

Федеральное агентство по образованию  
Обнинский государственный технический университет атомной энергетики  
Физико-энергетический факультет  
Кафедра перспективных методов получения и преобразования энергии

## Дипломная работа

Разработка алгоритма расчёта подгрупповых параметров  
нейтронных сечений

Выполнил

студент гр. Ф-02

\_\_\_\_\_ Е.В. Жемчугов

Руководитель

к.ф.-м.н.

\_\_\_\_\_ Мантуров Г.Н.

Рецензент

к.ф.-м.н.

\_\_\_\_\_ Колесов В.В.

Дипломную работу к защите допустить:

Зав. кафедрой ПМППЭ

д.ф.-м.н., проф.

\_\_\_\_\_ Зродников А.В.

Обнинск, 2008

# Содержание

Постановка задачи	3
Введение	5
<b>1 Многогрупповое приближение</b>	<b>10</b>
1.1 Уравнение Больцмана . . . . .	10
1.2 Факторы резонансной самоэкранировки . . . . .	12
<b>2 Подгрупповые параметры</b>	<b>15</b>
<b>3 Методика вычислений</b>	<b>23</b>
3.1 Основные соображения . . . . .	23
3.2 Алгоритм расчёта . . . . .	27
3.3 Программа <code>subgroups</code> . . . . .	27
3.3.1 Интерфейс программы . . . . .	27
3.3.2 Выходные файлы . . . . .	31
<b>4 Результаты расчётов, полученных с применением подгрупповых параметров</b>	<b>33</b>
4.1 Восстановление факторов резонансной самоэкранировки . . . . .	33
4.2 Сравнение с CALENDF . . . . .	34
4.3 «Broomstick experiment» . . . . .	39
Заключение	46

## Постановка задачи

Одной из самых сложных и важных задач, решаемых при конструировании ядерно-энергетической установки, является расчёт нейтронно-физических характеристик активной зоны и защиты от нейтронного излучения. От точности решения этой задачи сильно зависит стоимость реакторной установки. С улучшением точности можно уменьшать количество дорогостоящих материалов при постройке реакторов, увеличивать срок работы последних как в целом, так и между перегрузками топлива, выбирать коэффициенты запаса на уже построенных установках. Задача расчёта нейтронных и фотонных полей излучения и связанных с ними функционалов (эффективного коэффициента размножения нейтронов, энерговыделения и др.) является основным применением теории переноса нейтронов. Центральное уравнение этой теории — уравнение Больцмана — не имеет аналитического решения за исключением простейших случаев, поэтому обычно используется ряд приближений в сочетании с численными методами. Методы решения уравнения Больцмана можно разделить на два вида: статистические и детерминистические. Статистические методы обычно основаны на методе Монте-Карло и на текущий момент они дают наиболее точное и надёжное решение, но эта точность достигается за счёт потребления огромных вычислительных мощностей. Для проведения предварительных расчётов, для проверки статистических методов, а также в тех случаях, когда не требуется особо большая точность, используются детерминистические методы, основанные на том или ином приближении при решении уравнения Больцмана. Одним из наиболее часто применяемых методов является многогрупповое приближение, заключающееся в том, что всё множество возможных энергий нейтронов (обычно от  $10^{-5}$  эВ до 20 МэВ) разбивается на ряд областей (групп), в пределах которых все зависящие от энергии нейтрона функции (сечения взаимодействия нейтронов с веществом, среднее количество нейтронов, получающихся при делении одного ядра того или иного изотопа урана или плутония, спектр нейтронов деления) считаются постоянными.

Полная погрешность при расчёте имеет две составляющие: методическую погрешность и погрешность от входных данных. Погрешность от входных данных обусловлена, в основном, погрешностями, с которыми известны сечения взаимодействия нейтронов с веществом. Во времена первых реакторов эта погрешность превосходила погрешность, вносимую использованием многогруппового приближения. Но постепенно шло накопление информации от опытов по измерению сечений, и сейчас точность, с которой они известны, значительно улучшилась, хотя эта погрешность по-прежнему остаётся доминирующей. Тем не менее разумно постараться уменьшить и методическую составляющую погрешности.

Основная часть методической составляющей погрешности при использовании многогруппового приближения происходит из резонансной структуры сечений: если в некоторой группе у некоторого сечения наблюдается резонанс, то на этом резонансе увеличи-

вается количество соответствующих взаимодействий нейтронов с веществом, что влияет на поток нейтронов — он уменьшается. Этот эффект называется блокировкой или самоэкранировкой, и он приводит к тому, что эффективное среднегрупповое сечение оказывается отличным от рассчитанного по принятой формуле усреднения. Сейчас основным общепринятым методом его учёта является применение так называемых факторов резонансной самоэкранировки, формализм которых был разработан И. И. Бондаренко [1]. В §1.2 данной работы приводится его краткое описание.

Существует другой способ увеличения точности вычислений на основе многогруппового приближения, заключающийся в использовании подгруппового приближения при расчёте групповых коэффициентов в разложенном уравнении Больцмана. Формализм метода описан в [2] и, более подробно, в разделе 2 данной работы. Этот метод позволяет вычислять более широкий класс функционалов от сечения и позволяет получать эти функционалы с большей точностью.

Результатом применения подгруппового приближения является набор чисел — подгрупповых параметров — из которых можно сконструировать квадратурную формулу для вычисления среднегруппового значения требуемого функционала от сечения. К примеру, среднегрупповое значение функции пропускания нейтронов  $T(\sigma, t) = e^{-nt \cdot \sigma}$ , где  $\sigma$  — полное сечение взаимодействия нейтрона с веществом,  $t$  — толщина некоторого слоя вещества, а  $n$  — концентрация ядер в веществе, вычисляется таким образом:

$$\langle T \rangle = \sum_k a_k e^{-nt \cdot \sigma_k}, \quad (1)$$

где  $a_k$  и  $\sigma_k$  — подгрупповые параметры.

Целью данной работы является:

1. Построение алгоритма расчёта подгрупповых параметров.
2. Реализация алгоритма в виде расчётной программы.
3. Получение подгрупповых параметров на примере  $^{238}\text{U}$  и  $^{56}\text{Fe}$ .
4. Аprobация полученных подгрупповых параметров на примере расчёта факторов резонансной самоэкранировки и расчёта экспериментов по пропусканию нейтронов в хорошей геометрии (так называемые «broomstick experiments»).

При разработке алгоритма делался особый упор на то, чтобы с помощью полученных подгрупповых параметров можно было максимально точно рассчитывать факторы резонансной самоэкранировки. Это требование делает таблицы подгрупповых параметров совместимыми с общепринятыми таблицами микроконстант, что позволяет использовать подгрупповые параметры во всех задачах, где сейчас используются факторы резонансной самоэкранировки, без дополнительных модификаций алгоритмов решения этих задач.

Актуальность данной задачи обусловлена тем, что в настоящее время ведётся разработка новой системы групповых констант БНАБ-РФ на основе файлов оценённых нейтронных данных РОСФОНД, и эти параметры должны будут войти в эту систему.

# Введение

Основной величиной, характеризующей взаимодействие нейтронов (и не только нейтронов, но и других элементарных частиц и ядер атомов) с веществом, является сечение взаимодействия. Сечение зависит от кинетической энергии нейтрона в системе координат, связанной с ядром атома, с которым происходит взаимодействие. Эта зависимость имеет очень сложный характер. В среднем сечение меняется как  $1/\sqrt{E}$ , где  $E$  — энергия нейтрона, но существует область энергий, называемая промежуточной или резонансной областью, в которой сечение меняется сложным образом и на много порядков. Аналитически зависимость сечения от энергии во всей области энергий, интересной с точки зрения практического применения, описать не удаётся. Существует много моделей структуры ядер, каждая из которых является лишь некоторым приближением к истине. С помощью этих моделей можно получить представление о структуре зависимости сечений [3]. Рассчитанная таким образом зависимость имеет большое количество свободных параметров, которые фиксируются на основе экспериментальных данных по измерению сечений.

Уже более 50 лет проводятся различные эксперименты по измерению нейтронных сечений. Накоплено огромное количество экспериментальных данных, которые не всегда согласуются между собой. Эти данные обрабатываются и на их основе составляются рекомендуемые (так называемые «оценённые») зависимости сечений от энергии. Обработка проводится во многих странах, поэтому существует много различных библиотек оценённых нейтронных данных: БРОНД (Россия, [4]), ENDF/B (США, Evaluated Nuclear Data File, section B), JENDL (Япония), JEFF (Западная Европа).

Всю область энергий нейтронов можно условно разделить на три части: область тепловых нейтронов, область быстрых нейтронов и промежуточную или резонансную область. Тепловыми называются нейтроны, достигшие термодинамического равновесия с веществом, в котором они находятся. Резонансная область характерна тем, что в ней наблюдается особенно сложная зависимость сечения от энергии, в то время как в области быстрых нейтронов такая зависимость уже не наблюдается. Область резонансных нейтронов принято делить на две части: область разрешённых резонансов и область неразрешённых резонансов. Отличаются они тем, что в области неразрешённых резонансов детекторам, что используются в экспериментах по измерению сечения, не хватает разрешающей способности выделить отдельные резонансы. Поэтому в области неразрешённых резонансов во всех библиотеках зависимость сечения от энергии представлена лишь его средним значением, и для того, чтобы корректно провести в ней расчёты, приходится использовать различные статистические методы, обычно основанные на построении методом Монте-Карло некоторой детальной зависимости, наилучшим образом согласующейся с известным средним значением и с теоретическими расчётами (так называемый «method of random ladders»).

Объём информации в библиотеках оценённых нейтронных данных очень велик, и

программы, проводящие расчёты с детальной зависимостью сечений от энергии, потребляют большие вычислительные мощности. Многогрупповое приближение позволяет уменьшить этот объём на много порядков. Проведя (возможно, длительные) предварительные вычисления и получив библиотеки групповых констант, можно решать задачи, например, расчёта всего поля нейтронов в активной зоне за сравнительно небольшое время. Ещё одно важное достоинство многогруппового приближения заключается в том, что оно может работать и в области неразрешённых резонансов: разница между областями разрешённых и неразрешённых резонансов покрывается в формализме факторов резонансной самоэкранировки.

Разумеется, приведение данных к компактному виду с помощью многогруппового приближения неизбежно сопряжено с потерей части данных, содержащихся в библиотеке оценённых данных (за исключением, разве что, области неразрешённых резонансов). Существуют некоторые дополнения и развития многогруппового приближения, призванные уменьшить эти потери. Сейчас наиболее широко распространённым как в нашей стране, так и за рубежом, является использование факторов резонансной самоэкранировки. Благодаря зависимости этих факторов от некоторых параметров задачи, в частности, от сечений разбавления, они позволяют с небольшими затратами подгонять групповые константы под рассматриваемый случай.

В настоящее время идёт развитие другого метода улучшения точности многогруппового приближения — метода подгрупповых параметров. Идея метода была выдвинута М.Н. Николаевым и В.В. Филипповым в 1963 году [5], и независимо от них L.V. Levitt [6] и D.E. Cullen [7] в 1972–1974 годах, но несмотря на то, что приоритет принадлежит СССР, сейчас развитие идёт в основном за рубежом. В нашей стране методом подгрупповых параметров занимался В.В. Сеница [8], который разработал и обосновал методику нахождения подгрупповых параметров, а также разработал алгоритм расчёта. К сожалению, детальное описание алгоритма было утеряно, что и послужило причиной для возникновения потребности в данной работе. Французская программа, рекомендованная для расчёта подгрупповых параметров, называется CALENDF [9]. В её основе заложены те же методы, что будут описаны в §3.1, но есть ряд отличий, о которых будет сказано в §4.2.

Приведём несколько примеров, характеризующих улучшение точности расчётов при использовании подгруппового приближения. В [10] приводятся данные по так называемым «benchmark-экспериментам». Это один из видов экспериментов, предназначенных для проверки наших знаний о сечениях взаимодействия нейтронов с веществом. В этих экспериментах шар из делящегося материала окружался отражателем, в данном случае из железа. Отражатель представлял собой две полусферы — нижнюю и верхнюю. В процессе проведения эксперимента верхняя полусфера приближалась к делящемуся материалу до тех пор, пока не достигалась критичность или пока обе конструкции не состыковывались. В первом случае результаты экстраполировались на сферическую конструкцию и таким

Таблица 1. — Коэффициенты размножения, полученные расчётами с различными приближениями и экспериментально.

Обозначение эксперимента	Усреднение по току	Усреднение по потоку	Подгрупповой метод	MCNP	Эксперимент
HEU-MET-FAST-013	0.970	0.987	0.997	0.997	1.000
HEU-MET-FAST-021	0.964	0.993	1.000	1.007	1.000
IEU-MET-FAST-005	0.972	0.999	1.006	1.014	1.000
PU-MET-FAST-025	0.981	0.990	0.997	1.000	1.000
PU-MET-FAST-026	0.966	0.994	1.001	1.007	1.000
PU-MET-FAST-028	0.966	0.997	1.000	1.009	1.000
PU-MET-FAST-032	0.976	0.990	0.997	1.002	1.000

образом измерялся коэффициент размножения нейтронов в сферической конструкции. После этого он же рассчитывался по известным данным о сечениях. В табл. 1 представлены результаты этих расчётов. В первой колонке приведено обозначение эксперимента в [10]. Во второй и третьей — групповые расчёты с полным сечением усреднённым по току и по потоку. В первом случае среднее полное сечение в группе рассчитывается по формуле

$$\langle \sigma \rangle_g = \frac{\int_{E_g}^{E_{g-1}} \sigma(E) j(E) dE}{\int_{E_g}^{E_{g-1}} j(E) dE}, \quad (2)$$

во втором — по формуле

$$\langle \sigma \rangle_g = \frac{\int_{E_g}^{E_{g-1}} \sigma(E) \phi(E) dE}{\int_{E_g}^{E_{g-1}} \phi(E) dE}, \quad (3)$$

где  $E_g$  и  $E_{g-1}$  — нижняя и верхняя границы группы,  $\sigma(E)$  — полное сечение взаимодействия нейтронов с веществом,  $j(E)$  — плотность тока нейтронов,  $\phi(E)$  — плотность потока нейтронов. В четвёртой колонке таблицы приведены результаты, рассчитанные по подгрупповым параметрам из библиотеки БНАБ-93 [11]. Наконец, в пятой колонке представлены результаты, посчитанные по MCNP [12] с детальной зависимостью сечения от энергии. Видно, что подгрупповое приближение даёт результаты лучше, чем многогрупповое и даже порой лучше, чем расчёты по детальной зависимости методом Монте-Карло.

Другой пример: так называемый «broomstick-эксперимент» или эксперимент по пропусканию нейтронов в хорошей геометрии, проведённый в 1972 году в Окридже. Суть эксперимента заключалась в облучении пластины из железа мононаправленным потоком нейтронов и регистрации энергетического спектра прошедших нейтронов. Измерения проводились с пластинами толщиной 8 дюймов (20.3 см) и 12 дюймов (30.5 см). Автор настоя-

щей работы сравнил результаты эксперимента с расчётами по разным файлам оценённых нейтронных данных, как по детальной зависимости сечения от энергии, так и в многогрупповом и подгрупповом приближениях. Подробнее анализ эксперимента освещён в §4.3. На рис. 1 и 2 приведены получившиеся спектры для файлов РОСФОНД. Подчеркнём, что, в отличие от предыдущего примера, здесь использованы подгрупповые параметры, рассчитанные по описанному в данной работе алгоритму. Видно, что результаты в подгрупповом приближении не хуже описывают эксперимент, чем расчёт с детальной зависимостью сечения.

Приведённые примеры показывают важность подгруппового подхода и возможность его использования в практических расчётах.

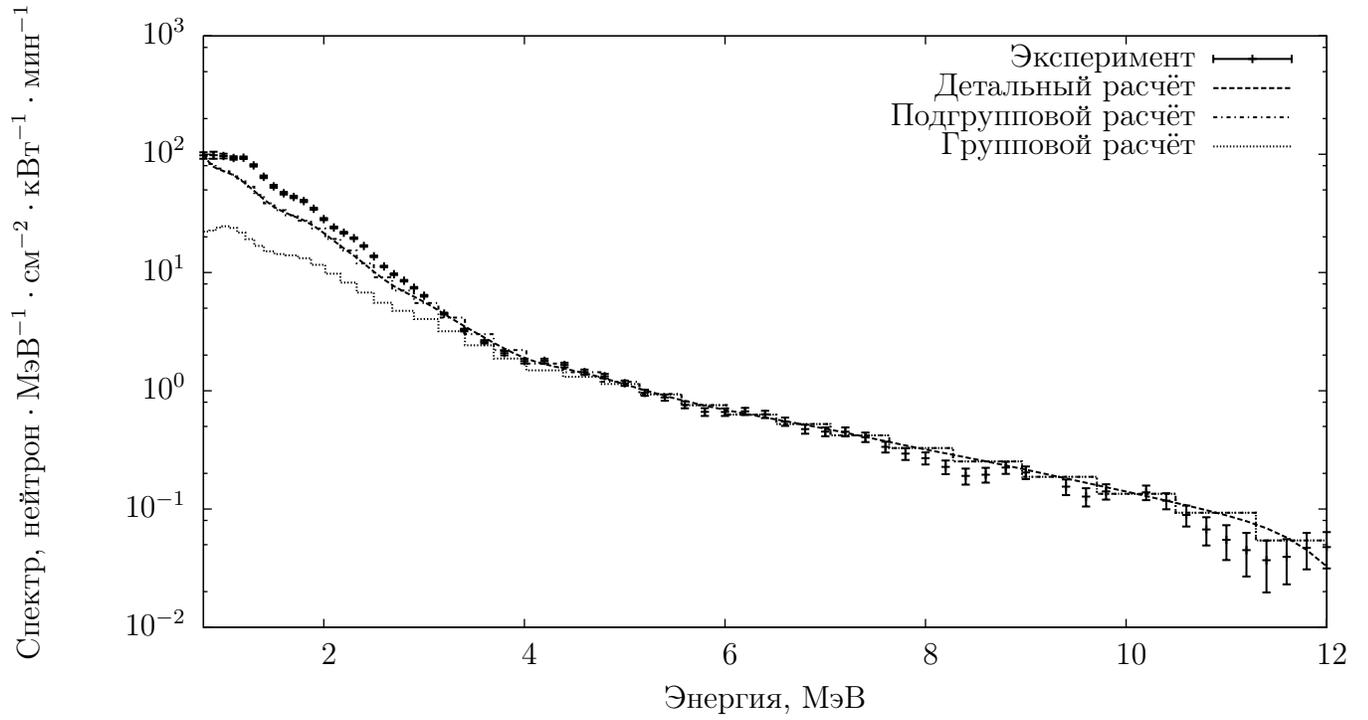


Рисунок 1. — Результаты расчёта эксперимента с пластиной толщиной 20.3 см.

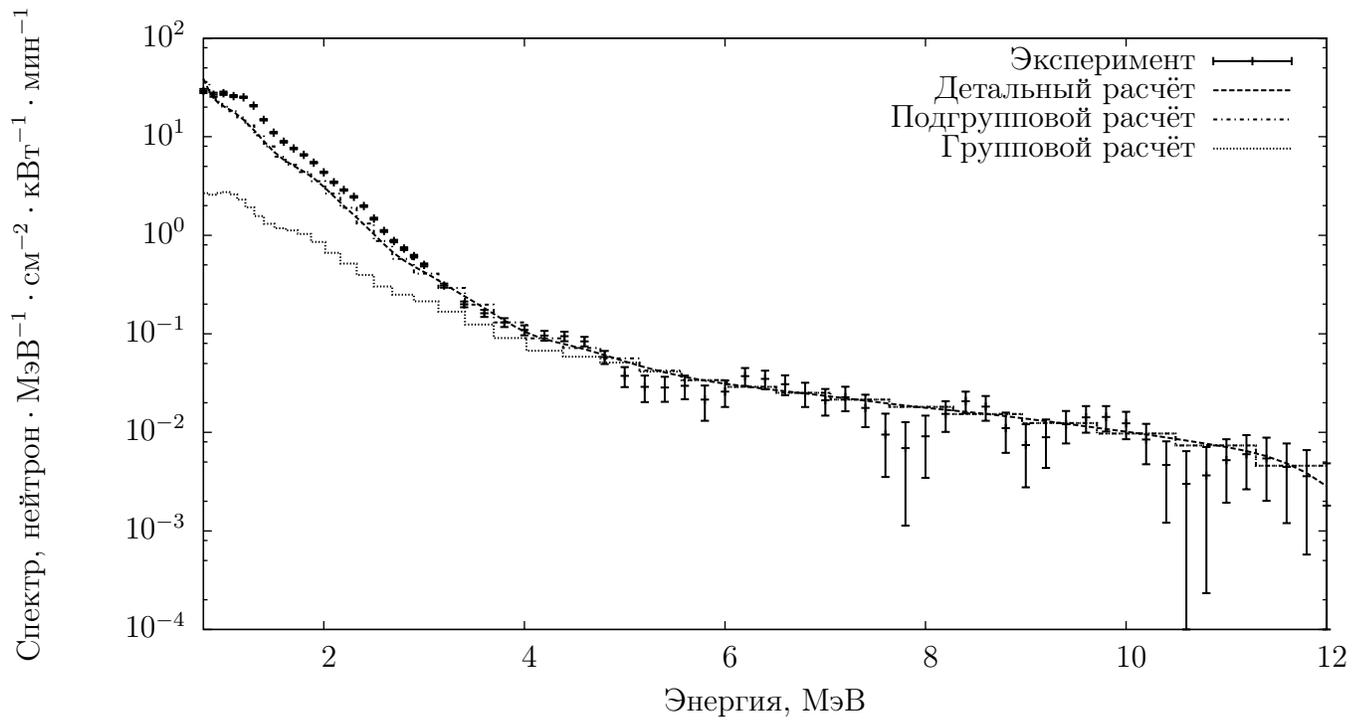


Рисунок 2. — Результаты расчёта эксперимента с пластиной толщиной 30.5 см.

# 1 Многогрупповое приближение

## 1.1 Уравнение Больцмана

Основным уравнением, описывающим прохождение нейтронов через вещество, является кинетическое уравнение Больцмана. В стационарном случае это уравнение имеет такой вид:

$$\begin{aligned} \vec{\Omega} \vec{\nabla} \phi(\vec{r}, u, \vec{\Omega}) + \Sigma_t(\vec{r}, u) \phi(\vec{r}, u, \vec{\Omega}) = & \int_{-\infty}^{\infty} \int_{4\pi} \Sigma_s(\vec{r}, u' \rightarrow u, \vec{\Omega}' \vec{\Omega}) \phi(\vec{r}, u', \vec{\Omega}') d\vec{\Omega}' du' + \\ & + \frac{\chi(\vec{r}, u)}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \nu \Sigma_f(\vec{r}, u') \int_{4\pi} \phi(\vec{r}, u', \vec{\Omega}') d\vec{\Omega}' du' + q(\vec{r}, u, \vec{\Omega}), \end{aligned} \quad (4)$$

где  $\phi(\vec{r}, u, \vec{\Omega})$  — плотность потока нейтронов лётаргии<sup>1</sup>  $u$ , двигающихся в направлении  $\vec{\Omega}$  в точке  $\vec{r}$ ,  $\Sigma_f(\vec{r}, u)$  и  $\Sigma_t(\vec{r}, u)$  — макроскопические сечение деления и полное сечение взаимодействия нейтронов с веществом,  $\Sigma_s(\vec{r}, u' \rightarrow u, \vec{\Omega}' \vec{\Omega})$  — дважды дифференциальное макроскопическое сечение рассеяния нейтрона из точки фазового пространства  $(\vec{r}, u', \vec{\Omega}')$  в  $(\vec{r}, u, \vec{\Omega})$ ,  $\chi(\vec{r}, u)$  — спектр нейтронов деления,  $\nu$  — среднее число нейтронов, рождающихся при делении,  $q(\vec{r}, u, \vec{\Omega})$  — источник нейтронов.

Это уравнение относительно неизвестной функции  $\phi(\vec{r}, u, \vec{\Omega})$ , но обычно с практической точки зрения интересна не сама плотность потока нейтронов, а функционалы от неё вида

$$\int_{4\pi} \phi(\vec{r}, u, \vec{\Omega}) \Sigma_x(\vec{r}, u) d\vec{\Omega}, \int_{-\infty}^{\infty} \int_{4\pi} \phi(\vec{r}, u, \vec{\Omega}) \Sigma_x(\vec{r}, u) d\vec{\Omega} du, \int_{-\infty}^{\infty} \int_{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(\vec{r}, u, \vec{\Omega}) \Sigma_x(\vec{r}, u) d\vec{\Omega} du d\vec{r}$$

и т.п., где  $\Sigma_x(\vec{r}, u)$  — макроскопическое сечение некоторой реакции  $x$  с нейтронами лётаргии  $u$  в точке  $\vec{r}$ . В общем случае получить аналитическое выражение ни для плотности потока, ни для приведённых функционалов не удаётся. Существует несколько способов нахождения интересующих величин, обычно комбинирующих определённые приближения с численными методами.

Одним из таких способов является широко известное многогрупповое приближение, заключающееся в интегрировании уравнения (4) по энергетическим интервалам, в каждом из которых сечения и плотность потока нейтронов считаются независимыми от энергии. Сочетая его с каким-либо приближением, позволяющим избавиться от зависимости плотности потока нейтронов от направления движения нейтронов, например, разложением плотности потока по сферическим функциям, можно получить относительно простые

<sup>1</sup>Здесь лётаргия нейтрона  $u = \ln \frac{E_0}{E}$ , где  $E_0 = 0.025$  эВ,  $E$  — энергия нейтрона

уравнения, решаемые тем или иным численным методом. Фигурирующие в этих уравнениях константы являются усреднениями функций сечения по заданным энергетическим группам. К примеру, итоговые уравнения после применения  $P_1$ -приближения<sup>2</sup> [2, стр. 22] выглядят так:

$$\vec{\nabla} \vec{J}_g(\vec{r}) + \Sigma_{t,0}^g \Phi_g(\vec{r}) = \sum_{g'=1}^g \Sigma_{s,0}^{g' \rightarrow g} \Phi_{g'}(\vec{r}) + \chi_g \sum_{g'=1}^G \nu \Sigma_f^{g'} \Phi_{g'}(\vec{r}) + q_g(\vec{r}), \quad (5)$$

$$\frac{1}{3} \vec{\nabla} \Phi_g(\vec{r}) + \Sigma_{t,1}^g \vec{J}_g(\vec{r}) = \sum_{g'=1}^g \Sigma_{s,1}^{g' \rightarrow g} \vec{J}_{g'}(\vec{r}), \quad (6)$$

где

$$\Phi_g(\vec{r}) = \int_{\Delta u_g} \int_{4\pi} \phi(\vec{r}, u, \vec{\Omega}) d\vec{\Omega} du - \text{среднегрупповой поток нейтронов,}$$

$$\vec{J}_g(\vec{r}) = \int_{\Delta u_g} \int_{4\pi} \phi(\vec{r}, u, \vec{\Omega}) \vec{\Omega} d\vec{\Omega} du - \text{среднегрупповой ток нейтронов,}$$

$$q_g(\vec{r}) = \int_{\Delta u_g} \int_{4\pi} q(\vec{r}, u, \vec{\Omega}) d\vec{\Omega} du - \text{среднегрупповой источник нейтронов,}$$

$$\Delta u_g = [u_{g-1}; u_g] - \text{группа } g,$$

$$G - \text{количество групп,}$$

а макроконстанты определяются следующим образом:

$$\Sigma_{t,0}^g = \frac{1}{\langle 1/\Sigma_t \rangle_g}, \quad \Sigma_{s,1}^{g' \rightarrow g} = \frac{\langle \mu_0^{-g} \Sigma_s^{-g} / \Sigma_t^2 \rangle_{g'} + a_1^g \langle \mu_0^{-g} \Sigma_s^{-g} / \Sigma_t \rangle_{g'}}{\langle 1/\Sigma_t^2 \rangle_{g'} + a_1^{g'} \langle 1/\Sigma_t \rangle_{g'}}, \quad (7)$$

$$\Sigma_{s,0}^{g' \rightarrow g} = \frac{\langle \Sigma_s^{-g} / \Sigma_t \rangle_{g'}}{\langle 1/\Sigma_t \rangle_{g'}}, \quad a_1^g = \frac{\langle \bar{\mu}_0 \Sigma_s^{-g} / \Sigma_t^2 \rangle_g}{1 - \langle \bar{\mu}_0 \Sigma_s / \Sigma_t \rangle_g}, \quad (8)$$

$$\Sigma_s^{-g} = 2\pi \int_{-\infty}^{u_{g-1}} \int_{-1}^1 \Sigma_s(u' \rightarrow u, \mu_0) d\mu_0 du', \quad \nu \Sigma_f^g = \frac{\langle \nu \Sigma_f / \Sigma_t \rangle_g}{\langle 1/\Sigma_t \rangle_g}, \quad (9)$$

$$\mu_0^{-g} = \int_{-\infty}^{u_{g-1}} \bar{\mu}_0(u' \rightarrow u) du, \quad \Sigma_{t,1}^g = \frac{\langle 1/\Sigma_t \rangle_g + a_1^g}{\langle 1/\Sigma_t^2 \rangle_g + a_1^g \langle 1/\Sigma_t \rangle_g}, \quad (10)$$

$$\bar{\mu}_0(u' \rightarrow u) = \frac{\int_{-1}^1 \mu_0 \Sigma_s(u' \rightarrow u, \mu_0) d\mu_0}{\int_{-1}^1 \Sigma_s(u' \rightarrow u, \mu_0) d\mu_0}. \quad (11)$$

Здесь угловые скобки имеют смысл усреднения по летаргии:

$$\langle f(u) \rangle_g = \frac{1}{\Delta u_g} \int_{\Delta u_g} f(u) du. \quad (12)$$

<sup>2</sup>В этом приближении учитывается только первая угловая гармоника плотности потока нейтронов — ток нейтронов  $\vec{J}$ .

Видно, что коэффициенты уравнения выражаются через величины вида  $\langle 1/\Sigma_t \rangle_g$ ,  $\langle \Sigma_s/\Sigma_t^2 \rangle_g$  и т.п. Подобные выражения характерны не только для  $P_1$ -приближения, но и для других, более высоких приближений, причём в уравнениях для более высоких гармоник потока фигурируют сечения, выражаемые через  $\langle 1/\Sigma_t \rangle_g$  в более высоких степенях.

Как уже говорилось во введении, непосредственное вычисление коэффициентов по формуле (12) — очень дорогая операция с точки зрения потребления машинного времени и памяти. Поэтому встаёт вопрос о том, как организовать библиотеку групповых микроконстант таким образом, чтобы можно было легко и точно рассчитать коэффициенты для большинства задач, решаемых в реакторной физике. При этом одних лишь среднегрупповых сечений будет недостаточно. Так, для  $^{238}\text{U}$  в интервале энергий  $5.60 \div 6.00$  эВ, где сечение слабо зависит от энергии,  $\langle \frac{1}{\sigma_t} \rangle = 8.85 \cdot 10^{-2}$  барн $^{-1}$ ,  $\frac{1}{\langle \sigma_t \rangle} = 8.80 \cdot 10^{-2}$  барн $^{-1}$ , т.е. относительная погрешность — 0.6%, а в интервале  $6.35 \div 6.85$  эВ, где присутствует один резонанс,  $\langle \frac{1}{\sigma_t} \rangle = 2.23 \cdot 10^{-2}$  барн $^{-1}$ ,  $\frac{1}{\langle \sigma_t \rangle} = 1.49 \cdot 10^{-2}$  барн $^{-1}$ , и относительная погрешность — 33%.

## 1.2 Факторы резонансной самоэкранировки

Решение этой проблемы применительно к задачам расчёта реакторов на быстрых нейтронах было предложено И.И. Бондаренко [1]. Заключается оно в следующем. Возьмём, для примера, то же  $P_1$ -приближение. Через микроконстанты парциальные сечения  $\Sigma_x^g$  представляются так:

$$\Sigma_x^g = \frac{\langle \Sigma_x/\Sigma_t \rangle_g}{\langle 1/\Sigma_t \rangle_g} = \sum_i n_i \frac{\langle \sigma_{x,i}/\Sigma_t \rangle_g}{\langle 1/\Sigma_t \rangle_g}, \quad (13)$$

где  $n_i$  — концентрация ядер  $i$ -го изотопа в веществе,  $\sigma_{x,i}$  — микроскопическое парциальное сечение взаимодействия нейтронов с изотопом  $i$ , сумма берётся по всем изотопам, содержащимся в веществе. Если сечения взаимодействия нейтронов с изотопом  $i$  не имеют резонансных зависимостей в группе  $g$ , то  $\langle \sigma_{x,i}/\Sigma_t \rangle_g \approx \langle \sigma_{x,i} \rangle_g \cdot \langle 1/\Sigma_t \rangle_g$ . Если это выполняется для всех изотопов в веществе, то для  $\Sigma_x^g$  получается простое выражение:

$$\Sigma_x^g = \sum_i n_i \langle \sigma_{x,i} \rangle_g. \quad (14)$$

Если резонансной зависимостью обладают только сечения изотопа  $j$ , то

$$\Sigma_x^g = \sum_{i \neq j} n_i \langle \sigma_{x,i} \rangle_g + n_j \frac{\langle \sigma_{x,j}/(\sigma_{t,j} + \sigma_{0,j}^g) \rangle_g}{\langle 1/(\sigma_{t,j} + \sigma_{0,j}^g) \rangle_g}, \quad (15)$$

где

$$\sigma_{0,j}^g = \frac{1}{n_j} \sum_{i \neq j} n_i \langle \sigma_{t,i} \rangle_g \quad (16)$$

— так называемое сечение разбавления  $j$ -го изотопа остальными. В общем виде это выражение можно представить таким образом:

$$\Sigma_x^g = \sum_i n_i \langle \sigma_{x,i} \rangle_g f_{x,i}^g(\sigma_0^g), \quad (17)$$

где  $f_{x,i}^g \equiv 1$  если сечение изотопа  $i$  не обладает резонансной структурой в группе  $g$  и

$$f_{x,i}^g(\sigma_0) = \frac{1}{\langle \sigma_{x,i} \rangle_g} \frac{\langle \sigma_{x,i}/(\sigma_{t,i} + \sigma_0) \rangle_g}{\langle 1/(\sigma_{t,i} + \sigma_0) \rangle_g} \quad (18)$$

в противном случае. Функция  $f_{x,i}^g(\sigma_0)$  называется фактором резонансной самоэкранировки парциального сечения  $x$  нулевой гармоники. Фактор резонансной самоэкранировки полного сечения нулевой гармоники (для  $\Sigma_{t,0}^g$ ) можно получить, просуммировав факторы для парциальных сечений, поэтому обычно он в таблицах микроконстант не приводится. Вместо него приводится фактор резонансной самоэкранировки полного сечения первой гармоники (для  $\Sigma_{t,1}^g$ ), равный

$$f_{t,i}^g(\sigma_0) = \frac{1}{\langle \sigma_{t,i} \rangle_g} \frac{\langle \sigma_{t,i}/(\sigma_{t,i} + \sigma_0)^2 \rangle_g}{\langle 1/(\sigma_{t,i} + \sigma_0)^2 \rangle_g} = \frac{1}{\langle \sigma_{t,i} \rangle_g} \left( \frac{\langle 1/(\sigma_{t,i} + \sigma_0) \rangle_g}{\langle 1/(\sigma_{t,i} + \sigma_0)^2 \rangle_g} - \sigma_0 \right). \quad (19)$$

Характерная зависимость фактора резонансной самоэкранировки от сечения разбавления (характерная как для нулевой, так и для первой гармоник) представлена на рис. 3.

Таким образом, в таблицу микроконстант следует внести среднегрупповые сечения  $\langle \sigma_{x,i} \rangle_g$  и факторы резонансной самоэкранировки  $f_{x,i}^g(\sigma_0)$  для различных значений сечения разбавления, чтобы иметь достаточно данных для использования  $P_1$ -приближения.

Приведённый метод факторов самоэкранировки ориентирован на описание распространения нейтронов в протяженных гомогенных средах. Внутригрупповые спектры в этих средах можно оценить, рассчитывая спектр замедления в бесконечной среде. Это приближение вполне оправдано при расчете энергетических реакторов на быстрых нейтронах. Реакторы на тепловых и промежуточных нейтронах существенно гетерогенны: их активные зоны состоят из топливных стержней, погруженных в замедлитель, причем диаметры стержней и расстояние между ними сравнимы или даже меньше длины свободного пробега нейтронов. В этих случаях резонансная самоэкранировка сечений существенно меняется при переходе от внешней поверхности стержня к его центру. В первом приближении интегральный по стержню спектр нейтронов можно оценить как спектр нейтронов в бесконечной среде того же состава, разбавленной веществом с макроскопическим сечением  $1/l$ , где  $l = 4V/S$  — средняя хорда стержня,  $V$  — объём стержня,  $S$  — площадь его поверхности (приближение Вигнера) [14]. Это приближение (с последующими уточнениями) позволяет приближенно рассчитать эффективные сечения материала топливного стержня на основе факторов самоэкранировки. Альтернативой [15], работавшей ещё на первых эта-

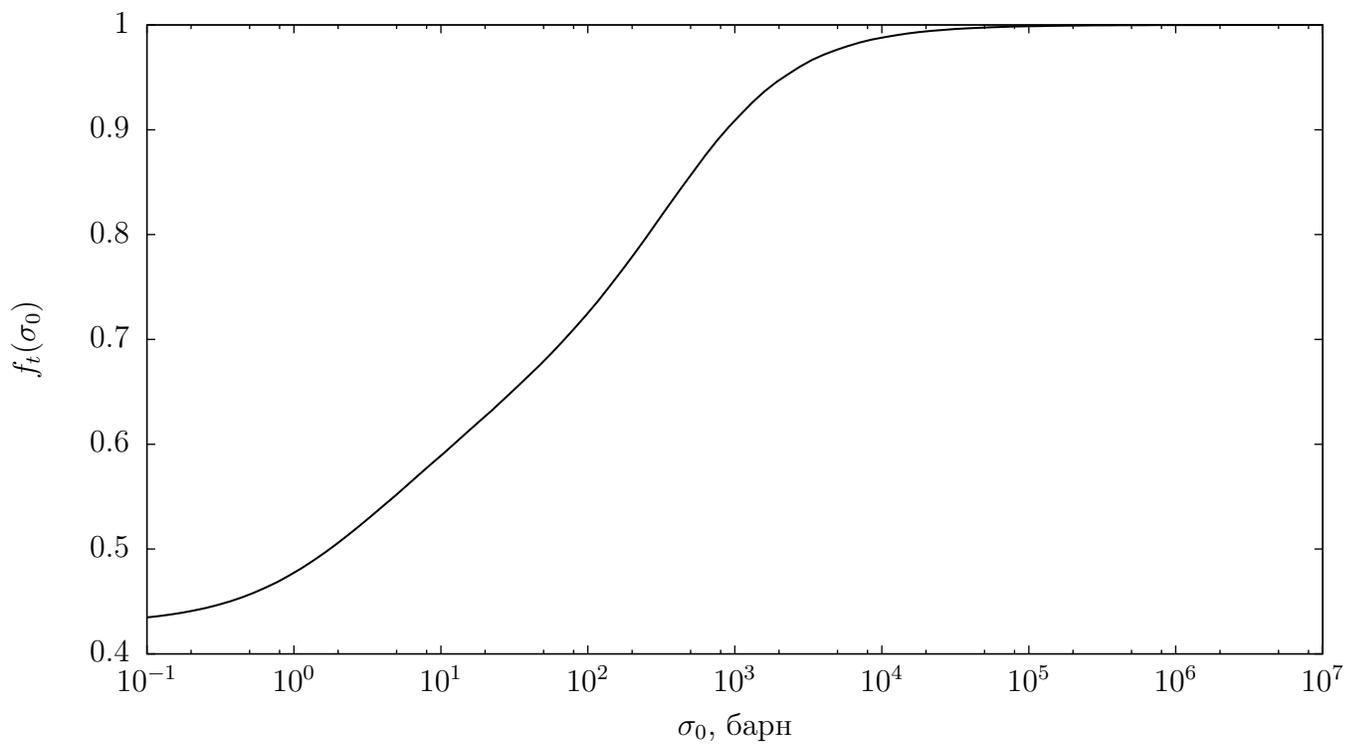


Рисунок 3. — Зависимость фактора резонансной самоэкранировки полного сечения  $^{238}\text{U}$  от сечения разбавления в группе с энергией от 2783 эВ до 2966 эВ.

пах реакторостроения, являлось использование в расчетах результатов непосредственных измерений чисел реакций в топливных стержнях.

## 2 Подгрупповые параметры

Приведём формальное описание метода подгрупповых параметров. Для этого определим оператор  $\langle f \rangle$  следующим образом:

$$\langle f(\sigma) \rangle = \frac{\int_{\Delta E} f(\sigma(E))\phi(E) dE}{\int_{\Delta E} \phi(E) dE}, \quad (20)$$

где  $\Delta E$  — некоторая область энергий,  $\phi(E)$  — плотность потока нейтронов энергии  $E$ ,  $f(\sigma)$  — произвольный функционал от полного сечения взаимодействия нейтронов с веществом. При построении библиотеки микроконстант зависимость  $\phi(E)$ , вообще говоря, неизвестна. Однако существуют три стандартных спектра — спектр Максвелла, спектр Ферми и спектр нейтронов деления — которые каждый в своей области энергий достаточно хорошо описывают спектр нейтронов в наиболее важной задаче, для которой создаётся система микроконстант, — расчёт ядерного реактора. Поэтому в качестве  $\phi(E)$  выбирается один из этих спектров. Отметим, что если выбирается спектр Ферми, то  $\phi(E) dE \sim du$ , где  $u$  — логарифм нейтронов и тогда для непрерывной области  $\Delta E$  определение (20) совпадает с (12).

Перейдём в (20) в числителе от интеграла Римана к интегралу Лебега по некоторой мере  $\mu(E)$ . Для этого разобьём область энергий  $\Delta E$  на отрезки  $[E_i; E_{i+1}]$ , на которых функция  $\mu(E)$  монотонна. Тогда на каждом таком отрезке можно получить однозначную монотонную функцию  $E_i(\mu)$ , обратную функции  $\mu(E)$ . В результате верхний интеграл уравнения (20) примет вид:

$$\int_{\Delta E} f(\sigma(E))\phi(E) dE = \sum_i \int_{E_i}^{E_{i+1}} f(\sigma(E))\phi(E) dE = \sum_i \int_{\mu(E_i)}^{\mu(E_{i+1})} f(\sigma(E_i(\mu)))\phi(E_i(\mu)) \frac{dE_i}{d\mu} d\mu, \quad (21)$$

где суммирование ведётся по всем отрезкам монотонности  $\mu(E)$ . Поменяв местами пределы интегрирования в тех слагаемых этого выражения, в которых  $\frac{dE_i}{d\mu} < 0$ , его можно переписать в виде:

$$\sum_i \int_{\mu(E_i)}^{\mu(E_{i+1})} f(\sigma(E_i(\mu)))\phi(E_i(\mu)) \frac{dE_i}{d\mu} d\mu = \int_{\mu_{\min}}^{\mu_{\max}} \sum_{i \in M(\mu)} f(\sigma(E_i(\mu)))\phi(E_i(\mu)) \left| \frac{dE_i}{d\mu} \right| d\mu, \quad (22)$$

где  $M(\mu) = \{n: \mu \in [\mu(E_n); \mu(E_{n+1})]\}$ , а  $\mu_{\min}$  и  $\mu_{\max}$  — минимальное и максимальное значение  $\mu(E)$  на  $\Delta E$ . Практический результат из этого громоздкого выражения можно из-

влекь, если положить  $\mu \equiv \sigma$ . Тогда выражение (20) запишется в виде:

$$\langle f(\sigma) \rangle = \frac{\int_{\sigma_{\min}}^{\sigma_{\max}} f(\sigma) \sum_{i \in M(\sigma)} \phi(E_i(\sigma)) \left| \frac{dE_i}{d\sigma} \right| d\sigma}{\int_{\Delta E} \phi(E) dE}. \quad (23)$$

Функция

$$p(\sigma) = \sum_{i \in M(\sigma)} \phi(E_i(\sigma)) \left| \frac{dE_i}{d\sigma} \right| \quad (24)$$

имеет смысл плотности вероятности того, что нейтрон, произвольно выбранный из множества нейтронов, имеющих энергию  $E' \in \Delta E$  и распределённых в этом интервале по спектру  $\phi(E)$ , будет иметь такую энергию, что сечение его взаимодействия с ядром будет равно  $\sigma$ . Соответственно, оператор  $\langle f(\sigma) \rangle$  имеет смысл математического ожидания величины  $f(\sigma)$  в области энергий  $\Delta E$  (рис. 4).

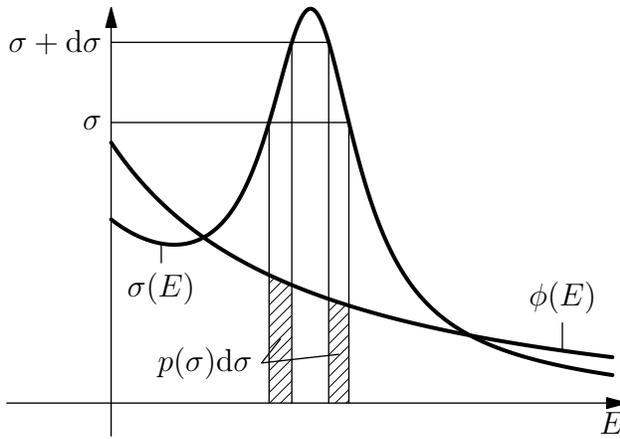


Рисунок 4. — Принцип построения функции  $p(\sigma)$ . Величина  $p(\sigma) d\sigma$  совпадает с суммой площадей заштрихованных областей и, таким образом, имеет смысл вероятности того, что нейтрон, попавший в рассматриваемую группу, будет иметь такую энергию  $E$ , что  $\sigma(E) \in [\sigma; \sigma + d\sigma]$ .

$\frac{d\sigma}{dE} = 0$  и, соответственно,  $p(\sigma)$  имеет интегрируемый полюс. Подгрупповое приближение (25) по сути является аппроксимацией функции вероятности  $\int_0^{\sigma} p(\sigma') d\sigma'$  гистограммой. График функции вероятности вместе с аппроксимацией для той же группы  $^{238}\text{U}$ , что и на рис. 5, представлен на рис. 6.

Рассмотрим теперь парциальные сечения  $\sigma_x(E)$ . Для произвольного функционала

Представим приближённо  $p(\sigma)$  как сумму  $\delta$ -функций:

$$p(\sigma) = \sum_{k=1}^K a_k \delta(\sigma - \sigma_k) \cdot \int_{\Delta E} \phi(E) dE \quad (25)$$

(здесь интегральный коэффициент взят лишь из соображений удобства). Тогда выражение (23) примет вид квадратурной формулы:

$$\langle f(\sigma) \rangle = \sum_{k=1}^K a_k f(\sigma_k). \quad (26)$$

Величины  $a_k$  и  $\sigma_k$  называются подгрупповыми параметрами.

Зависимость  $p(\sigma)$  довольно сложная. Типичная картина для группы с большим количеством резонансов представлена на рис. 5. При каждом сечении, соответствующем локальному экстремуму функции  $\sigma(E)$ ,

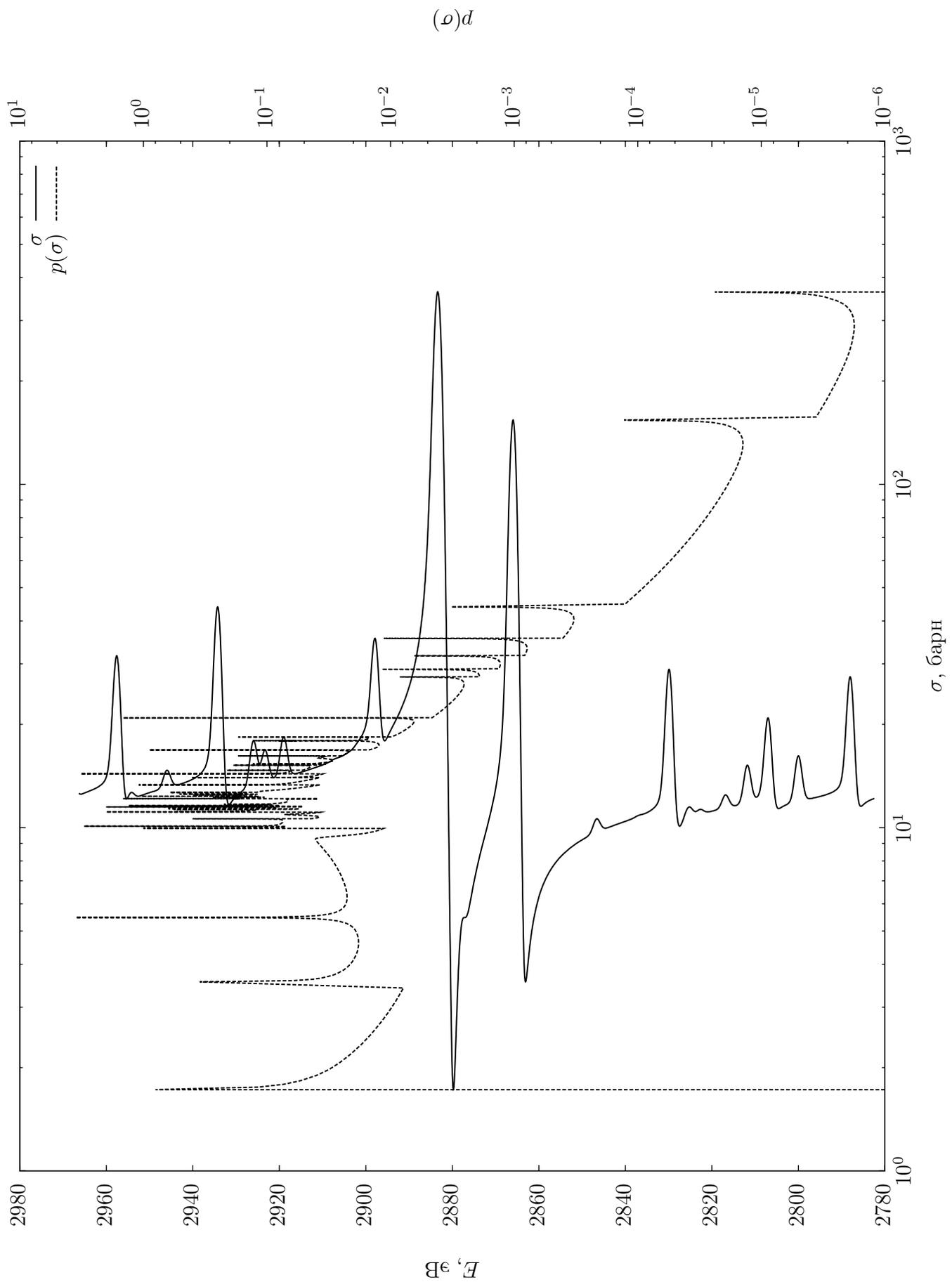


Рисунок 5. —  $p(\sigma)$  для  $^{238}\text{U}$  в области энергий от 2783 эВ до 2966 эВ.

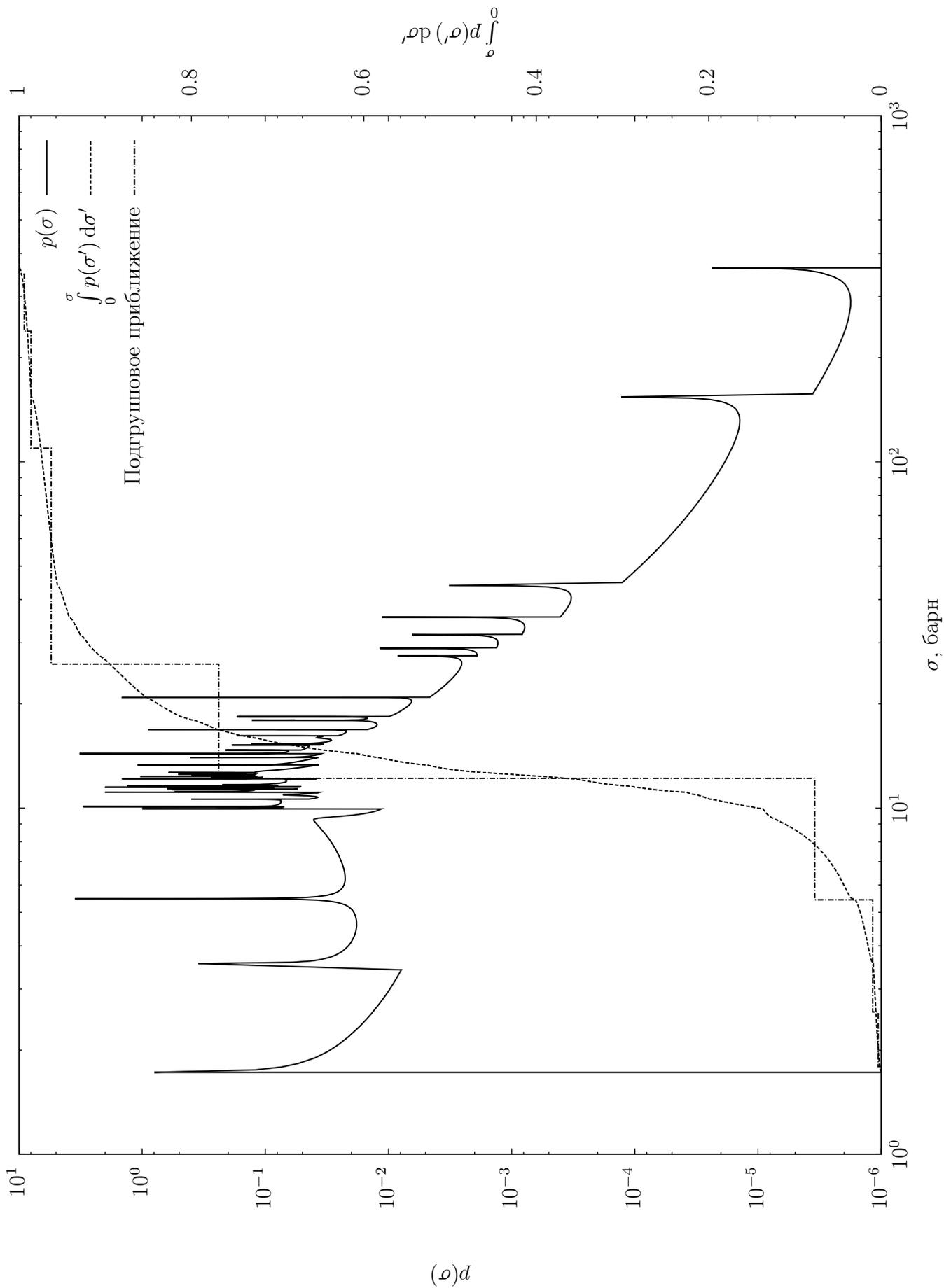


Рисунок 6. — Функция вероятности для  $^{238}\text{U}$  в области энергий от 2783 эВ до 2966 эВ.

$g(\sigma_X, \sigma)$ , где  $\sigma_X$  — набор парциальных сечений, тяжело подобрать удобное описание через подгрупповые параметры, но для функционалов вида  $g(\sigma_X, \sigma) = \sigma_x f(\sigma)$ , которые только и встречаются на практике, это оказывается возможным. Пусть уже рассчитаны параметры  $a_k$  и  $\sigma_k$  и пусть  $\mathcal{E}_k$  — множество энергетических отрезков, в пределах которых выполняется условие  $\sigma_{k-1} \leq \sigma(E) < \sigma_k$  (считая, что  $\sigma_0 = 0$ ). Тогда можно записать:

$$\langle \sigma_x f(\sigma) \rangle = \frac{\int_{\Delta E} \sigma_x(E) f(\sigma(E)) \phi(E) dE}{\int_{\Delta E} \phi(E) dE} = \frac{\sum_{k=1}^K \int_{\mathcal{E}_k} \sigma_x(E) a_k f(\sigma_k) \phi(E) dE}{\int_{\Delta E} \phi(E) dE} = \sum_{k=1}^K a_k \sigma_{x,k} f(\sigma_k), \quad (27)$$

где

$$\sigma_{x,k} = \frac{\int_{\mathcal{E}_k} \sigma_x(E) \phi(E) dE}{\int_{\Delta E} \phi(E) dE}. \quad (28)$$

На практике подгрупповые параметры проще получать не по приведённым выше построениям, а из системы уравнений

$$\sum_{k=1}^K a_k f_n(\sigma_k) = \langle f_n(\sigma) \rangle, \quad (29)$$

$$\sum_{k=1}^K a_k \sigma_{x,k} f_n(\sigma_k) = \langle \sigma_x f_n(\sigma) \rangle. \quad (30)$$

При некоторых условиях, налагаемых на множество функционалов  $f_n(\sigma)$ , входящих в эти уравнения, с помощью вышеприведённых построений подгрупповым параметрам можно приписать ясный и удобный физический смысл. В данной работе рассматривается такое множество функционалов, при котором  $a_k$  имеют смысл вероятностей нейтрону, попавшему в рассматриваемую группу, попасть в подгруппу  $k$ ,  $\sigma_k$  и  $\sigma_{x,k}$  — средних полного и парциального сечений в подгруппе  $k$ . Такая трактовка позволяет использовать эти подгрупповые параметры в программах, основанных на методе Монте-Карло. Приведём формальные требования, которым должны удовлетворять подгрупповые параметры для успешного использования в этих программах:

$$\forall k \ a_k \geq 0, \sigma_k \geq 0, \quad (31)$$

$$\forall (x, k) \ \sigma_{x,k} \geq 0, \quad (32)$$

$$\sum_{k=1}^K a_k = 1, \quad (33)$$

$$\sum_{k=1}^K a_k \sigma_k = \langle \sigma \rangle, \quad (34)$$

$$\forall x \in X \sum_{k=1}^K a_k \sigma_{x,k} = \langle \sigma_x \rangle, \quad (35)$$

$$\forall k \sum_{x \in X} \sigma_{x,k} = \sigma_k. \quad (36)$$

Рассмотрим эти условия подробнее.

- Условия (31) и (32) должны удовлетворяться в соответствии с определениями подгрупповых параметров. Однако приведённый ниже метод расчёта подгрупповых параметров такого гарантировать не может: он является приближённым, и, хотя условие (31) им удовлетворяется, условие (32) удовлетворить удаётся не всегда. Для него используются специальные методы, описанные далее.
- Условие (33) будет выполнено, если в системе уравнений (29), из которой определяются  $a_k$  и  $\sigma_k$ , будет присутствовать уравнение с  $f_n(\sigma) = \text{const}$ .
- Условие (34) будет выполнено, если в той же системе уравнений будет присутствовать уравнение с  $f_n(\sigma) = \sigma$ .
- Условие (35) будет выполнено, если в системе уравнений (30) будет присутствовать по уравнению с  $f_n(\sigma) = \sigma$  для каждого  $x$ .
- Условие (36) можно выполнить, вычисляя в каждой подгруппе параметр, соответствующий одному из парциальных сечений, как разность параметра, соответствующего полному сечению и остальных параметров для парциальных сечений.

Определимся с оставшимися функционалами  $f_n(\sigma)$ , которые следует использовать при получении подгрупповых параметров. Основными функциями, которые планируется вычислять с помощью подгрупповых параметров, являются факторы резонансной самоэкранировки и функции пропускания. Последние представляют собой следующие функционалы:

$$T(\sigma, t) = e^{-t(\sigma + \sigma_0)}, \quad (37)$$

где  $\sigma_0$  — сечение разбавления (16). Функции пропускания обычно используются в расчётах нейтронной защиты и позволяют судить, какой толщины должен быть слой материала, чтобы снизить поток нейтронов на заданную величину. Соответственно,  $t$  имеет смысл толщины слоя, умноженной на концентрацию ядер рассматриваемого элемента. Факторы резонансной самоэкранировки вычисляются через функционалы  $\sigma$ ,  $(\sigma + \sigma_0)^{-1}$  и  $(\sigma + \sigma_0)^{-2}$ ; если разложить функцию пропускания в ряд Тейлора, то она окажется выраженной через функционалы вида  $(\sigma + \sigma_0)^n$ ,  $n \leq 0$ . Поэтому в качестве функций  $f_n(\sigma)$  удобно выбрать функции  $(\sigma + \sigma_0)^n$  с  $n \in [N_1; N_2]$ ,  $N_1 \leq 0$ ,  $N_2 \geq 1$  (степени 0 и 1 обязаны входить в  $[N_1; N_2]$ , чтобы были выполнены условия (33), (34) и (35)). В этом случае основными уравнениями

для получения подгрупповых параметров становятся

$$\sum_{k=1}^K a_k (\sigma + \sigma_0)^n = \langle (\sigma + \sigma_0)^n \rangle, \quad (38)$$

$$\sum_{k=1}^K a_k \sigma_{x,k} (\sigma + \sigma_0)^n = \langle \sigma_x (\sigma + \sigma_0)^n \rangle, \quad (39)$$

$$n \in [N_1; N_2]$$

Величины в правой части этих уравнений принято называть моментами.<sup>3</sup>

В построенной модели есть три свободных параметра:  $N_1$ ,  $N_2$  и  $\sigma_0$ . Первые два дают количество подгрупповых параметров, требующихся для того, чтобы можно было точно получить значения всех моментов  $\langle (\sigma + \sigma_0)^n \rangle$  и  $\langle \sigma_x (\sigma + \sigma_0)^n \rangle$  для всех степеней  $n \in [N_1; N_2]$ . Однако точное значение практически не необходимо. Входные данные — зависимости сечений от энергии  $\sigma(E)$  и  $\sigma_x(E)$  — сами имеют некоторую погрешность, обычно не превышающую 1%, но, разумеется, не нулевую. Кроме того, целесообразно стараться уменьшить количество подгрупп, может быть, даже ценой потери точности. Дело в том, что при работе с многоизотопной средой, особенно методом Монте-Карло, количество расчётов, которое требуется провести для каждой группы, может очень быстро расти с ростом количества подгрупп для каждого изотопа. В первых работах по подгрупповым параметрам [8] в 1980х количество подгрупп старались делать не больше четырёх. Кроме того, до сих пор в программах часто используются массивы фиксированного размера, и нужное количество подгрупповых параметров в них может просто не поместиться. Поэтому имеет смысл ввести в расчёт дополнительный параметр — точность восстановления моментов  $\varepsilon$ . Используется он следующим образом: если выполняется

$$\delta \left( \langle \sigma_x (\sigma + \sigma_0)^n \rangle, \sum_{k=1}^K a_k \sigma_{x,k} \sigma_k^n \right) < \varepsilon, \quad (40)$$

то момент степени  $n$  для парциального сечения  $x$  посчитан с удовлетворительной точностью. Аналогично и для полного сечения. Здесь

$$\delta(x, y) = \left| \frac{x - y}{x} \right| \quad (41)$$

— относительная погрешность величины  $y$  в сравнении с величиной  $x$  (считается, что  $x$  известна точно и  $x \neq 0$ ). С параметром  $\varepsilon$  необязательно иметь  $N_2 - N_1 + 1$  подгрупп, чтобы восстановить все требуемые моменты. Часто количество подгрупп можно уменьшить в

---

<sup>3</sup>Наверное, это название пошло от того, что оператор  $\langle f \rangle$  является математическим ожиданием величины  $f$  (см. (23) и (24)), а математические ожидания от степеней случайных величин в теории вероятностей принято называть моментами.

несколько раз, а если в группе нет резонансной зависимости, то может хватить и одной. Так, для восстановления моментов с  $-4$  по  $3$   $^{238}\text{U}$  в 299-групповом разбиении с  $\varepsilon = 0.01$  в группах с 228 по 296 требуется только одна подгруппа, в группах с 187 по 192 — две подгруппы, а ведь при этом сохраняется 8 моментов.

### 3 Методика вычислений

#### 3.1 Основные соображения

Расчёт подгрупповых параметров базируется на системах уравнений

$$\sum_{k=1}^K a_k (\sigma + \sigma_0)^n = \langle (\sigma + \sigma_0)^n \rangle, \quad (38)$$

$$\sum_{k=1}^K a_k \sigma_x (\sigma + \sigma_0)^n = \langle \sigma_x (\sigma + \sigma_0)^n \rangle, \quad (39)$$

$$n \in [N_1; N_2]$$

Рассмотрим сначала систему (38). Идея решения этой системы описана в [16], и здесь будет приведено её применение для интересующего нас случая. Для удобства обозначим через  $M_l = \langle (\sigma + \sigma_0)^l \rangle$  момент степени  $l$ . Возьмём функцию-генератор моментов в виде интеграла Стилтъяса:

$$F(z) = \int_0^{\sigma_{\max}} \frac{(z\sigma)^{1-K}}{1-z\sigma} p(\sigma) d\sigma = \sum_{l=1-K}^K z^l M_l + \mathcal{O}(z^{K+1}), \quad (42)$$

домножим её на  $z^{K-1}$  и применим к результату приближение Паде:

$$z^{K-1} F(z) = \sum_{l=0}^{2K-1} z^l M_{l-K+1} = \frac{\sum_{m=0}^{K-1} \alpha_m z^m}{\sum_{m=0}^{K-1} \beta_m z^m + z^K}. \quad (43)$$

Умножение обеих частей этого тождества на знаменатель дроби даёт:

$$\left( z^K + \sum_{m=0}^{K-1} \beta_m z^m \right) \left( \sum_{l=0}^{2K-1} z^l M_{l-K+1} \right) = \sum_{m=0}^{K-1} \alpha_m z^m. \quad (44)$$

Переставив слагаемые и приняв  $\beta_K = 1$ , получим:

$$\sum_{l=0}^{3K-1} z^l \sum_{m=\max(0, l-2K+1)}^{\min(l, K)} \beta_m M_{l-m-K+1} = \sum_{m=0}^{K-1} \alpha_m z^m. \quad (45)$$

Если теперь приравнять коэффициенты при степенях  $z$  от  $K$  до  $2K - 1$ , то выйдет система уравнений относительно  $\beta_m$ :

$$\begin{pmatrix} M_1 & M_0 & \dots & M_{2-K} \\ M_2 & M_1 & \dots & M_{3-K} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ M_K & M_{K-1} & \dots & M_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_{K-1} \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} M_{1-K} \\ M_{2-K} \\ \vdots \\ M_0 \end{pmatrix}. \quad (46)$$

Матрица в этом уравнении представляет собой матрицу Тёплица,<sup>4</sup> но, как указано в [17, §5.12], матрицу, получающуюся при построении приближения Паде, выгоднее обрабатывать обычным методом LU-разложения [17, §2.3]. В программе `subgroups`, написанной автором этой работы и основанной на описываемом алгоритме, для этой цели использовались соответствующие функции из библиотеки GNU Scientific Library [18].

Подгрупповые параметры  $\sigma_k$  получаются из решения уравнения

$$\sum_{k=1}^K \beta_k z^k = 0 \quad (47)$$

[19], которое удобнее преобразовать к виду

$$\sum_{k=1}^K \beta_{K-k} \sigma^k = 0. \quad (48)$$

Параметры  $a_k$  можно было бы получить, найдя коэффициенты  $\alpha_m$ , но проще вычислить их, решив систему уравнений (38). Матрица этой системы при  $N_1 = 0$  представляет собой матрицу Вандермонда,<sup>5</sup> но, поскольку более интересен случай с  $N_1 < 0$ , её тоже выгоднее решать методом LU-разложения.

Зная  $a_k$  и  $\sigma_k$ , можно вычислить  $\sigma_{x,k}$ , решив систему уравнений (39) для каждого  $x \in X$ .

Осталось неопределённым количество подгрупп  $K$ . С одной стороны, с увеличением  $K$  растёт точность восстановления моментов, с другой, как уже отмечалось на стр. 21, растёт также и стоимость вычислений по полученным подгрупповым параметрам. Кроме того, при различных  $K$  получаются, соответственно, различные  $\sigma_{x,k}$  и может случиться так, что при каких-то  $K$  будет выполнено условие (32). Поэтому разумно варьировать число подгрупп  $K$  так, как это будет показано в §3.2.

Определим погрешность восстановления моментов по  $K$  подгрупповым параметрам

<sup>4</sup>[http://en.wikipedia.org/wiki/Toeplitz\\_matrix](http://en.wikipedia.org/wiki/Toeplitz_matrix)

<sup>5</sup>[http://en.wikipedia.org/wiki/Vandermonde\\_matrix](http://en.wikipedia.org/wiki/Vandermonde_matrix)

таким образом:

$$E_K = \max_{x,n} \left( \delta \left( \langle \sigma^n \rangle, \sum_{k=1}^K a_k \sigma_k^n \right), \delta \left( \langle \sigma_x \sigma^n \rangle, \sum_{k=1}^K a_k \sigma_{x,k} \sigma_k^n \right) \right), \quad (49)$$

где функция  $\delta(x, y)$  определена уравнением (41). Тогда оптимальное значение  $K$  определяется выражением

$$K_{\text{optimal}} = \inf \{ n : E_n < \varepsilon \text{ и } \forall(x, k), k \in [1; n] \sigma_{x,k} \geq 0 \}, \quad (50)$$

где, как уже говорилось на стр. 21,  $\varepsilon$  — внешний параметр, определяющий точность восстановления заданных моментов. Ввиду сложности вычисления величин  $E_K$ ,  $K_{\text{optimal}}$  проще всего находить линейным поиском, начиная от значения  $K = 1$ .

Бесконечно увеличивать  $K$  нельзя. При больших  $K$ , во-первых, становится практически невозможно использовать полученные подгрупповые параметры в существующих программах и, во-вторых, из-за ограниченной машинной точности вычислений, у полинома (48) появляются комплексные корни, не имеющие смысла в нашей задаче. Для преодоления этой проблемы используется последний оставшийся свободный параметр модели — сечение разбавления  $\sigma_0$ , при котором вычисляются подгрупповые параметры, так называемое сечение разбавления привязки. Определим функцию  $K(\sigma_0)$  следующим образом:

$$K(\sigma_0) = \begin{cases} K_{\text{optimal}} & \text{если удалось получить } K_{\text{optimal}} \\ \max \{ K : \forall(x, k), k \in [1; K] \sigma_{x,k} \geq 0 \} & \text{в противном случае} \end{cases} \quad (51)$$

и введём функцию погрешностей

$$E(\sigma_0) = E_{K(\sigma_0)}. \quad (52)$$

При этом все параметры в уравнении (49) рассматриваются как функции от  $\sigma_0$ . Так как при  $K = 1$   $\sigma_{x,1} = \langle \sigma_x \rangle \geq 0$ , то и  $K(\sigma_0)$ , и  $E(\sigma_0)$  определены для всех  $\sigma_0$ . Поскольку  $E_K$  убывает с возрастанием  $K$ , то определённая таким образом  $E(\sigma_0)$  будет минимальной максимальной погрешностью восстановления заданных моментов, которую можно получить в данной группе при фиксированном сечении разбавления привязки.

Факторы резонансной самоэкранировки (19) и (18), разложенные по подгрупповым

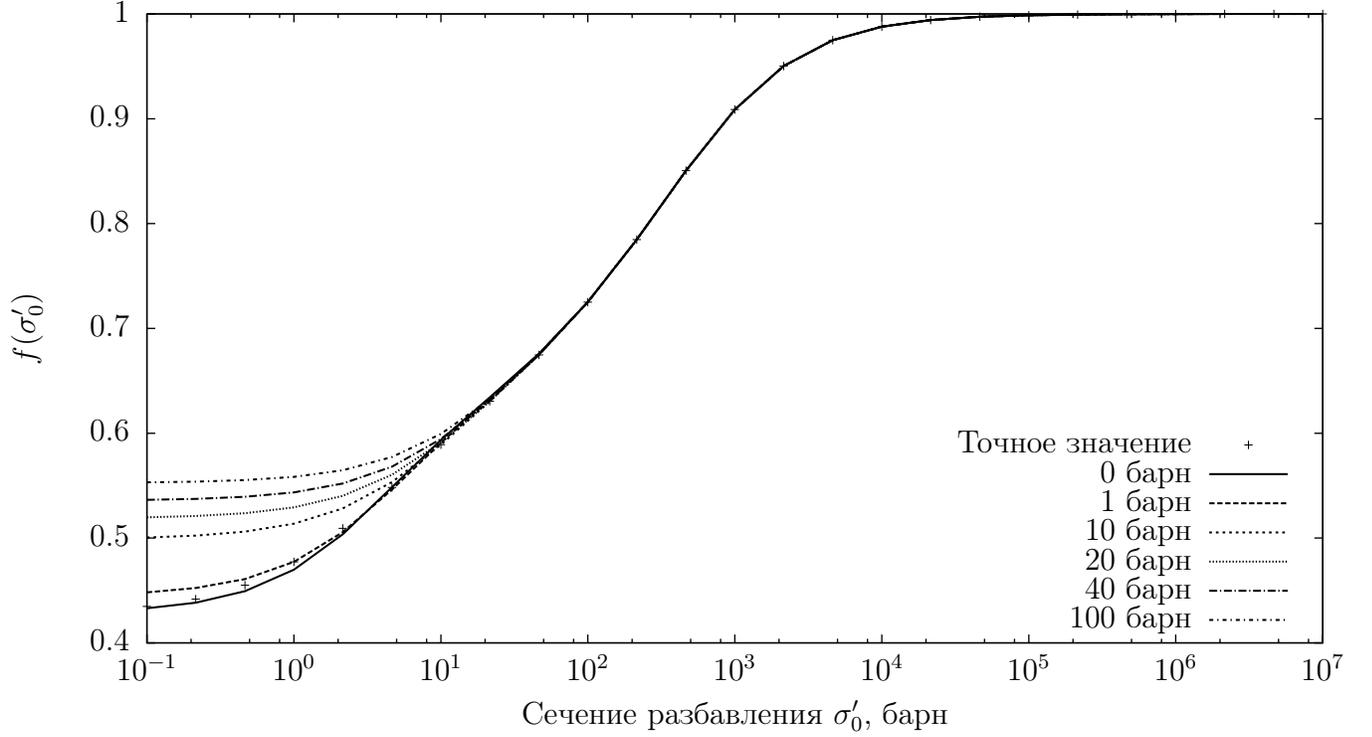


Рисунок 7. — Изменение зависимости фактора резонансной самоэкранировки полного сечения  $^{238}\text{U}$  в группе с энергией от 2783 эВ до 2966 эВ от сечения разбавления задачи при изменении сечения разбавления привязки. Количество подгрупп фиксированно и равно 6.

параметрам, выглядят следующим образом:

$$f_t(\sigma'_0, \sigma_0) = \frac{1}{\sum_{k=1}^{K(\sigma_0)} a_k(\sigma_0)\sigma_k(\sigma_0)} \cdot \left( \frac{\sum_{k=1}^{K(\sigma_0)} \frac{a_k(\sigma_0)}{\sigma_k(\sigma_0) + \sigma'_0}}{K(\sigma_0)} - \sigma'_0 \right) \quad (53)$$

$$f_x(\sigma'_0, \sigma_0) = \frac{1}{\sum_{k=1}^{K(\sigma_0)} a_k(\sigma_0)\sigma_{x,k}(\sigma_0)\sigma_k(\sigma_0)} \cdot \frac{\sum_{k=1}^{K(\sigma_0)} \frac{a_k(\sigma_0)\sigma_{x,k}(\sigma_0)}{\sigma_k(\sigma_0) + \sigma'_0}}{K(\sigma_0) \sum_{k=1}^{K(\sigma_0)} \frac{a_k(\sigma_0)}{\sigma_k(\sigma_0) + \sigma'_0}}. \quad (54)$$

Они зависят, соответственно, от сечения разбавления привязки  $\sigma_0$  и от сечения разбавления  $\sigma'_0$  той задачи, в которой они применяются. Многочисленные расчёты показали, что точность восстановления факторов при возрастании  $\sigma_0$  падает приблизительно так, как это показано на рис. 7. Поэтому оптимальное сечение разбавления можно определить следующим образом:

$$\sigma_{0,\text{optimal}} = \inf\{\sigma_0 : E(\sigma_0) < \varepsilon\}. \quad (55)$$

Функция  $K(\sigma_0)$  дискретная, поэтому функция  $E(\sigma_0)$  непрерывна лишь кусочно и

тяжело придумать эффективный алгоритм нахождения  $\sigma_{0,\text{optimal}}$ . Пока наиболее корректным является алгоритм линейного поиска начиная от некоторого значения  $\sigma_0$  с переменным шагом  $\Delta\sigma_0 = \varepsilon \cdot \sigma_0$ . В этом случае относительная погрешность определения  $\sigma_{0,\text{optimal}}$  не будет превышать  $\varepsilon$ . Однако, как оказалось, затраты на столь подробные вычисления не стоят небольших потерь точности при вычислении тем же алгоритмом, но с фиксированным шагом  $\Delta\sigma_0 = 0.5$  барн. При подгонке алгоритма под конкретную задачу эту часть всегда можно поменять.

## 3.2 Алгоритм расчёта

Исходя из приведённых выше соображений, был разработан следующий алгоритм получения подгрупповых параметров:

1. Получение входных данных:  $\varepsilon$ ,  $\sigma_x(E)$ ,  $\sigma_t(E)$ ,  $N_1$ ,  $N_2$ ,  $\Delta\sigma_0$ , установка  $\sigma_0 = 0$ .
2. Установка числа подгрупп  $K = 1$ . При одной подгруппе подгрупповые параметры являются среднегрупповыми значениями соответствующих величин:  $a_1 = 1$ ,  $\sigma_1 = \langle \sigma \rangle$ ,  $\sigma_{x,1} = \langle \sigma_x \rangle$ , следовательно, все условия с (31) по (36) выполняются.
3. Если максимальная погрешность восстановления моментов достаточно мала (меньше  $\varepsilon$ ) и выполняется условие (32), то расчёт заканчивается.
4. Число подгрупп  $K$  увеличивается на 1, из системы уравнений (46) находятся коэффициенты разложения Паде  $\beta_k$ , из уравнения (48) находятся параметры  $\sigma_k$ .
5. Если среди  $\sigma_k$  оказались комплексные значения, то сечение разбавления увеличивается на  $\Delta\sigma_0$  и идёт переход к пункту 2.
6. В противном случае из систем уравнений (38) и (39) находятся подгрупповые параметры  $a_k$  и  $\sigma_{x,k}$  и идёт переход к пункту 3.

Блок-схема алгоритма приведена на рис. 8.

## 3.3 Программа subgroups

На основе приведённого алгоритма автором этой работы на языке C++ была написана программа под названием `subgroups`, вычисляющая подгрупповые параметры.

### 3.3.1 Интерфейс программы

Для получения параметров расчёта программа `subgroups` использует командную строку, которая обрабатывается библиотекой `Program Options` из набора библиотек `Boost`.<sup>6</sup> Вот пример вызова программы:<sup>7</sup>

<sup>6</sup><http://www.boost.org>

<sup>7</sup>Здесь используется синтаксис командной строки, стандартный для Unix-подобных операционных систем. Символ «~» означает домашнюю директорию пользователя, символ «/» разделяет директории, символ «\» экранирует символ начала новой строки, сигнализируя, что здесь одна команда, а не две.

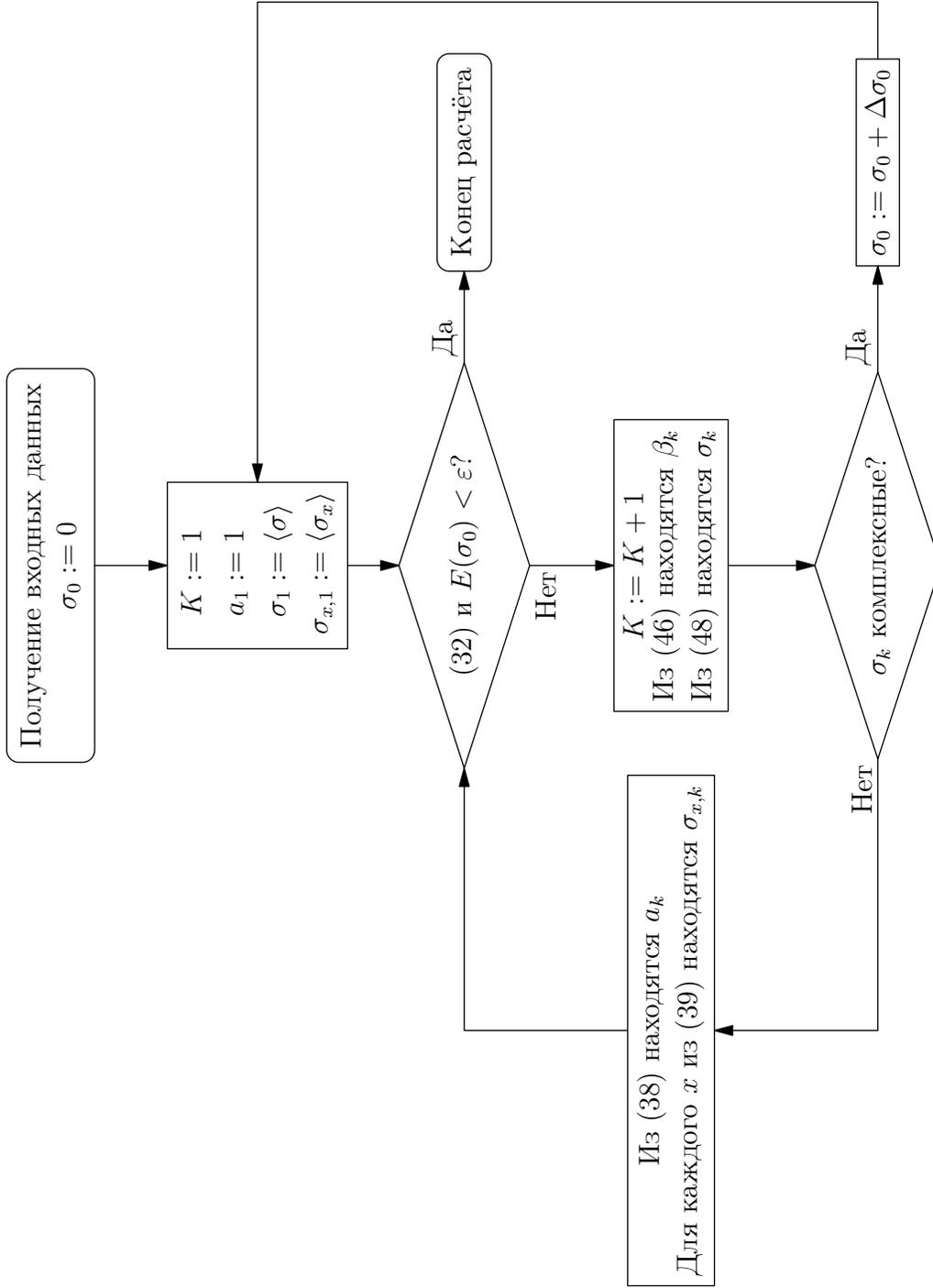


Рисунок 8. — Блок-схема алгоритма расчёта подгрупповых параметров.

```
subgroups --energies ~/data/e299 -s capture -s elastic -a inelastic \  
~/data/xsections/fe56 --error 0.05 -m -2 -M 1
```

Командная строка начинается с указания названия программы, `subgroups`. Далее следует набор из названий именованных параметров — `--energies`, `-s`, `-a`, `--error`, `-m` и `-M`, — после каждого из которых идёт аргумент параметра. Параметр `~/data/xsections/fe56` не имеет названия и является позиционным. Позиционные параметры считываются по порядку их возникновения в строке, в то время как именованные параметры могут появляться в строке в произвольном порядке. У `subgroups` может быть только один позиционный параметр — название файла в формате ENDF, из которого следует считывать сечения. Каждый именованный параметр начинается с символов `-` или `--`, за которым следует название параметра. С `--` начинаются длинные названия, которые проще запомнить, с `-` — короткие, которые быстрее набираются в командной строке. Ниже приведён список всех именованных параметров:

- `-h` или `--help`: выводит подсказку со списком возможных параметров и краткую информацию о программе
- `-d` или `--dilution`: если этот параметр указан, то расчёт проводится при фиксированном сечении разбавления  $\sigma_0$ , равном аргументу параметра.
- `-E` или `--energies`: файл, из которого следует считать энергетические границы групп. Этот параметр обязателен.
- `-e` или `--error`: максимальная относительная погрешность восстановления заданных моментов  $\varepsilon$ . По умолчанию — 0.01.
- `-g` или `--group`: если этот параметр указан, то расчёт проводится только для данной группы.
- `-m` или `--momenta-min`: минимальная степень сохраняемых моментов  $N_1$ . По умолчанию — 4.
- `-M` или `--momenta-max`: максимальная степень сохраняемых моментов  $N_2$ . По умолчанию — 3.
- `-s` или `--section`: парциальное сечение, для которого следует производить расчёт подгрупповых параметров. Этим параметров может быть несколько и хотя бы один должен присутствовать.
- `-a` или `--additional-section`: парциальное сечение, для которого следует производить расчёт подгрупповых параметров, но для которого не следует добиваться их положительности и сохранения соответствующих моментов. Этим параметров может быть несколько.

`-t` или `--total`: полное сечение.

Аргументом параметров `--section`, `--additional-section` и `--total` служит либо номер секции в файле формата ENDF (так называемое «число МТ»), либо название этой секции, либо файл в простом формате. Сейчас программа «знает» про следующие секции:

- `total`: полное сечение, номер 1.
- `elastic`: сечение упругого рассеяния, номер 2.
- `inelastic`: сечение неупругого рассеяния, номер 4.
- `fission`: сечение деления, номер 18.
- `capture`: сечение захвата, номер 102.

Если указана хотя бы одна секция в файле формата ENDF, необходимо указать и сам файл именованным параметром.

Файл в простом формате должен представлять собой два столбца чисел, из которых первое — это энергия в эВ, второе — сечение в барнах при этой энергии. Если надо указать файл, название которого состоит из цифр или совпадает с названием секции, то это можно сделать, добавив в начале путь к текущей директории, например: `./102` или `./elastic`.

Если не используется параметр `--total`, то полное сечение трактуется как сумма парциальных, как `--section`, так и `--additional-section`. Если же этот параметр используется, то рассчитывается величина

$$\delta_\sigma = \max_i \delta \left( \sigma(E_i), \sum_x \sigma_x(E_i) \right), \quad (56)$$

где  $\{E_i\}$  — множество энергий, при которых задано полное сечение, а в набор сечений  $\sigma_x$ , опять же, входят как `--section`, так и `--additional-section`. Если  $\delta_\sigma > \varepsilon$ , то к `--additional-section` добавляется сечение

$$\sigma'(E) = \sigma(E) - \sum_x \sigma_x(E). \quad (57)$$

Различие между параметрами `--section` и `--additional-section` заключается в том, что для дополнительных сечений подгрупповые параметры не проверяются на положительность и для них не рассчитываются погрешности восстановления моментов. Сделано это для того, чтобы можно было получить корректные параметры для полного сечения, не стараясь точно описать несущественную неплывность хода некоторых парциальных сечений. Например, у  $^{56}\text{Fe}$  сечение неупругого рассеяния нулевое в области энергий до 1 МэВ и имеет сложную резонансную структуру при больших энергиях. Если пользователя интересует только полное сечение и резонансная структура сечений захвата и упругого рассеяния, то он может передать сечение неупругого рассеяния как дополнительное сечение. Тогда подгрупповые параметры для полного сечения будут давать моменты, рассчитанные с учётом сечения неупругого рассеяния, но при этом в них не будет содержаться

дополнительная информация о резонансной структуре отдельно неупругого рассеяния, что позволит сократить число подгрупп и длительность расчётов.

### 3.3.2 Выходные файлы

Во время работы программы на `stdout` выводятся результаты расчёта, а на `stderr`<sup>8</sup> — дополнительная информация о результатах.

#	G	SG	probability	total	capture	elastic
1	1	1.00000e+00	3.31276e+00	3.33607e-04	3.31242e+00	
2	1	1.00000e+00	3.22614e+00	3.96040e-04	3.22575e+00	
3	1	1.00000e+00	3.09989e+00	4.95240e-04	3.09939e+00	
.....						
202	1	4.10454e-01	1.75214e+01	2.18921e+00	1.53321e+01	
	2	4.21635e-01	2.54256e+01	5.27786e+00	2.01478e+01	
	3	1.67911e-01	4.13086e+01	1.27409e+01	2.85677e+01	
203	1	2.84943e-02	1.83874e+01	1.82677e+01	1.19722e-01	
	2	6.14537e-02	2.23575e+01	2.22339e+01	1.23543e-01	
	3	8.92311e-02	3.32003e+01	3.16548e+01	1.54545e+00	
	4	2.49855e-01	6.24074e+01	3.51536e+01	2.72539e+01	
	5	2.14134e-01	1.47899e+02	9.14850e+01	5.64138e+01	
	6	1.19594e-01	5.95406e+02	4.01720e+02	1.93687e+02	
	7	7.63807e-02	2.24411e+03	1.55434e+03	6.89769e+02	
	8	5.88472e-02	4.98406e+03	3.45179e+03	1.53227e+03	
	9	5.27991e-02	7.87841e+03	5.45423e+03	2.42418e+03	
	10	4.92109e-02	9.65346e+03	6.69395e+03	2.95952e+03	
.....						

Рисунок 9. — Пример вывода результатов расчёта

На рис. 9 приведён отрывок из вывода на `stdout` при расчёте подгрупповых параметров для  $^{238}\text{U}$ . Вывод представляет собой таблицу данных. В начале вывода пишется заголовок, помеченный символом #, за которым следуют названия полей таблицы:

- **G**: номер группы.
- **SG**: номер подгруппы.
- **probability**: подгрупповой параметр  $a_k$ , соответствующий вероятности нейтрону попасть в эту подгруппу.
- **total**: подгрупповой параметр  $\sigma_k$ , соответствующий полному сечению.
- **capture**: подгрупповой параметр  $\sigma_{c,k}$ , соответствующий сечению захвата.
- **elastic**: подгрупповой параметр  $\sigma_{e,k}$ , соответствующий сечению упругого рассеяния.

<sup>8</sup>`stdout` и `stderr` — это файлы стандартного вывода данных и стандартного вывода сообщений об ошибках и диагностики. Подробнее см. [http://en.wikipedia.org/wiki/Standard\\_streams](http://en.wikipedia.org/wiki/Standard_streams).

В таблице всегда присутствуют только первые четыре поля, остальные меняются в зависимости от поставленной задачи. Названия полей для парциальных сечений берутся из аргументов параметров `--section` и `--additional-section`.

```

# G SG      dilution      error
  1  1  0.00000e+00 1.64621e-03
  2  1  0.00000e+00 3.65912e-03
  3  1  0.00000e+00 6.14772e-03
.....
202  3  0.00000e+00 6.19646e-03
203 10  1.00000e+00 1.37319e-04
.....

```

Рисунок 10. — Пример вывода диагностической информации

На рис. 10 приведён аналогичный отрывок из вывода на `stderr`. Вывод также представляет собой таблицу данных с заголовком. Вот описание полей таблицы:

- **G**: номер группы.
- **SG**: количество подгрупп  $K$ .
- **dilution**: сечение разбавления привязки  $\sigma_0$ .
- **error**: максимальная погрешность восстановления заданных моментов  $E(\sigma_0)$ .

## 4 Результаты расчётов, полученных с применением подгрупповых параметров

### 4.1 Восстановление факторов резонансной самоэкранировки

Как уже говорилось, основные функции, рассчитываемые по подгрупповым параметрам, — это зависимости факторов резонансной самоэкранировки от сечения разбавления. Факторы резонансной самоэкранировки применяются довольно широко в методах, основанных на групповых приближениях, и если подгрупповые параметры точно восстанавливают факторы резонансной самоэкранировки, то они автоматически становятся применимыми во всех методах, где эти факторы используются.

Для расчёта точных значений факторов резонансной самоэкранировки применяются формулы (19) и (18), в которых оператор усреднения раскрывается в соответствии с его определением (20). В приведённых ниже результатах полученные интегралы брались методом трапеций по тем точкам, в которых было определено полное сечение. Парциальное сечение в формуле (18) интерполировалось линейно. Точность расчёта при этом должна быть достаточно высокая, поскольку входные ENDF-файлы были предварительно обработаны программой NJOY так, чтобы линейная интерполяция давала погрешность не больше 1% — того же порядка, с которым известны сами данные.

Для расчёта факторов резонансной самоэкранировки с помощью подгрупповых параметров применялись формулы (53) и (54), которые представляют собой те же формулы (19) и (18), но с оператором усреднения раскрытым в соответствии с уравнениями (29) и (30). На стр. 26 уже указывалось, что эти факторы зависят не только от сечения разбавления среды, но и от сечения разбавления привязки и на рис. 7 приводился пример этой зависимости. Подчеркнём ещё раз, что точность восстановления факторов ухудшается с увеличением сечения разбавления привязки.

В качестве рассматриваемого материала был выбран  $^{238}\text{U}$ , потому что он, во-первых, важен для реакторных расчётов, и, во-вторых, обладает наиболее сложной резонансной структурой. Помимо  $^{238}\text{U}$  были также рассчитаны подгрупповые параметры для  $^{235}\text{U}$  и природной смеси железа, но эти они ничем особенных от параметров  $^{238}\text{U}$  не отличаются.

При подготовке подгрупповых параметров были заданы следующие значения: сохраняемые моменты — с  $-4$  по  $3$ , максимальная погрешность восстановления  $\varepsilon = 1\%$ , учитываемые сечения: захвата и упругого рассеяния. Зависимость сечения от энергии была взята из библиотеки оценённых нейтронных данных РОСФОНД.

Выберем мерой неточности восстановления факторов резонансной самоэкранировки функцию  $\delta(f_x^g(\sigma_0), f_x'^g(\sigma_0))$ , определённую уравнением (41), где  $f_x^g(\sigma_0)$  — фактор резонансной самоэкранировки для сечения  $x$  в группе  $g$  при сечении разбавления  $\sigma_0$ , рассчитанный по детальной зависимости сечения от энергии,  $f_x'^g(\sigma_0)$  — аналогичный фактор, рассчитанный по подгрупповым параметрам.

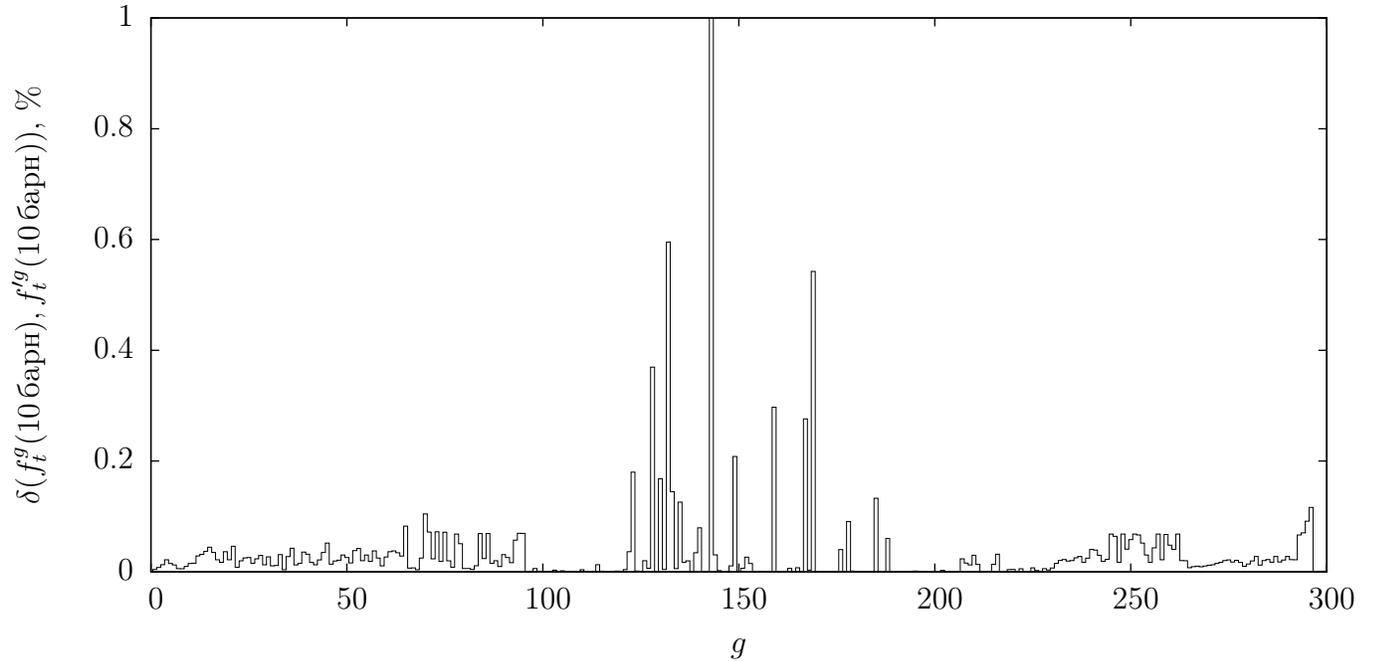


Рисунок 11. — Погрешность восстановления факторов резонансной самоэкранировки для полного сечения в зависимости от номера группы.

Для начала рассмотрим, как восстанавливаются факторы резонансной самоэкранировки при различных энергиях. Поскольку они выражаются через моменты 0,  $-1$  и  $-2$  порядков, то при нулевом сечении разбавления они восстанавливаются с заведомо хорошей точностью ( $\delta(f_x^g(0), f_x'^g(0)) < \varepsilon$  для всех групп). Основная рабочая область по сечениям разбавления в типичных задачах, в которых используются факторы резонансной самоэкранировки  $^{238}\text{U}$ , находится в пределах от 1 до 100 барн. Рассмотрим зависимость  $\delta(f_x^g(\sigma_0), f_x'^g(\sigma_0))$  от номера группы при сечении разбавления 10 барн, представленную для полного сечения на рис. 11, для сечения захвата на рис. 12 и для сечения упругого рассеяния на рис. 13. Видно, что в основном выполняется неравенство  $\delta(f_x(\sigma_0), f_x'(\sigma_0)) < \varepsilon$ . Однако не для всех групп. Так, у полного сечения в 143 группе погрешность равна 2.1%, для сечения захвата в 128 1.4%, в 132 3.2%, в 143 2.6%.

Зависимость относительной погрешности восстановления факторов резонансной самоэкранировки в 128 и 143 группах от сечения разбавления приведена на рис. 14 и 15

## 4.2 Сравнение с CALENDF

Как уже упоминалось, существует французская программа CALENDF, выполняющая функции, аналогичные `subgroups`. Это программа более общего назначения. Помимо расчёта подгрупповых параметров она позволяет проводить более полную обработку ядерных данных вроде их термализации с учётом эффекта Доплера. Однако мы сосредоточимся

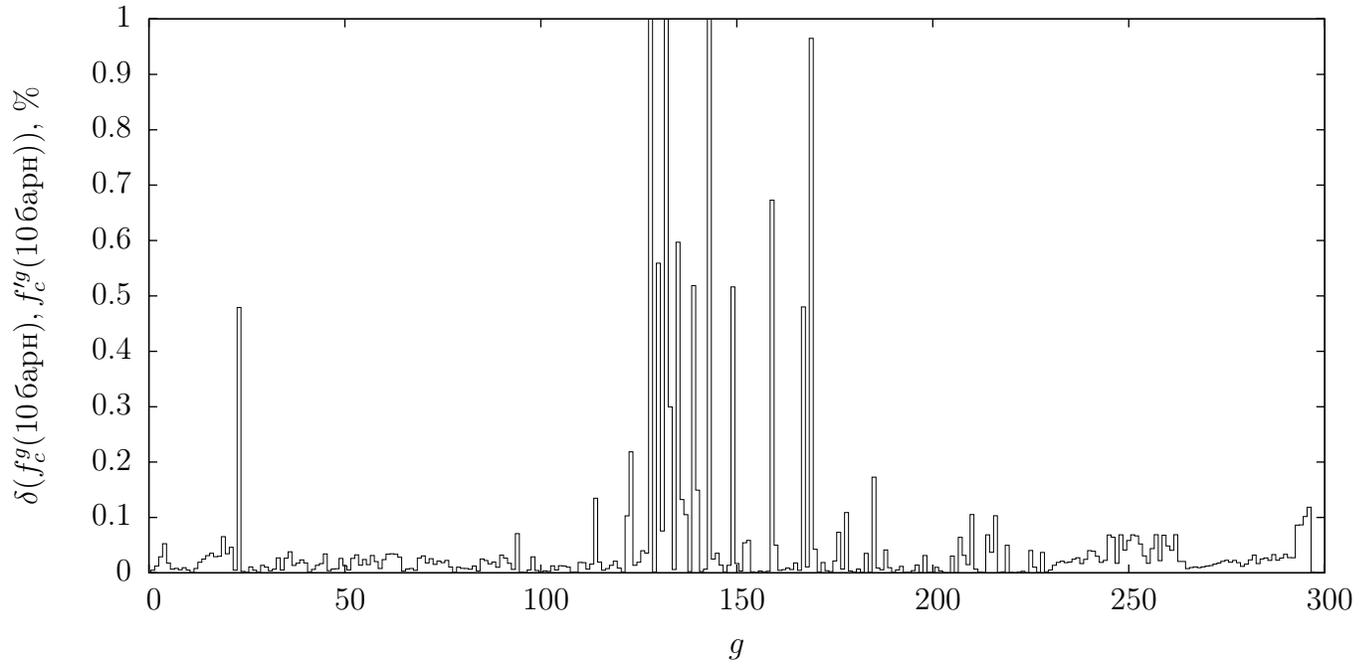


Рисунок 12. — Погрешность восстановления факторов резонансной самоэкранировки для сечения захвата в зависимости от номера группы.

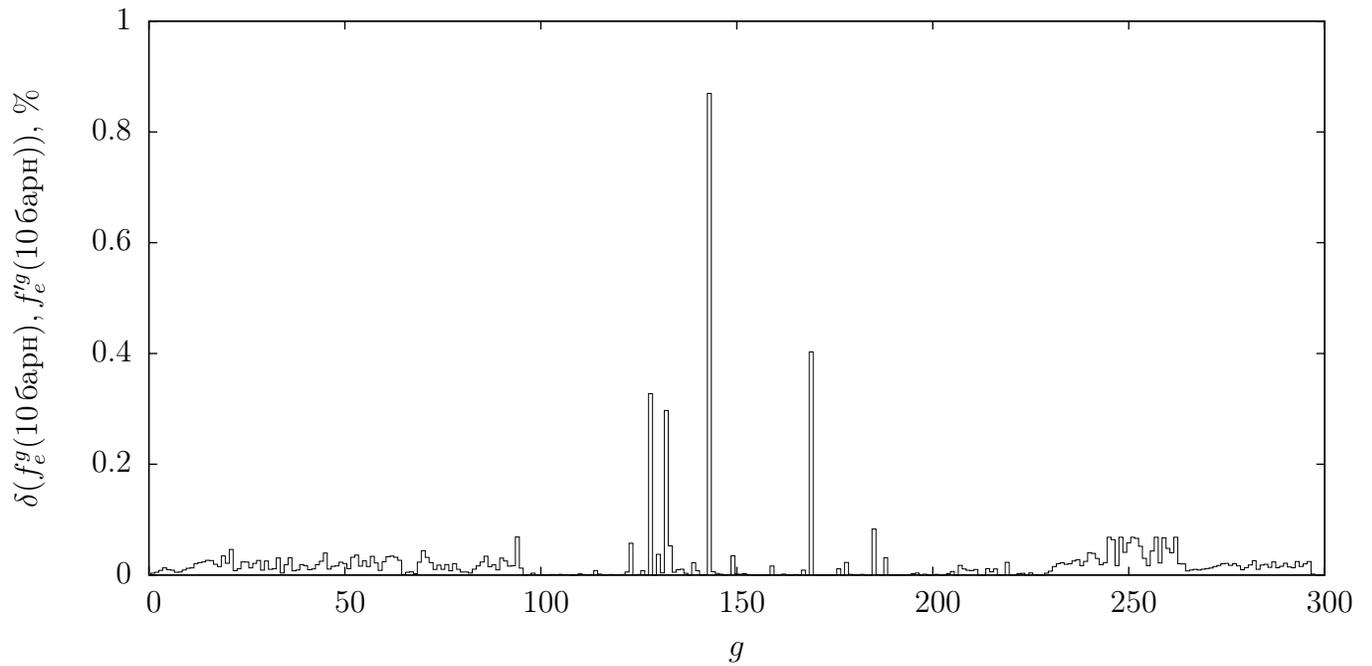


Рисунок 13. — Погрешность восстановления факторов резонансной самоэкранировки для сечения упругого рассеяния в зависимости от номера группы.

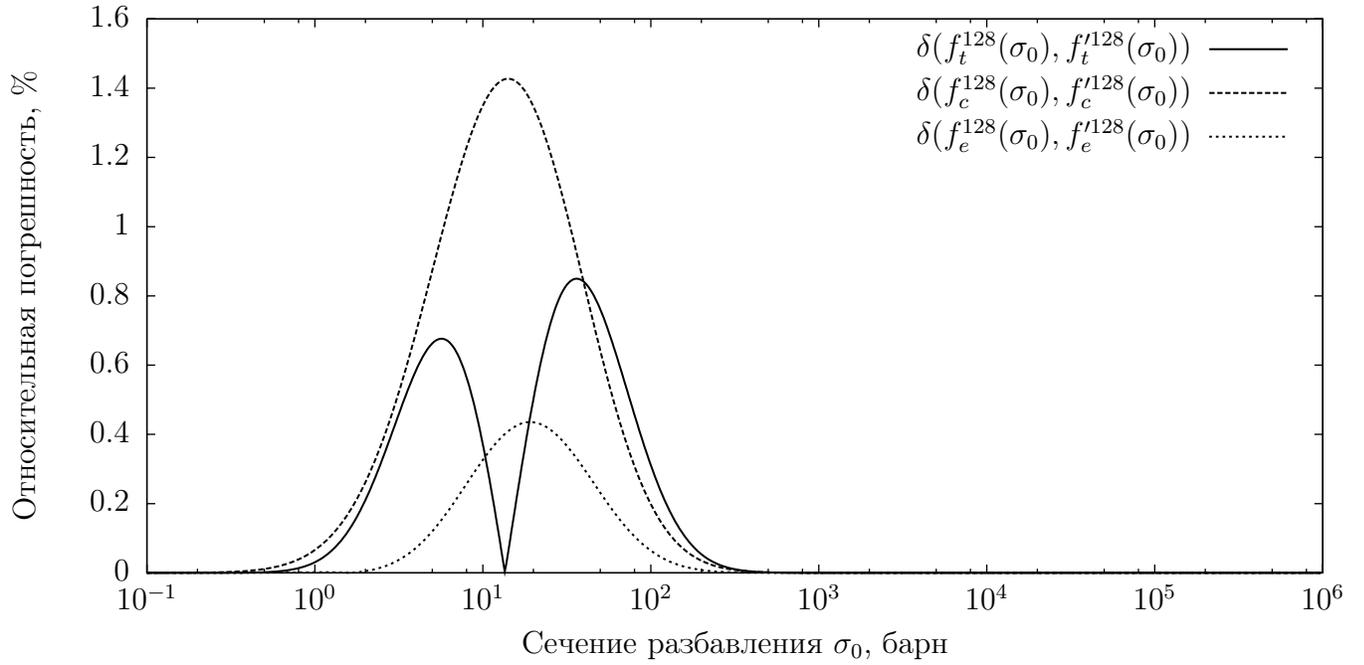


Рисунок 14. — Погрешности восстановления факторов резонансной самоэкранировки в зависимости от сечения разбавления.

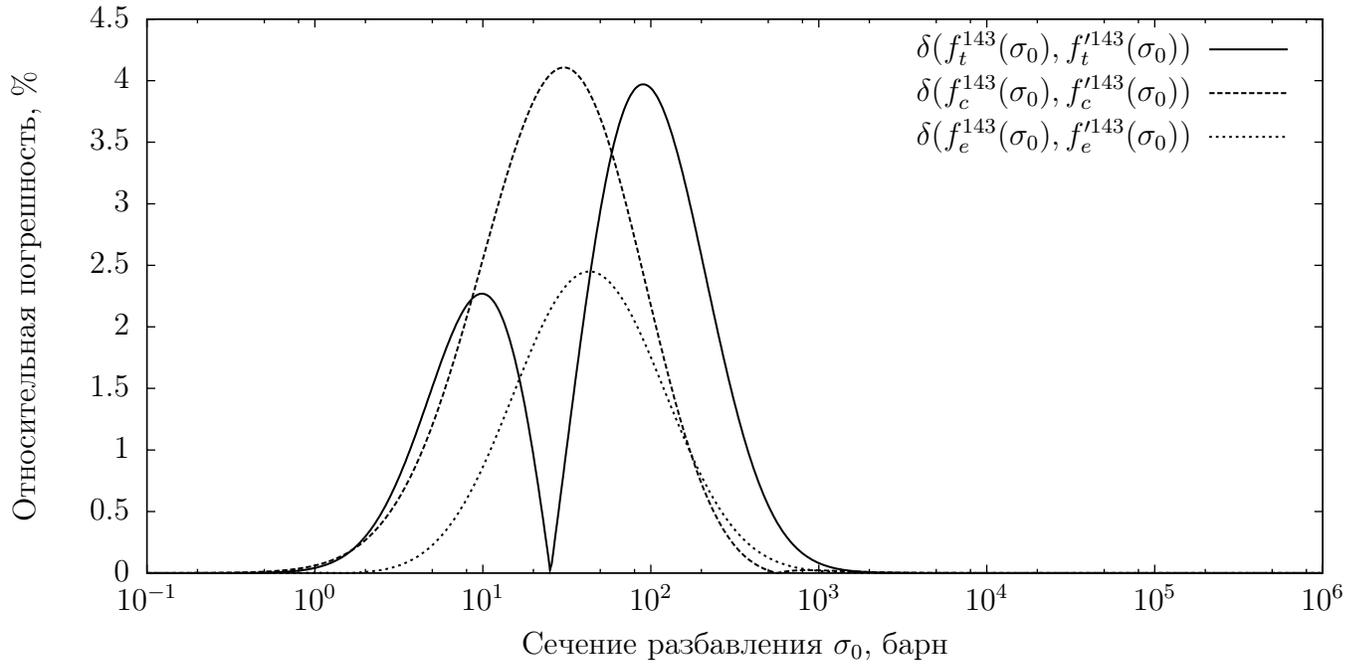


Рисунок 15. — Погрешности восстановления факторов резонансной самоэкранировки в зависимости от сечения разбавления.

на её особенностях, касающихся расчёта подгрупповых параметров.<sup>9</sup> В основе CALENDF лежат те же системы уравнений (38) и (39), что и в основе **subgroups**. Метод получения подгрупповых параметров, соответствующих полному сечению, выбран тот же — описание функции-генератора моментов приближением Паде (43) и вычисление корней полинома (48).

Основные отличия CALENDF от **subgroups** следующие:

1. CALENDF не старается выполнить условие (32), из-за чего в результатах расчётов могут появляться отрицательные подгрупповые параметры.
2. В CALENDF присутствует код, строящий детальную зависимость сечения от энергии в области неразрешённых резонансов, благодаря чему эта программа может получать надёжные подгрупповые параметры и в этой области.
3. При вычислении подгрупповых параметров, соответствующих полному сечению, количество подгрупп  $K$  увеличивается до тех пор, пока не будут восстановлены моменты  $-K$  и  $K + 1$  или пока не будет достигнут заданный максимум. Редко когда нужны моменты высоких порядков (больше 1), поэтому такой алгоритм ведёт к нерациональному увеличению количества подгрупп.

Чтобы сравнить подгрупповые параметры, рассчитанные по программам CALENDF и **subgroups**, по ним, а также с помощью программы NJOY были насчитаны факторы резонансной самоэкранировки  $^{238}\text{U}$ . Параметры расчёта следующие: сечение разбавления привязки  $\sigma_0 = 0$  барн, сечение разбавления задачи  $\sigma'_0 = 1$  барн, погрешность восстановления моментов  $\varepsilon = 1\%$ , восстанавливаемые моменты — с  $-4$  по  $3$  (только для **subgroups**). Зависимость сечения от энергии была взята из библиотеки РОСФОНД, как и в предыдущем примере. В качестве сравниваемых функций выступали  $\delta(f_{\text{NJOY}}, f_{\text{CALENDF}})$  и  $\delta(f_{\text{NJOY}}, f_{\text{subgroups}})$ , где  $\delta(x, y)$  — относительная погрешность величины  $x$  в сравнении с величиной  $y$ , определённая уравнением (41). На рис. 16 и 17 представлены эти функции; на первом — во всей области энергий, на втором — только в области разрешённых резонансов. Видно, что **subgroups** не работает в области неразрешённых резонансов, в отличие от CALENDF. В области же разрешённых резонансов удалось достичь требуемой точности в  $1\%$ . При этом заметное различие в высокоэнергетической части области разрешённых резонансов вызвано, в основном, несовпадением факторов резонансной самоэкранировки, вычисленных по детальной зависимости сечения от энергии и полученных с помощью программы NJOY. Источник несовпадения пока не установлен.

---

<sup>9</sup>Следует заметить, что в распоряжении автора была версия CALENDF-2002. Хотя уже вышла CALENDF-2005, достать её до защиты данной работы не представляется возможным. Согласно описанию CALENDF-2005, доступному в [9], код, рассчитывающий подгрупповые параметры, подвергся изменениям.

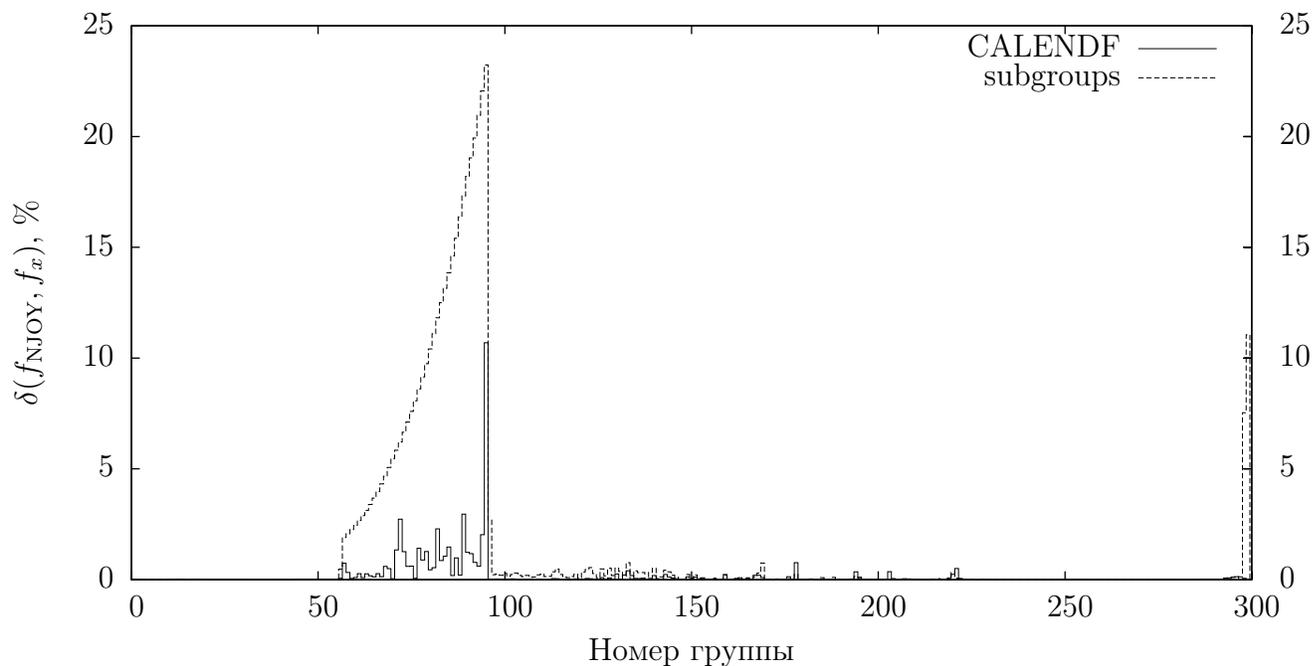


Рисунок 16. — Погрешность восстановления факторов резонансной самоэкранировки программами CALENDAR и subgroups в сравнении с программой NJOY.

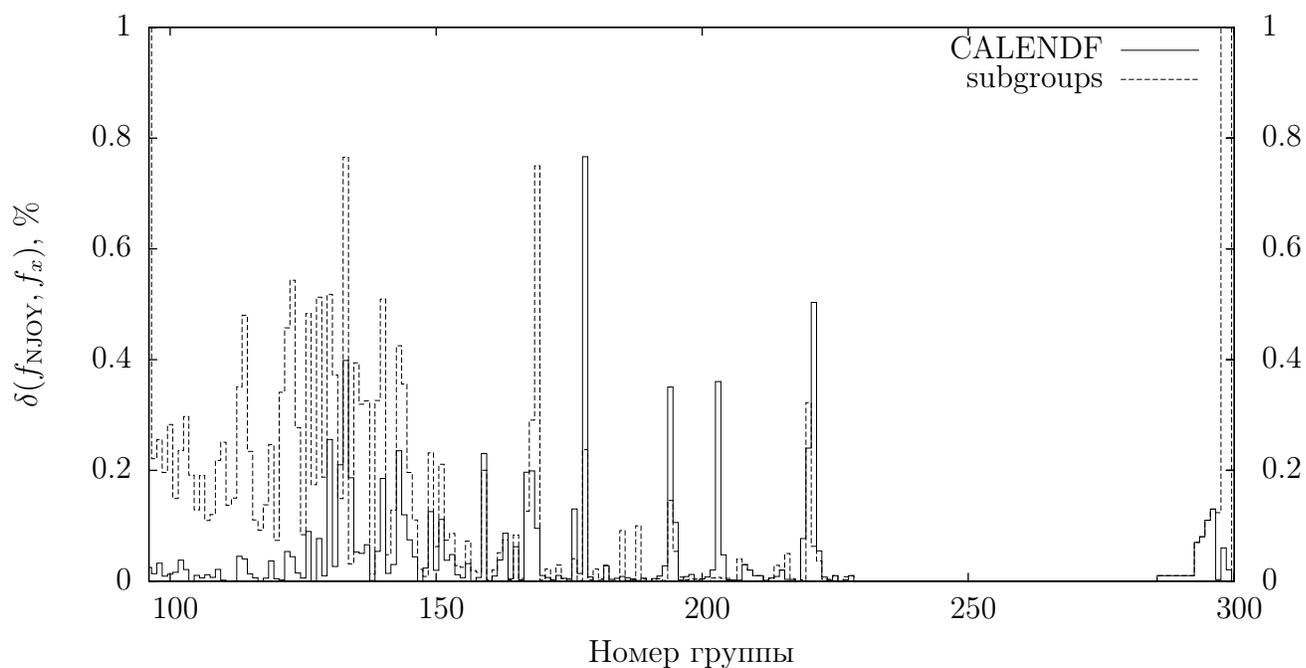


Рисунок 17. — Погрешность восстановления факторов резонансной самоэкранировки программами CALENDAR и subgroups в сравнении с программой NJOY (только область разрешённых резонансов).

### 4.3 «Broomstick experiment»

В 1972 году в Окридже был проведён эксперимент по пропусканию нейтронов в хорошей геометрии, так называемый «broomstick-experiment» [13]. Схема эксперимента, взятая из отчёта, представлена на рис. 18. Экспериментальная установка состояла из исследовательского реактора под названием «Tower Shielding Reactor-II», в защите которого было проделано отверстие. Из этого отверстия свободно выходили нейтроны и, пройдя несколько коллиматоров из различных веществ, попадали на мишень, представляющую собой камеру из пенополистирола. Нейтроны, пролетевшие камеру без взаимодействий, проходили через стоящий за ней коллиматор и регистрировались сцинтилляционным детектором. Для уменьшения фона детектор был окружён свинцовой и водяной защитой. Было проделано три серии измерений: с пустой камерой и с камерой, в которой стоял цилиндр из железа высотой 8 дюймов (20.3 см) и с цилиндром из железа высотой 12 дюймов (30.5 см); оси цилиндров совпадали с направлением движения нейтронов.

Такая геометрия эксперимента позволяет считать, что спектр нейтронов, падающих на детектор, равен

$$\phi(E) = \phi_0(E) \cdot e^{-nt \cdot \sigma(E)}, \quad (58)$$

где  $\phi_0(E)$  — спектр нейтронов до мишени,  $n$  — концентрация ядер железа в мишени,  $t$  — толщина мишени,  $\sigma(E)$  — полное сечение взаимодействия нейтронов с железом (природным).

Поскольку разрешение детектора конечно, то показания детектора можно смоделировать, используя формулу

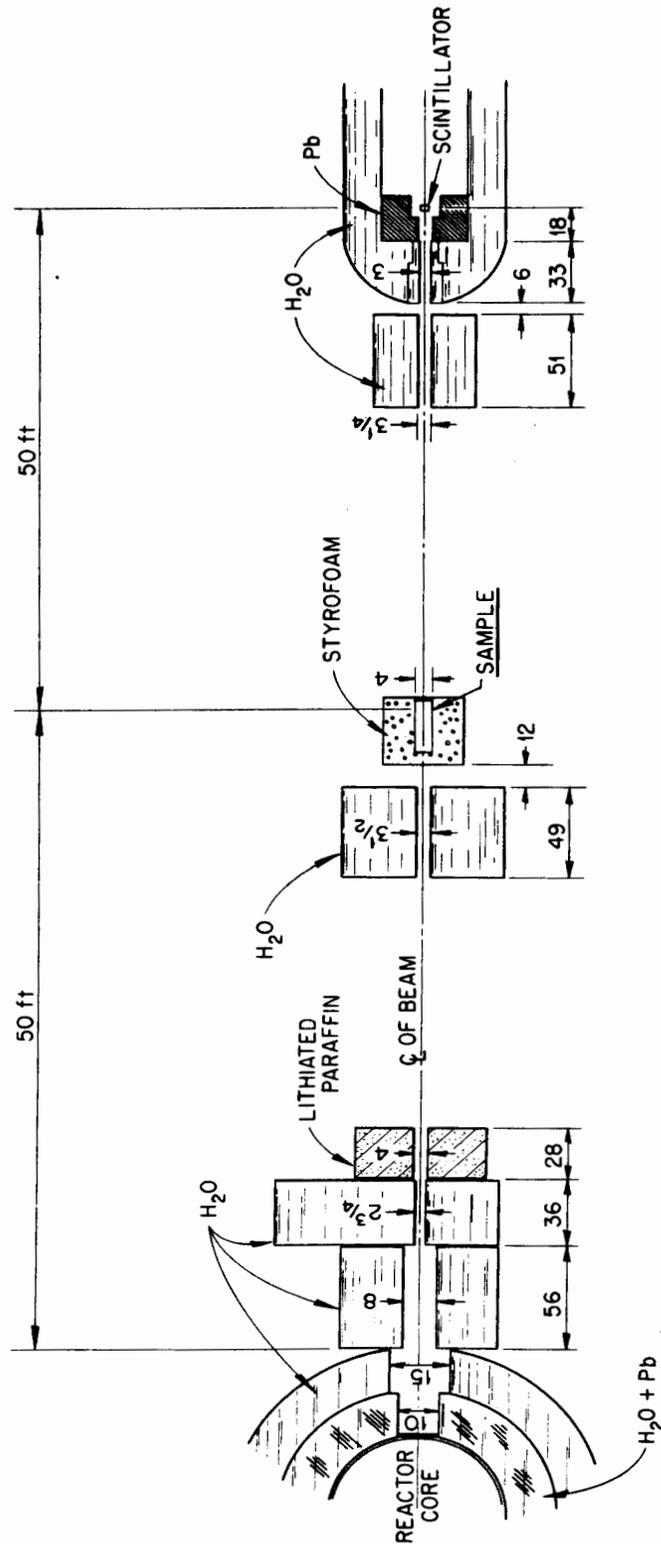
$$\bar{\phi}(E) = \int_0^{\infty} \phi_0(E') \cdot e^{-nt \cdot \sigma(E')} R(E' \rightarrow E) dE', \quad (59)$$

где  $R(E' \rightarrow E)$  — функция разрешения детектора, представленная в [13] среди экспериментальных данных. Функция  $\phi_0(E)$ , вообще говоря, неизвестна, зато известна функция

$$\bar{\phi}_0(E) = \int_0^{\infty} \phi_0(E') R(E' \rightarrow E) dE', \quad (60)$$

представляющая собой показания детектора в отсутствие железного цилиндра. Эта функция изображена на рис. 19. За неимением лучшей оценки экспериментаторы предлагают использовать её в качестве оценки спектра нейтронов до мишени.

Автором настоящей работы была написана программа, берущая интеграл в уравнении (59) как по детальной зависимости сечения от энергии, так и по подгрупповым параметрам. Результаты расчётов спектров представлены на рис. 1 и 2, однако с практической точки зрения интереснее оценка не получающегося спектра, а функции пропускания,



NOT TO SCALE. ALL DIMENSIONS IN INCHES EXCEPT AS NOTED.  
BEAM CENTERLINE ~ 78 INCHES ABOVE CONCRETE PAD.

Рисунок 18. — Схема эксперимента, представленная в [13]

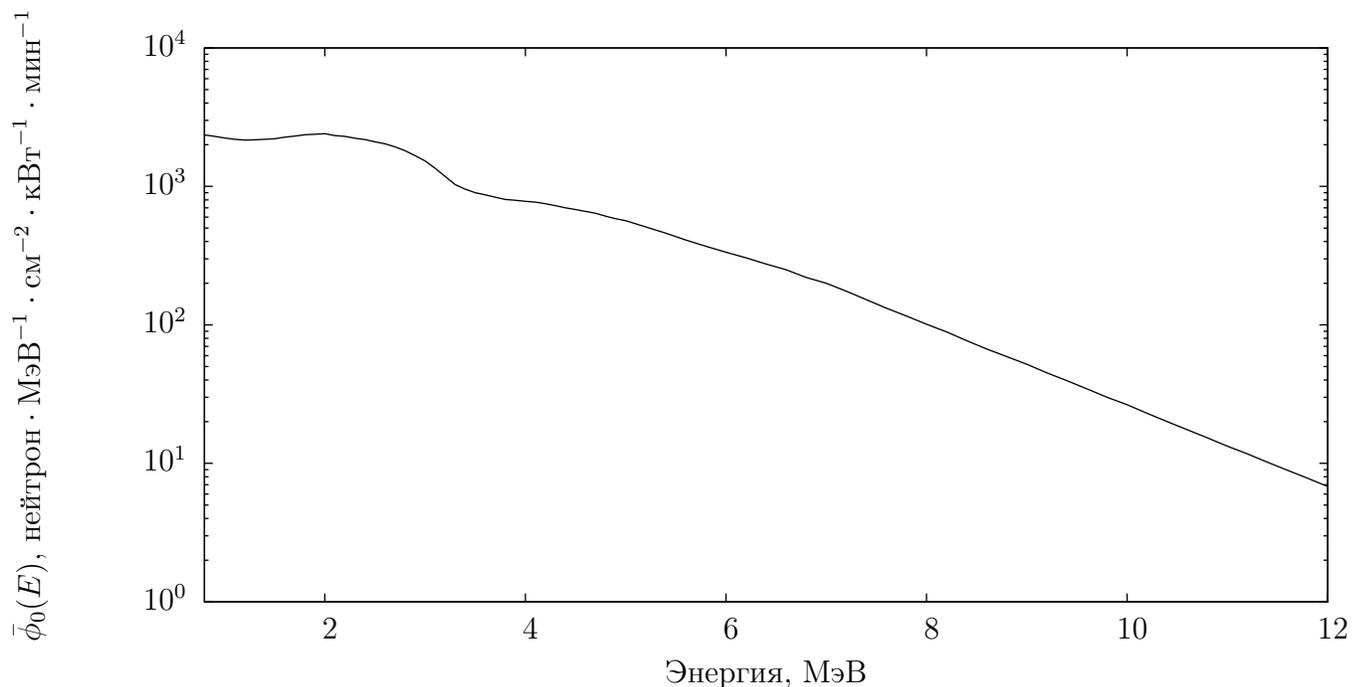


Рисунок 19. — Показания детектора в отсутствие мишени.

которая определяется следующим образом:

$$T(E, t) = e^{-nt \cdot \sigma(E)}. \quad (61)$$

Для данного эксперимента, с его конечным разрешением детектора, можно оценить лишь среднюю функцию пропускания:

$$\bar{T}(E, t) = \frac{\bar{\phi}(E)}{\bar{\phi}_0(E)}. \quad (62)$$

Кроме этого, интересно провести анализ достоверности зависимостей сечения от энергии, предложенных в различных библиотеках оценённых нейтронных данных. Для данной работы были выбраны американская библиотека ENDF/B-VII и западноевропейская JEFF-3.1 и российская РОСФОНД.

Оценку расхождения данных между собой или с экспериментом удобнее проводить, строя не сами функции пропускания, а, выбрав какую-либо функцию за истинную, относительную разницу между остальными функциями и этой, т.е. строя функции  $\delta(f(E), g(E))$ , где  $\delta(x, y)$  определена формулой (41),  $f(E)$  — «истинная» функция,  $g(E)$  — сравниваемая функция.

На рис. 20 приведён расчёт функции пропускания по библиотеке РОСФОНД и по подгрупповым параметрам, полученным на основе этой библиотеки. Для сравнения там же показан групповой расчёт. На рис. 21 приведён расчёт этой же функции по другим биб-

лиотекам. Для оценки расхождения между различными результатами на рис. 22 и рис. 23 представлены относительные разницы между получившимися функциями, где детальный расчёт по библиотеке РОСФОНД принят за истинный. Видно, что подгрупповое приближение даёт результаты, лежащие в пределах неопределённости между ядерными данными из различных источников.

Относительная разница между расчётами и экспериментом показана на рис. 24 и 25.

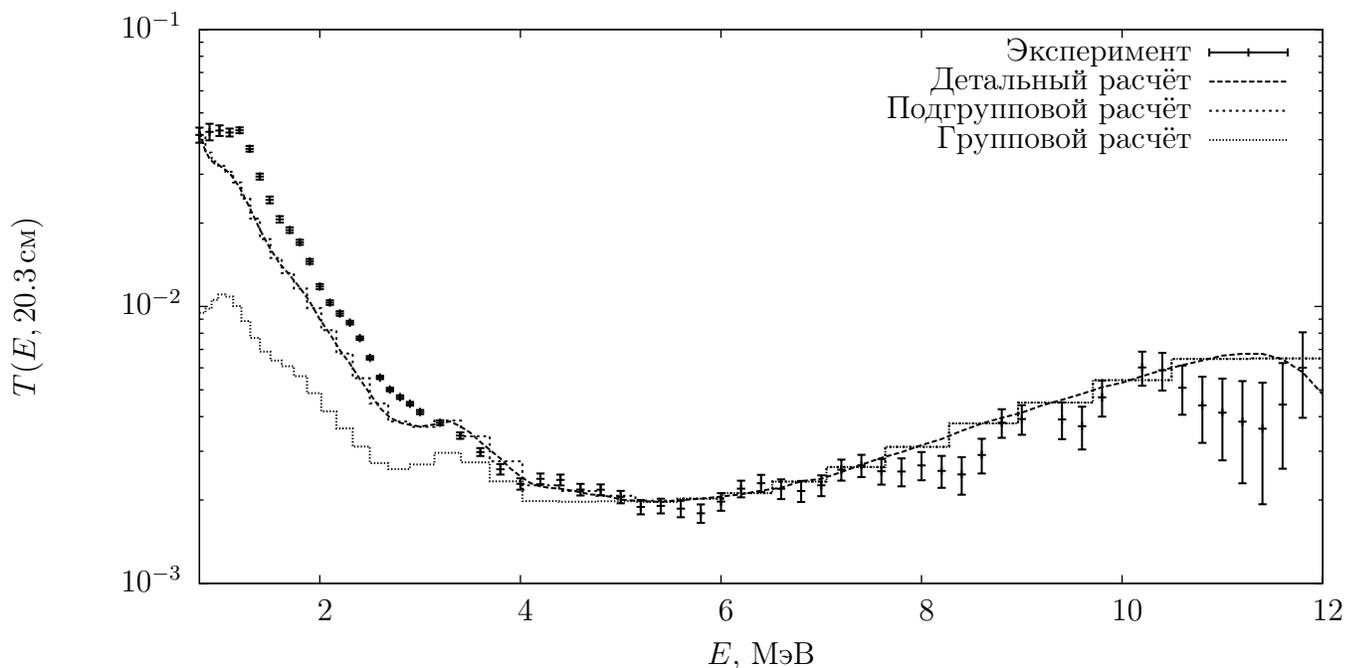


Рисунок 20. — Функции пропускания для толщины 20.3 см, рассчитанные по детальной зависимости и по подгрупповому и групповому приближениям.

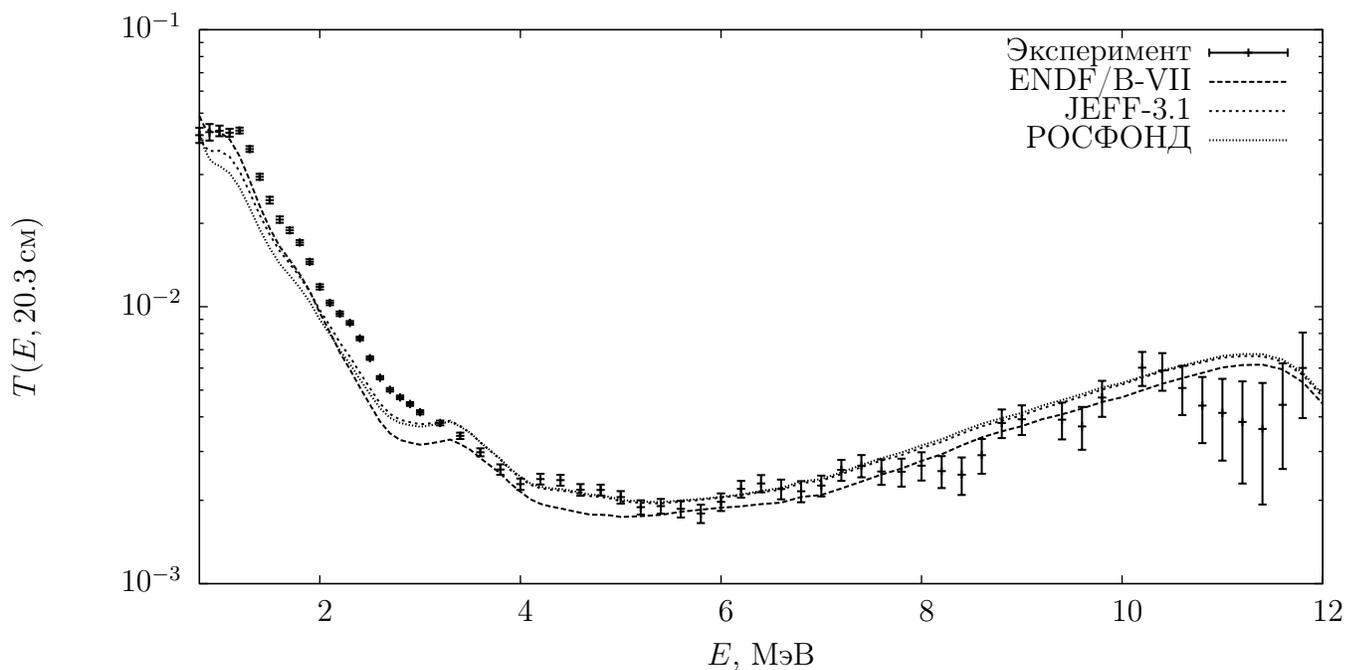


Рисунок 21. — Функции пропускания для толщины 20.3 см, рассчитанные по различным библиотекам.

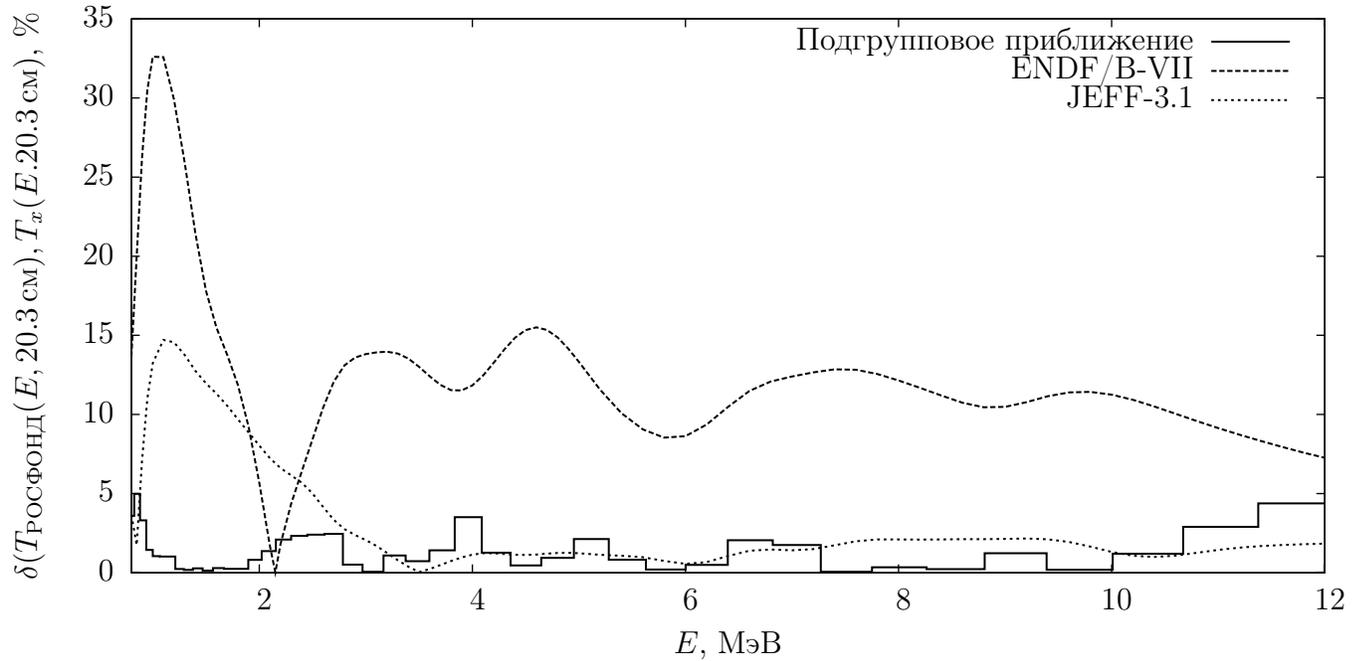


Рисунок 22. — Относительная разница между детальными расчётами по различным библиотекам и расчётом по подгрупповым параметрам для толщины 20.3 см. Детальный расчёт по РОСФОНД принят за истинный.

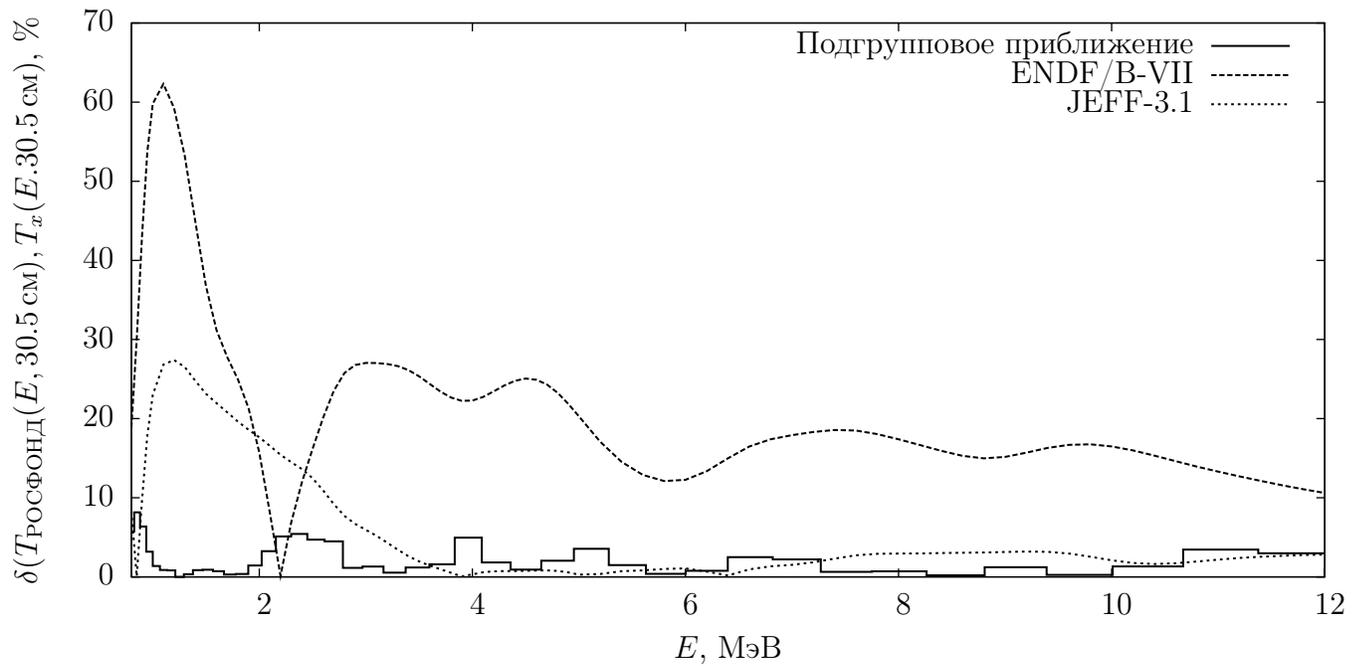


Рисунок 23. — Относительная разница между детальными расчётами по различным библиотекам и расчётом по подгрупповым параметрам для толщины 30.5 см. Детальный расчёт по РОСФОНД принят за истинный.

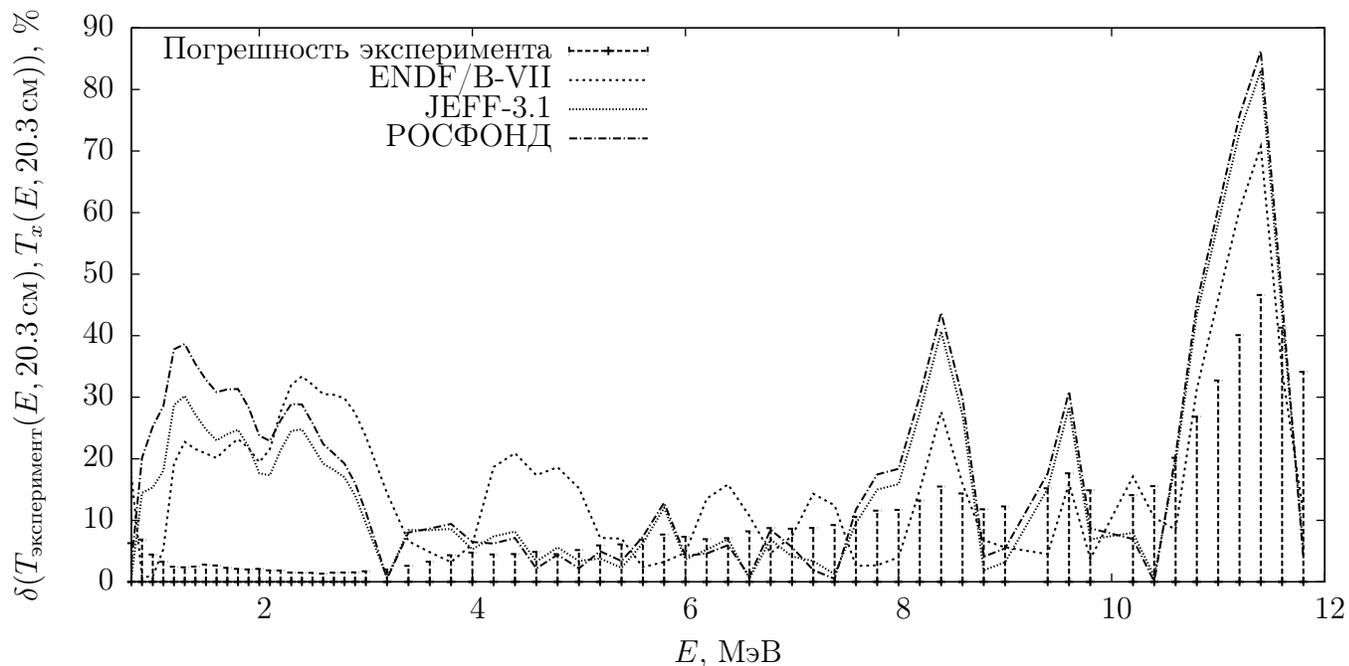


Рисунок 24. — Относительная разница между функциями пропускания, рассчитанными по различным библиотекам при толщине 20.3 см, и экспериментом.

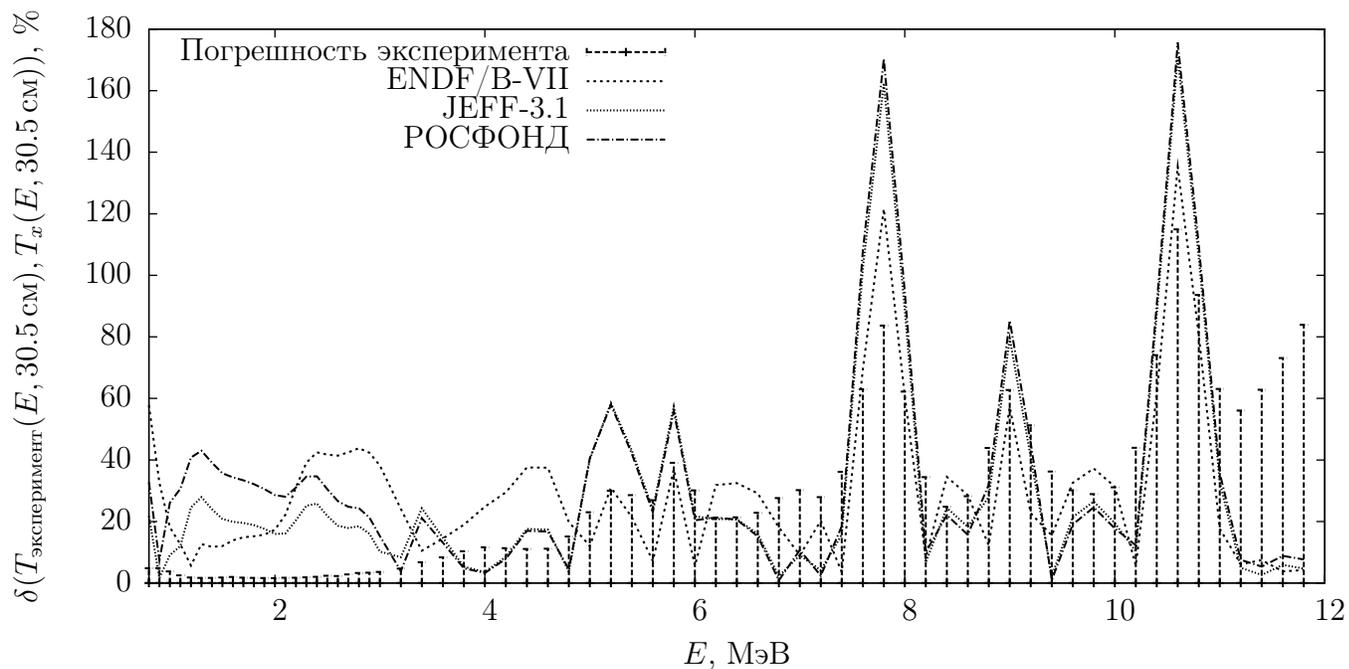


Рисунок 25. — Относительная разница между функциями пропускания, рассчитанными по различным библиотекам при толщине 30.5 см, и экспериментом.

## Заключение

В процессе выполнения дипломной работы были решены следующие задачи:

1. Усовершенствован метод расчёта подгрупповых параметров таким образом, чтобы полученные параметры гарантированно имели свойства, соответствующие их физическому смыслу.
2. Алгоритм расчёта подгрупповых параметров реализован в программе под названием `subgroups`.
3. С помощью программы `subgroups` рассчитаны подгрупповые параметры для следующих материалов:  $^{56}\text{Fe}$ , природного железа,  $^{235}\text{U}$ ,  $^{238}\text{U}$ .
4. Разработаны программы, рассчитывающие как по детальной зависимости, так и по подгрупповым параметрам факторы резонансной самоэкранировки и функции пропускания.
5. Проведена апробация полученных подгрупповых параметров
  - а) путём сравнения факторов резонансной самоэкранировки, рассчитанных по детальной зависимости сечения от энергии, с рассчитанными по подгрупповым параметрам;
  - б) путём сравнения факторов резонансной самоэкранировки, рассчитанных по подгрупповым параметрам от двух разных программ: `subgroups` и `CALENDF`;
  - в) путём анализа эксперимента по пропусканию нейтронов в хорошей геометрии.

В результате полученные подгрупповые параметры могут быть использованы при разработке новой системы групповых констант БНАБ-РФ.

С помощью разработанной программы могут быть получены подгрупповые параметры для всех важных материалов из библиотеки оценённых нейтронных данных РОСФОНД.

## Список использованных источников

- [1] Л.П. Абагян, Н.О. Базазянц, И.И. Бондаренко, М.Н. Николаев. Групповые константы для расчёта ядерных реакторов. — М.:Атомиздат. 1964. — 137 с.
- [2] М.Н. Николаев, Б.Г. Рязанов, М.М. Савоськин, А.М. Цибуля. Многогрупповое приближение в теории переноса нейтонов. — М.:Энергоатомиздат, 1984. — 256 с.
- [3] Д.Ж. Блатт, В. Вайнскопф Теоретическая ядерная физика.— М. 1954.
- [4] БРОНД-2. Библиотека рекомендованных оценённых нейтронных данных. // Вопросы Атомной Науки и Техники, серия Ядерные Константы, вып. 2 и 3 (1991).
- [5] М.Н. Николаев, В.В. Филиппов, Атомная Энергия, 15, с. 493 (1963).
- [6] L.V. Levitt, Nuclear Science Engineering, т. 49, с. 450 (1972).
- [7] D.E. Cullen, Nuclear Science Engineering, т. 55, с. 387 (1974).
- [8] В.В. Сеница. Методы расчёта нейтронных групповых микроконстант в резонансной области энергий: Кандидатская диссертация. Обнинск: ФЭИ, 1981.
- [9] The CALENDF Nuclear Data Processing System,  
<http://www.nea.fr/abs/html/nea-1278.html>
- [10] International Handbook of Evaluated Criticality Safety Benchmark Experiments NEA/NSC/DOC(95)03. September 2007 Edition.
- [11] Система групповых констант БНАБ-93 // Вопросы Атомной Науки и Техники, серия Ядерные Константы, вып. 1, с. 39.
- [12] J.F. Briesmeister, Ed. MCNP — A General Monte-Carlo N-Particle Transport Code, Version 4C. LA-13709-M (2000).
- [13] ORNL-RM-3867, SDT1: «Iron broomstick experiment — an experimental check of neutron total cross-sections», см. также  
[http://www.nea.fr/html/science/shielding/sinbad/SDT1/SDT1\\_A.HTM](http://www.nea.fr/html/science/shielding/sinbad/SDT1/SDT1_A.HTM)
- [14] G.I. Bell, S. Glasstone Nuclear Reactor Theory.— Van Nostrand Reinhold Company (1970).
- [15] А. Вейнберг, Е. Вигнер Физическая теория ядерных реакторов.— М.:ИЛ., 1961 г.
- [16] A. Hébert, M. Coste Computing Model-Based Probability Tables for Self-Shielding Calculations in Lattice Codes // Nuclear Science Engineering, т. 142, с. 245 (2002).
- [17] W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling, B.P. Flannery Numerical Recipes in C.— Cambridge University Press. 1997.

[18] GNU Scientific library v 1.8, <http://www.gnu.org/software/gsl/>

[19] С.А. Бадиков, Е.В. Гай Н.С. Работнов, В.В. Сеница, Применение Паде-аппроксимации в задачах расчёта групповых констант. ФЭИ-1580. Обнинск. 1984.