

## Справочник по ядерным данным для расчёта реакторов и защиты

### Аннотация

Справочник ориентирован в первую очередь на студентов, изучающих физику ядерных реакторов и радиационной защиты, а также на молодых специалистов, работающих или стажирующихся в этих областях. Он может представлять интерес и для более опытных инженеров и научных работников.

Настоящий справочник отличается от более ранних изданий тем, что содержащиеся в нём ядерные константы (т.е. ядерные данные в форме, ориентированной на их использование в практических расчётах) позволяют решать весь спектр ядерно-физических задач атомной энергетики – рассчитывать нейтронно-физические характеристики реакторов разных спектральных классов, работающих в стационарном режиме; оценивать параметры реакторной кинетики; определять нуклидный состав топлива при перегрузках (в том числе в условиях замкнутого топливного цикла); рассчитывать радиационную защиту реакторов; оценивать возможные радиоактивные выбросы в окружающую среду в результате аварий; оценивать ядерную и радиационную безопасность на предприятиях по переработке и рефабрикации отработанного ядерного топлива и др. Приводимые в справочнике константы пригодны для использования в программах, реализующих все современные методы решения уравнения переноса излучений.

Поскольку справочник ориентирован на молодое поколение специалистов-реакторщиков, стоит пояснить, зачем изучать всё многообразие используемых при разработке АЭС ядерных данных в условиях, когда все действующие энергетические реакторы снабжены надёжными системами контроля за всеми их характеристиками, включая и нейтронно-физические и радиационные характеристики (эти системы контроля – во всяком случае, их константное обеспечение - было разработано ещё в прошлом веке).

Первоочередные задачи, стоящие перед разработчиками реакторов нового типа (быстрых реакторов со свинцовым теплоносителем, обладающих естественной ядерной безопасностью, натриевых быстрых реакторов, ориентированных на использование в двухкомпонентной атомной энергетикой, реакторов ВВЭР со спектральным регулированием и пр.) носят технологический и экономический характер. Используемые разработчиками ядерные данные (разработанные на грани веков) обеспечивают возможность безопасного ввода их в эксплуатацию, а если опыт эксплуатации потребует уточнения этих данных, то это и будет сделано на основе этого самого опыта.

Всё это так, однако, чтобы уточнить ядерные данные на основе опыта эксплуатации реакторов нового типа, необходимо знать какие данные требуют уточнения в первую очередь, как осуществить это уточнение, а для этого требуются достаточно квалифицированные специалисты. Дополнительные проблемы в атомной энергетике возникнут в 30-е годы в связи с запланированным выводом из эксплуатации реакторов РБМК (опыт такого вывода очень скуден, а тот, что имеется, свидетельствует о том, что обеспечение радиационной безопасности при этом выводе дело весьма не простое). Надёжного ядерно-физического обеспечения потребует и обеспечение ядерной и радиационной безопасности на предприятиях замыкания ядерного топливного цикла, в частности переработки огромных количеств накопленного отработанного ядерного топлива. Все эти проблемы лягут на плечи молодого поколения, которому, чтобы справиться с ними, необходимо обладать определённой грамотностью в области ядерных данных и обращения с ними.

Справочник содержит четыре раздела

1. **Ядерные данные для расчёта реакторов и защиты.** Здесь разъясняется, какие ядерные данные требуются для расчёта полей излучения и функционалов этих полей – характеристик реакторов и защиты.

2. **КОЛИБРИ – библиотека справочных данных для расчёта реакторов и защиты,** содержащая нейтронные и фотонные данные для всех стабильных и долгоживущих изотопов и для многоизотопных элементов в формах, позволяющих использовать их в расчётах, реализующих различные расчётные методики и приближения, а также характеристики радиоактивного распада атомных ядер.

3. **Замечания об использовании констант КОЛИБРИ,** содержащая некоторые рекомендации по использованию приводимых в справочнике данных

4. **Библиотека РОСФОНД** - российская национальная библиотека оцененных нейтронных данных, положенная в основу приводимых в справочнике констант. Хотя форма представления нейтронных данных в этой библиотеке (в международном формате ENDF/B-6) слишком сложна для непосредственного использования в расчётах, приводимые текстовые обоснования выбора оцененных данных, сопровождаемые графиками с представлением экспериментальных данных и результатов независимых зарубежных оценок позволят желающим ознакомиться с состоянием дел в области ядерных данных для расчёта реакторов.

### 1. Ядерные данные для расчёта реакторов и защиты

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

$$J = \int_{V_j} d\vec{r} \int_{4\pi} d\Omega \int_0^\infty dE \int_{t_1} dt Q_j(\vec{r}, \Omega, E, t) \Phi(\vec{r}, \Omega, E, t), \quad (1)$$

Функционалом  $J$  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,  $\text{Pu}^{239}$  в топливе или  $\text{C}^{14}$  в замедлителе РБМК); дозы нейтронного и гамма-излучений в определённом месте за защитой и т.д. и т.п. Вычисление функций  $Q_j$  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 потока рассматриваемого излучения.

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

$$\Phi(\vec{r}, \Omega, E, t) = \int_0^{X_{\max}(-\Omega)} P(E, \vec{r}, \vec{r} - \Omega x) * S(\vec{r} - \Omega x, \Omega, E, t - a/\sqrt{E}) dx \quad (2)$$

Здесь  $S(\vec{r} - \Omega x, \Omega, E, T - a/\sqrt{E})$  - функция источника (или просто – источник), т.е. число нейтронов или  $\gamma$ -квантов с энергией  $E$ , ежесекундно испускаемых в направлении  $\Omega$ , из единицы объёма в точке  $\vec{r} - \Omega x$ , во время  $t - x * a/\sqrt{E}$ . Здесь  $a \approx 13.9$  – коэффициент, позволяющий выразить скорость нейтрона с энергией  $E$  МэВ в метрах/секундах, так что  $x * a/\sqrt{E}$  - это время пролёта нейтрона от источника до точки наблюдения  $\vec{r}$ .  $X_{\max}(-\Omega)$  - максимальное расстояние до точки источника, испускающей нейтроны рассматриваемой энергии  $E$  в интересующем нас направлении  $\Omega$ . 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. Далее, если не будет сделано специальных оговорок, будем рассматривать уравнение переноса нейтронов.

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

$P_k(E) = \exp[-l_k * \sum_i \rho_{i,k} \sigma_i(E)]$ . Здесь  $l_k$  - длина нейтронной траектории, лежащей в зоне  $k$ ,  $\rho_{i,k}$  - концентрация ядер нуклида  $i$  в зоне  $k$ ,  $\sigma_{t,i}(E)$  - площадь поперечного сечения ядра нуклида<sup>1</sup>  $i$ , такая, какой она «видится» нейтрону с энергией  $E$ .  $\rho_{i,k}$  - плотность ядер  $i$ -го нуклида;  $\rho_{i,k} = 6,02214082 * 10^{23} c_{i,k} / A_i$ , где  $c_{i,k}$  - масса нуклида  $i$  в единице объёма зоны  $k$ ,  $A_i$  - атомный вес этого нуклида (в единицах 1/12 массы атома углерода);  $A_w = 0,602214082 * 10^{24}$  - число Авогадро. Площадь поперечного сечения ядер принято измерять в барнах (1 барн =  $10^{-24}$  см<sup>2</sup>), поэтому если  $c_{i,k}$  - масса нуклида в см<sup>3</sup>, то при вычислении  $\rho_{i,k}$  следует принять равным  $A_w = 0,602214082$ .

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

Источник излучения, фигурирующий в формуле (1), состоит из двух или даже из трёх составляющих. Первая составляющая - это внешний источник  $S_0(\vec{r}', \vec{\Omega}, E, t')$ , введенный в рассчитываемый объект. При расчёте полей гамма-излучения это может быть зона, содержащая радионуклид (например, радий), это может быть поток гамма-излучения из отражателя реактора в его радиационную защиту. 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.

Другой составляющей является рассеяние нейтронов с энергией  $E' \neq E$ , 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:

$$S_s(\vec{r}', \vec{\Omega}, E, t) = \int dE' \int_{4\pi} d\Omega' \Phi(\vec{r}', \vec{\Omega}', E', t) * \sum_i \rho_i(\vec{r}') \sigma_{t,i}(E') \sum_m p_{m,i}(E') q_{m,i}(E', E, \vec{\Omega}, \vec{\Omega}') y^m \quad (3)$$

Здесь  $p_{m,i}(E')$  - вероятность того, что при столкновении нейтрона с энергией  $E'$  с ядром нуклида  $i$  произойдёт рассеяние типа  $m$ .  $m=0$  - упругое рассеяние, при котором нейтрон передаёт ядру часть своей кинетической энергии, а сам отскакивает под углом, косинус которого равен  $\mu = \vec{\Omega} \vec{\Omega}'$ . При  $m=1, 2, \dots, M$  имеется в виду рассеяние, при котором столкнувшийся нейтрон тратит часть своей энергии на возбуждение ядра (неупругое рассеяние) и, отскакивая, оставляет ядро в  $m$ -м возбуждённом состоянии.  $M$  - число известных дискретных возбуждённых состояний ядра-мишени.  $m=M+1$  соответствует возбуждению всех остальных - неизвестных - уровней.  $m=M+2$  соответствует реакции  $(n, 2n)$ , при которой ядро-мишень возбуждается столь сильно, что снимает часть энергии возбуждения испуская ещё один нейтрон. При  $m=M+3$  испускается ещё два нейтрона.  $y_m$  - число нейтронов, образовавшихся при столкновении: при упругом и неупругом рассеянии  $y_m=1$ ; при  $m>M$   $y_m=m-M$ .

<sup>1</sup> Под нуклидом мы будем понимать или изотоп определённого элемента, либо естественную смесь стабильных изотопов - в зависимости от того, с каким объектом произошло столкновение нейтрона.

$q_{m,i}(E', E, \Omega\Omega')$  – энерго-угловое распределение рассеянных нейтронов, т.е. вероятность того, что в результате рассеяния нейтрон приобретёт энергию  $E$  и при этом рассеется на угол, косинус которого равен  $\mu = \Omega\Omega'$ . При упругом и неупругом рассеянии с возбуждением дискретного уровня между энергией и углом рассеяния существует однозначная связь, обусловленная законами сохранения энергии и импульса и определяемая соответствующей формулой. Неупругое рассеяние и, тем более, реакции  $(n,2n)$  возможны, только если энергия сталкивающегося нейтрона достаточно высока чтобы возбудить ядро до необходимой степени (пороговые реакции).

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  $\sim 1$  эВ) возможно только 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  $q_{m,i}(E', E, \Omega\Omega')$ , устанавливающий связь между всеми тремя переменными  $E, E'$  и  $\mu$ . Этот закон зависит от того в каком состоянии (газообразном, жидком, каким-либо кристаллическом) находится вещество, содержащее ядра, рассеяние на которых рассматривается. Таким образом, в тепловой области энергий интегрирование в формуле (3) должно выполняться начиная от 0.

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  $\rho_i$  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.

Вторая составляющая источника и превращает формулу (2) в уравнение. Формула (3) получена в предположении, что за время пролёта нейтроном расстояния от точки  $r'$  до точки  $r$  поток нейтронов не успеваеет измениться и потому положено  $t'=t$ . Короткое время пролёта обусловлено высокой скоростью движения нейтронов: даже при средней энергии теплового движения, равной 0.035 эВ нейтрон движется со скоростью 2200 м/сек. Таким образом, за время свободного пролёта поток нейтронов не успеваеет измениться (если не рассматривается ядерный взрыв).

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

$$S(r, E) = \int_{4\pi} \int_{E'} \rho(r') \sigma_{s,i}(E', E) \chi_i(E', E) v_i(E') / 4\pi \quad (4)$$

Здесь  $\sigma_{s,i}(E') = \sigma_{t,i}(E') * p_{f,i}(E')$  - сечение деления ( $p_{f,i}(E')$  - вероятность вызвать деление при столкновении нейтрона с энергией  $E'$  с ядром  $i$ ).  $v_i(E')$  - среднее число вторичных нейтронов, испускаемых при делении;  $\chi_i(E', E)$  - спектр этих нейтронов. Важны два отличия источника нейтронов деления от источника рассеянных нейтронов. Первое состоит в том, что число вторичных нейтронов  $v_i(E')$  значительно превышает единицу: для основных топливных материалов оно равно, примерно 2,5 – 3 нейтрона на деление. Второе состоит в том, что нейтроны, испускаемые при делении, могут иметь энергию, превышающую энергию нейтрона, вызвавшего деление.

Если в рассчитываемом объекте делящихся ядер нет или их концентрация достаточно мала, нейтроны в нём могут появиться только благодаря внешнему источнику. При достаточно высокой концентрации делящихся ядер, нейтроны, испускаемые при делении, вызывают новые деления; при этом испускаются нейтроны деления следующего поколения и т.д., т.е. возникает цепная реакция делений, которая в атомной бомбе прекращается лишь тогда, когда зона, содержащая делящийся нуклид разлетится от внезапного нагрева за счёт выделяющейся при

делении энергии (~ 200 МэВ). В ядерных реакторах поток нейтронов, удаётся поддерживать на постоянном уровне, благодаря так называемым запаздывающим нейтронам деления. Дело в том, что часть нейтронов испускается не в момент деления ядра на две осколка, а несколько позже в процессе радиоактивного распада некоторых из образующихся осколков. Отношение числа нейтронов к числу протонов в осколках деления почти таково же, каким оно было в разделившемся ядре. Например, при делении  $U^{236}$ , образовавшегося от поглощения нейтрона  $U^{235}$  среднее отношение числа нейтронов к числу протонов равно 1.565. Число протонов  $Z$  в каждом из осколков в среднем вдвое меньше, чем у урана, т.е. равно примерно 30 или 50 (осколки при делении образуются не одинаковыми). Стабильные ядра с таким значением  $Z$  имеют отношения числа нейтронов к числу протонов порядка 1.3 – 1.4, т.е. осколки представляют собой ядра, сильно перегруженные нейтронами. Основным способом избавиться от этой перегрузки является бета-распад, т.е. превращение нейтрона в протон с испусканием электрона. Образующийся при делении осколок испытывает целую цепочку бета-распадов до тех пор, пока не превратится в стабильное ядро. Однако изредка в результате очередного бета-распада образуется ядро столь возбуждённое, что предпочитает избавиться от лишнего нейтрона путём его испускания, а не превращения в протон. Примером может служить распад  $Br^{87}$ , который вместо нормального бета-распада в основное состояние  $Kr^{87}$ , порой (с вероятностью 2,5%) распадается на стабильный  $Kr^{86}$  и нейтрон. Период полураспада  $Br^{87}$  составляет 55,7 секунды; таким образом, нейтрон, образующийся вслед за его распадом, испускается почти на минуту позже акта деления, при котором образовался осколок с  $A=87$ .  $Br^{87}$  называют предшественником испускания запаздывающих нейтронов. Среди всех продуктов деления таких предшественников насчитывают не один десяток, но вероятности образования каждого из них очень мала: доля запаздывающих нейтронов составляет доли процента (для  $U^{235}$  – 0,66%; для  $Pu^{239}$  – 0,23%). Предшественников запаздывающих нейтронов разбивают на 6 или на 8 групп, каждая из которых характеризуется неким средним периодом полураспада. При 6-групповом разбиении периоды полураспада приходится принимать зависящими от делящегося ядра. При 8-групповом разбиении удаётся описывать временную зависимость запаздывания с помощью групп со стандартными периодами; от делящегося ядра зависят только выходы групп. При описании реакторов со сложным составом топлива это много удобнее. Периоды полураспада при 8-групповом описании варьируются от 55.6 сек. до 0.195 сек. Для учёта запаздывающих нейтронов источник нейтронов деления (3) делят на две части – источник мгновенных нейтронов  $S^{мгн}$  и источник запаздывающих  $S^{зан}$ :

$$S^{мгн}(r', \Omega, E, t) = \int dE' \int_{4\pi} d\Omega' \Phi(r', \Omega', E', t) * \sum_{i=1}^8 \rho_i(r') \sigma_{f,i}(E') \chi_i(E, E') v_i(E') [1 - \beta_i(E')] / 4\pi \quad (5)$$

$$S_f(r', \Omega, E, t) = \int dE' \int_{4\pi} d\Omega' \int dt' \Phi(r', \Omega', E', t') * \sum_{k=1}^8 \rho_i(r') \sigma_{f,i}(E') \chi_k^{зан}(E) v_i(E) \beta_{i,k}(E) e^{-\lambda_k(t-t')} / 4\pi \quad (6)$$

Интегрирование по  $t'$  производится по интервалу времени, предшествующему времени  $t$  длительностью несколько минут. В формуле (6)  $\lambda_k$  - постоянная распада  $k$ -й группы предшественников ( $\ln 2$ , делённый на период полураспада);  $\chi_k^{зан}(E)$  - спектр  $k$ -й группы запаздывающих нейтронов.

Если рассчитываемый объект содержит делящееся вещество, в нём нейтронный поток, генерируемый внешним источником, порождает источник нейтронов деления, интенсивность которого может существенно превышать интенсивность внешнего источника. Именно такая ситуация имеет место в ядерных реакторах.

При пуске реактора сначала собирается конструкция, в которой нейтронный поток  $\Phi_0(\vec{r}_0, \Omega, E)$  обусловлен главным образом внешним источником. Этот поток в определённом месте  $\vec{r}_0$  регистрируется прибором, обладающим чувствительностью к нейтронному потоку  $\varepsilon(E, \Omega)$ . Показание прибора фиксируется:  $Q_0 = \int dE \int_{4\pi} d\Omega \varepsilon(E) \Phi_0(\vec{r}_0, \Omega, E)$ . После этого

конструкция реактора слегка меняется – так, чтобы размножение нейтронов внешнего источника за счёт вызываемых ими делений возросло, но реактор, по прежнему сохранял достаточно глубокую подкритичность, т.е. преобладание внешнего источника над источником деления. Показание прибора в этой конфигурации  $Q_1$  будет превышать предыдущее. Отношение  $Q_1/Q_0$  называют умножением. На следующих нескольких шагах конструкция реактора продолжает осторожно меняться, сохраняя реактор подкритичным. В течение этого процесса строится график зависимости обратного умножения  $Q_0/Q_n$  от номера шага  $n$ . Экстраполяция этой зависимости к нулю позволяет определить конфигурацию, при которой умножение станет бесконечным, т.е. реактор станет критическим. Перед тем, как критичность будет достигнута, исследуется, как влияет на обратное умножение плавное перемещение органа регулирования. Далее реактор выводится в состояние, при котором обратное умножение становится меньшим, чем контролируемое органом регулирования, после чего критичность достигается путём плавного перемещения органа регулирования. При достижении критичности поток нейтронов в реакторе начинает постепенно увеличиваться за счёт размножения запаздывающих нейтронов, предшественники которых накопились в подкритическом состоянии. При этом, естественно, возрастает и скорость накопления предшественников, так что рост умножения происходит экспоненциально, но не слишком быстро, так что по достижении желаемого уровня мощности (точнее – желаемого показания регистрирующего поток прибора) с помощью перемещения органа регулирования рост потока можно прекратить, достигнув тем самым строго критического состояния. Если критический реактор выведен на достаточно высокий уровень нейтронного потока, роль внешнего источника становится пренебрежимо малой по сравнению с ролью источника деления. При расчёте такого реактора им можно (и нужно) просто пренебречь и уравнение переноса (2) становится однородным. Однородное уравнение имеет простое

решение  $\Phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t) = 0$ . Для нахождения ненулевого решения однородного уравнения используется итерационная процедура, подобная процедуре вывода реактора в критическое состояние. Сначала рассчитывается нейтронный поток в заведомо подкритическом реакторе с заданным источником. Далее с использованием этого потока рассчитывается источник нейтронов деления. Затем рассчитывается реактор, в котором найденный источник деления рассматривается как внешний (размножением нейтронов в актах деления при этом пренебрегается). Полученный в результате источник нейтронов деления, рождённых в рассчитанном первом поколении, используется как источник нейтронов второго поколения. При этом рассчитывается эффективный коэффициент размножения нейтронов деления в первом поколении, равный отношению интенсивности источника нейтронов деления второго поколения к интенсивности источника нейтронов деления первого поколения,  $k_{эфф}$ . Этот коэффициент будет, естественно, ниже единицы. После этого в рассчитываемую конструкцию реактора вносятся изменения, ведущие к повышению коэффициента размножения (увеличение объёма зоны, содержащей делящийся материал (активной зоны), извлечение или уменьшение плотности материала, поглощающего нейтроны, повышение отражающей способности конструкций, окружающих активную зону и т.п.). Рассчитывается коэффициент размножения в реакторе, приближенном к критичности. Поскольку внесённое в конструкцию изменение меняет пространственное распределение актов деления, что сказывается на коэффициенте размножения. найденный источник нейтронов надо ещё хотя бы раз использовать в качестве внешнего источника чтобы получить правильное значение коэффициента размножения в измененной конфигурации. Так шаг за шагом находится критическая конфигурация, в которой источник деления воспроизводит себя с достаточной точностью ( $k_{эфф}=1$ ). В найденной критической конфигурации целесообразно произвести расчёт, в котором из найденного пространственного распределения делений испускаются только запаздывающие нейтроны. Это позволяет оценить тот вклад в новый источник деления, который вносится этими нейтронами. Этот вклад называется эффективной долей запаздывающих нейтронов и обозначается  $\beta_{эфф}$ . Если внесённое в критический реактор изменение повысит  $k_{эфф}$  больше, чем на  $\beta_{эфф}$ , для развития цепной реакции в нём достаточно будет одних лишь мгновенно испускаемых нейтронов деления

и реактор взорвётся, чего, разумеется, допускать нельзя. Для этого необходимо знать насколько изменяется  $k_{эфф}$  при внесении в реактор того или иного изменения (перемещение органа регулирования, изменения температуры и пр.). Найденное в расчёте изменение называют реактивностью. Вычисление реактивностей является наиболее частой потребностью реакторных расчётов.

С расчётом поля гамма-излучения дело обстоит проще, чем с учётом нейтронных полей, т.к. гамма-излучение если и порождает 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,  $\Gamma$  образованные 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  $(\gamma, n)$  на ядра дейтерия или  $Be^9$ , в которых энергия связи нейтрона невелика. Это позволяло получить почти моноэнергетические источники нейтронов ( $Sb^{124} + Be^9 ; 0,024 \text{ МэВ}$ .  $La^{140} + D2O; 0.15 \text{ МэВ}$ .  $La^{140} + Be^9; 0.62 \text{ МэВ}$ ).

Для расчёта реактора или радиационной защиты должно быть задано число зон, на которые может быть разбит объём рассчитываемого объекта, формы и размеры этих зон, их составы (плотности нуклидов, входящих в состав зоны) и температуры. Объём этих данных может быть весьма велик, но все они определены проектом рассчитываемого объекта, а выделение необходимой для фиксации всей этой числовой информации памяти – не проблема для современных компьютеров. Сложнее обстоит дело с ядерными данными, особенно с нейтронными данными. Энергетические зависимости нейтронных сечений весьма сложны. Для описания энергетической зависимости сечений одного изотопа требуется задание этих сечений в нескольких десятках тысяч энергетических точек с линейной интерполяцией между ними. Ещё больший объём памяти требуется для фиксации энерго-угловых распределений. Единственным методом, позволяющим учесть нейтронные данные с той степенью детальности, с которой они ныне известны, является метод Монте-Карло, т.е. метод расчётного моделирования траекторий нейтронов. Ядерные данные при использовании этого метода извлекаются непосредственно из содержащих их таблиц. Допустим, решается стационарная задача определения нейтронных потоков в некотором объекте, содержащим 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  $G(E) = \int_0^E g(E') dE' / \int_0^\infty g(E') dE'$ . Тогда энергия  $E$  определяется из условия  $G(E) = \xi$ , где

$0 \leq \xi \leq 1$  - величина, определённая генератором случайных чисел, встроенным в компьютер<sup>2</sup>. 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  $E_j \geq E$  и сечение  $\sigma_{t,i}(E)$  определяется путём линейной интерполяции 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

$\sum_i \rho_{k,i}(E) \sigma_{t,i}(E) / \Sigma_{t,k}(E) > \xi$ . Затем проверяется, не поглотился ли нейтрон при этом

столкновении. Нейтрон считается поглотившимся, если  $p_{a,i}(E) = (1 - \sigma_{s,i}(E)) / \sigma_{t,i}(E) < \xi$ .  $p_{a,i}(E)$

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 поглещённого 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  $\xi$  и если  $\xi < p_{0,i}(E)$ , значит, произошло упругое рассеяние; иначе, если  $\xi < p_{0,i}(E) + p_{1,i}(E)$  - неупругое рассеяние с возбуждением первого уровня ядра мишени и

т.д. пока не будет найден тип рассеяния. Если оказалось, что  $\xi < \sum_{m=0}^{M+2} p_{m,i}(E)$  значит, произошла

реакция  $(n,2n)$ . Далее требуется определить энергию и направление движения рассеянного нейтрона. При упругом рассеянии или неупругом рассеянии с возбуждением дискретного уровня, достаточно определить косинус угла рассеяния  $\mu$ , разыграв его, используя угловое распределение  $q_m(E, \mu)$ . Энергия рассеянного нейтрона в этих случаях однозначно определяется формулой, следующей из законов сохранения энергии и импульса. При рассеянии с возбуждением континуума уровней и в случае реакций  $(n,2n)$  и  $(n,3n)$  энергию и косинус угла рассеяния приходится разыгрывать, используя заданное энерго-угловое распределение  $q_m(E, E', \mu)$ . Косинус азимутального угла рассеяния определяется как  $1-2\xi$ . Направляющие косинусы рассеянного нейтрона определяются по формулам, зависящим от системы координат,

<sup>2</sup> Далее при каждом упоминании случайного числа  $\xi$  будет иметься в виду новое его значение.

выбранной для описания геометрии рассчитываемого объекта. 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. Если такой рост обнаружен, а задача состоит в определении критической конфигурации, требуется вносить в эту конфигурацию коррективы. Так же следует поступать, если реактор оказался слегка подкритическим. При этом используется метод, подобный тому, как реактор выводится в критическое состояние при пуске. Вместо измеряемой величины обратного умножения используют коэффициент размножения  $k_{эфф}$  нейтронов деления в одном поколении, определённый как отношение числа делений, образованных в поколении, к числу делений, породивших нейтроны данного поколения. Т.о. при поиске критической конфигурации в качестве источника используются только нейтроны делений, произошедших в предыдущем поколении. 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 (так называемые реактивности) или, например, при расчёте  $\beta_{эфф}$  – эффективной доли запаздывающих нейтронов, т.е. обусловленного ими вклада в  $k_{эфф}$ . При подборе критической конфигурации достаточно выполнять расчёты  $k_{эфф}$  и с меньшей точностью. В любом случае расчёты методом Монте-Карло являются весьма трудоёмкими.

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.

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, сопровождающемся 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 неупругого 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.

Многогрупповое приближение может быть использовано и для описания нейтронных полей. Среднегрупповые нейтронные сечения определяются путём усреднения по спектру

нейтронов внутри рассматриваемой группы: 
$$\sigma_g = \frac{\int_{E_g}^{E_{g-1}} \sigma(E) \tilde{\Phi}(E) dE}{\int_{E_g}^{E_{g-1}} \tilde{\Phi}(E) dE}$$
 .Здесь  $\sigma$  - любое

усредняемое сечение,  $\tilde{\Phi}(E)$  - спектр усреднения, заведомо неизвестный. Для его оценки в первом приближении можно принять, то приближение, которое применялось в физике реакторов ещё в 50-х годах 20 века: в области быстрых нейтронов (выше 2.5 МэВ) принимается спектр нейтронов деления урана-235 – спектр Уатта:  $\tilde{\Phi}(E) \approx Const * \exp(-E) \sinh \sqrt{2E}$  ; 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  $kT \approx 0.025$  эВ). Это приближение было бы приемлемым при условии, что сечение плавно зависит от энергии и число групп достаточно велико. 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 десятки тысяч энергетических точек. 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.

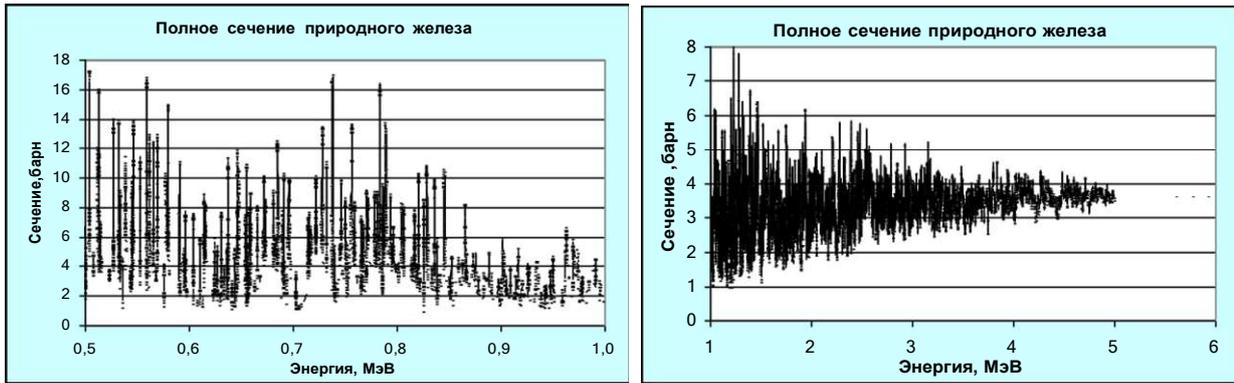


Рис.1. Полное сечение природного железа

Приближенная оценка формы спектра нейтронов, необходимая для усреднения нейтронных сечений по групповым интервалам энергии, выполняется исходя из следующих соображений. Поток нейтронов будем считать независимым от времени (стационарная задача). Будем считать, что пространственная область, занимаемая рассматриваемой средой, намного больше длины свободного пробега. В этом случае можно считать, что в окрестности той точки  $\vec{r}$ , в которой хотим оценить структуру энергетической зависимости плотности потока нейтронов, поток нейтронов не слишком сильно зависит от расстояния, до той точки, в которой оценивается нейтронный спектр. Т.е.  $\Phi(\vec{r}', E, \Omega) \approx \Phi(\vec{r}, E, \Omega) + x\Omega \text{grad}\Phi(\vec{r}, E, \Omega)$ , где  $x$  – расстояние между точками  $\vec{r}'$  и  $\vec{r}$

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  $E \cdot 4A / (A+1)^2$  (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 (3), которая, если и имеется, от энергии рассеянных нейтронов зависит плавно. Таким образом, в формуле (2) для плотности потока нейтронов сохранилась лишь координатная зависимость источника  $\vec{S}(\vec{r} - x\Omega, E)$ , усреднённого по всем энергиям и направлениям движения первичных нейтронов):

$$\Phi(\vec{r}, \Omega, E) = \int_0^{X_{\max}(-\Omega)} P(E, r, r - \Omega x) * S(r - \Omega x, E) dx \quad (7)$$

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

$$S(\vec{r} - \Omega x, E) \approx S(\vec{r}, E) + \Omega x \frac{dS(\vec{r}, E)}{dx} \quad (8)$$

Подставив это выражение в формулу (7) и проинтегрировав по всем направлениям, получаем

$$\Phi(\vec{r}, E) = \int_0^{4\pi} \int_0^{X_{\max}(-\Omega)} \Phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) d\vec{\Omega} = \int_0^{X_{\max}(-\Omega)} \exp(-x\Sigma(E)) * S(\vec{r}, E) dx = S(\vec{r}, E) / \Sigma(E) \quad (9)$$

(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  $\frac{dS(\vec{r}, E)}{dx}$  максимально. Для потока нейтронов в этом направлении получим оценку

$$\Phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) = S(\vec{r}, E) / \Sigma(E) - \frac{dS(\vec{r}, E)}{dx} \frac{1}{\Sigma^2(E)} \quad (10)$$

(знак минус указывает, что в направлении, противоположном вектору градиента поток нейтронов уменьшается). При рассмотрении противоположного направления знак в формуле (10) изменится на обратный, так как со стороны градиента, где источник  $S(\vec{r}', E)$  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  $1/\Sigma(E)$  и с весом  $1/\Sigma^2(E)$ .

При решении уравнения переноса детерминистическими методами решается уравнение переноса в интегро-дифференциальной форме (получаемой из уравнения (2) путём

дифференцирования по направлению  $\vec{\Omega}$ ). При этом угловая зависимость потока (и угловых распределений рассеянных нейтронов) описывается путём разложения в ряд по ортогональным функциям Лежандра. В уравнении для коэффициента первой (точнее, нулевой) из этих функций, 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 нейтронного потока используется второй набор констант (усреднённых по спектру тока нейтронов, т.е. с весом  $1/\Sigma_t^2(E)$ ). Такие же константы используются и в уравнениях для более высоких гармоник, 'слабее влияющих на результат расчёта и не удостоенных подготовки специальных наборов констант. О том, как может быть учтена угловая зависимость сечений при выполнении многогрупповых расчётов методом Монте-Карло будет сказано ниже.

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<sup>3</sup> [1]). Групповые сечения нуклидов  $\bar{\sigma}_{i,r,g}$  должны быть определены так чтобы получить правильные значения макроскопических сечений, т.е. чтобы выполнялось условие

$$\Sigma_{r,g,m}^0 = \sum_i \rho_{i,m} \sigma_{i,r,g} = \sum_i \rho_{i,m} \left\langle \frac{\sigma_{i,r}(E)}{\sum_j \rho_{j,n} \sigma_{t,j}(E)} \right\rangle_g \left/ \left\langle \frac{1}{\sum_j \rho_{j,n} \sigma_{t,j}(E)} \right\rangle_g \right. \quad (11a)$$

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 (11), проводится итерационно. Сначала рассчитываются  $\bar{\sigma}_{i,r,g}^0 = \langle \sigma_{i,r}(E) \rangle_g$ . Затем для всех нуклидов, кроме рассматриваемого вычисляется «сечение разбавления»  $\sigma_{0,i,n} = \sum_{j \neq i} \rho_{j,n} \sigma_{j,t,g}^0 / \rho_{i,n} \sigma_{i,t,g}^0$ . После этого  $\sigma_{i,r,g}$

рассчитываются в предположении, что сечения остальных нуклидов постоянны и равны  $\bar{\sigma}_{i,r,g}^0$ :

$$\bar{\sigma}_{i,r,g} = \left\langle \frac{\sigma_{i,r}(E)}{\sigma_{i,t}(E) + \sigma_{0,i,g}} \right\rangle_g \left/ \left\langle \frac{1}{\sigma_{i,t}(E) + \sigma_{0,i,g}} \right\rangle_g \right. = \sigma_{i,r,g}^0 f_{i,r,g}(\sigma_{0,i,g}) \quad (12a)$$

Здесь  $f_{i,r,g}(\sigma_{0,i,g})$  - 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  $\sigma_{0,i,g} = \sum_{j \neq i} \rho_{j,n} \sigma_{j,t,g}^0 f_{j,t,g} / \rho_{i,g} \sigma_{i,t,g}^0 f_{i,t,g}$ , 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.

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  $f_{i,r,g}(\sigma_{0,k}, T_l)$ , где  $\sigma_{0,k}$  и  $T_l$ - наборы сечений разбавления и температур, для которых рассчитываются факторы. Для корректного учёта токов требуется и подготовка данных для расчёта полного сечения, усреднённого с весом  $1/\Sigma^2$ , т.е. факторы  $f_{i,t,g}^1(\sigma_{1,k}, T_l)$ , которые определяются так, чтобы обеспечить выполнение условия

$$\Sigma^1 = \sum_{r,g,m} \rho_{i,m} \sigma_{i,r,g}^0 f_{i,r,g}^1(\sigma_{1,i,g}) = \sum_i \rho_{i,m} \left\langle \frac{\sigma_{i,r}(E)}{[\sum_j \rho_{j,n} \sigma_{t,j}(E)]^2} \right\rangle_g \left/ \left\langle \frac{1}{[\sum_j \rho_{j,n} \sigma_{t,j}(E)]^2} \right\rangle_g \right., \quad (11b)$$

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

$$\bar{\sigma}_{i,r,g} = \left\langle \frac{\sigma_{i,r}(E)}{[\sigma_{i,t}(E) + \sigma_{1,i,g}]^2} \right\rangle_g \left/ \left\langle \frac{1}{[\sigma_{i,t}(E) + \sigma_{1,i,g}]^2} \right\rangle_g \right. = \sigma_{i,r,g}^0 f_{i,r,g}^1(\sigma_{1,i,g}) \quad (12b)$$

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  $f_{i,t,g}^1(\sigma_{1,k}, T_l)$ .

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.

Альтернативой методу факторов самоэкранировки является метод подгрупп. Идея его состоит в следующем. Среднегрупповые сечения выражаются через интегралы от той или иной функции нейтронных сечений по энергии. В этой функции всегда фигурирует и полное сечение. Если рассматривается функция от сечений определённого нуклида i в фиксированной группе, то в этой группе может быть определена функция вероятности попасть на то или иное полное сечение при случайном попадании в групповой интервал  $p(\sigma_{i,t})$  и вычислены средние значения сечений реакций в зависимости от  $\sigma_{i,t}$ . Если эти зависимости известны, интегралы по энергии могут быть заменены интегралами по полному сечению

(  $\int_{\Delta E_m} F(\sigma_{t,i}(E), \sigma_{r,i}(E)) dE = \int_{\sigma_{t,\min}}^{\sigma_{t,\max}} F(\sigma_{t,i}, \sigma_{r,i}) p(\sigma_{t,i}) d\sigma_{t,i}$  - риманов интеграл по энергии заменяется

интегралом Лебега по полному сечению). Введём функцию  $P(\sigma_{t,i}) = \int_{\sigma_{t,j,\min}}^{\sigma_{t,i}} p(\sigma'_{t,i}) d\sigma'_{t,i}$ ,

меняющуюся, очевидно, от 0 до 1, и аппроксимируем её гистограммой, состоящий из K отрезков (подгрупп). Каждому отрезку k будет соответствовать определённая ширина  $a_{i,k}$ , усреднённое по этому отрезку полное сечение  $\sigma_{t,i,k}$  и сечения реакций  $\sigma_{r,i,k}$ .  $a_{i,k}$  есть вероятность попасть в k-ю подгруппу (доля подгруппы k в рассматриваемой группе),  $\sigma_{t,i,k}$  и  $\sigma_{r,i,k}$  – подгрупповые сечения. Совокупность подгрупповых долей и сечений называют подгрупповыми параметрами. Если справедливо предположение о том, что потеря энергии при рассеянии больше, чем расстояние между резонансами и, во всяком случае, много больше ширин резонансных пиков, вероятность нейтрону, принадлежащему одной из подгрупп, оставшемуся после рассеяния в той же группе, попасть после рассеяния в другую группу будет пропорциональна доле этой подгруппы<sup>4</sup>. Это тем более справедливо при попадании нейтрона в другую группу.

При использовании метода подгрупп в расчётах методом Монте-Карло нейтрону, попавшему в группу, приписывается номер подгруппы k пропорционально  $a_k$  и далее траектория его разыгрывается с использованием подгрупповых сечений пока нейтрон не выйдет из подгруппы в результате рассеяния или поглощения. Ясно, что при этом угловая зависимость полного сечения будет учтена настолько полно, насколько правильно подгрупповое приближение позволяет описать среднегрупповую функцию пропускания, т.е. насколько

корректно приближение  $T(x) = \int_{\Delta E_n} \exp(-x\Sigma_t(E)) \approx \exp\left[-x \sum_i \rho_i \sum_{k_i} a_{i,k_i} \sigma_{t,i,k_i}\right]$ . Наиболее сильно

функция пропускания отличается от экспоненты в среде, содержащий только один нуклид, обладающий резонансной структурой сечений. В этом случае, очевидно, желательно, чтобы подгрупповое приближение обеспечивало сохранение среднегруппового макроскопического полного сечения (равного производной от функции пропускания при  $x=0$ ), среднегрупповое значение величины, обратной макроскопическому полному сечению (равной интегралу от функции пропускания) и среднегрупповое значение величины, обратной квадрату макроскопического полного сечения (равной интегралу от  $x^*T(x)$  от нуля и до бесконечности). Перечисленным трем условиям можно удовлетворить используя всего три подгруппы, параметры которых из этих условий и могут быть определены (учитывая что в случае двух подгрупп  $a_2=1-a_1$ ). Для того, чтобы подгрупповая аппроксимация внутригрупповой структуры сечений корректно отражала и зависимости  $\sigma_{r,i}(\sigma_{t,i})$  используются данные о зависимости факторов самоэкранировки от сечения разбавления. Метод подгрупп был предложен в 1963 г. на основе анализа кривых пропускания нейтронов, позволивших оценивать подгрупповые параметры в области неразрешенных резонансов [2]. В 1972 г. он был реализован в детерминистических расчётах нейтронных полей [3]. В 1972 г. в США независимо был предложен «метод вероятностных таблиц» [4], отличающийся от метода подгрупп тем, что значения подгрупповых полных сечений задаются пользователем одинаковыми для разных нуклидов, а доли подгрупп подбираются исходя из тех же соображений, что и доли подгрупп. За рубежом в расчётах методом Монте-Карло этот метод более популярен, чем метод подгрупп. Его очевидный недостаток состоит в том, что коль скоро подгрупповые сечения не оптимизируются, для приемлемой точности описания структуры сечений требуется задание существенно большего числа фиксированных сечений (20 и более вместо 2, максимум 5 в случае подгрупп).

В заключение этого раздела упомянем ряд практически важных задач, для решения которых знания нейтронных и гамма-констант не достаточно. 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

<sup>4</sup> Это приближение обычно называют приближением узких резонансов.

невыгоревших топливных изотопов, продукты деления и так называемые минорные актиниды, образовавшиеся в результате радиационного захвата нейтронов ядрами основных топливных изотопов и образовавшихся из них миноров. 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.

## **2. КОЛИБРИ – библиотека справочных данных для расчёта реакторов и защиты**

В предыдущем разделе говорилось, что при расчёте полей излучения используются различные формы представления ядерных данных: детальные описания энергетических зависимостей сечений и энерго-угловых распределений, многогрупповое представление этих зависимостей, требуются данные и для расчёта переноса энергии гамма-квантами. Встаёт, естественно, вопрос – «где взять эти данные». Первичным источником информации о нейтронных данных является библиотека оцененных данных. Однако таких библиотек несколько (американская ENDF/B, европейская JEFF, японская JENDL, российские РОСФОНД и БРОНД др.). К тому же эти библиотеки имеют по несколько версий (лишь РОСФОНД имеет одну версию, сформированную в 2010 г.). Что касается фотонных данных, то здесь положение много лучше: во всех странах принимаются оцененные данные о взаимодействии фотонов с веществом, скомпилированные в американской библиотеке EPDL. Более-менее устоялись данные и о характеристиках распада радионуклидов; во всяком случае, встречающиеся различия и противоречия в оценках этих данных не сказываются заметным образом на функционалы полей излучения, представляющие интерес с инженерной точки зрения. Что касается проблемы выбора библиотеки нейтронных данных, то окончательное решение по этому вопросу принимают научные руководители и конструктора-проектировщики ядерно-энергетических установок, которые в своем выборе руководствуются не столько доверием к компетентности тех или иных специалистов-оценщиков ядерных данных, сколько опытом применения этих данных для расчёта энергетических реакторов и их моделей (критических сборок). Однако для того, чтобы этот опыт мог быть накоплен, необходимо располагать ядерными данными в форме, пригодной для использования в инженерных расчётах и знать, как этими данными правильно пользоваться. Настоящий справочник нацелен на то, чтобы помочь специалистам образоваться в этой области.

В справочнике приводятся ядерные данные, позволяющие выполнять расчёты, как детерминистическими методами, так и методами моделирования траекторий (методами Монте-Карло) с описанием энергетических зависимостей нейтронных данных в любом из перечисленных в разделе 1 приближений или их комбинации (потому приводимая в справочнике библиотека справочных данных и названа КОЛИБРИ – Combined Library). Данные для расчёта полей гамма-квантов в ней приводятся только в многогрупповой форме.

Данные представлены для всех стабильных и долгоживущих (с периодом полураспада более года) атомных ядер и нескольких более короткоживущих ядер, обладающих аномально высокими сечениями взаимодействия с тепловыми нейтронами. В качестве первичного источника нейтронных данных принята российская библиотека файлов оцененных нейтронных данных РОСФОНД. Этот выбор обусловлен тем, что эта единственная библиотека, снабженная детальными обоснованиями принятых в ней оцененных данных, в которых проводится сравнение и с данными других библиотек. Библиотека РОСФОНД приводится в последнем разделе справочника с той целью, чтобы наиболее любопытные пользователи могли оценить полноту и согласованность экспериментальных данных о нейтронных сечениях, рассмотреть как оценщики-специалисты разных стран проводят через разбросанные экспериментальные данные плавные кривые и на каком основании был произведен отбор оцененных данных в библиотеку РОСФОНД.

Гамма-константы, приводимые в настоящем справочнике, основываются на упомянутой библиотеке EPDL. Данные об испускании гамма-квантов при распаде радионуклидов основаны на данных библиотеки JEFF.

Объём числовой информации, включенной в библиотеку КОЛИБРИ весьма велик и потому в отличие от предшествующих справочников по ядерным данным для расчёта реакторов и защиты [1, 5] эти данные приводятся не в тексте самого справочника, а в электронных приложениях к нему. В частности, числовая информация библиотеки КОЛИБРИ приведены в директории «Библиотека КОЛИБРИ». Ниже даются пояснения к содержанию включённых в эту директорию данных. Поскольку структура приводимых данных довольно сложна, они содержатся в целом ряде вложенных друг в друга директорий. Так директория «Библиотека КОЛИБРИ» содержит три директории низшего ранга – «299-групповые нейтронные константы», «Детальные энергозависимости» и «Образование и перенос гамма-квантов».

Заметим, что приводимые ядерные данные названы «константами» поскольку предполагается, что при их использовании в конкретном расчёте они остаются неизменными. В других вариантах расчёта могут, разумеется, использоваться данные, почерпнутые из иных источников – т.е. иные константы.

Приводимые ниже пояснения к содержанию библиотеки КОЛИБРИ будет соответствовать структуре содержащихся в них данных.

## **2.1. 299-групповые нейтронные константы**

Директория «299-групповые нейтронные константы» содержит двенадцать поддиректорий, содержание которых будет рассмотрено поочерёдно

### **2.1.1. 299 групповые нейтронные константы**

299-групповые нейтронные константы, приводимые в справочнике, получены на основе библиотеки РОСФОНД с помощью специально для этого предназначенного американского комплекса программ NJOY [6]. В приводимых данных об энерговыделении в нейтронных реакциях и образовании гамма-квантов учтены и вклады от распада образующихся в этих реакциях радионуклидов. Приводятся также данные без учёта вклада гамма-квантов, которые предназначены для использования в программах, учитывающих перенос энергии гамма-излучением, порождённым в нейтронных реакциях. Указываются и радионуклиды, вклад которых учтён в энерговыделении.

Таблицы 299-групповых константы приводятся в формате библиотеки БНАБ-93 [7]. Более поздняя версия, полученная на основе данных библиотеки РОСФОНД, названа БНАБ-РФ и также как БНАБ-93 состоит из таблиц, представленных в виде файлов. Эти файлы данных поименованы и, как правило, содержат таблицы данных для нуклида, определенного присвоенным файлу наименованием. Смысловое содержание таблиц определяется расширением.

Имеются, также, и файлы с общей для библиотеки информацией.

Каждая таблица БНАБ представляет собой набор строк.

Таблицы содержат строки трех 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 (NX, 100) NAME, BIB, MF, MT, PARAM1, PARAM2  
100 FORMAT (4X, A9, 4X, A4, 1X, 2(4X, I4), 2(5X, E12.5))
```

Здесь:

**NAME** - символьное “имя” (наименование) материала, данные для которого содержатся в таблице (не более 8 символов, из которых, как правило, используются только первые четыре). В таблицах данных, требующихся для расчета переноса нейтронов, и в ряде других таблиц NAME (за редкими исключениями) – это “имя” изотопа или изомера, данные для которого содержатся в определенном файле библиотеки РОСФОНД (например, NAM=FE56, PU39, AM2m и т.п.).

В таблицах, содержащих информацию, общую для всей библиотеки, полагается NAM=HEAD.

Таблицы термализационных матриц конденсированных сред именуется “именами” этих сред с сокращенными наименованиями (например, H(ZrH) содержит данные о рассеянии медленных нейтронов на водороде, входящем в состав гидрида циркония; D(D2O) содержит данные о рассеянии медленных нейтронов на дейтерии, входящем в состав тяжелой воды, и т.п.).

Таблицы данных об образовании фотонов в нейтронных реакциях, как правило, используют в качестве NAME обозначение химического символа элемента (например, NI). Данные, содержащиеся в этих таблицах, просуммированы по всем изотопам с весом соответствующих сечений. Исключениями из этого правила являются таблицы данных об образовании фотонов в реакциях на топливных изотопах, которые именуется обозначением соответствующего изотопа (например, U238).

**VIB**- символьное “имя” (наименование) библиотеки, данные которой содержатся в таблице.

Таблицы 299-групповых констант, содержащиеся в КОЛИБРИ, имеют VIB=RUSF

**MF** - основной идентификатор типа данных (см. ниже).

**MT** - дополнительный идентификатор типа данных (см. ниже).

**PARAM1** - 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.

**PARAM2** - 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 (NY,200) LV, LT, LC, LS, FORM

200 FORMAT (4X, I3, 10X, I4, 2(5X, I3), 6X, A30)

Здесь:

LV - идентификатор, определяющий порядок следования типов данных в следующих строках таблицы.

LT - число не комментированных строк в таблице (не считая первых двух заголовочных строк).

LC - полное число столбцов в таблице данных.

LS - целочисленный признак, используемый лишь в некоторых типах таблиц.

FORM - тело оператора FORMAT для чтения величин, размещенных в одной строке таблицы.

Собственно табличные данные считываются по формату, определенному параметрами LV, LC, LS и FORM.

Величины, хранимые в таблицах БНАБ, могут быть трех типов - REAL, INTEGER или CHARACTER. Допускается два варианта порядка размещения величин этих типов, которые определяются с помощью параметра LV.

Первый вариант (LV>0): первые LI столбцов содержат величины типа INTEGER, последующие LH столбцов - величины типа CHARACTER, а остальные LR столбцов содержат величины типа REAL. Вышеупомянутые параметры LI, LH и LR определяются следующим образом:

LI=INT(LV/10); LH=LV - 10\*LI; LR=LS - LI - LH

Второй вариант (LV<0): первые LH столбцов содержат величины типа CHARACTER, следующие LI столбцов - величины типа INTEGER и, наконец, последние LR столбцов содержат, как и в первом варианте, величины типа REAL. Параметры LI, LH и LR определяются следующим образом:

LH= - INT(LV/10); LI= -LV-10\*LH; LR=LS - LH - LI.

При любом варианте LH не должно быть больше 8.

Если LR отлично от нуля, то и LI не должно превышать восьми.

Значение  $LI=9$  допустимо, но оно означает, что величины типа REAL в таблице не приводятся, а число и порядок следования величин типа INTEGER и типа CHARACTER определяются в соответствии с правилами, аналогичными сформулированным выше: при  $LV>0$ ,  $LH=LV-90$ ,  $LI=LS-LH$ ; сначала следуют величины типа INTEGER; при  $LV<0$   $LH= - LV+90$ ,  $LI=LS-LH$ , сначала следуют величины типа CHARACTER.

Заметим, что параметры MF, MT и NAM используются для поиска таблицы в библиотеке; эти параметры, следовательно, обязательно должны быть заданы в каждой таблице. Параметры LV, LT, LC; LS и FORM используются для прочтения содержащихся в таблице данных; их задание также совершенно необходимо. Задание остальных параметров требуется постольку, поскольку это необходимо для интерпретации или обработки содержащихся в таблице данных.

При фиксированных NAM и MF таблица БНАБ позволяет записать несколько функций одной целочисленной переменной – номера группы. Каждой функции соответствует определенный столбец таблицы.

Параметр MT используется для представления функций трех переменных. Например, при записи матриц угловых моментов межгрупповых переходов при рассеянии MT имеет смысл номера момента (при  $MT=0$  приводятся вероятности переходов, при  $MT=1$  – средние косинусы угла рассеяния, сопровождающегося переходом из группы, номер которой определяется столбцом, в группу, номер которой определяется строкой,  $MT>1$  соответствуют более высоким угловым моментам.

Параметр MT может быть использован и для описания температурных зависимостей. В этом случае значение температуры, к которой относится таблица, указывается в качестве второго параметра в первой строке:  $T=PARAM2$  (в градусах Кельвина). Увеличение MT соответствует увеличению температуры. Параметр LS приводимый в таблицах для всех температур, в этом случае имеет смысл общего числа температур. Указанный способ описания температурных зависимостей не является единственно возможным.

### ***2.1.1.1. Содержание библиотеки***

В директории «01.Содержание библиотеки» приводятся 5 файлов, описывающих это содержание: «1.АКТИНИДЫ», «2.ИЗОТОПЫ», «3.ЭЛЕМЕНТЫ», «4.ЗАМЕДЛИТЕЛИ» и «5.РЕАКЦИОНЕРЫ». Во всех этих файлах  $NAN=HEAD$ ,  $MF=0$ ,  $MT$  приравнено к числу перечисляемых в таблице нуклидов.

В первом файле содержится перечень 58 актинидов, для которых в библиотеке КОЛИБРИ содержатся нейтронные данные, достаточно полные для обеспечения ими задач переноса излучений. Нуклиды перечисляются в алфавитном порядке – от долгоживущего изомера америция-242 до урана-238. Для каждого нуклида указан -его идентификационный номер ZAI – пятизначное число, в котором два старших разряда обозначают зарядовое число Z, три следующих – массовое число A, а последний разряд – номер изомерного состояния Z (для основного состояния  $Z=0$ ). В столбце, поименованном NAME, приводится наименование нуклида в библиотеке РОСФОНД (оно же используется и в КОЛИБРИ). В столбце AWR приведено отношение массы нуклида к массе нейтрона (11 знаков), а в столбце AM(a.e) – масса нуклида в атомных единицах. Столбец «abundance» содержит содержание изотопа в естественной смеси (если таковая имеется). В столбце «T1/2» указан период полураспада изотопа в годах, сутках или минутах (см. столбец YDM).

В начале таблицы приведены ещё четыре целочисленных столбца: NN- номер нуклида; NGPIN – номер самой низкоэнергетической группы, в которой сечение неупругого рассеяния отлично от нуля; NGMIN – номер самой высокоэнергетической группы, содержащей разрешенные резонансы. В расчётах с детальным слежением за энергией нейтронов резонансная самоэранировка сечений при энергиях выше вехнеэнергетической границы группы

NGMIN в системе КОЛИБРИ описывается в подгрупповом приближении, построенном на основе факторов самоэкранировки, вычисленных исходя из данных о средних характеристиках неразрешенных резонансов, приведенных в библиотеке РОСФОНД.

В файле «2.ИЗОТОПЫ» в том же формате приводятся данные для 302 неделящихся изотопов, а в файле «3.ЭЛЕМЕНТЫ» - для 53-х многоизотопных природных элементов. В последнем случае содержание, равное единице, и период полураспада не приводятся.

В файле «4. ЗАМЕДЛИТЕЛИ» приведены наименования 20 замедлителей, для которых в библиотеке КОЛИБРИ содержатся матрицы межгрупповых переходов при рассеянии нейтронов в тепловой области энергий.

В файле «5.РЕАКЦИОНЕРЫ» содержится перечень изотопов, для которых в КОЛИБРИ все нейтронные данные, необходимые для расчёта переноса нейтронов, могут не содержаться, но в секции «Сечения реакций» приводятся групповые сечения всех реакций, для которых в библиотеке РОСФОНД имеются соответствующие данные (т.е. все реакции, возможные при энергии нейтронов ниже 20 МэВ).

### 2.1.1.2. Характеристики библиотеки

Эти характеристики содержатся в поддиректории «02.Характеристики библиотеки», содержащей 7 файлов, поименованных NAME=HEAD, MF=0 и различающихся признаком MT 299-групповое разбиение MF=0;MT=299. В столбцах содержится:

NG- номер группы нейтронов;

EL – нижняя граница энергетической группы, эВ

EU – верхняя граница;

DU= $\ln EU/EL$  – интервал логарифма;

R – признак внутригруппового спектра:

R=1.42 – спектр испарения с температурой 1.42 МэВ;

R=-1 – спектр Ферми ( $1/v$ )

R=3 – спектр Максвелла с температурой 300°K.

$1/\langle 1/v \rangle$  - средняя скорость движения нейтронов, м/сек/

EAV – Средняя энергия нейтронов, эВ.

Сечения разбавления MF=0,MT=26.

Таблица содержит 26 значений сечения разбавления, для которых в таблицах MF-304 приводятся факторы самоэкранировки.

Температуры факторов MF=0,MT=4.

В таблице указаны 5 температур, для которых приводятся факторы самоэкранировки.

### 2.1.1.3. Основные нейтронные константы

Эта директория разделена на три части: поддиректория «Актиниды» содержит основные нейтронные константы для 58 актинидов от тория-228 до эйнштейния-255; поддиректория «Изотопы» содержит основные нейтронные константы для 303 изотопов; поддиректория «Элементы» - основные нейтронные константы для 53 многоизотопных природных элементов (водород и углерод, имеющие ничтожные включения более тяжелых изотопов, чем H—1 и, соответственно, C-12, в их число не включены)

Данные для каждого нуклида (актинида, изотопа или элемента) сгруппированы в файлы, поименованные 4-х или 2-значным наименованием нуклида с расширением «MLT». Каждый такой файл содержит несколько таблиц.

- 1) Первой таблицей является таблица нейтронных сечений и множественностей, в первой строке которой проставлено: MF=301, MT=0. Парам1 переименован в AWR; его значение равно отношению массы нуклида к массе нейтрона. Параметр NAM= суть

наименование нуклида, обозначенное в наименовании файла. ВВВ=АВВВ означает, что этот же файл используется в системе констант БНАБ-РФ.

Вторая как отмечалось выше, определяет формат считывания информации из столбцов.

В столбцах содержится следующее:

1-й столбец – двузначный (от -1 до 26) номер группы системы констант БНАБ-78, соответствующий трёхзначному номеру группы 299-групповой системы БНАБ-РФ. Он проставлен в столбце 2 непосредственно после двузначного номера.

**3.** TOTAL – среднегрупповое полное сечение;

**4.** CAPTURE – суммарное сечение реакций захвата без деления;

**5.** FISSION – сечение деления (отличное от нуля только для актинидов);

**6.** ELASTIC – сечение упругого рассеяния;

**7.** INELASTIC – суммарное сечение неупругих взаимодействий: неупругого рассеяния, реакций (n,2n), (n,3n), (n,2np) и т.п.

**8.** YN – множественность числа вторичных нейтронов, испускаемых в результате неупругих взаимодействий.

**9.** NU – среднее число вторичных нейтронов деления (включая запаздывающие нейтроны);

**10.** MU – средний косинус угла упругого рассеяния;

**11.** KSI – среднее изменение лётаргии при упругом рассеянии.

2) Вслед за таблицей MF=301, MT=0. приводится вероятности и средние косинусы межгрупповых переходов при неупругом рассеянии и соответствующие средние косинусы угла рассеяния -таблицы MF=502, MT=0 и MF=502, MT=1. Таблица MF=502, MT=0 содержит вероятности межгрупповых переходов при неупругом рассеянии (точнее – при любых неупругих взаимодействиях). Эта таблица отсутствует только в файле для водорода, поскольку в этом случае неупругие процессы невозможны. В первых двух целочисленных столбцах проставлены, как и в предыдущей таблице, номер группы БНАБ-78 и номер группы БНАБ-РФ. Это – номер группы, в которую попадает неупруго рассеянный нейтрон. Номер группы, в которой он рассеялся (в результате чего и совершил межгрупповой переход) указан в закомментированной строке над числовыми данными. Первый вещественный столбец соответствует первой группе, далее – второй, третьей и т.д. до последней группы, в которой неупругое рассеяние, приведенное в предыдущей таблице, отлично от нуля. Максимальный номер группы, вероятность попадания в которую может быть отлично от нуля, принят равным 229. Вслед за рассмотренной таблицей приводится таблица MF=502, MT=1, имеющая точно такую же структуру, как и предыдущая, но содержащая средние косинусы угла неупругого рассеяния, сопровождаемого соответствующим межгрупповым переходом.

3) После таблиц данных о характеристиках неупругого рассеяния приводится серия таблиц MF=303, описывающих вероятности межгрупповых переходов и анизотропию упругого рассеяния. Энерго-угловая зависимость упруго рассеянных нейтронов замедляющихся из группы ng в группу mg=ng+k представляется в виде разложения в ряд по полиномам Лежандра

$$\sigma_e^{ng \rightarrow ng+MT}(\mu_e) = \frac{\sigma_e^{ng} p^{ng \rightarrow ng+MT}}{4\pi} \left[ 1 + \sum_{n=1}^5 (2n+1) \omega_n^{ng \rightarrow ng+MT} P_n(\mu_e) \right]$$

Здесь  $p^{ng \rightarrow ng+MT}$  - вероятность зацы.медления из группы ng в группу ng+MT;  $\omega_n^{ng \rightarrow ng+k}$  –угловые моменты индикатрисы рассеяния. Очевидно,  $\omega_1^{ng \rightarrow ng+k} = \mu_e^{ng \rightarrow ng+k}$ , т.е. имеет смысл среднего косинуса угла рассеяния, сопровождающегося указанным межгрупповым переходом. Параметр MT определяет группу, в которую осуществляется переход: при MT=0 описывается рассеяние, в результате которого нейтроны остаются в пределах той же группы, при MT=1 описывается замедление в соседнюю группу. Для ядер легче азота упругое рассеяние может привести к переходу и в более низколежащие по энергии группу, чем соседняя. Параметры  $p^{ng \rightarrow ng+MT}$  и произведения  $p^{ng \rightarrow ng+MT} * \omega_n^{ng \rightarrow ng+k}$  приводятся в таблицах MF=303, MT=0, 1,...MTmax. В первых двух целочисленных столбцах проставлены, как и в предыдущей таблице, номер группы

БНАБ-78 и номер группы БНАБ-РФ. Далее следует 6 столбцов, в которых приведены значения произведений  $p^{ng \rightarrow ng+MT} * \omega^{ng \rightarrow ng+MT}$ , где  $ng$  – номер мультигруппы, указанный во втором целочисленном столбце, а  $MT$  указано в заголовке таблицы. Первой приводится таблица с  $MT=0$ , содержащая данные для упругого рассеяния, оставляющего нейтрон в прежней группе. Затем следует таблица с  $MT=1$ , содержащая данные для нейтронов, замедляющихся в соседнюю группу. Для изотопов железа и более лёгких ядер возможно замедление с перескоком через одну или даже несколько групп. Для них приводятся столько таблиц с разными значениями  $MT$ , сколько требуется. Максимального значения число приводимых таблиц достигает для водорода :  $MT=210$ .

### 11.1.1.1. Факторы резонансной самоэкранировки нейтронных сечений

Поддиректория «04.Факторы самоэкранировки» содержит файлы, поименованные NAME.ssf. Здесь NAME – четырёх или двухсимвольное наименование нуклида. Факторы самоэкранировки приводятся только для тех групп, в которых они требуются, т.е. в которых энергетическая зависимость сечений имеет резонансный характер. В этих группах факторы самоэкранировки приведены для 26 сечений разбавления и для 5 значений температуры. Приводятся:

а) факторы самоэкранировки полного сечения по спектру тока, характеризуемые признаком

$$K=1, \quad f_1(\sigma_0) = \frac{1}{\langle \sigma_t(E) \rangle} \left[ \frac{\langle 1/(\sigma_t(E) + \sigma_0) \rangle}{\langle 1/(\sigma_t(E) + \sigma_0)^2 \rangle} - \sigma_0 \right];$$

б) факторы самоэкранировки полного сечения по спектру потока, характеризуемые признаком

$$K=0, \quad f^0(\sigma^0) = \frac{1}{\langle \sigma_t(E) \rangle} \left[ \frac{1}{\langle 1/(\sigma_t(E) + \sigma_0) \rangle} - \sigma_0 \right];$$

в) факторы самоэкранировки сечения упругого рассеяния, характеризуемые признаком

$$K=2, \quad f_2(\sigma_0) = \frac{1}{\langle \sigma_e(E) \rangle} \frac{\langle \sigma_e(E)/(\sigma_t(E) + \sigma_0) \rangle}{\langle 1/(\sigma_t(E) + \sigma_0) \rangle}$$

г) факторы самоэкранировки сечения захвата, характеризуемые признаком

$K=102$  (номером суммарной реакции поглощения без деления в системе ENDF/B)

$$f_{102}(\sigma_0) = \frac{1}{\langle \sigma_c(E) \rangle} \frac{\langle \sigma_c(E)/(\sigma_t(E) + \sigma_0) \rangle}{\langle 1/(\sigma_t(E) + \sigma_0) \rangle}.$$

г) Для делящихся ядер (актинилов) приводятся также факторы самоэкранировки сечения деления, характеризуемые признаком  $K=18$  (номером реакции деления в системе ENDF/B)

$$f_{18}(\sigma_0) = \frac{1}{\langle \sigma_f(E) \rangle} \frac{\langle \sigma_f(E)/(\sigma_t(E) + \sigma_0) \rangle}{\langle 1/(\sigma_t(E) + \sigma_0) \rangle}.$$

Приводимые факторы самоэкранировки обеспечивают выполнение условия баланса

$$f_0(\sigma_0, T) * \sigma_t = f_2(\sigma_0, T) * \sigma_e + f_{102}(\sigma_0, T) * \sigma_c + f_{18}(\sigma_0, T) * \sigma_{18} + f_4(\sigma_0, T) * \sigma_{in}$$

Факторы самоэкранировки сечения неупругого рассеяния не приводятся. В тех группах, в которых учёт резонансной структуры необходим и сечение неупругого рассеяния отлично от нуля, фактор самоэкранировки этого сечения должны вычисляться из приведенного условия баланса.

В приводимых в справочнике таблицах факторы самоэкранировки сформированы в массивы из 26 столбцов и 5 строк. Значения, приводимые в вещественных столбцах, различаются сечениями разбавления. Эти сечения указаны в закомментированной строке,

предшествующей строкам с числовыми данными, а также в файле MF=0, MT=3 в поддиректории «Характеристики библиотеки». Значения, приводимые в строках, различаются температурой среды, для которой эти факторы вычислены. Эти пять значений приведены в файле MF=0, MT=4 и равны в градусах Кельвина 300К, 550К, 1400К, 2100К и 3000К. В приводимых таблицах каждый такой массив сопровождается номером энергетической группы и признаком К, определяющим тип приводимых в массиве факторов. Признак К приведен во втором целочисленном столбце, предвещающем столбцы с данными о факторах (один и тот же для для всех пяти строк массива, различающихся температурами). Температуры не указываются – они однозначно определяются номером строки рассматриваемого массива). Номер группы приводится в первом целочисленном столбце таблицы только в первой строке первого массива (для К=1). В остальных 19 или 24 (для актинидов) строках с массивами данных для остальных значений К номер группы не указывается.

### **11.1.1.2. Подгрупповые параметры.**

Приближение относительной независимости плотности столкновений от энергии нейтрона в пределах группы оправдано только при рассмотрении достаточно протяженных сред, когда нейтроны прилетают в рассматриваемую точку с расстояний много больших длины свободного пробега. При расчете гетерогенных сред (из которых состоят энергетические реакторы) непосредственное использование факторов самоэкранировки проблематично. Проблема может быть решена с помощью метода подгрупп [2]. Идея метода в том, что группа, в которой проявляется резонансная структура сечений, разбивается на несколько подгрупп, каждая из которых характеризуется «долей» - вероятностью нейтрона попавшему в группу после рассеяния, иметь энергию, при которой полное сечение данного изотопа близко к некоторому заданному подгрупповому значению. Представление структуры сечений в таком виде, как отмечено в цитированной работе, эквивалентно представлению функции пропускания нейтронов, входящую в уравнение переноса, в виде суммы экспонент. Подгрупповые параметры должны адекватно описывать и зависимости факторов резонансной самоэкранировки от сечения разбавления. Алгоритм определения подгрупповых параметров на основе факторов самоэкранировки был предложен Е.В.Жемчуговым, текст которой «Вычисление подгрупповых параметров» приведен в электронном приложении «Библиотека КОЛИБРИ» в поддиректории «Подгрупповые параметры». Кроме этой работы, представленной в формате pdf, в этой поддиректории приводятся её результаты: подгрупповые параметры, позволяющие описать факторы самоэкранировки сечений актинидов, неделящихся изотопов и многоизотопных элементов при температуре 300К. Файлы с таблицами представлены в стандартном формате БНАБ-РФ. Каждый файл поименован как NAME.sun, где NAME – стандартное наименование нуклида. Первые два столбца отведены для указания номера группы в 28-групповой системе БНАБ-78 и в системе БНАБ-РФ. Для каждой группы отведено столько строк, сколько потребовалось подгрупп для описания структуры сечений в этой группе. Подгруппы не пронумерованы. В первом столбце приводятся доли подгруппы (равные единице в группах, в которых учёт резонансной самоэкранировки несущественен). Далее приводятся подгрупповые сечения захвата, упругого рассеяния, деления и подгрупповое полное сечение.

В справочнике приводятся подгрупповые параметры, описывающие резонансную структуру только при комнатной температуре. Для более высоких температур требуется вычислять подгрупповые параметры, используя упомянутый выше алгоритм Жемчугова. Поскольку подгрупповые параметры при температуре 300 К известны, для более высоких температур целесообразно сохранить число групп и доли подгрупп, и подбирать для описания факторов самоэкранировки только подгрупповые сечения. Это не только упростит решение задачи, но и позволит более корректно формулировать граничные условия на границе сред разной температуры.

### **11.1.1.3. Данные о запаздывающих нейтронах**

Данные о запаздывающих нейтронах приводятся в поддиректории «**06.Запаздывающие**», содержащей раздел «Выходы» и файл «Периоды и спектры». В соответствии с библиотекой РОСФОНД предшественники запаздывающих нейтронов объединены не в 6, а в 8 групп, различающихся эффективными периодами полураспада. Такое представление позволяет описывать запаздывающие нейтроны, испускаемые при делении любых ядер (при 6-групповом представлении эффективные периоды полураспада приходится принимать различными для разных делящихся ядер). Это обстоятельство делает 8-групповое представление особо предпочтительным при расчётах быстрых реакторов, работающих в замкнутом топливном цикле, нуклидный состав топлива которых заметно меняется не только от кампании к кампании но и в течение каждой из них. Заметим, что 8-групповое представление запаздывающих нейтронов из тех же соображений принято и в европейской библиотеке JEFF-3.3.

В разделе «Выходы» для всех актиидов приводятся файлы MF=319. Каждый файл MF=319 содержит две таблицы. В первой из них – таблице MF=319, MT=0 в единственном вещественном столбце приводится суммарный выход запаздывающих нейтронов при делении в зависимости от номера группы, в которой произошло деление (указан в предшествующем целочисленном столбце). Во второй таблице MF=319, MT=1 приводятся распределения запаздывающих нейтронов по восьми группам. Эти распределения различны (точнее – могут быть различны) для разных интервалов энергетических групп. В первом целочисленном столбце указан номер интервала (не более трёх). В следующем столбце в порядке убывания приводится наименьший номер группы БНАБ-РФ, входящей в этот интервал. Наибольший номер группы первого интервала равен 299, для каждого следующего он на единицу превышает наименьший номер группы предыдущего интервала. После этого следуют 8 вещественных столбцов содержащих доли каждой из восьми групп запаздывающих нейтронов в рассматриваемом интервале. Сумма долей равна единице.

Файл «Периоды и спектры» содержит одну таблицу, в первой строке которой приведены эффективные периоды полураспада 8 групп запаздывающих нейтронов (в секундах), в остальных строках – 299-групповые спектры нейтронов этих групп.

### **11.1.1.4. Спектры нейтронов деления**

Спектры нейтронов деления представлены в поддиректории «**07.Спектры деления**», содержащей файлы NAME.spm с таблицами MF=510 MT=0. В первом целочисленном столбце таблицы приводится номер 28-группового разбиения, во втором – номер группы БНАБ-РФ. Далее следуют вещественные столбцы, содержащие спектры нейтронов деления под действием нейтронов 1-й группы БНАБ-РФ, 2-й группы БНАБ и т.д. вплоть до последней группы (с номером LC-2), для которой приводятся спектры деления. Спектры деления под действием нейтронов, принадлежащих группам с номерами, большими, чем LS-2, следует принимать спектр деления, приведенный в последнем столбце таблицы.

В строках каждого столбца приведена вероятность нейтрону деления попасть в группу, определённую номером строки, указанным во втором целочисленном столбце. Сумма приведенных вероятностей равна единице с точностью 6 знаков после запятой.

### **11.1.1.5. Энерговыделение в нейтронных реакциях**

В справочнике содержится два набора данных об энерговыделении. В первом и главном из них содержатся данные по энерговыделению в нейтронных реакциях с учётом энергии, освобождаемой при распаде радиоактивных продуктов этих реакций, т.е. с некоторым запаздыванием. Этот набор данных приводится в поддиректории «**08.Энерговыделение**»,

содержащей таблицы поименованные NAME.mf-308 или (многоизотопные элементы) NAME.mf308. Здесь, как и выше, NEME – четырёх или двузначное наименование нуклида.

Каждая таблица содержит один целочисленный столбец, содержащий номер группы, для которой приводятся данные в строке, и 5 или 7 вещественных столбцов с данными об энерговыделении ( в единицах МэВ/реакция):

E-EL – энерговыделение при упругом рассеянии;

E-C - локальное энерговыделение при реакциях захвата нейтрона;

T-C – полное энерговыделение при этих реакциях;

E-C - локальное энерговыделение при реакциях захвата нейтрона;

T-C – полное энерговыделение при этих реакциях;

Для делящихся ядер приводится еще два столбца

E-F - локальное энерговыделение при делении;

T-F – полное энерговыделение при делении.;

Полное энерговыделение означает учёт энергии, уносимой гамма-квантами. И в локальном и в полном энерговыделении учитываются вклады, вносимые при распаде радиоактивных продуктов рассматриваемых реакций. Ясно, что локальные энерговыделения следует использовать в тех расчётах, в которых учитывается перенос энергии гамма-излучением, порождённом в нейтронных реакциях. Если перенос энергии гамма-излучением не рассчитывается (как обычно), следует использовать полные энерговыделения.

### **11.1.1.6. Термализационные матрицы**

В поддиректории «10.Термализация» приводятся данные, необходимые для многогрупповых расчётов рассеяния нейтронов в средах с учётом теплового движения атомов и их связей в молекулах или кристаллах. Тепловое движение и связи необходимо учитывать при рассеянии нейтронов в последних 73-х группах системы БНАБ-РФ (от 227-й до 299-й группы). Атомы замедлителей, для которых необходимо учитывать молекулярные или кристаллические связи перечислены в таблице MF=0, MT=6. В остальных случаях в таблицах приводятся матрицы, рассчитанные в приближении свободного газа.

При расчёте термализации нейтронов в воде и в тяжелой воде рекомендуется использовать матрицу рассеяния нейтронов на свободном (несвязанном) кислороде. При расчёте термализации в полиэтилене рекомендуется использовать термализационную матрицу рассеяния нейтронов на свободном (несвязанном) углероде

Термализационные данные содержатся в поддиректории «термализация» в форме таблиц БНАБ, имеющих в довольно сложную форму. Для каждого материала прежде всего приводится таблица MF=307, MT=T для температуры T=300K.

Первые три столбца этой таблицы – целочисленные. Первое целое число представляет номер широкой группы БНАБ (меняется от 22 до 26); второе – номер мультигруппы (меняется от 227 до 299). В третьем столбце стоит число k, смысл которого будет разъяснён ниже.

Первый вещественный столбец представляет собой отношение сечения упругого рассеяния нуклида, входящего в состав рассматриваемой молекулы, к “сечению рассеяния на свободном ядре” – SSF. Значение SSF приведено в первой заголовочной строке таблицы после пятого знака равенства (PARAM1). Следующие 73 столбца содержат сечения перехода из рассматриваемой в данной строке мультигруппы в неё самоё и в предыдущие или последующие ( $\sigma_s^{g \rightarrow g'}$ ;  $g=227, \dots, 299$ ;  $g'=227, \dots, 299$ ). При этом сечения выражены не в барнах, а в единицах SSF. С целью сокращения объёма таблицы порядок следования данных в ней довольно сложен. Чтобы при расчётах использовать табличные данные в естественном порядке требуется знать порядок расшифровки матриц, содержащихся в таблицах MF=307.

В первой строке таблицы в третьем столбце всегда стоит  $k=1$ , затем отношение суммарного по всем переходам сечения рассеяния к SSF; в пятом столбце первой строки всегда стоит  $\sigma_s^{127 \rightarrow 127}$ , а в последующих  $\sigma_s^{127 \rightarrow g}$ ,  $g'=128, \dots, 299$ .

В каждой из последующих строк приводятся значения  $k \geq 2$ . Диагональный член  $\sigma_s^{g \rightarrow g}$  в этих строках приводится в столбце с номером  $4+k$  стоит  $\sigma_s^{g \rightarrow g}$ . В предыдущем столбце с номером  $3+k$  указано значение  $\sigma_s^{g \rightarrow g-1}$ , а если  $k \geq 3$ , в столбце с номером  $2+k$  приводится  $\sigma_s^{g \rightarrow g-2}$  и так далее. Справа от диагонального элемента – в столбце №(5+k) – стоит  $\sigma_s^{g \rightarrow g+1}$ , далее  $\sigma_s^{g \rightarrow g+2}$  и т.д. до  $\sigma_s^{g \rightarrow g+2}$ . В оставшейся части строки стоят нули. Таким образом, строки матриц оказываются смещёнными от диагонали влево. Считается, что переходы из группы  $g \geq 227$  в группу 226 невозможны и потому соответствующие сечения равны нулю. Получается, что в пятом столбце стоит сечение перехода из группы  $g$  в группу с самым маленьким номером.

В таблицах MF=317 с MT=T содержатся матрицы второго типа – первые угловые моменты сечений межгрупповых переходов – средние косинусы угла рассеяния, сопровождаемого заданным межгрупповым переходом, умноженные на “сечения”<sup>5</sup>, приведенные в таблице MF=307. Они имеют ту же структуру, что и матрицы с MF=317.

Пары термализационных матриц MF=307 и MF=317 приводятся для целого набора температур: MT=300K, 400K, 500K, 600K, 700K, 800K, 1000K и 1200K. Для промежуточных температур матрицы следует вычислять путём интерполяции.

### 11.1.1.7. Сечения реакций

В директории «10.Сечения реакций» содержится 98 файлов, поименованных наименованием элемента с расширением gea. В каждом таком файле приводятся многогрупповые сечения нейтронных реакций, возможных на каждом из изотопов данного элемента. Каждый файл содержит таблицу из 306 строк и большого числа столбцов. Два первых целочисленных столбца – двузначном и трёхзначном – указаны номера групп 28-групповой и 299-групповой системы, для которой в данной строке приводятся данные о сечениях нейтронных реакций. Первые две строки – стандартные строки таблиц БНАБ. Во второй из них указано число столбцов на два превышающее число вещественных столбцов таблицы. Каждый вещественный столбец содержит сечения реакции, происходящей на том изотопе, который указан в этом столбце на первой не стандартной строке. Следующую строку можно пропустить. На третьей нестандартной строке указан номер рассматриваемой в этом столбце реакции в номенклатуре ENDF/B-6. Далее стоит ZAM-идентификатор ядра-продукта реакции, а под ним – значение Q-энергии реакции в МэВ'ах. В следующих 299 строках приводятся 299-групповые сечения рассматриваемой реакции. Все данные получены на основе файлов РОСФОНД.

### 11.1.1.8. Дозовые факторы и пр.

В директории «11.Дозы и пр.» собраны данные, требующиеся для вычисления некоторых часто используемых функционалов потока излучений в тех случаях, когда потоки излучения уже рассчитаны (или определены экспериментально). К ним относятся следующие

- 1) В файле «Выходы продуктов деления» приведены независимые выходы 162-х осколков деления при делении основных делящихся ядер: U-235, U-238, Pu-239, Pu-240 и Pu-241.
- 2) В файле «Дозовые факторы для нейтронов» приводятся дозовые факторы для изотропного облучения человеческого тела и для облучения параллельным пучком нейтронов. Факторы приводятся в единицах  $10^{-12}$  зиверт\*см<sup>2</sup>.

<sup>5</sup> Слово “сечения” поставлено в кавычки, поскольку величины, приводимые термализационных матрицах, измеряются не в барнах, а в SSF.

- 3) В файле «DPA» для основных конструкционных материалов приведены зависимости сечений образования смещений на атом при облучении потоком. Данные приведены для 27-группового представления энергетической зависимости потока. Именно эти данные использовались при анализе радиационной стойкости материалов в экспериментах на реакторах БН-600 и БОР-60. Заметим, что из анализа зарубежных источников о величине сечений образования СНА следует, что погрешность этих величин составляет 20% - 30%. Это и не удивительно, имея в виду что числа смещений атомов неизмеримы, и эффект повреждения облучённых материалов связывается с накопленной дозой облучения (фдьюенсом) исходя из принятых числовых значений СНА. Целесообразно поэтому придерживаться одной и той же оценки сечений образования СНА.
- 4) В файле «Энерговыделение при делении» приводятся усреднённые по спектру быстрого реактора типа БН-800 значения энерговыделения при делении различных делящихся ядер и их составляющие. Эти данные могут быть полезны при анализе результатов расчёта энерговыделения.
- 5) В файле «энерговыделение при захвате» с той же целью приводятся аналогичные данные для основных реакторных материалов.

## 2.2. Детальные энергетические зависимости нейтронных данных

Эти данные приводятся в директории «ДЕТАЛЬНЫЕ ЭНЕРГОЗАВИСИМОСТИ», содержащей две поддиректории «СЕЧЕНИЯ» и «АНИЗОТРОПИЯ», каждая из которых содержит по три раздела – «Актиниды», «Изотопы» и «Элементы».

В справочнике приводятся детальные энергетические зависимости двух классов нейтронных данных – сечений основных нейтронных реакций, требующихся при расчёте переноса нейтронов, и угловых распределений упруго рассеянных нейтронов. Энерго-угловые распределения нейтронов, испытавших неупругое рассеяние с возбуждением дискретного уровня ядра-мишени или континуума этих уровней; нейтронов испущенных в реакции  $(n,2n)$  и т.п. авторами справочника рекомендуется описывать в 299-групповом приближении. В групповом приближении рекомендуется описывать и спектры нейтронов деления – как мгновенных, так и запаздывающих. О разрешении некоторых проблем, возникающих при совместном использовании детального и многогруппового описания энергетических зависимостей, будет сказано в разделе 3.

### 2.2.1. Детальные энергетические зависимости сечений

Эти данные, как отмечено выше, приводятся в директории «СЕЧЕНИЯ» в разных поддиректориях для неделящихся изотопов, многоизотопных элементов и делящихся изотопов – актинидов. Такое разделение обусловлено различием в содержании файлов данных для этих групп нуклидов. Формат таблиц упрощён по сравнению с форматом таблиц БНАБ. Первая строка содержит лишь число энергетических точек, в которых приводятся значения сечений –  $K_{\text{max}}$ . Далее следует одна строка с заголовками столбцов, нужная лишь при визуальном обращении к таблице. Затем следует  $K_{\text{max}}$  строк, содержащих энергетические зависимости нейтронных сечений.

Первый столбец – целочисленный. Он считывается по формату I8 и содержит номер энергетической точки. Далее следуют несколько столбцов, считываемых по формату E15.8. В первом из этих столбцов приводится энергия нейтронов, для которой в остальных столбцах приведены сечения. В следующем – втором вещественном – столбце приводится полное сечение, затем – суммарное сечение реакций поглощения без деления, а в четвёртом столбце – сечение упругого рассеяния. Для актинидов в пятом столбце приводится сечение деления. Суммарное сечение неупругого рассеяния с возбуждением дискретных уровней и континуума этих уровней, а также реакций  $(n,2n)$ ,  $(n,3n)$ ,  $(n,n'p)$  и т.п. определяется по разности между

полным сечением и суммой приведенных парциальных сечений. Среднее число вторичных нейтронов, испускаемых в этих процессах рекомендуется брать из таблиц групповых констант.

Для многоизотопных элементов также приводится пятый столбец, содержащий AWEL – эффективное массовое число элемента, использование которого позволяет рассчитывать энергию нейтрона, упруго рассеянного на заданный угол, используя ту же формулу, что и для изотопов. При этом средняя потеря энергии при рассеянии сохраняется. Угловые распределения нейтронов, упруго рассеянных на многоизотопных элементах приводятся в директории «АНИЗОТРОПИЯ» (см.ниже).

### **2.2.2. Угловые распределения упругого рассеяния**

Эти распределения приведены в файлах, содержащихся в директории «АНИЗОТРОПИЯ» в поддиректориях «Актиниды», «Изотопы» и «Элементы». Угловые зависимости упруго рассеянных нейтронов, представленные при каждой фиксированной энергии границами 32-х равновероятных интервалов по среднему косинусу угла рассеяния в системе центра инерции. Для многоизотопных элементов угловые распределения сначала рассчитывались путём усреднения заданных в файлах РОСФОНД угловых моментов упругого рассеяния с весом сечений упругого рассеяния изотопов, входящих в состав естественной смеси. Затем на основе найденных усреднённых моментов восстанавливались для каждой энергии детальные угловые распределения, которые и позволяли найти границы равновероятных интервалов для естественной смеси.

Форма представления табличных данных аналогична той, что используется для задания энергетической зависимости сечений.

В первой строке приводится число энергий  $K'max$ , для которых приводятся угловые распределения. Строка буквенных заголовков отсутствует; в строках 2,..., $K'max+1$  в первом столбце приводятся номера энергетических точек. Формат представления целых чисел в этих таблицах I6.

Далее следует 34 вещественных столбца, считываемых по формату E13.6. Первый из них содержит значение энергии, для которой приводится угловое распределение. Во втором столбце проставлены нижние границы первого равновероятного интервала, при всех энергиях, равные -1. В третьем столбце содержится верхняя граница первого равновероятного интервала, за ним – верхняя граница второго равновероятного интервала и т.д. В 34-м столбце приводится граница последнего, 32-го равновероятного интервала, равная единице при всех энергиях.

### **2.3. Образование и перенос гамма-квантов.**

При расчёте реакторов и их радиационной защиты нейтронные реакции и образующиеся в этих реакциях радионуклиды являются главным (точнее сказать – определяющим) источником гамма-квантов. Образующиеся гамма-кванты уносят с собой заметную, а порой определяющую часть энергии, в этих реакциях (см.таблицы энерговыделения MF-308), однако при расчёте распределения энерговыделения по объёму реактора перенос энергии гамма-лучами обычно не учитывается, т.к. по сравнению с полным энерговыделением энергия, уносимая гамма-квантами сравнительно невелика и, главное, выделяется она в основном в тяжелом топливном материале. Исключения представляют реакторы с тяжелым жидкометаллическим теплоносителем, в которых примерно 10% энергии выделяется гамма-лучами непосредственно в теплоносителе. Ещё важнее учёт переноса энергии гамма-квантами при расчёте радиационной защиты, т.к. радиационная обстановка за защитой определяется в основном проникшими через защиту гамма-квантами. Данные, необходимые для расчёта переноса энергии гамма-квантами приводятся в директории «Образование и перенос гамма», содержащей несколько поддиректорий, содержание которых излагается ниже.

### 2.3.1. 127-групповое представление

Энергетическая зависимость характеристик взаимодействия гамма-квантов с веществом приводится в 127-групповом представлении, параметры которого приведены в файле «127-групповое разбиение» MF=0; MT=127. В столбцах таблицы содержится:

IG – номер группы гамма-квантов;

EL – нижняя граница энергетической группы, эВ;

EU – верхняя граница;

R – Признак спектра усреднения  $\Phi(E)=E^R$ .

EAV – средняя энергия, эВ.

### 2.3.2. Образование гамма-квантов в нейтронных реакциях

Для расчёта переноса энергии гамма-квантами необходимо, конечно, прежде всего рассчитать источник гамма-излучения. Необходимые для этого данные содержатся в поддиректории «Образование гамма-квантов» в подразделах которой, поименованных «Актиниды», «Изотопы» и «Элементы», приводятся файлы MF=310 с таблицами выходов гамма-квантов различных энергий при неупругом рассеянии, реакции (n,2n) и т.п. (MT=4), в реакциях поглощения не считая деления (MT=101), а в случае актинидов также и в реакции деления (MT=18). Каждая таблица кроме двух заголовочных строк содержит 299 строк и 129 столбцов. В первом столбце указан номер группы нейтронов, для которой в данной строке приводятся данные об образовании гамма-квантов. В следующих 127 столбцах приведены выходы  $y_g$  гамма-квантов поочерёдно для всех 127 групп. В последнем столбце приведена

суммарная энергия испущенных гамма-квантов  $EGAM = \sum_{g=1}^{127} y_g * EAV_g$ . Заметим, что эта энергия

равна разности T-E, где T и E – полное и локальное энерговыделения, указанные для рассматриваемой реакции в таблице энерговыделения MF=308. Отметим также, что выходы гамма-квантов учитывают как те гамма-лучи, которые испускаются в момент реакции, так и гамма-лучи, испускаемые радиоактивными продуктами этой реакции. Перечень этих радионуклидов приводится в строках комментирования, следующих за заголовочными строками.

### 2.3.3. Образование гамма-квантов при распаде радионуклидов

Для решения задач радиационной защиты при обращении с отработанным ядерным топливом, в процедурах снятия АЭС с эксплуатации, при использовании радионуклидов в медицине и в а технологических процессах необходимо располагать данными об испускании гамма-квантов теми радионуклидами, с которыми приходится иметь дело. Эти данные содержатся в таблицах MF=90, MT=127, собранных в директорию «распадные гамма». Всего в директории содержатся таблицы для 1536 нуклидов поименованных шестизначным номером ZAM. Как уже отмечалось выше, первые два старших разряда этого номера означают зарядовое число рассматриваемого в таблице нуклида. В таблицах с данными для фермия (Z=100) в этих двух разрядах проставлены нули. Следующие три разряда означают массовое число рассматриваемого нуклида. Последний разряд – номер изомерного состояния (0 для основного состояния, 1 для первого изомера, 2 – для второго изомерного состояния). Таблицы представлены в стандартном формате БНАБ. Структуру данных поясним на примере приведенной ниже таблице данных для селена-87 – одного из продуктов деления, являющегося одним из источников запаздывающих нейтронов..

В первой заголовочной строке указано наименование нуклида –SE87; наименование библиотеки –ABBN; Далее следуют значения MF и MT и идентификатор ZAM в форме вещественного числа. Наконец указан идентификатор АСТ. Цифры вещественной части этого идентификатора (в данном примере 25) указывают на характер радиационного распада радионуклида. 1 означает позитронный распад (или захват орбитального электрона); 2 – бета-распад; 3 – альфа-распад; 4 – спонтанное деление; 5 – бета распад, сопровождающийся

испусканием нейтрона. Изомерный переход, всегда с какой-то вероятностью возможный при рассмотрении изомеров, никакой цифрой не обозначается. В данном примере указывается, что селен-87 испытывает бета-распад и бета-распад, сопровождающийся испусканием нейтрона. Идентификатор АСТ может быть дробным. Дробная часть идентификатора АСТ приводится только для природных изотопов и означает содержание рассматриваемого изотопа в естественной смеси. Для одноизотопных элементов это содержание приводится равным не единице, а 0.99999, чтобы INT(АСТ) сохраняло смысл перечня возможных способов распада. Например, для тория-232 АСТ= 34.99999 (он испытывает альфа-распад и способен к спонтанному делению)

Вторые заголовочные строки в таблицах различаются только числом строк LT, содержащих приводимые в таблице данные. Первые 7 строк предназначены для приведения характеристик распада рассматриваемого нуклида; затем следует строка комментариев, указывающая на то, что в последующих строках будут приведены спектры испускаемых при распаде гамма-квантов в 127-групповом представлении. Все таблицы содержат по две пары столбцов – первый содержит целое число, следующий за ним – вещественное. Первая пара столбцов содержит данные, характеризующие непосредственно рассматриваемый нуклид, вторая пара – данные, характеризующие цепочку радиоактивных распадов, порожденную продуктами распада основного изотопа.

В закомментированной звёздочкой строке, следующей за заголовочной, указывается содержание данных, приводимых в следующих строках. Первой такой величиной является период полураспада,  $T_{1/2}$ . Во втором (вещественном) столбце указывается значение этой величины, в предшествующем целом – единица её измерения: 1 – секунды, 2 – минуты, 3 – часы, 4 – сутки, 5- годы. Во второй паре столбцов в паре столбцов в этой строке указывается самый большой период полураспада из членов рассматриваемой радиоактивной цепочки. Во второй строке первым приводимым целым числом является INT(АСТ) – перечень способов распада рассматриваемого нуклида. Следующее за ним вещественное число означает постоянную распада  $\lambda = \ln(2)/T_{1/2}$  в обратных секундах. Во второй паре столбцов эти места не используются. В третьей строке приведено локальное энерговыделение (обусловленное торможением заряженных продуктов распада), а в четвёртой – полное энерговыделение. Энерговыделение выражено в мегаэлектронвольтах. Во второй паре столбцов на этих строках приводятся соответствующие энерговыделения при распаде всех звеньев рассматриваемой радиоактивной цепочки. Целые числа в 3-й и 4-й строках первой пары столбцов не используются. Во второй паре приводимое целое число означает число радионуклидов, учтённых в цепочке ( вклады радионуклидов с периодами полураспада более трёх лет не рассматриваются. В приведенном ниже примере INT(АСТ)=25, т.е. Se-87 испытывает бета-распад (в Br-87) и бета-распад с испусканием нейтрона (в Br-86). На следующих строках в первом столбце приводятся идентификаторы ZAM продуктов распада, следующем за ним вещественном столбце – вероятности осуществления этих распадов. Идентификатором продукта спонтанного деления является шестёрка нулей.

```
NAM=SE87  BIB=ABBN MF= 90 MT=127 ZAM=3.40870e+5  АСТ=25
LV= 10  LT= 79  LC= 4  LS= 4  LF=(i7,e12.5,i7,e12.5)
*T1/2,LAMBDA,ENERGY LOC,TOT
  1  5.80000E+00  2  7.63000E+01
 25  1.19508E-01
    2.74700E+00    6.06325E+00
    4.11300E+00    4  1.16756E+01
350870 9.99800E-01
350860 2.00000E-04

* G  YIELD
 44  3.37951E-02  28  1.91028E-07
 46  3.79412E-02  29  9.13288E-08
 47  1.71546E-02  31  1.31928E-06
```

|    |             |       |             |
|----|-------------|-------|-------------|
| 65 | 4.43498E-01 | 32    | 7.89262E-04 |
| 73 | 1.15329E-01 | 33    | 4.69761E-03 |
| 82 | 1.13485E-01 | ..... | .....       |
| 93 | 2.76422E-01 | 120   | 0.10274E-02 |
|    |             | 126   | 0.52634E-04 |

Для идентификаторов продуктов распада отведено три строки. Следующая строка также закомментирована звёздочкой. В ней говорится, что в первом целочисленном столбце каждой пары приводится номер гамма-группы, а в соседнем вещественном – выход гамма-квантов, принадлежащих этой группе. Выход гамма-линий, попавших в группу, перенормировался на среднюю энергию гамма-квантов группы с тем, чтобы сохранить суммарную энергию, уносимую гамма-квантами. В вещественном столбце второй пары приводится суммарный выход гамма-квантов, испускаемых при распаде всех учтённых членов распадной цепочки. Если в результате распада основного ядра радионуклида не образуются, или образуются только нуклиды с периодом полураспада, большим трёх лет, в цепочке учитывается только гамма-кванты исходного радионуклида и гамма-спектры, приведенные во второй паре столбцов, совпадают с приведенными в первой паре. Заметим, что гамма-кванты, испускаемые продуктами спонтанного деления во второй паре столбцов не учитываются.

На первой строке в вещественном столбце второй пары указывается максимальный период полураспада (если такая цепочка порождена). В приведенном примере указан период полураспада криптона-87, образующегося в случае бета-распада исходного ядра. Этот нуклид испытывает альфа-распад в рубидий-87, период полураспада которого (48 миллиардов лет) слишком велик для того чтобы его включать в цепочку.

Данные второй пары столбцов предназначены, главным образом, для учёта вклада радионуклидов, образующихся в нейтронных реакциях в энерговыделение и образование гамма-квантов (если, как это обычно бывает, запаздывание вклада радионуклидов в расчёте не учитывается).

### 2.3.4. Сечения процессов взаимодействия гамма-излучения с веществом

Директория «СЕЧЕНИЯ ПРОЦЕССОВ» содержит файлы формата БНАБ, поименованные МАМЕ.111, и содержащие для всех элементов таблицы БНАБ MF=111, MT=0. В первом столбце таблицы приведен номер гамма-группы БНАБ (от 1 до 127). Далее следует 6 столбцов формата E12.6, в которых приводятся:

1. Сечение когерентного рассеяния (на электронах атомов рассматриваемого элемента);
  2. Сечение комптоновского рассеяния (на атомных ядрах этих элементов);
  3. Сечение образования электрон-позитронных пар;
  4. Сечение фотоэффекта (когда энергия гамма-кванта целиком передаётся электрону);
  5. Полное сечение;
  6. Среднее энерговыделение (потеря энергии) при столкновении – в электронвольтах.
- Сечения, естественно, приводятся в барнах.

### 2.3.5. Угловое распределение когерентного рассеяния

При когерентном рассеянии гамма-квант меняет направление движения, но энергию сохраняет. Директория «КОГЕРЕНТНОЕ РАССЕЯНИЕ» содержит файлы формата БНАБ, поименованные NAME.113 и содержащие таблицы БНАБ MF=113, MT=0, считываемые по формату I4,5E13.5. В первом столбце содержится номер гамма-группы, для которой приводятся данные, описывающие угловое распределение когерентно рассеянных квантов. Эти распределения представлены в форме трёх дискретных косинусов угла рассеяния MU1, MU2 и MU3. В первом вещественном столбце приводится вероятность рассеяния на угол с косинусом MU1, затем значение этого косинуса. В третьем вещественном столбце приведена вероятность рассеяния на угол с косинусом MU2; в четвёртом – значение этого косинуса. В последнем, пятом, столбце приведено значение третьего косинуса MU3; вероятность рассеяния на соответствующий угол определяется из условия баланса.

Значения дискретных косинусов и соответствующих им вероятностей рассеяния получены из условия сохранения значений пяти угловых моментов индикатрисы рассеяния. В тех случаях, когда для описания индикатрисы рассеяния достаточно трёх угловых моментов, в таблице приводится только два косинуса (третий положен равным нулю, а сумма вероятностей рассеяния на первые два равна единице).

### 2.3.6. Энерго-угловые распределения нейтронов при комптоновском рассеянии

При комптоновском рассеянии гамма-квант меняет и направление и энергию поэтому для описания этого процесса необходимо знать энерго-угловые распределения рассеянных нейтронов. В настоящем справочнике эти распределения представлены в следующей форме:

$$P(E \rightarrow E'; \mu) = \sum_j p(g \rightarrow j) \sum_{k=1}^3 \omega_k^{g,j} \delta(\mu - \mu_k^{g,j})$$

Здесь  $P(E \rightarrow E'; \Omega)$  - вероятность комптоновского рассеяния гамма-кванта с энергией  $E$  на угол с косинусом  $\mu$  и при этом получить энергию  $E'$ . В приводимой формуле эта вероятность принята одинаковой для всех гамма-квантов группы  $g$  и представляется в виде суммы вероятностей  $p(g \rightarrow j)$  попадания рассеянного кванта в группу  $j$ , умноженной на вероятность  $\omega_k^{g,j}$  рассеяния на один из трёх возможных косинусов угла рассеяния  $\mu_k^{g,j}$ . Как и в случае когерентного рассеяния  $\omega_k^{g,j}$  и  $\mu_k^{g,j}$  выбираются так, чтобы сохранить пять угловых моментов функции углового распределения, усреднённой по группам  $g$  и  $j$ . Сохранение нулевого момента обеспечивается условием  $\omega_3^{g,j} = 1 - \omega_1^{g,j} - \omega_2^{g,j}$ . Параметры такой формы представления энерго-угловых распределений сведены в таблицу MF=127, MT=127, приведенную в файле «комптоновское рассеяние». Табличные данные считываются по формату 2I4,6E13.5. Целое число в первом столбце – номер исходной группы  $G$ ; во втором столбце указан номер конечной группы  $J$ .

В первом вещественном столбце приведена вероятность перехода между указанными группами. Далее – вероятность рассеяния на угол, косинус которого равен MU1, приведенному в следующем столбце. После этого приводится вероятность рассеяния на второй угол, косинус которого приведен в пятом столбце. В последнем, шестом, столбце приведен косинус третьего возможного угла рассеяния, вероятность которого определяется из условия баланса. Как отмечалось значения косинусов и вероятностей определены так, чтобы сохранить пять угловых моментов индикатрисы рассеяния.

### 2.3.7. Дозовые факторы

При расчётах радиационной защиты важнейшим функционалом поля гамма-квантов являются дозы, получаемые обслуживающим объект персоналом. В таблице «дозовые факторы» приводятся эти самые факторы в единицах  $10^{-12}$ зивертов\*см<sup>3</sup>. Данные соответствуют НРБ99.9. В соответствии с этими нормами факторы приводятся отдельно для облучения кожи, тела и глаз для случаев облучения параллельным и изотропным потоком излучения. Таблица дозовых факторов MF=0, MT=2 содержится в файле «дозовые факторы».

## 3. Замечания об использовании констант КОЛИБРИ

Константы, содержащиеся в библиотеке КОЛИБРИ, позволяют выполнять расчёты нейтронных и фотонных полей с использованием самых различных методов решения уравнения переноса излучений, включая метод Монте-Карло с детальным описанием энергетических зависимостей нейтронных данных. Этот метод позволяет получать результаты расчёта, погрешность которых определяется только погрешностью используемых нейтронных констант и статистической погрешностью (которая при использовании современных компьютеров может быть сведена до незначительного уровня). Это преимущество, однако, достигается ценой

значительного (в несколько раз, а то и на порядок) больших затрат расчётного времени. Опыт использования системы константного обеспечения РОКОКО [8, 9], использовавшей в качестве базы библиотеку КОЛИБРИ, показал, что комбинируя детальное описание энергетической зависимости сечений с многогрупповым позволяет в разы сократить расчётное время по сравнению с программами, использующими прецизионное описание структуры сечений.

Разумеется, использование РОКОКО не является единственной возможностью применения библиотеки КОЛИБРИ. К тому же данные этой библиотеки могут использоваться не только в расчётах методом Монте-Карло, но и в программах, реализующих широко используемый многогрупповой метод. Некоторые рекомендации по использованию констант системы КОЛИБРИ в расчётных программах будут изложены ниже

### 3.1. Многогрупповые микро- и макроконстанты.

Как следует из раздела 1, нейтронные данные входят в уравнение переноса в виде сумм по всем изотопам, входящим в состав определённой зоны реактора или защиты. Эти суммы, называемые макроконстантами, и используются в большинстве программ расчёта нейтронных полей сеточными методами (когда пространственная, а порой и угловая зависимость потока нейтронов описывается значениями искомой функции в узлах пространственной (или пространственно-угловой) сетки. Многогрупповое приближение широко используется и в расчётах методом Монте-Карло. Поэтому задача подготовки к расчёту многогрупповых констант нуклидов, входящих в состав среды (микро-констант) является необходимой при любом пути использования констант КОЛИБРИ.

В уравнении переноса макроконстанты интегрируются по энергии. Многогрупповое приближение состоит в том, что интегралы по энергии заменяются суммами по фиксированным группам, а стоящие под знаком интеграла величины, в частности нейтронные данные, заменяются среднегрупповыми значениями. Для каждой группы нейтронов  $g$  требуется, прежде всего, задание для каждой зоны  $k$  полного макроскопического сечения, усреднённого по группе с весом потока нейтронов:

$$\Sigma_{0,k}^g = \sum_i \rho_{i,k} \langle \sigma_{t,i}^g(E) \rangle_g = \sum_i \rho_{i,k} \sigma_{t,i}^g f_{0,i}^g(\sigma_{0,i,k}^g). \quad (13a)$$

Здесь символ  $\langle \dots \rangle_g$  означает усреднение по энергии в пределах группы  $g$  с весом потока

нейтронов в группе.  $\sigma_{0,i,k}^g = \frac{1}{\rho_{i,k}} \sum_{j \neq i} \rho_{j,k} \sigma_{t,j}^g f_{0,j,k}^g(\sigma_{0,j,k}^g)$  - сечение разбавления нуклида  $i$  всеми

остальными нуклидами, входящими в состав среды. Таким образом, первой процедурой, которую необходимо выполнить при вычислении макроконстант для среды данного состава является вычисление сечений разбавления. Для каждой среды в каждой группе эти сечения вычисляются итерационно. В первой итерации сечения разбавления вычисляются в приближении  $f_{t,j}^g(\sigma_{0,j,k}^g) = 1$ . В каждой следующей итерации используется сечения разбавления, определённые в предыдущей итерации. Итерации завершаются, когда максимальное расхождение в итерируемых факторах снизится ниже заданного значения (обычно 0,1%). Групповые сечения нуклидов, умноженные на факторы самоэкранировки, часто называют «блокированными микроконстантами».

Требуется также знание для каждой зоны полного макроскопического сечения, усреднённого по группе с весом тока нейтронов:

$$\Sigma_{1,k}^g = \sum_i \rho_{i,k} \langle \sigma_{t,i}^g(E) \rangle_g = \sum_i \rho_{i,k} \sigma_{t,i}^g f_{1,i}^g(\sigma_{1,i,k}^g). \quad (13b)$$

Сечение разбавления, используемое для вычисления этого сечения,  $\sigma_{1,i,k}^g$ , вычисляется аналогично  $\sigma_{0,i,k}^g$ , но в итерациях используются полные сечения соседствующих нуклидов, усреднённые с весом тока, т.е. с использованием факторов  $f_{1,i}^g(\sigma_{1,i,k}^g)$  вместо  $f_{0,i}^g(\sigma_{0,i,k}^g)$

В формулах (13) указана зависимость факторов самоэкранировки от сечения разбавления. На самом деле эти факторы зависят также и от температуры и поэтому для зон даже одинакового состава, но разной температуры макроскопические сечения различаются. Значения факторов для конкретной температуры можно получить путём интерполяции табличных данных путём интерполяции полиномом 3-й степени по формуле Лежандра:

$$f(T) = \frac{(T-T_2)(T-T_3)(T-T_4)}{(T_1-T_2)(T_1-T_3)(T_1-T_4)} f(T_1) + \frac{(T-T_1)(T-T_3)(T-T_4)}{(T_2-T_1)(T_2-T_3)(T_2-T_4)} f(T_2) +$$

$$+ \frac{(T-T_1)(T-T_2)(T-T_4)}{(T_3-T_1)(T_3-T_2)(T_3-T_4)} f(T_3) + \frac{(T-T_1)(T-T_2)(T-T_3)}{(T_4-T_1)(T_4-T_2)(T_4-T_3)} f(T_4) \quad (14)$$

Рекомендуется в интервале от 300К до 900К использовать значения факторов самоэкранировки при первых четырёх базовых температурах (300К, 550К, 900К и 1400К). В интервале от 1400К до 3000К использовать значения факторов самоэкранировки при четырёх последних базовых температурах (900К, 1400К, 2100К и 3000К). В интервале от 900К до 1400К использовать средне-арифметическое между результатами интерполяции в двух указанных выше диапазонах.

Интерполяция по Лежандру пригодна и для определения факторов самоэкранировки при промежуточных значениях сечения разбавления (используются два значения факторов при сечениях разбавления ниже требуемого и два значения для сечений разбавления выше требуемого. Если достигается то или иное крайнее значение сечения разбавления, применяется квадратичная интерполяция с использованием трёх табличных значений факторов.

Для вычисления источника нейтронов деления требуется знать макроскопическое сечение деления  $\Sigma_{i,k}^g = \sum_i \rho_{i,k} \sigma_{f,i}^g f_{f,i}^g (\sigma_{0,i,k}^g)$ . Число нейтронов деления и форма спектра нейтронов деления

от энергии нейтрона, вызвавшего деление зависят слабо, поэтому член  $\chi_i(E', E) \nu_i(E')$  в формуле (4) при использовании 299-группового приближения может быть вынесен из под знаков интегрирования по начальной группе  $g$  и по конечной энергии (по группе  $g'$ ) при среднем значении  $\nu_i^g * \chi_i^{g,g'}$ . Значения этих величин, конечно, требуется своевременно извлечь из

библиотеки КОЛИБРИ. При рассмотрении стационарного уравнения переноса источник деления в многогрупповом приближении выражается так:

$$S_f^g(\vec{r}', \Omega) = \sum_g \frac{\Phi_0^g(\vec{r}')}{4\pi} \sum_{i,k} \rho_{i,k} \sigma_{f,i}^g f_{f,i}^g (\sigma_{0,i,k}^g) \nu_i \chi_i^{g,g'} \quad (156)$$

где  $\Phi_0^g(\vec{r}') = \int_{4\pi} \Phi^{g'}(\vec{r}', \Omega) d\Omega$  - интегральный поток нейтронов в точке испускания нейтрона деления.

Более сложен учёт резонансной самоэкранировки при расчёте источника рассеянных нейтронов (3), поскольку это выражение содержит сложное выражение

$$\sum_i \rho_i(\vec{r}') \sigma_{t,i}(E') \sum_m p_{m,i}(E') q_{m,i}(E', E, \mu) y_m,$$

где  $\mu = \Omega \Omega'$  - косинус угла рассеяния (между исходным направлением движения нейтрона и направлением движения рассеянного нейтрона). Для упрощения угловая зависимость индикатрисы рассеяния  $q_{m,i}(E', E, \mu)$  представляется в виде разложения по ортогональным

функциям Лежандра:  $q_{m,i}(E', E, \mu) = \sum_{l=0}^L q_{m,i,l}(E', E) P_l(\mu)$ , что позволяет заменить непрерывную

функцию косинуса угла рассеяния суммой нескольких «угловых гармоник» (в 299-групповой системе констант для упругого рассеяния  $L=5$ , для неупругого  $L=1$ ). Если в формуле (3) для стационарного уравнения переноса вынести суммирование по гармоникам вперёд, интегралы заменить суммами по группам, то для источника рассеяния нейтронов группы  $g$  получим :

$$S_s^g(r', \mu) = \sum_{l=0} \sum_i \rho_{i,k}(r') \left[ \sigma_{e,i}^{g'} f_{e,i,l}^g(\sigma_{0,i,k}^g) q_{e,i,l}^{g',g} + \sum_m \sigma_{m,i,k}^{g'} f_{m,i,l}^g(\sigma_{0,i,k}^g) q_{m,i,l}^{g',g} + 2\sigma_{2n,i,k}^{g'} q_{2n,i,l}^{g',g} + \dots \right] \int_{4\gamma} \Phi^{g'}(\vec{r}, \vec{\Omega}) P_l(\mu) d\vec{\Omega} \quad (16a)$$

Здесь  $r'$  лежит в зоне  $k$ . Первый член в квадратных скобках описывает упругое рассеяние; сумма по  $m$  берётся по всем уровням ядра-мишени, возбуждаемым нейтронами группы  $g'$ ; за ним следует член, учитывающий вклад реакции  $(n,2n)$ , далее должен быть член, учитывающий реакцию  $(n,3n)$ , которая при энергиях нейтронов, образующихся в реакторах, практически никогда не существенна. В 299-групповой системе константы последние два члена объединяются, т.е. все типы рассеяния кроме упругого, описываются суммарным сечением всех неупругих взаимодействий, приводимые в таблицах индикатрисы  $q_{in,i,l}^{g',g}$  усреднены по всем уровням и включают реакции  $(n,2n)$ , а если надо, то и  $(n,3n)$ . Поскольку анизотропия неупругого рассеяния сравнительно слаба, она учитывается только до  $l \leq 1$ . В результате формула вычисления источника рассеянных нейтронов приобретает вид

$$S_s^g(r', \mu) = \sum_{l=0} \sum_i \rho_{i,k}(r') \left[ \sigma_{e,i}^{g'} f_{e,i,l}^g(\sigma_{0,i,k}^g) q_{e,i,l}^{g',g} + \sum_{l=0} \sum_i \rho_{i,k}(r') \sigma_{in,i}^{g'} f_{in,i,l}^g(\sigma_{0,i,k}^g) q_{in,i,l}^{g',g} y_i \right] \int_{4\gamma} \Phi^{g'}(\vec{r}, \vec{\Omega}) P_l(\mu) d\vec{\Omega} \quad (16b)$$

Здесь первый член учитывает вклад упруго рассеянных нейтронов, второй – неупруго рассеянных на всех уровнях и реакций типа  $(n,2n)$  а  $y_i^{g',g}$  – множественность – среднее число нейтронов, образовавшихся в результате всех неупругих взаимодействий на нуклиде  $i$  в группе  $g'$  и попавших после рассеяния в группу  $g$ . Величину, стоящую в квадратных скобках можно было бы назвать гармоникой макроскопического сечения замедления и обозначить  $\Sigma_{s,r,l}^{g',g}$ . Проблемой вычисления источника рассеяния является вычисление интегралов  $\int_{4\gamma} \Phi^{g'}(\vec{r}, \vec{\Omega}) P_l(\mu) d\vec{\Omega}$ , способ вычисления которых, очевидно, зависит от того, каким образом

решается уравнение переноса и как выражается при этом угловая зависимость потока нейтронов. Проще всего проблема решается, когда угловая зависимость потока нейтронов представляется в виде ряда по сферическим гармоникам:  $\Phi^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \sum_l \sum_{m=-l}^l \Phi_{l,m}^g(\vec{r}) P_{l,m}(\Omega)$ . Это позволяет привести уравнение переноса к системе уравнений для гармоник потока нейтронов  $\Phi_{l,m}^g(\vec{r})$ , а интегралы, стоящие в формуле (14б), сводятся к интегралам от известных функций.

При использовании иных методов описания угловой зависимости потока нейтронов по иному вычисляются и стоящие в формуле (16б) интегралы. Например, в многогрупповых расчётах методом Монте-Карло по американской программе KENO угловое распределение рассеянных нейтронов представляется в виде суммы дельта-функций косинуса угла рассеяния:

$$q(g' \rightarrow g, \mu) = \sum_{k=1}^3 q_k(g' \rightarrow g) \delta(\mu - \mu_k). \text{ Здесь } \sum_{k=1}^K q_k(g' \rightarrow g) = 1. \text{ Значения } q_k \text{ и } \mu_k \text{ вычисляются из}$$

условия сохранения средних значений пяти угловых моментов подобно тому, как в КОЛИБРИ описываются угловые распределения гамма-квантов, испытавших комптоновское рассеяние.

При использовании методов, в которых угловая зависимость потока нейтронов описывается путём её дискретизации (как в широко используемом SN-методе Карлсона) возникает проблема учёта анизотропии полного сечения (различие между  $\Sigma_{t,0}$  и  $\Sigma_{t,1}$ ). В этом случае для её решения используется один из многочисленных вариантов транспортного приближения, в котором вместо  $\Sigma_{t,0}$  используется некое независящее от направления «транспортное сечение», а связанная с этим погрешность компенсируется изменениями угловых гармоник сечения рассеяния. Выбор из возможных вариантов предоставляется пользователю, но оптимальный существенно зависит от особенностей решаемой задачи. Наиболее полное описание вариантов транспортного приближения можно найти в работе Роберта Мак Ферлейна «TRANSX» (см. приложение «КОЛИБРИ»)

### 3.2. Двухподгрупповое приближение макроконстант.

Укажем ещё на один путь учёта анизотропии полного сечения. Разобьём каждую группу с резонансной структурой сечений, для которой заданы  $\Sigma_{t,0}$  и  $\Sigma_{t,1}$ , на две части – макрподгруппы – с полными сечениями  $\Sigma_{t,x}$  и  $\Sigma_{t,y}$ . Пусть  $\Sigma_t$  – с полное сечение в рассматриваемой группе, вычисленное без учёта резонансной самоэкранировки. Обозначим  $X = \Sigma_{t,x} / \Sigma_t$ ;  $Y = \Sigma_{t,y} / \Sigma_t$ , а долю подгруппы с полным сечением  $X$  обозначим через  $a$ . Построенная двухподгрупповая модель структуры полного сечения должна удовлетворять условиям

$$aX + (1-a)Y = 1 \quad (17a)$$

$$\frac{a}{X} + \frac{(1-a)}{Y} = \frac{\Sigma_{t,0}}{\Sigma_t} = F_0 \quad (17б)$$

$$\frac{\frac{a}{X} + \frac{(1-a)}{Y}}{\frac{a}{X^2} + \frac{(1-a)}{Y^2}} = \frac{\Sigma_{t,1}}{\Sigma_t} = F_1 \quad (17в)$$

Сравнение с формулами (11a) и (11б) показывает, что двухподгрупповая модель структуры сечений обеспечивает сохранение среднегрупповых факторов самоэкранировки полного сечения. Решение системы уравнений (17) сводится к решению уравнения 4-й степени относительно  $Y$

$$(F_0 - F_1)Y^4 + F_1(3F_0 - 2F_1 - 1)Y^3 - 3F_1^2(F_0 - 1)Y^2 - F_1^2(F_0 F_1 + F_1(F_0 - 1) - 1)Y + (F_0 - 1)F_1 F_0^2 = 0, \quad (17)$$

которое может быть решено методом Феррари или, зная, что  $Y$  лежит в интервале от 0 до  $\frac{1}{2}$ , путём интерполяционного подбора.

Естественно, что двукратное увеличение числа групп, в которых существенна резонансная самоэкранировка сечений, усложняет решение многогруппового уравнения (главным образом за счёт того, что при рассеянии нейтроны способны переходить из одной подгруппы в другую, т.е. диагональность матрицы межгрупповых – точнее межподгрупповых – переходов нарушается). При современных возможностях вычислительной техники это усложнение не представляется сложно-преодолимым, а учёт анизотропии полного сечения решается естественным путём.

### 3.3. Использование констант КОЛИБРИ в расчётах методом Монте-Карло.

Ниже вкратце будет описан опыт использования констант КОЛИБРИ в расчётах методом Монте-Карло, реализованный в вычислительном комплексе РОКОКО<sup>17,18</sup>. В этом комплексе нуклиды, входящие в состав сред, делятся на три группы: «детальные» - энергетическая зависимость сечений которых описывается детально; «групповые» - энергетическая зависимость сечений которых описывается в 299-групповом представлении с учётом резонансной структуры с помощью факторов самоэкранировки; и «подгрупповые», в которых резонансная структура сечений описывается в подгрупповом приближении, что позволяет учесть пространственную зависимость эффекта резонансной самоэкранировки. Структура сечений детальных нуклидов в области неразрешенных резонансов описывается в подгрупповом приближении с использованием подгрупповых параметров, рассчитанных на основе групповых факторов самоэкранировки. Включенные в комплекс РОКОКО процедуры выполняют все необходимые для расчётов в многогрупповом приближении операции, перечисленные в разделе 3.1. Кроме того для всех подгрупповых нуклидов вычисляются факторы резонансной самоэкранировки используя алгоритм, описанный в Приложении в разделе «05.Подгрупповые параметры» в файле «Получение подгрупповых параметров.doc». Подгрупповые параметры вычисляются и для всех детальных нуклидов, но только в области неразрешенных резонансов. Для них, естественно, считываются детальные сечения и угловые распределения упруго рассеянных нейтронов. Угловые распределения неупруго рассеянных нейтронов описываются в P1-приближении.

### 3.3.1. Процедура FEFIS.

Первое, что требуется знать при моделировании нейтронной траектории – это координаты, направление движения и энергию рассматриваемого нейтрона. При расчёте реактора источником нейтронов являются деления. Программа, моделирующая нейтронные траектории должна фиксировать координаты каждой точки деления, номер разделившегося нуклида  $i$  и номер группы  $ngfis$ , которой принадлежал нейтрон, вызвавший деление. Для каждого делящегося нуклида  $i$  и для каждой группы  $g'$ , которой может принадлежать нейтрон, вызвавший деление, в КОЛИБРИ либо приводится 299-групповой спектр нейтронов  $\chi_{i,g',g}$ , либо рекомендуется использовать спектр для самой низкоэнергетической группы, для которой он приведен. Из этого спектра для обеспечения потребности процедуры  $gefis$  должна быть сформирована функция вероятности попадания нейтрона деления в группу  $g$  или в группы с

меньшими номерами.:  $X_{i,g',g} = \sum_{k=1}^g \chi_{i,g',k} \cdot (X_{i,g',299} = 1)$  (для  $g' \leq 110$ ; в области более низких энергий зависимость спектра деления от энергии нейтрона, вызвавшего деление, ничтожна). Номер группы нейтрона деления  $g$  определяется случайной выборкой, т.е. из условия  $X_{i,g',g} = \xi$ , где  $\xi$  - случайное число.

Определение энергии нейтрона в этой группе в программе  $gefis$  производится в предположении, что распределение нейтронов по энергии внутри группы  $g$  линейно:

$$\chi_i(E)_g \approx a_{i,g} + b_{i,g} E \phi(E) \approx a_{i,g} \left[ 1 + \frac{2C_{ig}}{E_{ig} - E_{ig+1}} E \right], \quad (17)$$

Коэффициент  $a_{ig}$  при заданном значении  $C_{ig}$  определяется из условия нормировки

интеграла  $\int_{E_{ig+1}}^{E_{ng}} \phi(E) dE = 1$ :  $a_{ig} = \frac{1}{(1 + C_{ig}) * (E_{ig} - E_{ig+1})}$ . Оказалось, что параметры  $C_{ig}$ , выбранные

для описания спектра нейтронов урана-235 тепловыми нейтронами, позволяют вполне приемлемо описать и спектры нейтронов других ядер, в том числе разделившимися быстрыми нейтронами (см. рис.1), т.е. индекс делящегося изотопа  $i$  можно отбросить.

Значения аппроксимационных параметров приведены в таблице 1.

Таблица 1– Значения параметров  $C_g$

| G  | $C_g$  | g  | $C_g$  | g  | $C_g$ | g   | $C_g$ | g   | $C_g$ |
|----|--------|----|--------|----|-------|-----|-------|-----|-------|
| 1  | -0.934 | 31 | -0.459 | 61 | 0.581 | 91  | 0.935 | 121 | 0.991 |
| 2  | -0.930 | 32 | -0.428 | 62 | 0.606 | 92  | 0.939 | 122 | 0.991 |
| 3  | -0.925 | 33 | -0.396 | 63 | 0.630 | 93  | 0.942 | 123 | 0.992 |
| 4  | -0.920 | 34 | -0.363 | 64 | 0.653 | 94  | 0.946 | 124 | 0.992 |
| 5  | -0.915 | 35 | -0.329 | 65 | 0.675 | 95  | 0.949 | 125 | 0.993 |
| 6  | -0.909 | 36 | -0.295 | 66 | 0.696 | 96  | 0.952 | 126 | 0.993 |
| 7  | -0.903 | 37 | -0.261 | 67 | 0.715 | 97  | 0.955 | 127 | 0.994 |
| 8  | -0.896 | 38 | -0.226 | 68 | 0.734 | 98  | 0.958 | 128 | 0.994 |
| 9  | -0.889 | 39 | -0.191 | 69 | 0.751 | 99  | 0.961 | 129 | 0.995 |
| 10 | -0.880 | 40 | -0.155 | 70 | 0.768 | 100 | 0.963 | 130 | 0.995 |
| 11 | -0.870 | 41 | -0.119 | 71 | 0.782 | 101 | 0.965 | 131 | 0.995 |
| 12 | -0.860 | 42 | -0.083 | 72 | 0.794 | 102 | 0.967 | 132 | 0.996 |
| 13 | -0.848 | 43 | -0.047 | 73 | 0.806 | 103 | 0.969 | 133 | 0.996 |
| 14 | -0.836 | 44 | -0.008 | 74 | 0.817 | 104 | 0.971 | 134 | 0.996 |
| 15 | -0.823 | 45 | 0.032  | 75 | 0.827 | 105 | 0.973 | 135 | 0.996 |

|    |        |    |       |    |       |     |       |     |       |
|----|--------|----|-------|----|-------|-----|-------|-----|-------|
| 16 | -0.809 | 46 | 0.072 | 76 | 0.837 | 106 | 0.975 | 136 | 0.997 |
| 17 | -0.793 | 47 | 0.111 | 77 | 0.846 | 107 | 0.976 | 137 | 0.997 |
| 18 | -0.777 | 48 | 0.150 | 78 | 0.855 | 108 | 0.978 | 138 | 0.997 |
| 19 | -0.759 | 49 | 0.189 | 79 | 0.864 | 109 | 0.979 | 139 | 0.997 |
| 20 | -0.740 | 50 | 0.227 | 80 | 0.872 | 110 | 0.981 | 140 | 0.998 |
| 21 | -0.720 | 51 | 0.264 | 81 | 0.879 | 111 | 0.982 | 141 | 0.998 |
| 22 | -0.698 | 52 | 0.301 | 82 | 0.886 | 112 | 0.983 | 142 | 0.998 |
| 23 | -0.676 | 53 | 0.336 | 83 | 0.893 | 113 | 0.984 | 143 | 0.998 |
| 24 | -0.652 | 54 | 0.371 | 84 | 0.899 | 114 | 0.985 | 144 | 0.998 |
| 25 | -0.628 | 55 | 0.404 | 85 | 0.905 | 115 | 0.986 | 145 | 0.998 |
| 26 | -0.601 | 56 | 0.436 | 86 | 0.911 | 116 | 0.987 | 146 | 0.999 |
| 27 | -0.574 | 57 | 0.468 | 87 | 0.916 | 117 | 0.988 | 147 | 0.999 |
| 28 | -0.546 | 58 | 0.498 | 88 | 0.921 | 118 | 0.989 | 148 | 0.999 |
| 29 | -0.518 | 59 | 0.527 | 89 | 0.926 |     |       |     |       |
| 30 | -0.489 | 60 | 0.554 | 90 | 0.931 |     |       |     |       |

Степень приемлемости предложенного приближения иллюстрируется рис.1.

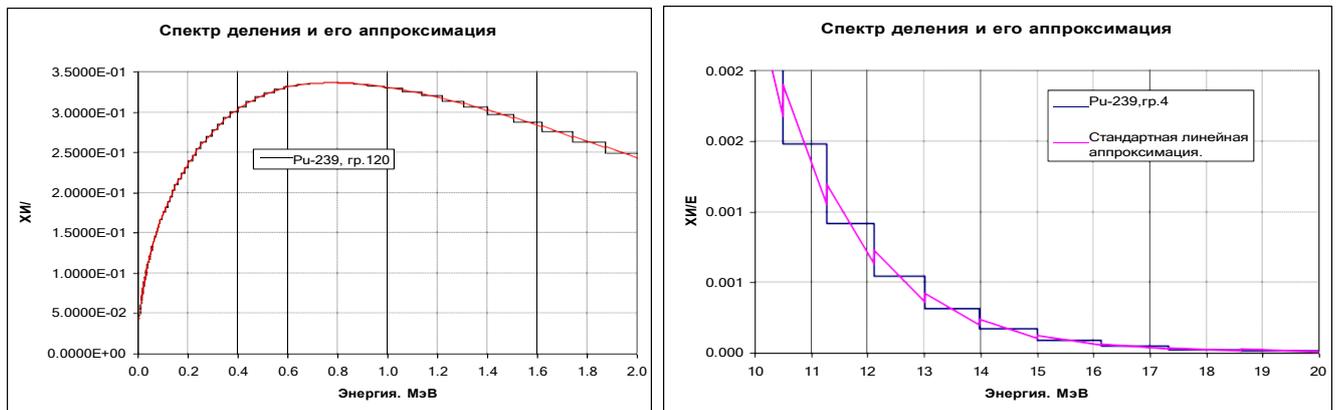


Рис.1. Аппроксимация спектра деления плутония быстрыми нейтронами с использованием параметров  $a_g u b_g$

Пилообразность аппроксимации в области высоких энергий, сказывается на судьбе разыгрываемого нейтрона несравненно меньше, чем погрешности современных данных о сечениях деления и числе нейтронов деления. Поэтому вводить уточнения в алгоритм не представляется целесообразным.

### 3.3.2. Определение эффективной доли запаздывающих нейтронов.

При расчётах коэффициента размножения целесообразно оценивать и меру безопасного превышения этого коэффициента над единицей -  $\beta_{eff}$ . Для оценки этой величины параллельно с определением энергии нейтрона деления следует определить вероятность того, что этот нейтрон может быть запаздывающим нейтроном. Таблица NAME.319 позволяет для нуклида  $i$  плюс, разделившегося нейтроном группы  $g'$  определить выход запаздывающих нейтронов каждой из 8 групп. Обозначим его  $\beta_l$ . В таблице MF=319, MT=299 содержатся нормированные спектры нейтронов каждой группы  $\chi_{l,g}^{del}$ . Таким образом,  $w_l = \beta_l \chi_{l,g}^{del}$  есть вероятность того, что испущенный в энергетической группе  $g$  нейтрон деления есть запаздывающий нейтрон  $l$ -й

группы. Если испущенному нейтрону деления приписан «вес» равный единице<sup>6</sup>, то  $w_1, w_2, \dots, w_8$  представляют собой «веса» каждой из 8 групп запаздывающих нейтронов. Оценки коэффициента размножения, полученные с учётом этих весов, определяют долю каждой группы запаздывающих нейтронов в коэффициенте размножения  $\beta_{eff,l}$ , а их сумма и даст искомое значение  $\beta_{eff}$ . Для оценки этой величины было бы достаточно использовать суммарный вес всех групп запаздывающих нейтронов, но отдельное их рассмотрение позволяет оценить и среднее время запаздывания  $T = \sum_l T_l \beta_l \chi_{l,g}^{del}$ .

### 3.3.3. Процедура SIGMA

После определения энергии и направления движения<sup>7</sup> рассматриваемого нейтрона прослеживается его траектория – пробег за пробегом до поглощения или вылета нейтрона наружу. Первая задача при этом состоит в определении полного макроскопического сечения нейтрона в рассматриваемой среде. При использовании констант КОЛИБРИ это рекомендуется делать по формуле (13), которая принимает вид

$$\Sigma_{t,k}^g = \sum_i \rho_{i,k} \sigma_{t,j}^g + \sum_{i''} \rho_{i'',k} \xi_{i''} \sigma_{t,\xi_{i''}}^g + \sum_i \rho_{j,k} \sigma_{t,j}^g (E) * \xi_{i''} \sigma_{t,\xi_{i''}}^g / \sigma_{t,j}^g. \quad (13в)$$

Как видно, при прослеживании нейтронной траектории необходимо прослеживать как энергию нейтрона, так и группу, которой он принадлежит. В формуле (13и) первая сумма берётся по всем нуклидам, сечения которых решено описывать в многогрупповом приближении (с учётом резонансной самоэкранировки с использованием соответствующих факторов). Вторая сумма берётся по нуклидам резонансную структуру которых решено описывать методом факторов самоэкранировки; третья сумма берётся по нуклидам с детальным описанием энергетического хода сечений.  $\xi_{i''}$  - случайно выбранный номер подгруппы (выбор проводится пропорционально доле подгруппы),  $\sigma_{t,\xi_{i''}}^g$  - полное сечение в той подгруппе, в которую попал рассматриваемый нейтрон. Третья сумма берётся по нуклидам с детальным описанием структуры сечений. Подгрупповой учёт структуры сечений в этом случае проводится только в области неразрешенных резонансов ( $g < n_{gmin}$ ).

Знание полного макроскопического сечения позволяет вычислить среднюю длину свободного пробега нейтрона в рассматриваемой среде и длину пробега, случайно реализованной на рассматриваемой траектории, а значит можно рассчитать и координаты точки, в которой завершился (или мог завершиться пробег нейтрона). Если эта точка оказалась в пределах рассматриваемой зоны, то пробег завершился столкновением и следует рассмотреть результаты этого столкновения, если точка завершения пробега оказалась вне зоны, координаты пересечения нейтронной траектории с границей. И в том и в другом случае пробег нейтрона в зоне завершен и программа моделирования траекторий вызывает процедуру оценки потока нейтронов на пробеге и вероятностей тех процессов, которые могли бы на этом пробеге произойти. При этом используются микроскопические сечения процессов, определённые для этого пробега процедурой SIGMA.

### 3.3.4. Процедура COLLY

Задача процедуры – определить результат столкновения. Нуклид, с которым произошло столкновение, разыгрывается пропорционально его вкладу в полное макроскопическое сечение (13). Далее разыгрывается вероятность поглощения (захвата или деления) - с использованием определённых в процедуре Sigma микроконстант. Если поглощение произошло на делящемся нуклиде в банк данных источника нейтронов деления заносятся координаты точки поглощения, номер изотопа, в котором произошло столкновение, номер группы нейтрона, вызвавшего деление произведение «веса» нейтрона на среднее число нейтронов деления, образующихся при

<sup>6</sup> На протяжении рассматриваемой нейтронной траектории этот вес может меняться для учёта дополнительного размножения нейтронов в реакции (n,2n) или иных причин неаналогового моделирования траекторий.

<sup>7</sup> Для нейтрона деления выбор направления выполняется случайным образом из изотропного распределения.

поглощения  $\eta = \nu \sigma_{fi}^g / (\sigma_{ci}^g + \sigma_{fi}^g)$ . Нейтрону, образовавшемуся при делении или образовавшемуся в результате упругого рассеяния нейтрона деления, обычно приписывается вес, равный единице.

Если  $g < n_{grin_i}$ , нейтрон, избежавший столкновения, мог испытать неупругое рассеяние, вероятность которого равна отношению суммарного сечения неупругих взаимодействий к разности между  $\sigma_{ti}^g$  и  $\sigma_{ei}^g$ . Энергия неупруго рассеянного нейтрона оценивается в групповом приближении. Вероятность попадания нейтрона в ту же группу, которой он принадлежал до столкновения, пересчитывается:  $p_{in_i}^{g \rightarrow g}$  заменяется на  $p_{in_i}^{g \rightarrow g} (E - E_g) / (\bar{E} - E_g)$ . Вероятности попадания во все остальные группы соответственно увеличиваются. Тем самым возможность увеличения энергии при рассеянии исключается. Угол неупругого рассеяния в системе центра инерции рассчитывается в приближении линейной индикатрисы рассеяния (средний косинус угла этого рассеяния в системе 299-групповых констант определён).

Если неупругого рассеяния не произошло, имело место упругое рассеяние. Прежде всего следует определить угол рассеяния. Для детальных нуклидов для этого следует использовать таблицы угловых распределений. Угловое распределение при фиксированной энергии нейтрона определяется путём интерполяции между двумя табличными значениями. Затем случайной выборкой определяется один из 32-х равновероятных отрезков по оси косинуса угла рассеяния, а затем в этом отрезке случайно выбирается конкретный косинус  $\mu$ . Энергия рассеянного нейтрона  $E'$  определяется после этого по простой формуле  $E' = E_g [1 - 2 * (1 - \mu) * AW_i / (1 - AW_i^2)]$ , где  $AW_i$  – отношение массы ядра к массе нейтрона. Направление движения рассеянного нейтрона определяются программой моделирования траекторий. Заметим, что таблицы угловых распределений в КОЛИБРИ приведены только при энергиях выше 10кэВ. При более низких энергиях упругое рассеяние на всех ядрах прекрасно описывается линейной зависимостью от косинуса угла рассеяния, среднее значение которого линейно зависит от энергии нейтрона меняясь от нуля при нулевой энергии до табличного значения  $COSNUC_i$  при 10 кэВ. В группах с номерами, большими 227 при упругом рассеянии следует учитывать тепловое движение атомов и их связи в молекуле или кристалле. Если в расчётном задании указано, что следует учитывать молекулярную связь и указано в какую молекулу входит рассматриваемый нуклид (например, задано H(ZrH)), то сечение и энерго-угловое распределение рассеянных нейтронов могут быть взяты из многогрупповой термализационной матрицы, составленной с учётом указанной связи. В противном случае может быть либо использованная термализационная матрица, составленная без учёта этой связи, либо непосредственный розыгрыш рассеяния нейтрона на ядре, находящемся в состоянии теплового движения ( см., например, работу [10]).

### 3.4. Оценка макроконстант для гетерогенных сред.

Приближение относительного постоянства плотности столкновений, положенное в основу факторов самоэкранировки, выполняется только для достаточно протяженных гомогенных зон (размером много больших длины свободного пробега). Между тем энергетические реакторы и моделирующие их критические сборки гетерогенны: тепловыделяющие элементы диаметром порядка длины свободного пробега разделены теплоносителем. Для учёта гетерогенности проводится расчёт отдельной ячейки гетерогенной решетки с учётом резонансной структуры нейтронных сечений. Полученные в результате расчёта усреднённые по ячейке поток нейтронов каждой группы, числа столкновений и отдельных нейтронных реакций позволяют оценить усреднённые по ячейке макроконстанты и затем использовать их при расчёте реактора. При этом ширина энергетических групп может быть оптимизирована с учётом особенностей рассчитываемого реактора. Вопрос в том, как учесть резонансную структуру сечений в этих расчётах. Проще всего использовать при расчёте ячейки метод Монте-Карло с детальным слежением за энергетической зависимостью сечений в области разрешенных резонансов и подгрупповым учётом структуры сечений в области неразрешенных резонансов. Все необходимые для подобных расчётов константы в системе КОЛИБРИ содержатся.

Гетерогенно экранированные групповые константы нуклидов рассчитываются как отношения чисел соответствующих процессов, произошедших в ячейке в рассматриваемой группе, к интегральному по группе потоку нейтронов. Вычисленные таким образом микроконстанты будут, естественно, учитывать самоэкранировку сечений лишь по потоку нейтронов.

Следует, однако, иметь в виду, что бесконечная среда из таких ячеек, из которых состоит активная зона, имеет  $k_{\infty} > 1$ . При моделировании нейтронных траекторий в бесконечной среде из рассматриваемых ячеек нейтрон, пересекший внешнюю границу ячейки, возвращается в неё обратно в симметричной точке т.е. в той, в которой он влетел в соседнюю ячейку. Для учёта того, что утечка из активной зоны превышает число рождённых в ней нейтронов, следует либо возвращать нейтрон в ячейку не всегда, а с некоторой вероятностью  $P$ , либо умножать «вес» возвращённых нейтронов на  $(1-P)$ . При вылете через торцевые и через боковые стенки ячейки могут быть использованы разные значения  $P$ . Учёт утечки описанным образом, естественно, скажется на форме интегрального по ячейке многогруппового спектра. Это позволит более обоснованно использовать этот спектр для свёртки многогрупповых констант в малогрупповые путём усреднения по выбранным для данного реактора широким группам.

Учёт утечки при расчёте ячейки, в принципе, позволяя выполнить усреднение констант и с весом тока нейтронов. Для усреднения с весом тока в вертикальном направлении следует при оценке числа процессов учитывать их с весом косинуса угла между направлением движения нейтрона и вертикальной осью координат. Для усреднения с весом тока в радиальном направлении следует усреднять с весом косинуса для перпендикулярной оси. Проблема лишь в том, что поскольку значения косинусов в разных направлениях меняют знак, статистическая погрешность суммы чисел процессов, взвешенных с весом косинуса, будет намного больше погрешности «невзвешенной суммы» и для получения приемлемой погрешности сечений, усреднённых с весом тока, потребуются разыгрывать намного больше нейтронных траекторий. Поэтому при расчётах ячеек с целью учёта эффектов гетерогенности влияние этой гетерогенности на константы, усреднённые с весом тока, обычно не учитывается. Заметим, однако, что на уровне макроконстант эта проблема представляется вполне разрешимой. Так при решении задачи оценки малогрупповых констант для каждой широкой группы может быть с приемлемой точностью оценено отношение разности между числом нейтронов, вытекающих из ячейки и усреднённым по группе потоком. Это отношение можно интерпретировать как макроскопическое сечение утечки. Если его вычесть из макроскопического полного сечения, то получим такую оценку  $\Sigma_{1,k}^g$ , которая будет учитывать и резонансную самоэкранировку и гетерогенность среды.

## 4. Библиотека РОСФОНД

### 4.1. Предисловие

В 2005 г. Минобрнаука России заключила с ГНЦ РФ ФЭИ договор на работу: «Создание национальной библиотеки нейтронных данных». Договор был заключен на основании решения конкурсной комиссии, выбравшей предложение о проведении этой работы среди многих других по приоритетному направлению «Энергетика и энергосбережение» - лот ЭЭ.12.1/001. Все результаты работы состоят из трёх частей –

- собственно библиотеки РОСФОНД в текстовом формате ENDF/B-6;
- текстовых обоснований отбора файлов оцененных нейтронных данных в формате pdf (к которым и относится настоящее предисловие);
- перевода описания формата ENDF-6 на русский язык (также в формате pdf).

Библиотека РОСФОНД содержит оцененные нейтронные данные для всех стабильных и долгоживущих (более 1 суток) нуклидов. Таких нуклидов оказалось 676. Кроме того, в РОСФОНД включены данные для десяти более короткоживущих изотопов, обладающих

высокими сечениями захвата или деления, так что при облучении в высоких потоках тепловых нейтронов заметная доля ядер этих изотопов успевают трансмутировать за свое короткое время жизни. Типичным примером является  $^{135}\text{Xe}$ , период полураспада которого составляет только 9.1 часа, но который обладает столь высоким сечением поглощения нейтронов, что в энергетическом реакторе на тепловых нейтронах и за время своей короткой жизни успевают поглотить нейтрон и тем самым притормозить цепную реакцию.

В библиотеку включены также данные о законах рассеяния нейтронов на ядрах, связанных в молекулы или кристаллы – для 20 материалов.

В постановке работы отнюдь не предполагалось создание новых оригинальных оценок нейтронных данных для всех рассматриваемых нуклидов – подобная работа потребовала бы не одного десятилетия труда большего научного коллектива, чем тот, который был привлечен к настоящей работе. Задача состояла в том, чтобы отобрать из файлов оцененных данных, принятых в современных версиях национальных библиотек, наиболее надежные версии и обосновать этот выбор. Рассматривались, главным образом, данные следующих библиотек – американской ENDF/B-VI и ENDF/B-VII, японской JENDL-3.3, западно-европейской JEFF-3.1 (включающей активационную библиотеку EAF-2003) и отечественных библиотек БРОНД-2 (3) и ФОНД-2.2.

Заметим, что все зарубежные библиотеки являются национальными только в том отношении, что их данные принимаются в качестве стандартных в соответствующем государстве (государствах). Каждая из них содержит многочисленные заимствования из других библиотек, отобранные файлы для важнейших материалов составлялись интернациональными коллективами. Национальным являлся лишь отбор файлов в библиотеку. Именно такой подход был принят и при создании российской национальной библиотеки.

Нередко в процессе отбора выяснялось, что получения достаточно надежного файла требуется корректировка тех или иных данных, сборка файла из разных оценок, а некоторых изотопов и полная переоценка данных на основе новой экспериментальной информации. Все сделанные изменения и коррекции подробно описываются и обосновываются в текстовой документации к библиотеке РОСФОНД.

Ответственность за отбор каждого файла в библиотеку РОСФОНД и обоснование этого отбора несет определенный специалист (специалисты). Фамилии ответственных указаны в заключительных разделах соответствующих текстовых обоснований, а также в заголовочных секциях файлов оцененных данных. Общее редактирование документации по РОСФОНДу осуществлял М.Н. Николаев. Алгоритмическая проверка файлов оцененных данных путем их переработки в формы, пригодные для непосредственного использования в расчетных программах (формат БНАБ, формат ACE для MCNP) проводилась В.Н. Кошечевым.

В 2006 – 2015 г.г. многогрупповые константы, сформированные на основе библиотеки РОСФОНД (система БНАБ-РФ), верифицировалась путём сравнения с результатами экспериментов на критических сборках, собранных в международном справочнике ICSBER (International Criticality Safety Benchmark Project) и приведенными в нём результатов расчётов, выполненных в разных странах. Общее заключение, следующее из анализа выявленных расхождений состояло в том, что расхождения между экспериментальными данными и результатами расчётов не превышают расхождений между результатами расчётов, выполненных в разных странах на основе принятых в них библиотек оцененных данных. Наиболее актуальная задача совершенствования библиотек оцененных нейтронных данных состоит, следовательно, в том, чтобы пополнить их данными о погрешностях оцененных данных и корреляциях между этими погрешностями (так называемыми ковариационными данными). К настоящему времени (2021 г.) большинство библиотек этими данными пополнены, однако анализ показывает, что оценки погрешностей зачастую оказываются заметно меньше расхождений между оценками сечений, выполненных в разных странах, а корреляции между погрешностями, указанные в библиотеках, противоречат приводимым в них же данным (коэффициенты корреляции зачастую существенно превышают единицу). Таким образом, можно констатировать, что проблема оценки погрешностей нейтронных данных пока ещё нигде

не получила удовлетворительного разрешения. Таким образом, среди национальных библиотек нейтронных данных, используемые в Европе, Америке, Японии и России не находится ни одной, обладающей заметными преимуществами перед остальными.

Достоинством библиотеки РОСФОНД состоит в том, что она сопровождается весьма детальными обоснованиями выбора оцененных данных. Именно наличие этих обоснований и послужило основанием включения библиотеки РОСФОНД в настоящий справочник – они позволяют пользователю ознакомиться с расхождениями между различными оценками нейтронных сечений и экспериментальными данными и самому сделать качественный вывод о погрешностях оцененных данных.

## **4.2. Содержание приложения РОСФОНД.**

В электронном приложении к справочнику «РОСФОНД» содержится 4 раздела.

4.2.1. «**Преамбула**» содержит информацию о статусе этой библиотеки, содержание которой, как отмечалось выше, явилось основой приводимых в справочнике нейтронных данных..

4.2.2. «**ОБОСНОВАНИЯ**». Раздел содержит 100 файлов в формате pdf. Файл «**00.intr.pdf**» содержит описание структуры библиотеки, содержащихся в ней данных, перечень нуклидов, для которых в библиотеке представлены оцененные нейтронные данные. Остальные файлы от «**01 N.pdf**» до «**99 Es.pdf**» содержат обоснования выбора оцененных данных для каждого изотопа поименованного элемента. В этих обоснованиях принятые в библиотеке оцененные данные сравниваются с результатами измерений этих данных и их оценками, принятыми в других библиотеках. Ознакомление с этими обоснованиями позволит пользователю составить собственное мнение о степени надёжности приведенных в библиотеке РОСФОНД оцененных данных.

4.2.3. «**ФОРМАТ**». Этот раздел содержит два подраздела. Первый из них «Формат библиотеки РОСФОНД» содержит русскоязычное описание довольно сложного международного формата ENDF/B-6 представления оцененных данных, использованного для представления данных библиотеки РОСФОНД. Второй раздел «ENDF FORMAT 2005» содержит англоязычное описание ENDF/B-6, содержащее описание формата представления и тех данных, которых в библиотеке РОСФОНД не содержатся, но которые присутствуют (или могут присутствовать) в её зарубежных аналогах.

4.2.4. «**ОЦЕНЕННЫЕ ДАННЫЕ**». В этом разделе собраны результаты оценки нейтронных данных для всех включенных в библиотеку нуклидов. Данные представлены в формате ENDF/B-6.

4.2.5. «**ЗАКОНЫ РАССЕЯНИЯ**». Раздел содержит принятые в библиотеке РОСФОНД оценки законов рассеяния медленных нейтронов на молекулах или кристаллах 20 наиболее широко используемых замедлителей нейтронов.

## **ЛИТЕРАТУРА**

1. Абагян Л.П.,Базазянц Н.О., Бондаренко И.И., Николаев М.Н. Групповые константы для расчета атомных реакторов. М. Атомиздат, 1964.
2. М.Н.Николаев, В.в. Филиппов. Атомная энергия.т.15, 493 (1963)
3. М.Н.Николаев, Ф.Ф.Игнатов. Бюллетень Информационного центра по ядерным данным , т.3. 409 (1966)
4. L.V.Levitt. Nucl.Sci.Eng. 49,450 (1972)
5. Л.П.Абагян, Н.О.Базазянц, М.Н.Николаев, А.М.Цибуля. Групповые константы для расчёта реакторов и защиты. М. Энергоиздат, 1981
6. [njoy@lanl.gov](mailto:njoy@lanl.gov)
7. Система групповых констант БНАБ-93. Верификационный отчёт т.т. 1 – 4 Межведомственно́й комиссии по аттестации стандартных справочных данных в различных тематических направлениях атомной науки , техники и технологий. М. ЦНИИАИ. 1993.

8. Г.М.Жердев, Т.С.Кислицына, М.Н.Николаев. РОКОКО-система константного обеспечения расчёта реакторов методом Монте-Карло. Известия ВУЗов «Ядерная энергетика». №1, 2018, стр.41.
9. Продолжение там же. №2, 2018, стр.47.
10. Ericsson J.R. Slow neutron scattering routine from the gas model. "Nucl.Sci, and Engng". 1970, v. 41, №9, p.307.