – число групп, в которых образовались гамма-кванты при столкновении нейтрона в группе IG.
В 4-м столбце столбцах приводятся:
EGAM –   энергия гамма-квантов,
в последующих NG столбцах:
Y(IG->KG) – выходы гамма-квантов в группах в группах от КG до KG+NG-1.

3.5.9.2. Таблица MF=310 MT=4 с заголовком
* GAMMA ENERGIES AND YIELDS IN INELASTIC REACTIONS WITH DECAY CONTRIBUTION
содержит данные об образовании гамма-квантов при полном неупругом рассеянии
с учётом вклада образующихся в результате распада продуктов реакции
Формат таблиц совпадает с предыдущей таблицей, но данные приводятся для реакции захвата нейтронов.

3.5.9.3. Таблица MF=310, MT=101 с заголовком
* GAMMA ENERGIES AND YIELDS IN CAPTURE REACTIONS WITH DECAY CONTRIBUTION
содержит данные об образовании гамма-квантов при поглощении нейтрона
с учётом вклада образующихся в результате распада продуктов реакции. Формат таблиц совпадает с предыдущей таблицей, но данные приводятся для реакции захвата нейтронов.
В случае актинидов

3.5.9.4. Таблица MF=310, MT=18 с заголовком
* GAMMA ENERGIES AND YIELDS IN FISSION REACTIONS
Формат таблиц совпадает с предыдущей таблицей, но данные приводятся для реакции деления. Вклад гамма-квантов от распада продуктов деления не учитывается.
Затем приводятся аналогичные таблицы для мгновенных гамма-квантов, с номером MF=311. Форматы такие же, как в таблицах MF=310, но данные относятся к гамма-квантам, образующимся в момент прохождения реакций.

3.5.9.5. Таблица MF=311, MT=3 с заголовком
* PROMPT GAMMA ENERGIES AND YIELDS IN NONELASTIC REACTIONS

3.5.9.6. Таблица MF=311, MT=4 с заголовком
* PROMPT GAMMA ENERGIES AND YIELDS IN INELASTIC REACTIONS

3.5.9.8. Таблица MF=311, MT=102 с заголовком
* PROMPT GAMMA ENERGIES AND YIELDS IN CAPTURE REACTIONS

3.5.9.9. Таблица MF=311, MT=18 с заголовком
* PROMPT GAMMA ENERGIES AND YIELDS IN FISSION REACTIONS
И, наконец, - для гамма-квантов, образующихся в результате распада радиоактивных продуктов реакций (кроме реакции деления) - таблицы с номером MF=312.
Форматы такие же, как в таблицах MF=310, но данные относятся к гамма-квантам, образующимся в результате распада продуктов реакций.

3.5.9.9. Таблица MF=312, MT=4 с заголовком
* GAMMA ENERGIES AND YIELDS IN INELASTIC REACTION PRODUCTS DECAY

3.5.9.10. Таблица MF=312, MT=102 с заголовком
* GAMMA ENERGIES AND YIELDS IN CAPTURE REACTION PRODUCTS DECAY

3.6. 127-групповые данные гамма-квантов

Директория первого уровня «127-group_gamma_data» содержит 2 директории 2-го уровня: «Photo-atomic_interaction_data» и «Photo-nuclear_interaction_data».
3.6.1. Директория второго уровня «Photo-atomic_interaction_data»
с файлами данных о фото-атомных взаимодействий для 100 элементов, поименованные стандартными именами атомов и расширением PHA. Данные представлены 4-мя таблицами:

3.6.1.1. Таблица MF=111, MT=0 с заголовком
* MAIN PHOTO-ATOMIC INTERACTION CROSS SECTIONS
и фиксированными значениями параметров: LV=10, LT=127, LC=LS=7.
Значения, задаваемые в столбцах:
GR- номер гамма-группы

COHER - сечение когерентного рассеяния,
COMPT - сечение комптоновского рассеяния,
PAIR - сечение образования электрон-позитронных пар,
PHOTO - сечение фотопоглощения,
TOTAL - полное сечение,
EN.LOSS - средняя потеря энергии при столкновении (эВ).

3.6.1.2. Таблица MF=112, MT=0 с заголовком
* GAMMA COHERENT SCATTERING ANGULAR DISTRIBUTION DISCRETE COSINES
содержит данные по анизотропии когерентного рассеяния. Таблица начинаются с групп, в которых вероятность рассеяния строго вперёд начинает отличатся от 1.0 более, чем на 0.0001, поэтому число строк LT в таблицах разные. Значения других параметров:
LV=10, LC=LS=6. Поскольку когерентное рассеяние гамма-квантов приводит только изменению направления их движения, в таблице указывается только номер группы, в которой произошло рассеяние.
Анизотропии когерентного рассеяния представлена в таблице дискретными косинусами угла рассеяния. Значения дискретных косинусов μ1, μ2 и μ3 и вероятностей рассеяния на первые два угла Ω1 и Ω2 таковы, что в точности сохраняют все пять угловых моментов индикатрисы рассеяния; Значение Ω3 не задаётся, поскольку определяется из условия нормировки вероятностей Ω3=1-Ω1-Ω2. В столбцах записаны:
NG – номер группы, в которой произошло рассеяние,
OMEGA1 – вероятность рассеяния с косинусом угла μ1,
MU1 – значение μ1,
OMEGA2 – вероятность рассеяния с косинусом угла μ2,
MU2 – значение μ2,
MU3 – значение μ3.

3.6.1.3. Таблица MF=112, MT=1 с заголовком
* GAMMA INCOHERENT SCATTERING GROUP TRANSITION PROBABILITIES
AND ANGULAR DISTRIBUTION DISCRETE COSINES
содержит матрицу вероятностей групповых переходов гамма-квантов при некогерентном рассеянии. Анизотропия групповых переходов представлена, как и в предыдущей таблице- дискретными косинусами.
Число строк LT определяется числом переходов, которое зависит от рассеивающего атома; параметр LV=20, число столбцов LC=LS=8.
Столбцы содержат:
IG – номер группы, в которой произошло упругое рассеяние,
KG – номер группы, в которую попал упруго рассеянный нейтрон,
P(IG->KG) – вероятность перехода нейтрона из группы IG в группу KG,
OMEGA1 – вероятность рассеяния с косинусом угла μ1,
MU1 – значение косинуса μ1,
OMEGA2 – вероятность рассеяния с косинусом угла μ2,
MU2 – значение косинуса μ2,
MU3 – значение косинуса μ3.

3.6.1.4. Таблица MF=112 MT=2 с заголовком
* ANNIHILATION GAMMA YIELD IN PAIR PRODUCTION REACTION
содержит номер группы, в которую попадают гамма-кванты при аннигиляции электрон-позитронной пары. Таблица приведена из формальных соображений - для обеспечения полноты данных фото-атомных взаимодействий. Значения параметров: LV=20, LT=76 и LC=LS=3. В столбцах приведены:
IG – номер группы, в которой произошло взаимодействие гамма-кванта,

KG - номер группы, в которой образовались гаммы-кванты (KG=87),
YIELD - число гамма-квантов, образовавшихся в результате аннигиляции пары электрон-позитрон (YIELD = 2.0).

3.6.2. Директория второго уровня «Photo-nuclear_interaction data» содержит файлы с данными фото-ядерных взаимодействий, поименованные стандартными именами нуклидов и расширением PHN. Число таблиц в файле фото-ядерных данных равно числу реакций с образованием нейтронов +1.

3.6.2.1. Таблица MF=121, MT=0

* PHOTO-NUCLEAR INTERACTION CROSS SECTIONS

содержит значения сечений фото-ядерных взаимодействий, и если реакция приводит к образованию нейтрона - значения выходов нейтронов.
Параметры таблицы: LV=10, LT=NGG+2, где NGG -число групп ненулевыми значениями сечений; LC=LS=NR+1, где NR – число реакций.
В первой строке таблицы, начиная со второго столбца, записаны

MT. – идентифицирующие номера реакций (с точкой) в номенклатуре ENDF; если в результате реакции образуется нейтрон, в следующим столбце задаётся значение MT, увеличенное на 1000 (для обозначения выхода нейтронов)

Соответствующий значениям MT записи реакций в общепринятом виде находятся над ними, в строке-комментарии.
Под значениями MT, строкой ниже, задаются значения Q реакции (в МэВ). В столбах для выхода нейтронов значение Q повторяется.
Так выглядит, например, заголовочный фрагмент таблицы MF=121 для U-235:

*	(r,nonel)	(r,anyth.)	n-yield	(r,2n)	n-yield	(r,fis)	n-yield
	3.	5.	1005.	16.	1016.	18.	1018.
	0.0000	-5.2600	-5.2600	-12.1471	-12.1471	190.3000	190.3000

где значениям MT соответствуют:
MT=3 - “ все реакции, кроме упругого рассеяния”;
MT=5 - “вылетает всё, что угодно”, дополнительно к тем реакциям, для которых данные приведены явно;
MT=16 - реакция с вылетом двух нейтронов;
MT=18 - реакция фотоделения.

Вслед за этими строками, начиная с 3-ей значащей строки, задаются по столбцам:
N - номер группы для гамма-кванта,
XS - значение сечения для соответствующего MT и, если образуются нейтроны,
YN – число нейтронов;
последующие столбцы задаются аналогичным образом для каждой реакции.
Число строк LT в таблице равно максимальному числу групп с ненулевыми значениями сечений + 2, параметр LV=10; число столбцов LC=LS=NR+1, где NR – число реакций.

3.6.2.2. Таблица MF=122, MT= идентификатор реакции в номенклатуре ENDF
имеет заголовок

* PHOTONEUTRON PRODUCTION PROBABILITIES P(N <- K)

Таблица содержит вероятности образования нейтронов в группе N при взаимодействии гамма-квантов в группе K для реакции MT. Параметры таблицы: LV=10, LC=LV= KM+1, где KM – максимальное число гамма-групп с ненулевой вероятностью образования нейтрона. Число строк в таблице LT определяется числом групп, в которые попадают нейтроны.
В первом столбце задаётся:
N - номер группы, в которой образуется нейтрон, в последующих KM - столбцах

P(N<-K) вероятность образования нейтрона при взаимодействии гамма-кванта в группе K, K=1,2, …, KM

Сумма элементов столбца равна 1, по определению.

3.7. Характеристики распада

Директория первого уровня "Decay_data" содержит таблицы с характеристиками процессов распада: период полураспада, вероятности распадов различных типов, локальное и полное энерговыделения при распаде, спектр гамма-квантов в гамма-групповом представлении при распаде данного нуклида и суммарный, по всей цепочке образующихся радиоактивных продуктов. Файлы данных в директории поименованы стандартными именами нуклидов с расширением 90.

Таблицы идентифицируются номерами MF=90, MT=127 На месте параметра PAR1 задаётся AWR – отношение массы ядра к массе нейтрона; на месте PAR2 - признак, обозначенный идентификатором ZAR, целая часть которого указывает заряд MZ, массу MA и состояние MS (номер возбуждённого уровня) ядра, в виде (MZ*1000+MA)*10+MS,
а дробная - возможные типы распада, задаваемые последовательностью целочисленных признаков:

1 – бета распад,
2 – позитронный распад или захват орбитального электрона;
3 – изомерный переход;
4 – альфа-распад;
5 – эмиссия нейтрона,
6 – спонтанное деление,
7 – эмиссия протона.

В комментариях к таблице приводятся:
* DECAY MODE CHARACTERISTICS
с расшифровкой приводимых признаков типов распада (если LT>0)
или
* STABLE ISOTOPE
в случае стабильного изотопа (LT=0)

Число строк LT зависит от числа гамма-групп, в который попадают гамма-кванты, образующиеся в цепочках распада: LT= 7+ NYG, где NYG – максимальное число групп с выходами гамма-квантов. Строки без данных, состоящие из пробелов, учитываются.

Значение других параметров фиксировано: LV=20, LC=LS=4.

Первые два столбца содержат данные для рассматриваемого нуклида, два последних – данные для цепочки распадов, порождённой этим нуклидом.

Периоды полураспада задаются в единицах: 1 – секунды, 2 – минуты, 3 – часы, 4 – сутки, 5 – годы.

Содержание столбцов зависит от номера строки.

В 1-й строке столбцы содержат:
IU – признак единица измерения периода полураспада нуклида,
T1/2 – период полураспада нуклида,
IUC – признак единица измерения максимального периода полураспада в цепочке,
TC1/2 – максимальный период полураспада нуклидов в цепочке распадов, порождённой исходным нуклидом.

Во 2-й строке, 2м-столбце (1-й столбец не используется)
LAMBDA – постоянная распада ln(2)/T1/2в обратных секундах;

Во 2-й строке, 4м-столбце (3-й столбец не используется)
LAMBDAC – минимальное значение постоянной распада в цепочке распадов ln(2)/TC1/2 в обратных секундах

В 3-й строке, начиная со 2-го столбца (1-й столбец не используется):
ELOC – локальное энерговыделение при распаде нуклида (МэВ)
NGP – число радионуклидов в цепочке – источников гамма
ELOCC – локальное энерговыделение во всей цепочке распадов (МэВ)

В 4-й строке, начиная со 2-го столбца (1-й столбец не используется):
ETOT – полное энерговыделение при распаде нуклида (МэВ)
NCH – полное число нуклидов в цепочке
ETOTC - полное энерговыделение во всей цепочке распадов (МэВ)
Начиная с 5-й строки, после заголовка приводятся характеристики типов распада:
RTYP – тип распада $I_1I_2{\dots}I_к$ – идентификатор типов распада, где число знаков k равно числу типов распада, а j-й разряд I_j указывает тип j-го распада (см. выше ACT)
PD – вероятность распада,
ZAM – идентификатор продукта распада.
Значение RTYP=0 замыкает список характеристик распада.
В последующих строчка, при наличии данных, приводятся:
IG - номер гамма-группы, в которую попадают гамма-кванты при распаде нуклида;
YIELD – выход гамма-квантов в группу IG для рассматриваемого нуклида;
IGC – номер гамма-группы, в которую попадают гамма-кванты из цепочки распадов;
YIELDC – выход гамма-квантов для IGC группы из всей цепочки распадов;
При отсутствии каких-либо данных, предназначенные для них поля оставляются пустыми.
Последующие строки приводятся до тех пор, пока есть заполненные поля.
Ниже приведен фрагмент таблицы MF=90 для Se87 из библиотеки ROSFOND10.

```
NAM=Se087   LIB=ROSF   MF= 90  MT=127  AWR=  8.618176+1  ZAR= 340870.15
LV= 20      LT=    81  LC=  4  LS=  4  LF=(i7,E12.0,i7,E12.0)
* DECAY MODE CHARACTERISTICS
*  1 - BETA
*  1.5 - BETA,N
*GAMMA CONTRIBUTERS: 035Br087   036Kr087   037Rb087
*INVOLVED TO CHAIN: 035Br086   036Kr086   038Sr087
*    IU     T1/2          IU   maxT1/2
*        LAMBDA              LAMBDAC
*         ELOC        NGP    ELOCC
*         ETOT        NCH    ETOTC
      1  5.500000+0      5      4.81329+10
          1.260268-1
         3.107142+0      3  4.776336+0
         3.769068+0      6  1.091931+1
*  RTYP  FRACTION  PRODUCT
      1  9.980000-1 350870
     15  2.000000-3 350860
      0
*    IG    YIELD        IGC  YIELDC
     44  1.771000-2     28  1.950000-6
     46  1.403000-2     29  9.100000-7
     :::::::::::::::::::::::::::::::::::::::::::::
     98  2.300000-1     40  3.333320-3
                        41  1.250494-2
                         :::::::::::::::::::
                       126 5.75942E-05
```

3.8. Детальные зависимости

<u>Директория первого уровня «Point-wise_energy_dependencies»</u> содержит 3 директории 2-го уровня. Ниже приводится описание структуры и содержания этих директорий.

<u>3.8.1. Директория второго уровня “Cross_sections”</u>
содержит 3 директории 3-го уровня: «Actinides», «Elements» и «Isotopes», каждая из которых содержит файлы с именами нуклидов с расширением 701. Перечни нуклидов приведены в директории _Content. Файлы содержат таблицы с детальными сечениями.
Диапазон изменения энергий-от 1.E-5 до 20МэВ, энергии расположены в порядке убывания. Сечения приведены для температуры 300^{o}K.
Таблицы разных директории имеют один и тот же номер MF, но отличаются числом столбцов.

3.8.1.1. Таблицы MF=701, MT=0 с заголовком
*   DETAILED CROSS SECTIONS
содержащие детальные зависимости сечений реакций и специальных величин при температуре, указанной на поле параметра PAR2.
Размерные параметры таблицы LV=10, LC=LS=NS+1, где NS-число типов сечений и специальных величин (NS=6 для изотопов, NS=8 для естественных смесей и NS=9 для актинидов); LT= число опорных точек.
В зависимости от наличия сечений
N – порядковый номер энергетической точки,
ENERGY - значение энергии в МэВ (в порядке убывания),
TOTAL - полное сечение,
CAPTURE – сечение захвата (сумма всех реакций, приводящих к исчезновению нейтрона)
Для актинидов в следующем столбце задаётся
FISSION – сечение деления;
Для изотопов и естественных смесей
ELASTIC - сечение упругого рассеяния,
INELASTIC – сечение неупругих взаимодействий - все реакции, кроме упругого рассеяния и деления, не приводящие к потере нейтрона: (n,n’), (n,2n), (n,3n,), (n,n'p), (n,n'α) и др.
YN – среднее число нейтронов, испускаемых при неупругих взаимодействиях.
Для актинидов в следующем столбце задаётся
NU – среднее число нейтронов деления;
для естественных смесей
AWEL – эффективная масса элемента, отнесённый к массе нейтрона, полученный усреднением AWR каждого изотопа с весом сечения упругого рассеяния.

<u>3.8.2 Директория второго уровня “Anisotropy”</u> содержит три директории 3-го уровня - «Isotopes», «Actinides» и «Elements» с файлами со стандартным именем нуклида и расширением 703, в которых находятся

3.8.2.1. Таблицы MF=703, MT=0 с заголовком
* ELASTIC SCATTERING ANGULAR DISTRIBUTIONS
содержащие детальные данные об анизотропии упругого рассеяния нейтронов.
На поле параметра заголовочной карты PAR1 задается среднее значение косинуса угла упругого рассеяния для всего энергетического интервала 1.E-5 эВ -20.0 МэВ

Параметры таблицы LV=10, LC=NMU+3, где NMU – количество равновероятных интервалов косинуса угла рассеяния (NMU=32); LT= число опорных точек по энергии.
В таблице приводятся значения границ равновероятных интервалов (число интервалов 32).
В столбцах приведены:
N – порядковый номер,
E – значение энергии в МэВ (в порядке убывания)
MU(0) – значение косинуса на нижней границе 1-го равновероятного интервала.
:::::::::::::::::::::::::::::::::
MU(32) - значение косинуса на верхней границе 32-го равновероятного интервала.

3.8.3. Директория второго уровня “Probability tables”

содержит две директории 2-го уровня - «Isotopes», «Actinides» с файлами со стандартным именем нуклида и расширением 706. В таблицах приводятся в опорных энергетических точках накопленные вероятности распределения сечений для основных типов реакций, полученные из таблиц вероятностей, вычисленных на основе средних резонансных параметров и законов их распределений методом генерирования случайных резонансных последовательностей. Число резонансных последовательностей составляло 50; число интервалов значений сечений, в которых накапливались вероятности, было принято равным 20.

В каждом файле находится 6 таблиц (по числу температур), значение температуры задаётся параметром TEM на поле PAR2. В таблицах задаются накопленные вероятности долей подгруппы и вероятностей сечений – подгрупповых сечений, нормированных на средне-групповое значение и умноженные на долю подгруппы.
Таблицы директории «Isotopes» имеют 6 столбцов

3.8.3.1. Таблица MF=706, MT=0

* PROBABILITY DISTRIBUTION CUMULATIVE FUNCTION
с данными о вероятности распределения сечений в области неразрешённых резонансов при температуре, указанной на поле параметра PAR2.
Размерные параметры таблицы: LV=10, LC=LS=NR+2, где NR- число резонансных сечений (NR=3 для неделящихся изотопов, NR=4-для актинидов);
LT=NE*NP – строк; здесь NE- число опорных энергий, NP=20 - число подгрупп.
Строки таблицы разделенных на секции. Число строк в секции равно числу подгрупп, на которые разбита группа. В первом столбце задан N – номер энергетической точки; задается только на первой строке секции, в других строках секция номер не указывается. Появление в первом столбце номера группы служит признаком начала новой секции. Число строк в секции задаёт число подгрупп.
Последующие столбцы содержат накопленные вероятности:
prob – попадания в подгруппу,
total – накопленная вероятность для сечения полного взаимодействия,
elastic – для сечения упругого рассеяния,
capture – для сечения захвата,
fission – накопленная вероятность для сечения деления (задаётся при его наличии).
Последняя строка каждой секции, по определению, равна 1.0.

3.8.4. Применение детальных зависимостей в расчётах методом Монте-Карло

Детальные энергозависимости нейтронных сечений и угловых распределений упруго рассеянных нейтронов ориентированы на использование их в расчётах реакторов методом Монте-Карло с детальным слежение за энергией нейтрона и понуклидного розыгрыша столкновений. Однако для выполнения таких расчётов приводимых данных недостаточно;

недостающие данные необходимо использовать в 299-групповой форме. Здесь будет разъяснено для каких целей и как это делать.

3.8.4.1. Определение энергии нейтрона деления.

Источником нейтронов являются точки поглощения нейтронов актинидами, определённые в предыдущем поколении. Для каждой точки должны быть заданы координаты, номер разделившегося актинида ia0, номер группы нейтрона, вызвавшего деление – ng0, и число испущенных при поглощении нейтронов η[♣]. Могут быть заданы и другие параметры, не влияющие на определение энергии нейтрона деления. Для определения энергии нейтрона деления требуется использовать спектры нейтронов деления, приведенные в таблицах MF=4, MT=0. Перед началом расчёта эти спектры, содержащие вероятности f(ia,ng0,ng) попадания нейтрона деления актинида ia нейтроном деления ng0 в группу ng, для всех входящих в состав рассчитываемого ректора актинидов требуется пребразовать в накопленные вероятности $\mathrm{F(ia, ngo, ng)} = \sum_{n=1}^{ng} f(ia, ng0, n)$. Номер группы испущенного нейтрона ng определяется из условия$\mathrm{F(ia, ngo, ng)} \leq \xi < \mathrm{F(ia, ngo, ng} + 1)$, где ξ случайное число. Энергия испущенного нейтрона E определяется в предположении линейной зависимости спектра деления от энергии в интервале группы ng, т. е. $E=EU_{ng}-(EU_{ng}-EL_{ng})*[\ \xi - \mathrm{F(ia, ng0, ng)}]$, где EU и EL – верхняя и нижняя границы найденной группы ng.

Если разыгрываемая траектория завершилась поглощением в актиниде, то точка поглощения рассматривается как источник нейтронов деления для следующего поколения. Суммарное число порождённых нейтронов деления, отнесённое к числу N_j разыгранных в поколении j нейтронов k_j является оценкой коэффициента размножения в данном поколении. Если разыграно M поколений, то усреднённое по всем поколениям значение коэффициента размножения определится как $k= \sum_{j=1}^{M} \mathrm{kj}\ /M$

3.8.4.2. Определение весов запаздывающих нейтронов.

Для оценки эффективной доли запаздывающих нейтронов нейтрону деления, траектория которого будет разыгрываться, следует приписать «вес» - вероятность того, что этот нейтрон был испущен с запаздыванием. Чтобы с каким именно запаздыванием он был испущен, следует приписать не один, а восемь «весов» - вероятностей испускания каждым из предшественников запаздывающих нейтронов. Для определения этих «весов» требуется обратится к таблице MF=313, MT=0 для рассматриваемого актинида i0. В строке, соответствующей найденной группе ng в первом вещественном столбце будет стоять значение β, которое и следует использовать в качестве суммарного «веса». Для определения восьми парциальных весов найденный суммарный вес следует умножить на 8 групповых долей запаздывающих нейтронов, приведенных в столбцах, следующих за столбцом с β. В процессе розыгрыша траектории «веса» запаздывающих нейтронов не меняются[*].Если траектория завершилась поглощением в делящемся нуклиде, породив точку деления для розыгрыша следующего поколения, то этой точке, помимо координат, номера

♣ Значение η используется при выборе точки деления.

[*] Если не меняется по какой-то причине вес самой траектории

разделившегося актинида и номера группы нейтрона, вызвавшего деления, приписываются ещё и вероятность beta того, что это деление было вызвано запаздывающим нейтроном (или восемь таких вероятностей – beta1, beta2,…,beta8 – если все группы запаздывающих нейтронов учитываются порознь).

При определении параметров нейтрона деления следующего поколения «веса запаздывающих нейтронов» определяются заново в зависимости от разделившегося ядра и энергетической группы нейтрона деления. При завершении всех М траекторий, рассматриваемых поколений кроме оценки k_j выполняется также оценка betaeff=$\sum_{j=1}^{M}$ kbetaj $/M$, где kbetaj отличается от k_j тем, что сумма нейтронов деления, порождённых в поколении j, заменяется суммой «весов», т.е. суммой вероятностей того, что эти нейтроны были порождены запаздывающими нейтронами.

3..8.4.3. Определение сечений взаимодействия.

Перед началом расчёта целесообразно сформировать таблицу, в которой для каждого нуклида, содержащегося и рассчитываемом реакторе, были определены границы области неразрешенных резонансов. Эти границы ENR приводятся в таблицах MF=706 директории probablity tables во втором (первом вещественном) столбце, разделёнными 20 строками. Первое значение $ENRU_i$ определяет верхнюю границу области неразрешенных резонансов, последнее – $ENRL_i$ – нижнюю по энергии границу. Если энергия рассматриваемого нейтрона лежит выше $ERRU_i$ или ниже $ENRL_i$, сечения взаимодействия нейтрона с нуклидом i однозначно определяются таблицей MF=701. В противном случае нейтрону следует приписать номер подгруппы, определяемой случайной выборкой из 20 накопленных (cumulative) вероятностей prob из таблицы MF=706 для того энергетического интервала, в который попал нейтрон. Интервал определяется из условия $ENR_i<E\leq ENR_{i+1}$. Номер подгруппы ns в этом интервале определяется из условия $prob_{ns}<\xi\leq prob_{ns+1}$. Значение ns определяет коэффициенты PC_{ns}, PE_{ns}, PF_{ns} и PT_{ns}, которые, будучи умноженными на сечение захвата, сечение упругого рассеяния, сечение деления и полное сечение, определённые по данным таблицы MF=701 для энергии нейтрона E, определят значения этих сечений, которые и следует приписать нейтрону подгруппы ns с энергией E.

Упругое рассеяние.

Если нейтрон испытал упругое рассеяние, косинус угла этого рассеяния определяется по данным таблицы MF=702. Определяются верхнеэнергетическая граница EU интервала, который содержит энергию E, и его нижняя граница EL; определяется номер этого интервала j. Далее вычисляется интерполяционный множитель Z = (EU-E)/(EU-EL). После этого определяется интервал косинусов угла рассеяния – первое значение k, при котором будет удовлетворено условие $(1-2\xi)\leq C_{j,k}*Z$. Значение косинуса угла рассеяния определится как $C= C_{j,k}*Z-(1-2\xi)$.

Неупругое рассеяние.

Если нейтрон испытал неупругое взаимодействие, спектр рассеянных нейтронов и (при высоких энергиях) их среднее число на основе данных настоящего справочника может быть оценено лишь в 299-групповом приближении. Т.е. если энергия нейтрона до рассеяния была равна E и принадлежала группе ng, то энергетическое распределение рассеянных нейтронов приходится оценивать на основе данных таблицы MF=302, MT=0 из директории Basik Neutron Data, содержащей для каждого нуклида матрицу вероятностей межгрупповых переходов при неупругих взаимодействиях PIN(ng→ng’). При оценке этой матрицы предполагалось, что энергия рассеянного нейтрона распределена по энергии группы ng в соответствии с принятыми внутригрупповыми спектрами, а рассеянные нейтроны неким образом распределены по группе ng'. Если PIN(ng→ng)=0 или пренебрежимо мало, при использовании этой матрицы в расчётах методом Монте-Карло можно принять распределение по группе равномерным. Тогда вероятность того, что рассеянный нейтрон будет иметь энергию E', принадлежащую группе ng', можно принять равной PIN(ng→ng')*[($E_{ng'}$ - ($E_{ng'}$ – $E_{ng'-1}$)*ξ]. Если PIN(ng→ng')>0, то распределение нейтронов, оставшихся в прежней группе нельзя принять равномерным, т.к. увеличение энергии при неупругом рассеянии невозможно. Простейший путь разрешения этой проблемы состоит в том, чтобы принять вероятность рассеянному нейтрону остаться в той же группе, линейно растущей с энергией от 0 при $E=E_{ng+1}$ до максимума, равного PIN(ng→ng)/(E_{ng}- E_{ng+1}) при $E=E_{ng}$, а рассеянные нейтроны считать равномерно распределёнными от начальной энергии E до нижней границы группы E_{ng+1}. При этом следует соответственно увеличивать вероятность перехода в соседнюю группу ng+1. Учёт размножения нейтронов в результате реакции (n,2n) может быть учтено путём умножения веса нейтрона на множественность Yng, приводимую в таблицах MF=301. Ступенчатое описание спектра неупруго рассеянных нейтронов является самым слабым местом в предлагаемой в справочнике методики учёта неупругих взаимодействий. Опыт, однако, показывает, что обусловленные этим скачки в спектре нейтронов в реакторе сглаживаются влиянием других источников (главным образом замедлением при упругом рассеянии) и скрываются за статистическими погрешностями расчётных результатов.

3.8.4.4. Расчёт функционалов нейтронного потока может быть выполнен при каждом пробеге и при каждом столкновении. Большинство функций, являющихся ядрами функционалов, представлены в многогрупповой форме. Важнейшей из них является энерговыделение, данные о котором представлены в файлах MF=308. Таблицы MF=310 позволяют учитывать перенос энергии гамма-квантами. Для этого требуется прервать рассмотрение траектории нейтрона в точке образования гамма-кванта и рассмотреть траекторию испущенного нейтрона, выбрав номер группы пропорционально числу гамма-квантов, попавших в группу ngam, умноженному на отношение средней энергии квантов этой группы (MF=0, MT=127), делённой на суммарное энерговыделение (MF=310, последний столбец). Это отношение следует использовать в качестве весового множителя гамма-кванта, траектория которого будет разыгрываться. После её завершения можно продолжить розыгрыш нейтронной траектории.

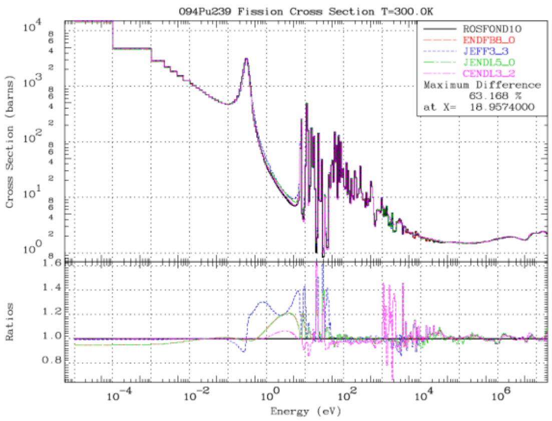
3.8.4.5. Расчёт реакторов с отработавшим топливом требует учёта влияния очень большого числа образовавшихся нуклидов. Выполнение этого учёта при розыгрыше нейтронных траекторий с детальным слежением за энергией и учётом всех возможных столкновений существенно увеличивает расчётное время. Ведь для расчёта макроскопического полного сечения (величины, обратной длине свободного пролёта) необходимо определять сечения всех нуклидов (а их может быть порядка много сотен) при каждом новом пробеге. Сократить затраты времени и оперативной памяти позволяет описание взаимодействия с частью нуклидов в групповом приближении. Все необходимые для этого данные в справочнике имеются.

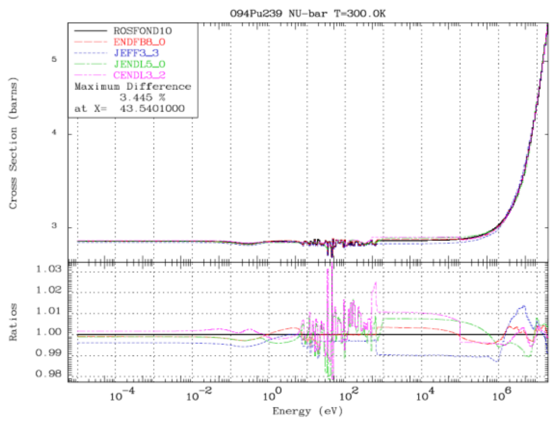
4. АТЛАС

В разделе «ATLAS» приводятся графики нейтронных энергетических зависимостей ядерных данных, приведенных в разделе COLIBRY. Раздел ATLAS содержит четыре zip-архива с директориями и один pdf-файл.

4.1. Сравнение нейтронных сечений

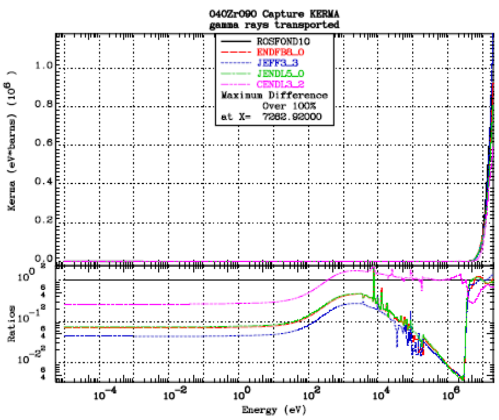
<u>4.1.1. Директория Neutron cross sections</u> содержат три директории второго уровня «Isotopes», «Actinides» и «Elements», в каждой из которых помещены pdf- файлы с именами нуклидов из библиотеки COLIBRY. В файлах представлены графики основных типов сечений в 299 групповом разбиении: сечения полного взаимодействия, упругого рассеяния, суммарного сечения неупругих взаимодействий, суммарного сечения захвата нейтрона, а также деления и среднего числа нейтронов деления (для актинидов). Вместе с сечениями приводятся их отношения к данным из библиотеки ROSFOND-2010. В качестве примера ниже приведены сравнения сечений деления (рисунок слева) и числа нейтронов деления (рисунок справа) Pu-239 из этой директории:

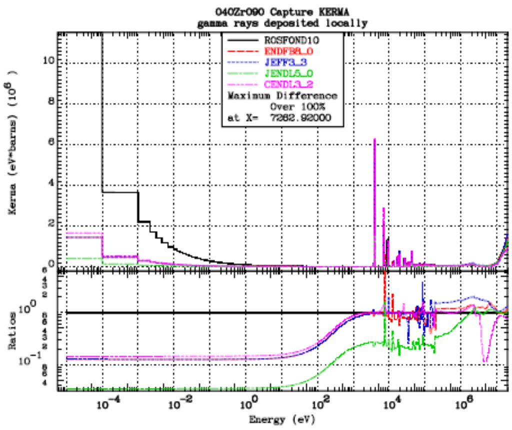




4.2. Сравнение нейтронных керма-факторов

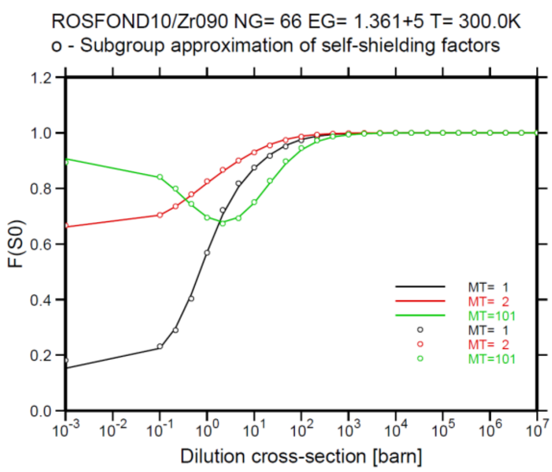
<u>4.2.1. Директория Neutron_kerma_factors</u> содержит три директории второго уровня «Isotopes», «Actinides» и «Elements», содержащих pdf-файлы с графиками сравнения керма-факторов, полученных из таблиц MF=301 и MF=308 библиотек COLIBRY относительно керма-факторов ROSFOND-2010, для процессов: упругот рассеяние, неупругое взаимодействие, захват нейтрона, и, для актинидов - деления. Сравниваются факторы двух типов: учитывающие перенос энергии гамма-квантами (“переносные”) и без вычета этой энергии (“локальные”). В качестве примера на рисунках показаны керма-факторы для процесса захвата нейтронов Zr-90: слева – переносные, справа – локальные.

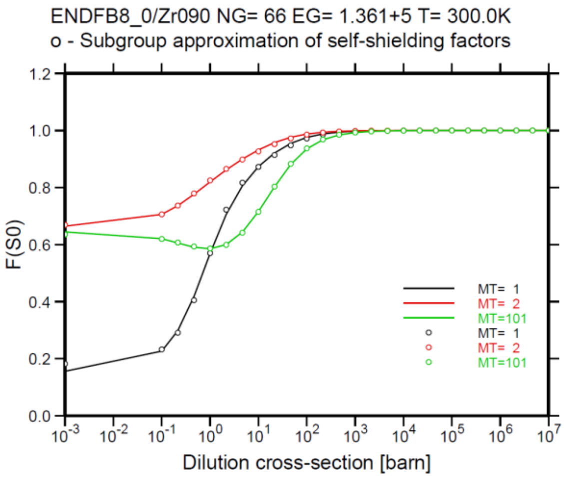


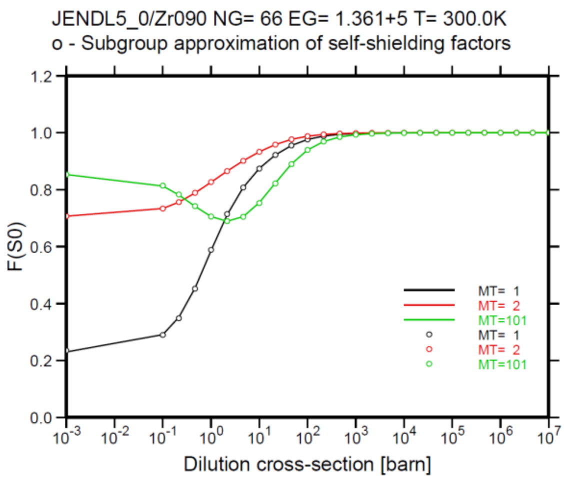


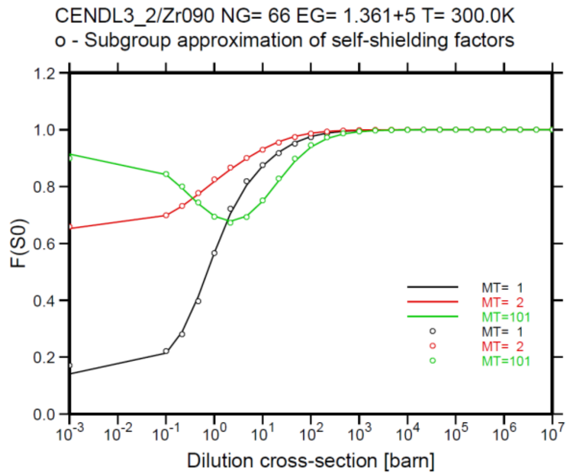
4.3. Подгрупповая аппроксимация факторов самоэкранировки

<u>4.3.1. Директория Subgroup_self-shielding_factors</u> содержит пять директорий второго уровня, поименованные названиями библиотек оцененных ядерных данных. Включённые в них директории третьего уровня Isotopes, Elements, Actinides содержат pdf-файлы, в которых приводятся графики зависимостей факторов резонансной самоэкранировки от величины сечения разбавления для всех энергетических групп, для которых эти факторы имеются. Факторы самоэкранировки полного сечения получены с весом тока (вторая гармоника), для остальных сечений (упругого MT=2, захвата MT=101, а для актинидов и деления MF18) с весом потока. Кроме непосредственно вычисленных факторов самоэкранировки приводятся факторы, восстановленные из подгрупповых параметров. На рисунках ниже в качестве примера приведены подгрупповые аппроксимации факторов самоэкранировки (обозначены кружками) для сечений Zr-90 полного (MT=1), упругого (MT=2) и захвата (MT=101) в группе с нижней границей по энергии, равной 136.1 кэВ при температуре 300^{o}K. В библиотеке JEFF-3.3 факторы самоэкранировки в этой группе равны единице, поэтому подгрупповые параметры не приводятся.



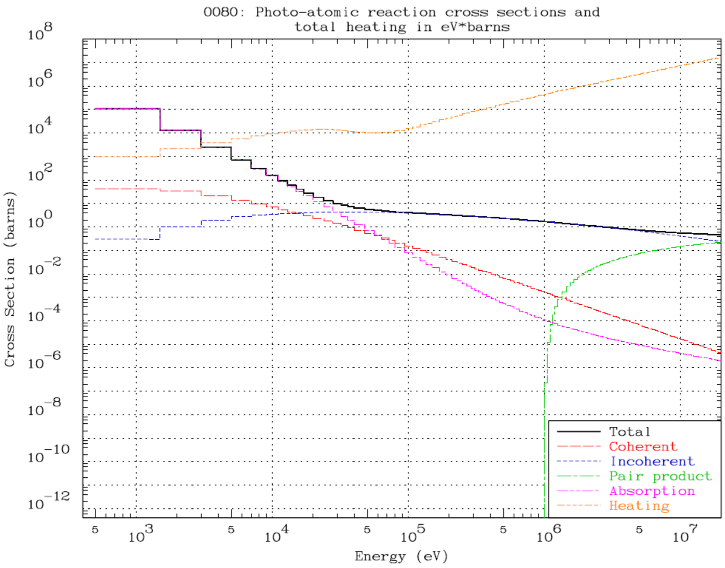






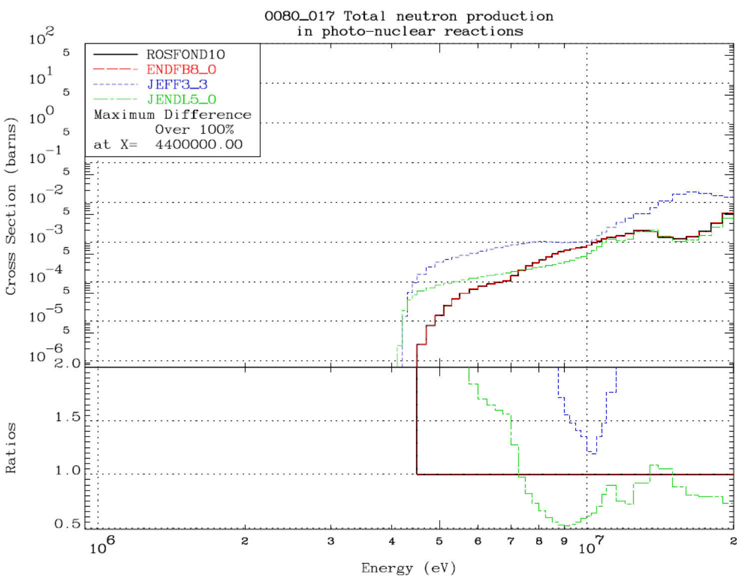
4.4. Сечения фото-атомных взаимодействий

4.4.1. Файл Photo-atomic_cross_sections содержит графики сечений фото-атомных взаимодействий в 127-групповом разбиении: полного сечения, когерентного и некогерентного рассеяний, образования пар, фотопоглощения, а также полного энерговыделения. Фото-атомные данные во всех библиотеках одинаковы, поэтому сравнение для них не приводится. Пример приведён для атома кислорода.



4.5. Сечения образования нейтронов в фото-ядерных реакциях

4.5.1. Директория Photo-nuclear_cross_sections содержит файлы с графиками сравнения суммарного сечения образования нейтронов в фото-ядерных реакциях в 127-групповом разбиении для трёх библиотек, а также отношения данных из других библиотек к данным ROSFOND-2010 (данные ROSFOND-2010 тождественны ENDFB8_0, данные для CENDL-3.2 отсутствуют). На приведённый ниже графике показаны сечения для изотопа O-17.



5. ПАКЕТ ПРОГРАММ И ПРОЦЕДУР ГРУКОН

5.1. История разработки

Модульная процессинговая система GRUCON является продуктом компьютеризация процесса преобразования ядерных данных, который начался с разработки форматов хранения данных микроскопических экспериментов и оцененных ядерных данных с целью формирования машинных библиотек. Оцененные данные должны соответсвовать условиям непротиворечивости, однозначности и полноты (с точки зрения приложения, на которое они ориентированы). Для обеспечения этих условий, экспериментальные данные подвергаются процедуре оценки, состоящей в анализе противоречий между данными различных экспериментов и в выборе способов параметризации, обеспечивающих однозначное восстановление отобранных данных. Там, где это сделать невозможно (по причине отсутствия экспериментальных данных), параметры рассчитываются по теоретическим моделям или определяются из систематик. Деятельность по оценке ведётся мировым сообществом (согласно принятому в 1955 году на 1–й Женевской конференции соглашению) и имеет конечным продуктом локальные библиотеки оцененных ядерных данных, представленные в определённом формате. Исторически существовало несколько форматов хранения оцененных данных – UKNDL в Великобритании, KEDAK – в Германии, ENDL – в Ливерморской Национальной Лаборатории и ENDF – в других лабораториях США, СОКРАТОР – в СССР. На начальном этапе эти форматы не были согласованы друг с другом, что затрудняло международный обмен данными.

Задача создания программных средств, для обеспечения константами расчётов быстрых реакторов и защиты на основе оцененных данных (системы СОКРАТОР) была поставлена в начале 70–х годов. К этому времени в константной лаборатории Физико–энергетического института, возглавляемой профессором М.Н.Николаевым, уже имелся опыт разработки библиотеки групповых констант для расчёта быстрых реакторов и защиты БНАБ–26 [с использованием вычислительных программ на языке АЛГОЛ–60 для ЭВМ М–20 и М–220. Требовалось объединить эти программы в комплекс, для которого было предложено название ГРУКОН. В процессе работы над комплексом выявились недостатки простого "механического" объединения программ. Поскольку программы были написаны разными авторами, входные и выходные данные не были согласованы, требовались громоздкие интерфейсы; в ряде программ использовались близкие по функциональному назначению алгоритмы. Всё это привело к тому, что попытка закончилась неудачей – комплекс начал морально устаревать еще до завершения работы над ним.

К концу 70–х годов начал обновляться машинный парк – на смену М–220 пришли более мощные ЭВМ БЭСМ–6, язык АЛГОЛ был вытеснен языком FORTRAN. Параллельно протекал процесс стандартизации библиотек оцененных данных – от существовавшего многообразия форматов отказались, во всех странах стали использовать формат ENDF, разработанный Генри Хонеком в 1964году в Брукхейвенской национальной лаборатории (США). После структурирования данных и разработки функций доступа, урощающих доступ к ним, удалось объединить программы, используемые для подготовки групповых констант, в пакет прикладных программ, за которым было оставлено название ГРУКОН –

ППП ГРУКОН–1. В 1984 году эта версия была протестирована в международном проекте МАГАТЭ по верификации процессинговых программ [18].

Версия ППП ГРУКОН–2 возникла в связи с переводом программы на более производительные ЭВМ серии ЕС. Кроме того, были расширены функциональные возможности пакета (добавлены модули переработки данных по энерго–угловым распределениям и разработаны новые алгоритмы (свертка сечений и получение подгрупповых параметров с использованием *Padé–II* аппроксимации). Вторая версия сопровождалась и развивалась вплоть до конца 80–х годов.

С появлением персональных компьютеров начались работы над третьей версией пакета, в которую предполагалось включить переработку данных фото–атомных взаимодействий, но закончить её не удалось. Причиной прекращения работ в Физико-энергетическом институте над пакетом ГРУКОН явилось распространение американской процессинговой программы NJOY, ставшей де–факто рабочим инструментом для переработки оцененных данных в групповые константы во всем мире. Понадобилось почти двадцать лет, чтобы пришло осознание ограниченности программы NJOY и необходимости разработки альтернативного программного средства для удовлетворения собственных потребностей. Тем не менее, это случилось, и в 2008 году работы над пакетом прикладных программ были возобновлены в НИЦ "Курчатовский институт", в связи с возникшей задачей обновления библиотек констант для задач математического моделирования физических процессов в ядерных установках с целью обоснования их ядерной безопасности. В настоящее время пакет ГРУКОН-21 (GRUCON) доступен на сайте МАГАТЭ[19]. Вплоть до 2022 года пакет GRUCON участвовал в проекте по верификации процессинговых программ, инициированным в 2015 году Секцией по Ядерным Данным МАГАТЭ[20] . До 2023 работы по сопровождению и развитию пакета велись в НИЦ «Курчатовский институт». После выхода автора программы на пенсию в 2023 году работы были продолжены на инициативной основе, с целью обеспечения возможности подготовки библиотеки КОЛИБРИ. Прилагаемое в разделе «СПРАВОЧНИК» “Руководство ГРУКОН” соответствует состоянию пакета GRUCON на сентябрь 2024 года.

5.2. Концепция процессинга

"Преобразованием" (или "процессингом", согласно англоязычной литературе) ядерных данных принято называть вычисления, цель которых состоит в подготовке рабочих библиотек для вычислительных программ, используемых для решения прикладных задач, на основе фундаментальных библиотек оцененных данных. Таким образом, преобразование обеспечивает связь между двумя видами деятельности в области ядерной науки и технологии:

– получение и накопление экспериментальной и теоретической информации о микроскопических процессах взаимодействия;

– описание макроскопических систем, поведение и характеристики которых обусловлены ядерными реакциями и превращениями.

---

[18] Cullen, D.E." Report on the IAEA Cross Section Processing Code Verification Project", INDS(NDS)–170/NI, Vienna, 1985

[19] Синица В.В., Ринейский А.А., Малков М.Р. Пакет программ ГРУКОН-2021 для переработки оцененных ядерных данных; доступен на сайте МАГАТЭ https://www-nds.iaea.org/grucon/

[20] https://www-nds.iaea.org/index-meeting-crp/CM_Data_Processing_2015/

К смежным задачам, использующим преобразование, относятся также: обработка результатов измерений микроскопических экспериментов, оценка этих данных, компиляция файлов оцененных данных, подготовка рабочих библиотек для транспортных расчётов и их валидация, оценка погрешности использованных приближений и т.д. Для их решения также могут быть использованы алгоритмы и методы, развитые для подготовки рабочих библиотек.

Многообразие типов данных, способов параметризации и форматов их хранения определяет не только многообразие алгоритмов и методов вычислений, но и их организацию, что определяет архитектуру программы. Все процессинговые системы имеют модульную структуру, отличие их только в том, какая функциональная нагрузка накладывается на модули. Следует выделить два типа модулей – модули-вычислители, меняющие тип параметризации данных, их представление, и модули-конвертеры, выполняющие функцию по изменению формы представления – формата данных.
В системе NJOY, в частности, модули-вычислители многофункциональны, объединяют несколько сложных вычислений, а поэтому их сравнительно немного – 10, оставшиеся 9 являются модулями-конвертерами. Небольшое число модулей-вычислителей ограничивает последовательность их вызова, которая, как правило, фиксирована.

Функции модулей-вычислителей в системе ГРУКОН существенно упрощены, поэтому число их значительно больше - 51 модуль. Как следствие этого – удлинение вычислительных цепочек и их многообразие. Для того, чтобы их реализовать, требуются дополнительные системные средства. По этой причине архитектура ГРУКОН выбрана пакетно-модульной. Под пакетом, или более точно, "Пакетом прикладных программ" в соответствии с определением, данным в документе[21], принято называть такую организацию вычислительной программы, которая предполагает наличие:

– языка задания для описания сценария вычислений;
– набора функциональных модулей;
– системной поддержки, обеспечивающей интерпретацию языка, последовательный вызов модулей и обмен информацией между ними.

Описание пакета GRUCON – система команд для описания сценария преобразования, структуры преобразуемых данных, функции модулей и управляющие ими параметры, типовые задачи, решаемые с его помощью - находится в прилагаемом в разделе СПРАВОЧНИК pdf-файле" Руководство GRUCON". В следующем же разделе приводится описание вычислительной среды для подготовки таблиц библиотеки КОЛИБРИ из файлов оцененных данных ENDF средствами пакета GRUCON.

[21] Академия наук СССР. Комиссия по пакетам прикладных программ координационного комитета по вычислительной технике." Положение о порядке разработки и документировании пакетов прикладных программ. Проект".
Препринт ВЦ АН СССР, М.,1981.

5.3. Структура раздела GRUCON

Переработка файлов оцененных данных из раздела ENDF в библиотеки констант, находящиеся в разделе COLIBRY осуществляется в директории GRUCON с помощью процедур - командных файлов, размещённых в _Tasks и _Procedures, запускаемых из пусковых командных файлов all_libraries и all_tasks. Ниже приводится описание разделов GRUCON и функций командных процедур.
Раздел GRUCON содержит следующие подразделы:

_Soft - исполняемые модули процессинговой системы GRUCON (grucon.exe), программы формирования каталога основных разделов библиотеки COLIBRY (content.exe), программы подготовки графиков сравнения данных для раздела ATLAS (view2plot.exe, plotsave.exe).

_Procedures – процедуры переработки данных – командные файлы, выполняющие преобразование определённого типа данных для заданного набора параметров;

_Parameters – глобальные параметры преобразований (групповые границы, весовые функции, наборы температур, сечений разбавления);
_Tasks – задания на переработку – командные файлы, вызывающие процедуры переработки данных и задающие для них набор данных и значения параметров;
_Temp – контейнер для размещения сегментов рабочей библиотеки (файлы file*)

При запуске процедур переработки, в разделе GRUCON создаются и заполняются подразделы:
Tapes – контейнер для хранения промежуточных результатов (файлы *.tape*)
Listings – контейнер для хранения протоколов прохождения заданий (файлы *.lst*)
Plots – контейнер для хранения графиков (файлы *.pdf).

5.3.1. Процедуры переработки данных

Процедуры переработки файлов оцененных данных ENDF в таблицы КОЛИБРИ, размещённые в подразделе _Procedures, представляют собой набор из 40 командных файлов, выполняющих следующие однотипные операции:
- копирование данных из библиотеки ENDF или контейнера Tapes в папку GRUCON,
- формирование задания на языке пакета GRUCON – сценария преобразования данных и управляющие параметры модулей,
- запуск программы GRUCON с помощью командного файла grucon, в котором прописан путь к исполняемому модулю,
- запись протокола прохождения задания в подраздел Listings,
- запись файлов с промежуточными данными в подразделы Tapes,
- запись результатов - таблиц в формате КОЛИБРИ – в подразделы COLIB

В подраздел _Procedures включены также командные файлы, выполняющие вспомогательные функции:
COLIBRY_dir - формирование разделов и подразделов библиотеки COLIBRY,
get_endf - копирования данных из раздела ENDF в рабочую папку GRUCON файлов нейтронные данные общего назначения,

get_endf_act - файлов активационных данных,
get_endf_nfy – выходов осколков деления,
get_endf_rdd - характеристик распада,
get_endf_th - данных по рассеянию нейтронов на связанных ядрах,
get_endf_ph - данных фото-атомных взаимодействий,
get_endf_ph_nuc - данных фото-ядерных взаимодействий.

Файл задания может быть настроен на запуск других командных файлов, отличных от task*. Для этого в файле заданий требуется удалить признак, блокирующий вызов content (# или rem, в зависимости от операционной системы - linux или windows). В частности, таблицы детальных сечений КОЛИБРИ MF701 могут быть повторно преобразованы с помощью процедурыdoppler_MF701 - получение из таблицы MF701, полученной при комнатной температуре, сечений для заданной температуры T>300K

Для подготовки файлов графического представления данных для раздела ATLAS служат процедуры:
compare_MF111 – сечения фото-атомных взаимодействий;
compare_MF121 – сравнение полных сечений выходов нейтронов в фото-ядерных реакциях
полученных из разных библиотек,с
compare_MF301 – сравнения групповых сечений, полученных из разных библиотек;
compare_MF306 - сравнение факторов резонансной самоэкранировки с факторами,
полученными из подгрупповых параметров;
compare_MF308 – сравнения керма-факторов, полученных из разных библиотек.

Для удаления отработавших файлов из рабочей папки GRUCON и контейнера _Temp служит командный файл clear_all.

Ниже приведены функции процедур переработки, входные и выходные данных для них, модули GRUCON, используемые в преобразовании. Входными данными могут быть файлы ENDF или бинарные файлы tapeN с промежуточными результатами. Для обозначения совокупности файлов с данным номером N изотопов, входящих в естественную смесь, используются фигурные скобки: tape{N}. Выходными данными могут быть файлы tape* или таблицы КОЛИБРИ, идентифицируемые номером которых MF*.

Таблица заданий для пакета ГРУКОН

Подготовка нейтронных групповых данных (процедуры 1-12)				
N	Назначение процедуры	Входные данные	Выходные данные	Модули GRUCON
1	Чтение файла ENDF с нейтронными данными; преобразование в структуры GRUCON с проверкой на непротиворечивость; линеаризация сечений, заданных таблицами	ENDF tape20	tape21	ENDF SXIXS WRITE
2	Восстановление детальных сечений из резонансных параметров в области разрешённых резонансов и средних резонансных параметров в области неразрешённых резонансов (если таковые имеются) при нулевой температуре; вычисление избыточных сечений из условий соблюдения баланса	tape21	tape22	READ EXTRAC RXTXS UXDXS SXCXS SXAXS REDUND WRITE
3	Получение детальных сечений для заданного набора температур интегрированием сечений, заданных таблицами, с ядром – распределением Максвелла	tape22	tape23	READ EXTRAC SXCXS SXEXS SXTXS WRITE
4	Вычисление таблиц вероятности сечений в области неразрешённых резонансов из детальных сечений, восстановленных из последовательностей резонансов, генерируемых на основе средних резонансных параметров (если таковые имеются) методом Монте-Карло	tape 21	tape24	READ UXEXP WRITE
5	Вычисление средне-групповых значений сечений реакций, энерговыделения, а также специальных величин для нейтронов (число нейтронов деления, доли и спектры запаздывающих нейтронов) в заданной групповой структуре с заданной весовой функцией при бесконечном разбавлении и комнатной температуре	tape21,23	tape25	READ EXTTEM KERMA EXTRA AXXS NUXXS SXIXS SXCXS SXAXS SXGXF FXXS WRITE
6	Вычисление моментов сечений, как функций температуры и сечения разбавления, для реакций с резонансной структурой (упругое рассеяние, радиационный захват, деление, суммы сечений)	tape23,24	tape26	READ EXTRAC REDEF SXCXS SXAEXF M WRITE

7	Вычисление матриц групповых переходов нейтронов в результате столкновений с ядром при комнатной температуре	tape21,23,24	tape27	READ EXTTEM SXAEXF M WRITE
8	Запись групповых векторов и матриц для нейтронных данных в таблицы КОЛИБРИ	tape21,25,27	MF301 MF302 MF303 MF304 MF313	READ REDUND MXXS REDEF SXCXS COLIBRY
9	Вычисление подгрупповых параметров из моментов сечений	tape26	tape29	READ FXEXP WRITE
10	Вычисление факторов резонансной самоэкранировки из моментов сечений и запись их вместе с подгрупповыми параметрами в таблицы КОЛИБРИ	tape26,29	MF305 MF306	READ COLIBRY
11	Вычисление матриц рассеяния нейтронов на свободных ядрах в области термализации нейтронов	tape21	tape30	READ SXIXS RXTXS SXCXS SXTXS THXXDS DXEXD SXGXF SXDXM WRITE
12	Запись матриц рассеяния нейтронов на свободных ядрах в таблицы КОЛИБРИ	tape30	MF307	READ COLIBRY
Подготовка нейтронных детальных по энергии данных (процедуры 13-17)				
N	Назначение процедуры	Входные данные	Выходные данные	Модули GRUCON
13	Запись поточечных детальных сечений и выходов нейтронов в неупругих процессах для комнатной температуры T=300K в таблицы КОЛИБРИ	tape21,23	tape28 MF701	READ EXTTEM PROD SXCXS REDUND NUXXS EXTRAC SXAXS SXEXS WRITE COLIBRY
14	Зарезервировано для процедуры подготовки поточечных энергетических распределений нейтронов в неупругих процессах (таблицы КОЛИБРИ MF702)			

15	Преобразование данных по угловому распределению упруго рассеянных нейтронов из представлений оцененных данных в дискретное представление границами равновероятных косинусов в системе центра масс и запись в таблицы КОЛИБРИ	tape21	MF703	READ EXTRAC AXXA COLIBRY
16	Получение поточечных подгрупповых параметров из таблиц вероятностей сечений в области неразрешённых резонансов	tape24	tape34	READ PXDXF FXEXP WRITE
17	Запись поточечных таблиц вероятностей /подгрупповых параметров в таблицы КОЛИБРИ в представлении таблиц накопленных вероятностей	tape24/ tepe34	MF706	READ COLIBRY
Подготовка групповых данных по образованию гамма-квантов в нейтронных реакциях (процедуры 18-19)				
N	Назначение процедуры	Входные данные	Выходные данные	Модули GRUCON
18	Вычисление средне-групповых сечений и матриц образования гамма-квантов в нейтронных реакциях при комнатной температуре	tape21,23,24	tape40	READ EXTTEM PROD SXAEXF M WRITE
19	Вычисление энергий, уносимых гамма-квантами в нейтронных реакциях при комнатной температуре	tape21,23,24	tape41	READ EXTTEM PROD REDUND KERMA SXCXS SXGXF FXXS WRITE
Подготовка групповых данных по рассеянию нейтронов на связанных ядрах (процедуры 20-21)				
N	Назначение процедуры	Входные данные	Выходные данные	Модули GRUCON
20	Вычисление средне-групповых сечений и матриц групповых переходов при рассеянии нейтронов на ядрах, связанных в молекулах и кристаллах	ENDF tape30	tape32	ENDF THXXDS DXEXD SXGXF SXDXM WRITE

21	Запись групповых векторов и матриц рассеяния нейтронов на связанных ядрах в таблицы КОЛИБРИ	tape32	MF307	READ REDEF FXCXF MXCXM COLIBRY
	Получение нейтронных групповых данных для естественных смесей изотопов (процедуры 22-28)			
N	Назначение процедуры	Входные данные	Выходные данные	Модули GRUCON
22	Линейная свертка групповых векторов сечений и матриц переходов для изотопов, входящих в естественную смесь, и запись в таблицы КОЛИБРИ	tape {25}, {27}	MF301 MF302 MF303	READ MXXS REDUND REDEF SXCXS SXAXS MXCXM COLIBRY
23	Свертка детальных сечений в пересечении областей разрешённых резонансов с последующим вычислением моментов, свёртка моментов в группах с разрешёнными частично и неразрешёнными резонансами, объединение моментов, их сохранение и запись полученных из них факторов резонансной самоэкранировки в таблицы КОЛИБРИ	tape {21}, {23},{26}	tape26 MF305	READ EXTRAC SXCXS SXGXF FXCXF REDEF FXCXF FXGXF WRITE
24	Вычисление подгрупповых параметров из свёрнутых моментов и запись в таблицы КОЛИБРИ	tape26	MF306	READ FXEXP COLIBRY
25	Свертка групповых векторов и матриц рассеяния нейтронов на свободных ядрах для естественной смеси изотопов, запись в таблицы КОЛИБРИ	tape {30}	MF307	READ FXCXF MXCXM COLIBRY
26	Свертка детальных сечений изотопов, входящих в естественную смесь и запись в таблицы КОЛИБРИ	tape {28}	MF701	READ SXAXS SXCXS SXEXS COLIBRY

27	Свёртка моментов угловых распределений при упругом рассеянии при комнатной температуре, преобразование в границы равновероятного распределения косинуса рассеяния, запись в таблицы КОЛИБРИ	tape {21}, {23}	MF703	READ EXTRAC EXTTEM AXXS SXCXS SXXA AXEXA AXXA COLIBRY
28	Свертка сечений и матриц образования гамма-квантов	tape {40}, {41}	tape42	READ MXCXM SXCXS WRITE

Подготовка групповых данных о взаимодействии гамма-квантов с атомами (процедуры 29-30)

N	Назначение процедуры	Входные данные	Выходные данные	Модули GRUCON
29	Вычисление средне-групповых сечений и матриц групповых переходов при взаимодействии гамма-квантов с атомами	ENDF tape50	tape51	ENDF SXIXS SXGXFM FXXS WRITE
30	Запись средне-групповых сечений и матриц групповых переходов для гамма-квантов в таблицы КОЛИБРИ	tape51	MF111 MF112	READ COLIBRY

Подготовка данных по образованию ядер - продуктов нейтронных реакций (процедура 31)

N	Назначение процедуры	Входные данные	Выходные данные	Модули GRUCON
31	Вычисление средне-групповых сечений образования продуктов реакций из файлов активационных данных или файлов общего назначения, содержащих файл MF8; запись в таблицы КОЛИБРИ. При переработке файлов активационных данных проводится линеаризация сечений и интегрирование с ядром Максвелла для получения сечений при температуре T=300K	ENDF tape20 tape21,25	tape55 MF500	ENDF/ READ SXIXS SXTXS ACTIV SXGXF FXXS WRITE COLIBRY

Подготовка данных об образовании гамма-квантов при распаде радиоактивных ядер (процедуры 32-35)

N	Назначение процедуры	Входные данные	Выходные данные	Модули GRUCON
32	Чтение файла ENDF с характеристиками распада и спектрами гамма-квантов, преобразование в структуры GRUCON	ENDF tape60	tape61	ENDF WRITE

33	Слияние всех структур с характеристиками распада в файл RDD	tape {61}	tape80	READ WRITE
34	Вычисление выходов гамма-квантов в цепочках распада радиоактивных продуктов реакций, объединение с мгновенными выходами и запись в таблицы КОЛИБРИ	tape61 tape80	tape63 MF90	READ RDXXS WRITE COLIBRY
35	Слияние всех структур с выходами гамма-квантов в цепочках распада в файл RDY	tape {63}	tape81	READ WRITE
Подготовка данных по выходам осколков деления (процедура 36)				
N	Назначение процедуры	Входные данные	Выходные данные	Модули GRUCON
36	Запись таблицы независимых и кумулятивных выходов осколков деления в таблицы КОЛИБРИ	ENDF tape40	MF314	ENDF COLIBRY
Подготовка таблиц энерговыделения и выходов гамма-квантов в реакциях с учетом распада радиоактивных продуктов (процедуры 37-38)				
N	Назначение процедуры	Входные данные	Выходные данные	Модули GRUCON
37	Вычисление энергий гамма-квантов, выделяющихся в цепочках распада радиоактивных продуктов реакций, объединение с мгновенным энерговыделением; запись в таблицы КОЛИБРИ	tape25,55 tape81	tape65 MF308	READ REDUND RDHEAT EXTRAC SXCXS WRITE COLIBRY
38	Вычисление групповых матриц образования гамма-квантов в цепочках распада радиоактивных продуктов реакций, объединение с матрицами образования мгновенных гамма-квантов и запись в таблицы КОЛИБРИ	tape40,41,55 tape81	tape66 MF310 MF311 MF312	READ RDYIELD WRITE COLIBRY
Подготовка данных об образовании гамма-квантов в нейтронных реакциях и энерговыделении с учетом распада образующихся радиоактивных продуктов реакций для естественных смесей изотопов (процедуры 39-40)				
N	Назначение процедуры	Входные данные	Выходные данные	Модули GRUCON
39	Вычисление энерговыделений для естественной смеси изотопов, запись в таблицы КОЛИБРИ	tape {25}, {55} tape81	tape65 MF308	READ REDUND RDHEAT EXTRAC SXCXS WRITE COLIBRY
40	Вычисление групповых матриц образования гамма-квантов для естественной смеси изотопов и запись в таблицы КОЛИБРИ	tape42,{55} tape65 tape81	tape66 MF310 MF311 MF312	READ RDYIELD MXCXM WRITE COLIBRY

Подготовка групповых данных о фото-ядерных взаимодействиях (процедуры 41-42)				
N	Назначение процедуры	Входные данные	Выходные данные	Модули GRUCON
41	Вычисление групповых сечений и матриц образования нейтронов в фотоядерных реакциях	ENDF tape50	tape52	ENDF SXIXS SXGXF FXXS SXAEXFM WRITE
42	Запись сечений и выходов нейтронов, матриц вероятностей образования нейтронов в фотоядерных реакциях в таблицы КОЛИБРИ	tape52	MF121, MF122	READ MXXS SXCXS COLIBRY

5.3.2 Задания на переработку данных

Запуск процедур переработки происходит из командных файлов, размещённых в подразделе _Tasks – заданий на переработку. В этих файлах задаются характеристики библиотеки констант – “управляющие параметры преобразования”: число нейтронных и/или гамма групп, весовые функции для группового усреднения, число температур, число сечений разбавления, число угловых моментов. Набор управляющих параметров зависит от типа данных, которые требуется преобразовать. Затем следуют вызов командного файла run_task с параметрами: номер начальной и конечной процедуры переработки, имя библиотеки, имя материала (нуклида, элемента, атома - в зависимости от типа перерабатываемых данных), имя подраздела библиотеки констант COLIBRY и имя, присваиваемое таблице констант; завершает командную строку массив значений управляющих параметров. Поскольку список материалов зависит от библиотеки/подбиблиотеки оцененных данных, в имена файлов заданий добавлен признак, указывающий библиотеку, для которой они предназначены. Этот признак обозначен ниже символом “*”, который может принимать значения: rf10 – для библиотеки ROSFOND, b80 – для ENDF/B-VIII.0, e33 – для JEFF3_3 и j50 – для JENDL5_0. Отсутствие признака (символа “*”) в названии процедуры означает, что задание не зависит от исходной библиотеки.

Всего в разделе имеется 9 типов пусковых командных процедур, предназначенных для выполнения заданий на переработку материалов библиотеки определённого типа:

all_isotopes_* - нейтронные данные общего назначения;
all_actinides_* - нейтронные данные общего назначения;
all_bound - данные по рассеянию нейтронов на связанных ядрах;
all_decay_* - характеристики распада радиоактивных ядер;
all_reactions_* - нейтронные данные общего назначения, содержащие файл MF8 с данными об образовании нестабильных продуктов реакций;
all_activations_* - активационные данные;
all_atoms - данные фото-атомных взаимодействий;
all_photonuc_* - данные фото- ядерных взаимодействий.
all_elements - нейтронные данные для природных смесей изотопов.

В параметры пусковых командных процедур входят номера itask, ktask, которые задают диапазон номеров заданий task, которые необходимо выполнить для этого типа данных (см. Таблицу заданий для пакета ГРУКОН). Пусковые командные процедуры находятся в папке _Tasks; изначально процедуры настроены на переработку всех материалов библиотеки; если какой-либо материал не требуется, вызов команды на его переработку блокируется символами # (для linux) или rem (для winows) в начале строки. Для выдачи каталога данных раздела библиотеки, сформированной соответствующей командной процедурой, номера заданий itask и ktask задаются равными нулю.

Запуск пусковых командных процедур осуществляется командным файлом **run_all_tasks** из раздела GRUCON, с расширением *.sh для linux и *.bat для windows. При вызове расчетного задания указывается: имя файла с заданием на переработку, диапазон номеров процедур переработки (начальный и конечный) имя (lib) и признак (ext) библиотеки оцененных данных. Ниже приведены тексты пусковой команды run_all_tasks для двух операционных систем, настроенные на подготовку таблиц всех разделов библиотеки COLIBRY из файлов оцененных данных ROSFOND10_1.

Настройка на другую библиотеку осуществляется разблокированием нужных строк удалением # или rem в начале строки, в зависимости операционной системы. Командные файлы для запуска заданий	
Linux: run_all_tasks.sh	Windows: run_all_tasks.bat
#! /bin/sh	setlocal
lib=ROSFOND10	set lib=ROSFOND10
ext=rf10	set ext=rf10
#lib=ENDFB8_0	rem set lib=ENDFB8_0
#ext=b80	rem ext=b80
#lib=JEFF3_3	rem set lib=JEFF3_3
#ext=e33	rem set ext=e33
#lib=JENDL5_0	rem set lib=JENDL5_0
#ext=j50	rem set ext=j50
#lib-CENDL3_2	rem lib=CENDL3_2
#ext=c32	rem ext=c32
task=./_Tasks/linux	set task=._Tasks\windows
$task/all_isotopes_$ext.sh 1 19 $lib $ext	call %task%\all_isotopes_%ext%.bat 1 19 %lib% %ext%
$task/all_actinides_$ext.sh 1 19 $lib $ext	call %task%\all_actinides_%ext%.bat 1 19 %lib% %ext%
$task/all_bound.sh 20 21 $lib $ext	call %task%\all_bound.bat 20 21 %lib% %ext%
$task/all_elements.sh 22 28 $lib $ext	call %task%\all_elements.bat 22 28 %lib% %ext%
$task/all_atoms.sh 29 30 $lib $ext	call %task%\all_atoms.bat 29 30 %lib% %ext%
$task/all_actinides_$ext.sh 31 31 $lib $ext	call %task%\all_actinides_%ext%.bat 31 31 %lib% %ext%
$task/all_reactions_$ext.sh 32 32 $lib $ext	call %task%\all_reactions_%ext%.bat 32 32 %lib% %ext%
$task/all_decay_$ext.sh 33 36 $lib $ext	call %task%\all_decay_%ext%.bat 33 36 %lib% %ext%
$task/all_isotopes_$ext.sh 37 38 $lib $ext	call %task%\all_isotopes_%ext%.bat 37 38 %lib% %ext%
$task/all_actinides_$ext.sh 37 38 $lib $ext	call %task%\all_actinides_%ext%.bat 37 38 %lib% %ext%
$task/all_elements.sh 39 40 $lib $ext	call %task%\all_elements.bat 39 40 %lib% %ext%
# ---- prepare catalogue	rem ----- prepare catalogue
$task/all_isotopes_$ext.sh 0 0 $lib $ext	call %task%\all_isotopes_%ext%.bat 0 0 %lib% %ext%
$task/all_actinides_$ext.sh 0 0 $lib $ext	call %task%\all_actinides_%ext%.bat 0 0 %lib% %ext%
$task/all_reactions_$ext.sh 0 0 $lib $ext	call %task%\all_reactions_%ext%.bat 0 0 %lib% %ext%
$task/all_bound.sh 0 0 $lib $ext	call %task%\all_bound.bat 0 0 %lib% %ext%
$task/all_atoms.sh 0 0 $lib $ext	call %task%\all_atoms.sh 0 0 %lib% %ext%
$task/all_photonuc.sh 0 0 $lib $ext	call %task%\all_photonuc.sh 0 0 %lib% %ext%
$task/all_decay_$ext.sh 0 0 $lib $ext	call %task%\all_decay_%ext%.bat 0 0 %lib% %ext%