

УДК 519.245

## УЧЕТ НЕРАЗРЕШЕННЫХ РЕЗОНАНСОВ ПРИ РЕШЕНИИ УРАВНЕНИЯ ПЕРЕНОСА НЕЙТРОНОВ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

Е. В. Артемьева, Н. В. Иванов, А. Г. Малькин, Т. В. Семенова  
(РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров)

Для ряда изотопов существует область энергий с неразрешенными резонансами. Особенность этой области состоит в том, что в ней сечения в каждой точке по энергии являются случайными функциями, значения которых определяются статистическими законами распределения параметров резонансов. Рассматриваются два метода учета неразрешенных резонансов: метод вероятностных таблиц и прямой метод. Необходимость учета неразрешенных резонансов в задачах переноса нейтронов подтверждается численными расчетами.

*Ключевые слова:* метод Монте-Карло, перенос нейтронов, неразрешенные резонансы.

### Введение

При решении задач переноса нейтронов методом Монте-Карло обычно используются поточечные системы данных по законам взаимодействия нейтрона с атомами элементов. Они готовятся из оцененных данных, хранящихся в библиотеках. Наиболее широко известны библиотеки ENDF/B, которые включают в себя набор модулей NJOY [1] для преобразования оцененных данных в поточечную систему данных. С помощью модуля RECONR строится набор узлов по энергии, достаточный для использования линейной интерполяции с заданной точностью, и оцененные данные преобразуются в поточечную систему данных, составной частью которой являются сечения взаимодействия.

При выборе узлов ось энергий разбивается на четыре области: 1) гладкого поведения сечений при малых энергиях; 2) разрешенных резонансов; 3) неразрешенных резонансов; 4) гладкого поведения сечений при высоких энергиях. Во всех областях, кроме области неразрешенных резонансов, оцененные данные прямо преобразуются в поточечные сечения. В области неразрешенных резонансов сечения являются суммой вкладов сотен резонансов. Существующий уровень техники не позволяет измерить положение и ширину каждого из них. Именно поэтому данная область энергий называется областью неразрешенных резонансов. В настоящее время в этой области экспериментальные сечения измеряются с грубым разрешением, т. е. получаются усреднением по интервалам энергий, содержащих несколько сотен резонансов. В нейтронных библиотеках неразрешенные резонансы принято описывать статистическим образом. При этом предполагается, что средние значения параметров резонансов являются достаточно гладкими функциями энергии. Отклонение параметров от средних значений описывается статистическими законами, которые имеют вид распределения  $\chi^2$  с заданным числом степеней свободы.

Основная особенность области неразрешенных резонансов состоит в том, что здесь сечения не являются однозначными функциями энергии, а дополнительно зависят от статистических законов распределения параметров резонансов. Это означает, что в каждой точке по энергии имеется некоторое распределение значений сечений, т. е. сечения являются случайными функциями. Случайность сечений создает определенные трудности при решении задач переноса нейтронов, в частности, меняется само уравнение переноса нейтронов. К тому же известно, что если при конструировании

реакторов на тепловых нейтронах можно ограничиться обычным уравнением переноса с грубо разрешенными сечениями, то при создании реакторов на быстрых нейтронах, где спектр нейтронов сосредоточен в области неразрешенных резонансов, требуется учет взаимного влияния резонансов и статистического характера сечений.

В одной из первых статей [2] по проблеме неразрешенных резонансов отмечено, что все трудности можно преодолеть с помощью метода Монте-Карло. По заданным статистическим законам разыгрывается набор резонансов и рассчитывается соответствующая поточечная система сечений. С этой системой сечений решается задача переноса. Затем строится новая реализация сечений, и снова решается задача переноса. Окончательное решение получается усреднением результатов серии расчетов. Однако этот способ никогда не использовался из-за больших вычислительных затрат.

В той же статье был развит приближенный способ учета неразрешенных резонансов, названный методом вероятностных таблиц. Метод сводится к построению вероятностных таблиц распределения значений сечений на интервалах энергий, содержащих сотни неразрешенных резонансов. Он представляет собой обобщение метода подгрупп [3], однако в отличие от этого метода здесь распределение значений сечений формируется не только их изменением по энергии, но и случайностью параметров резонансов. Метод широко используется, но построение вероятностных таблиц связано с выбором ряда параметров, влияние которых трудно оценить при решении задач переноса нейтронов. Это является недостатком метода вероятностных таблиц.

В связи с развитием вычислительной техники (созданием многопроцессорных систем) становится реальной идея прямого учета неразрешенных резонансов, предложенная в [2]. Статья содержит описание двух методов учета неразрешенных резонансов и примеры их использования в программе TDMCC [4].

## 1. Формулы расчета резонансных сечений

В области неразрешенных резонансов сечения трех процессов — упругого рассеяния, деления и  $\gamma$ -захвата — вычисляются как сумма гладкой подложки и резонансных вкладов. Сумму резонансных вкладов будем называть резонансным сечением. Сечения других процессов предполагаются гладкими и рассчитываются модулем RECONR стандартным образом. Для описания резонансных вкладов используется одноуровневый формализм Брейта—Вигнера.

Модуль RECONR создает отдельный файл с поточечной системой средних параметров резонансов. В их число входят ширины указанных выше процессов, среднее расстояние между центрами резонансов и степени свободы соответствующих статистических распределений  $\chi^2$ . Наличие других (конкурирующих) процессов учитывается заданием распределения их суммарной ширины.

Каждой паре квантовых чисел  $(l, J)$  составного ядра соответствует свой тип резонансов, обозначаемый ниже индексом  $\lambda$ . Квантовые числа имеют следующий смысл:  $l$  — орбитальный момент количества движения,  $J$  — полный угловой момент. В зависимости от энергии нейтрона учитывается до трех значений орбитального момента:  $l = 0, 1, 2$ . В совокупности получается около пяти типов резонансов, каждый из которых описывается своим набором параметров.

Таким образом, расчет одного случайного значения резонансного сечения для энергии  $E$  сводится к розыгрышу случайных значений параметров резонансов и вычислению двойной суммы: внешнее суммирование выполняется по типам резонансов, внутреннее — по всем резонансам одного типа, вклад которых заметен в данной точке по энергии. Формулы для расчета случайных значений резонансных сечений в точке  $E$  имеют следующий вид:

$$\sigma_s(E, \omega) = \sigma_p(E) + \sum_{\lambda} \sum_r \sigma_{\lambda r}^m \left[ \left( \frac{\Gamma_{\lambda r}^n}{\Gamma_{\lambda r}} - 2 \sin^2 \theta_l \right) \frac{\frac{\Gamma_{\lambda r}^2}{4}}{\frac{\Gamma_{\lambda r}^2}{4} + (E - E_{\lambda r})^2} + \sin 2\theta_l \frac{\frac{\Gamma_{\lambda r} (E - E_{\lambda r})}{2}}{\frac{\Gamma_{\lambda r}^2}{4} + (E - E_{\lambda r})^2} \right];$$

$$\sigma_p(E) = \sum_l \frac{4\pi}{k^2} (2l + 1) \sin^2 \theta_l;$$

$$\sigma_f(E, \omega) = \sum_{\lambda} \sum_r \sigma_{\lambda r}^m \frac{\Gamma_{\lambda r}^f}{\Gamma_{\lambda r}} \frac{\frac{\Gamma_{\lambda r}^2}{4}}{\frac{\Gamma_{\lambda r}^2}{4} + (E - E_{\lambda r})^2};$$

$$\sigma_{\gamma}(E, \omega) = \sum_{\lambda} \sum_r \sigma_{\lambda r}^m \frac{\Gamma_{\lambda r}^{\gamma}}{\Gamma_{\lambda r}} \frac{\frac{\Gamma_{\lambda r}^2}{4}}{\frac{\Gamma_{\lambda r}^2}{4} + (E - E_{\lambda r})^2}.$$

Здесь  $\sigma_p$  — гладкий потенциальный компонент сечения упругого рассеяния, обусловленный резонансами;  $\sigma_s$ ,  $\sigma_f$ ,  $\sigma_{\gamma}$  — резонансные компоненты в сечениях упругого рассеяния, деления и  $\gamma$ -захвата;  $\theta_l$  — фаза рассеяния. Внешнее суммирование ведется примерно по пяти типам резонансов:  $\lambda = (l, J)$ . С ростом расстояний центров  $E_{\lambda r}$  резонансов от точки  $E$  их вклады в сечение быстро убывают, тем не менее внутренняя сумма содержит обычно сотни членов. Каждый резонанс характеризуется несколькими параметрами: нейтронной шириной  $\Gamma_{\lambda r}^n = \Gamma_{\lambda r}^n(E, \omega)$ , шириной деления  $\Gamma_{\lambda r}^f = \Gamma_{\lambda r}^f(E, \omega)$ , шириной  $\gamma$ -захвата  $\Gamma_{\lambda r}^{\gamma} = \Gamma_{\lambda r}^{\gamma}(E, \omega)$  и полной шириной  $\Gamma_{\lambda r} = \Gamma_{\lambda r}^n + \Gamma_{\lambda r}^f + \Gamma_{\lambda r}^{\gamma} + \Gamma_{\lambda r}^x$ , где  $\Gamma_{\lambda r}^x(E, \omega)$  — ширина конкурирующих процессов. Расположение резонансов на энергетической оси описывается расстояниями  $D_{\lambda r}(E, \omega)$  между центрами  $E_{\lambda r}$  резонансов. Множитель  $\sigma_{\lambda r}^m(E, \omega)$  имеет смысл максимального вклада отдельного резонанса:

$$\sigma_{\lambda r}^m = \frac{4\pi}{k^2} \frac{2J+1}{I+1} \frac{\Gamma_{\lambda r}^n}{\Gamma_{\lambda r}},$$

где  $I$  — полный спин ядра;  $k = 2,19677 \cdot 10^{-3} A \sqrt{E} / (A+1) 10^{-12} / \text{см}$  — волновое число нейтрона,  $A$  — отношение массы изотопа к массе нейтрона.

В приведенных формулах аргумент  $\omega$  является элементом некоторого вероятностного пространства и служит для обозначения случайного характера соответствующих функций. Фиксированным значениям аргумента  $\omega$  отвечают выборочные значения функций. Выборочные значения параметров резонансов определяются из статистических законов.

Законы распределения ширин имеют вид распределения  $\chi^2$  с  $\nu$  степенями свободы:

$$P_{\nu}(y) = \frac{\nu}{2G} \left(\frac{\nu y}{2}\right)^{\nu/2-1} e^{-\nu y/2}, \quad y = \frac{\Gamma_{\lambda r}^c}{\bar{\Gamma}_{\lambda r}^c}, \quad \int_0^{\infty} P_{\nu}(y) dy = 1,$$

где  $G(x)$  — гамма-функция;  $\bar{\Gamma}_{\lambda r}^c$  — средняя ширина процесса  $c$ .

Расстояние между резонансами одного типа подчиняется распределению Вигнера:

$$P(z) = \frac{\pi}{2} e^{-\pi z^2/4}, \quad z = \frac{D_{\lambda r}}{\bar{D}_{\lambda r}}, \quad \int_0^{\infty} P(z) z dz = 1,$$

где  $\bar{D}_{\lambda r}(E)$  — среднее расстояние между резонансами.

**1.1. Формулы расчета тепловых сечений.** Приведенные формулы расчета резонансных сечений определяют холодные сечения, т. е. их можно использовать только для нулевой температуры среды. Чтобы получить сечения для температуры  $T$ , надо усреднить холодные сечения по скоростям движения ядер среды. Распределение скоростей ядер обычно описывается распределением Максвелла. Процесс усреднения приводит к так называемому доплеровскому уширению резонансов. Сечения с учетом уширения резонансов называют тепловыми сечениями при температуре  $T$ .

В литературе существует несколько алгоритмов численного усреднения поточечных систем сечений [5]. Однако в области неразрешенных резонансов эти алгоритмы трудно реализовать из-за случайности значений холодных сечений. С другой стороны, в формулах для резонансных сечений предполагается, что параметры резонансов являются достаточно гладкими функциями энергии.

Например, модуль RECONR для построения поточечной системы данных по параметрам резонансов использует не более 250 узлов по энергии, хотя для некоторых элементов область неразрешенных резонансов составляет около 100 кэВ. Поэтому при усреднении сечений в точке  $E$  резонансные параметры считаются постоянными, равными своим значениям при рассматриваемой энергии  $E$ . В результате формулы для расчета тепловых сечений удастся выразить через реальную и мнимую компоненты интеграла ошибок [6]:

$$\begin{aligned}\sigma_s(E, \omega) &= \sum_l \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2 \theta_l + \sum_\lambda \sum_r \sigma_{\lambda r}^m \left[ \left( \frac{\Gamma_{\lambda r}^n}{\Gamma_{\lambda r}} - 2 \sin^2 \theta_l \right) \psi(a, x) + \sin 2\theta_l \chi(a, x) \right]; \\ \sigma_f(E, \omega) &= \sum_\lambda \sum_r \sigma_{\lambda r}^m \frac{\Gamma_{\lambda r}^f}{\Gamma_{\lambda r}} \psi(a, x); \quad \sigma_\gamma(E, \omega) = \sum_\lambda \sum_r \sigma_{\lambda r}^m \frac{\Gamma_{\lambda r}^\gamma}{\Gamma_{\lambda r}} \psi(a, x).\end{aligned}$$

Введенные здесь функции  $\psi$  и  $\chi$  связаны с комплексным интегралом ошибок  $W(a, x)$  соотношениями

$$\psi(a, x) = a\sqrt{\pi} \operatorname{Re} W(x, a); \quad \chi(a, x) = a\sqrt{\pi} \operatorname{Im} W(x, a); \quad W(a, x) = \frac{i}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-t^2} dt}{x + ia - t}.$$

Здесь  $a = \Gamma_{\lambda r}/(2\Delta)$ ;  $x = (E - E_{\lambda r})/\Delta$ , где  $\Delta = \sqrt{4kTE/A}$  — доплеровская ширина для температуры  $T$ ;  $k$  — константа Больцмана.

Подробный вывод приведенных формул расчета тепловых сечений можно найти в монографии [7].

**1.2. Формулы расчета экспериментальных сечений.** В области неразрешенных резонансов экспериментальные сечения известны только с грубым разрешением. Это означает, что результат измерения в точке  $E$  представляет собой средние от реальных значений сечений по окрестности этой точки, содержащей сотни неразрешенных резонансов.

Получим схему расчета экспериментальных сечений из формул расчета холодных резонансных сечений. Для этого возьмем окрестность  $\Delta E$  точки  $E$ , содержащую достаточно большое число резонансов, и усредним по ней холодные сечения. Усреднение сводится к интегрированию по энергии каждого резонанса в этой окрестности. Отметим, что при усреднении грубость измерений позволяет считать параметры резонансов постоянными, равными своим значениям в центре окрестности.

Из свойств распределения расстояний между резонансами следует, что в окрестности  $\Delta E$  будет в среднем около  $N_\lambda = \Delta E/\bar{D}_\lambda$  резонансов типа  $\lambda$ . Кроме того, считая окрестность  $\Delta E$  достаточно большой, пределы интегрирования при усреднении резонансов можно распространить до бесконечности. Нетрудно видеть, что тогда интеграл от каждого резонанса будет равен  $\pi$  и внутренняя сумма будет состоять из  $N_\lambda$  слагаемых, значения которых имеют одинаковый статистический закон распределения. Это означает, что после усреднения внутренняя сумма будет равна произведению  $\pi N_\lambda \langle \cdot \rangle$ , где символом  $\langle \cdot \rangle$  обозначено усреднение по статистическим законам распределения ширин резонансов.

В результате приходим к следующим формулам расчета экспериментальных сечений в точке  $E$ :

$$\begin{aligned}\sigma_s(E) &= \sum_l \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2 \theta_l + \frac{2\pi^2}{k^2} \sum_\lambda \frac{2J+1}{I+1} \frac{1}{\bar{D}_\lambda} \left( \left\langle \frac{\Gamma_\lambda^n \Gamma_\lambda^n}{\Gamma_\lambda} \right\rangle - 2\bar{\Gamma}_\lambda^n \sin^2 \theta_l \right); \\ \sigma_f(E) &= \frac{2\pi^2}{k^2} \sum_\lambda \frac{2J+1}{I+1} \frac{1}{\bar{D}_\lambda} \left\langle \frac{\Gamma_\lambda^n \Gamma_\lambda^f}{\Gamma_\lambda} \right\rangle; \quad \sigma_\gamma(E) = \frac{2\pi^2}{k^2} \sum_\lambda \frac{2J+1}{I+1} \frac{1}{\bar{D}_\lambda} \left\langle \frac{\Gamma_\lambda^n \Gamma_\lambda^\gamma}{\Gamma_\lambda} \right\rangle.\end{aligned}$$

Отметим, что эти формулы получены из формул для холодных резонансных сечений. Для тепловых сечений формулы надо усреднить по распределению Максвелла с температурой  $T$ .

Из сделанных выше предположений следует, что экспериментальные холодные сечения имеют гладкое поведение как функции энергии. Учитывая это, можно показать, что при невысоких температурах около 1 эВ тепловые сечения с грубым разрешением достаточно хорошо совпадают с соответствующими холодными сечениями. Аналогичный результат получается, если попытаться

вывести тепловые сечения грубого разрешения путем усреднения по окрестности  $\Delta E$  тепловых резонансных сечений, приведенных в подразд. 1.1.

Из этого наблюдения следует, что рассчитанные значения резонансных сечений в точке  $E$  полезно перенормировать на сечения грубого разрешения в этой точке, взятые из соответствующей библиотеки нейтронных данных, чтобы иметь полное совпадение рассчитанных и библиотечных данных грубого разрешения.

## 2. Два метода учета неразрешенных резонансов

Здесь рассматриваются два способа учета неразрешенных резонансов при решении задач переноса нейтронов методом Монте-Карло. Первый способ — это широко используемый метод вероятностных таблиц [8–10]. Он является обобщением метода подгрупп [3], развитого для учета разрешенных резонансов в групповых методах решения задач переноса. Обобщение связано с тем, что в области неразрешенных резонансов распределение значений сечений на интервале энергий формируется не только их зависимостью от энергии, но и статистическими законами распределения параметров резонансов. Второй метод основан на идее прямого учета резонансов, высказанной в 1972 г. в статье [2].

**2.1. Метод вероятностных таблиц.** Из-за случайности сечений естественным инструментом построения вероятностных таблиц является метод Монте-Карло. В библиотеке NJOY имеется модуль PURR, который рассчитывает вероятностные таблицы распределения значений сечений методом Монте-Карло. Таблицы рассчитываются в узловых точках по энергии, совпадающих с узлами, в которых заданы параметры резонансов. Предполагается, что между узловыми точками распределения значений сечений определяются с помощью линейной интерполяции.

Вероятностные таблицы определяют распределение значений сечений на интервале энергий  $[E_{\min}, E_{\max}]$  из некоторой окрестности узла  $E$ . Предполагается, что интервал удовлетворяет двум условиям: он содержит достаточно много резонансов, и в нем параметры резонансов можно считать постоянными, равными своим значениям в узле  $E$ . Второе условие означает, что вклад отдельного резонанса в сечение зависит только от разности энергий нейтрона и резонанса, поэтому точку отсчета энергии можно выбрать произвольно. Вклад отдельного резонанса быстро убывает с ростом разности энергий нейтрона и резонанса.

В сечения из интервала энергий  $[E_{\min}, E_{\max}]$  дают вклад также резонансы, лежащие вне интервала. Поэтому полезно ввести дополнительную окрестность  $[E_{low}, E_{high}]$ , определяемую границами учитываемых резонансов. В модуле PURR левая граница резонансов выбирается у всех узлов равной  $E_{low} = 16$  эВ. Правая граница резонансов определяется по формуле  $E_{high} = E_{low} + N_r d_{\min}$ , где  $N_r = 1\,000$  — заданное максимальное число резонансов,  $d_{\min}$  — минимальное среднее расстояние между резонансами.

Интервал энергий  $[E_{\min}, E_{\max}]$  для расчета таблиц сечений выбирается следующим образом:

$$E_{\min} = E_{low} + N_o d; \quad E_{\max} = E_{high} - N_o d, \quad \text{где } N_o \approx 300, \quad d = \left( \sum_{\lambda} \frac{1}{\bar{D}_{\lambda}} \right)^{-1}.$$

При  $N_o \gg 1$  сечения практически не зависят от положения самого левого резонанса, поэтому его можно выбрать произвольным образом. В модуле PURR самый левый резонанс в окрестности  $[E_{low}, E_{high}]$  вычисляется по формуле  $E_{\lambda 1} = E_{low} + \bar{D}_{\lambda} \xi$ , где  $\lambda$  — тип резонанса,  $\xi \in [0, 1]$  — случайное число. Положения следующих резонансов определяются из рекуррентного соотношения  $E_{\lambda r} = E_{low} + \bar{D}_{\lambda} \zeta$ , где  $\zeta = \sqrt{-4 \ln \xi / \pi}$  — случайная величина, распределенная по закону Вигнера.

Для учета температуры среды  $T$  вероятностные таблицы должны определять распределение значений тепловых сечений на интервале  $[E_{\min}, E_{\max}]$ . Алгоритм расчета таблиц основан на проведении серии испытаний методом Монте-Карло. Каждое испытание состоит из построения в окрестности  $[E_{low}, E_{high}]$  выборочной системы резонансов и расчета из этой системы значений тепловых сечений в равномерно выбранных точках  $E_i$  интервала  $[E_{\min}, E_{\max}]$ . Предполагается, что достаточно примерно  $N = 5\,000$  случайных точек  $E_i$  для описания изменения сечений как функций энергии. Для упрощения алгоритма точки  $E_i$  полезно упорядочить по возрастанию.

Формулы расчета значений сечений содержат два суммирования: внешнее — по типам резонансов, внутреннее — по последовательности резонансов одного типа.

Для вычисления внутренней суммы последовательно разыгрываются положения  $E_{\lambda r}$  резонансов типа  $\lambda$ . Для каждого нового резонанса разыгрываются значения всех ширин: нейтронной  $\Gamma_{\lambda r}^n$ , ширины деления  $\Gamma_{\lambda r}^f$ , ширины  $\gamma$ -захвата  $\Gamma_{\lambda r}^\gamma$  и ширины конкурирующих процессов  $\Gamma_{\lambda r}^x$ , после чего вычисляется  $\Gamma_{\lambda r}$  — полная ширина резонанса:  $\Gamma_{\lambda r} = \Gamma_{\lambda r}^n + \Gamma_{\lambda r}^f + \Gamma_{\lambda r}^\gamma + \Gamma_{\lambda r}^x$ . Очевидно, что вклад в сечения отдельного резонанса будет заметен только в точках  $E_i$ , близких к энергии резонанса  $E_{\lambda r}$ . Критерием близости в модуле PURR выбран промежуток энергии  $\Delta E = c_1 \Gamma_{\lambda r} + \max\{c_1 \Gamma_{\lambda r}, c_2 \Delta\}$ , где  $c_1 \approx 32$ ;  $c_2 \approx 20$ ;  $\Delta$  — ширина Доплера в узле  $E$  при температуре  $T$ . Расчет внутренней суммы заканчивается, когда энергия очередного резонанса оказывается больше правой границы  $E_{high}$ .

Учет внешней суммы сводится к повторению описанного алгоритма до исчерпания всех типов резонансов. В результате в точках  $E_i$  получаются случайные значения резонансных сечений. К ним при необходимости добавляются плавные сечения подложки. Очевидно, что процесс получения сечений сопровождается построением выборочной системы резонансов с параметрами, разыгранными по заданным законам распределения.

Отметим, что имеются некоторые трудности при оценке вероятностных таблиц на испытаниях. Таблицы определяют вероятность появления на интервале  $[E_{min}, E_{max}]$  полного сечения из заданной полосы значений. Предполагается, что границы полос выбраны так, чтобы в соседних полосах вероятности мало отличались, и что число полос невелико, около 20. Очевидно, что практически невозможно заранее выбрать границы полос. В модуле PURR предлагается выбирать границы полос на первом испытании путем анализа полученной структуры полного сечения на интервале энергий  $[E_{min}, E_{max}]$ . При известных границах оценка таблиц сводится к подсчету числа попаданий в полосы рассчитанных в точках  $E_i$  значений полного сечения. Одновременно оцениваются средние значения в полосах сечений для процессов рассеяния, деления и  $\gamma$ -захвата.

После окончания заданного числа испытаний  $L$  выполняется нормировка результатов серии испытаний. Накопленные по полосам суммы сечений процессов нормируются на число попаданий в данную полосу значений полного сечения. В результате получаются средние значения сечений процессов в каждой полосе. Вероятностные таблицы получаются с помощью нормировки чисел попаданий в полосы значений полного сечения. При этом нормировка равна произведению  $NL$ , где  $N$  — число используемых точек  $E_i$  на интервале  $[E_{min}, E_{max}]$ . Средние значения сечений процессов по полосам можно рассматривать как условные средние для соответствующей вероятности значения полного сечения.

Входными данными для расчета таблиц служат два файла. В первом файле находятся данные по сечению подложки, а во втором файле записаны параметры статистических законов для каждого типа резонанса.

**2.2. Метод прямого учета неразрешенных резонансов.** Идея прямого учета резонансов была предложена в 1972 г. в статье [2]. Она заключается в проведении серии расчетов задачи переноса. Каждый из расчетов выполняется с табличными сечениями, вычисленными по случайному независимому набору параметров резонансов, и решение задачи находится усреднением результатов серии расчетов. В такой формулировке и при существовавшем уровне развития ЭВМ идея была практически нереализуема из-за больших вычислительных затрат на расчет серии задачи и большого объема памяти для хранения таблиц с резонансными сечениями.

В настоящее время объем памяти около 1–2 млн слов на изотоп не является запретным, тем более что число изотопов, для которых требуется учитывать неразрешенные резонансы, невелико.

Рассмотрим вторую проблему — затраты на проведение серии расчетов. В современных программах Монте-Карло траектории нейтронов моделируются пачками с заданным числом частиц. Отсюда сразу следует идея моделировать в области неразрешенных резонансов каждую пачку или группу пачек по случайному независимому набору сечений. Нетрудно видеть, что эта процедура приводит к автоматическому усреднению результатов решения задачи по независимым наборам резонансных сечений.

Для реализации процедуры требуется перед началом моделирования пачки рассчитывать новую независимую таблицу резонансных сечений. Очевидно, что для расчета новых таблиц сечений удоб-

но использовать параллельные вычисления. Алгоритм расчета независимых резонансных сечений можно взять из процедуры расчета вероятностных таблиц, где независимые таблицы резонансных сечений создаются на каждом испытании. Отметим, что эти таблицы сечений имеют одну особенность: они рассчитываются в случайно выбранных точках по энергии. В данном случае резонансные сечения удобно рассчитывать на равномерной сетке. В принципе, в окрестности каждого узла задания параметров резонансов сетка может выбираться со своим шагом по энергии. Нетрудно видеть, что таблицы сечений в окрестности одного узла или группы узлов можно вычислять независимо на отдельных процессорах.

Таким образом, в настоящее время имеется возможность решать задачи с прямым учетом неразрешенных резонансов без приближений, присущих методу вероятностных таблиц.

### 3. Результаты тестирования

Предложенные методы учета неразрешенных резонансов были реализованы в программе TDMCC [4] и протестированы на ряде задач. Первые две задачи были взяты из работ [8, 11] и позволили провести сравнение полученных результатов с результатами программы MCNP [11]. Также были выполнены расчеты двух модельных задач атомной энергетики.

**3.1. Сравнение с программой MCNP.** Первая задача использовалась при тестировании метода вероятностных таблиц в программе MCNP [11]. Представлена бесконечная однородная среда со следующим составом (в процентах атомов): 8,9286  $^{239}\text{Pu}$ , 89,2857  $^{238}\text{U}$ , 1,7857 Н. Плотность полагается равной 1. Значения коэффициентов размножения нейтронов без учета неразрешенных резонансов, полученные по программам MCNP и TDMCC, равны соответственно 1,49337 (0,00165) и 1,48931 (0,001) (в скобках указано стандартное отклонение). В табл. 1 приводятся аналогичные результаты, полученные с учетом неразрешенных резонансов.

В качестве второй задачи использовался тест BIG TEN [8]. Геометрия системы представляет собой два вложенных друг в друга цилиндра. Ядро имеет радиус 26,67 см и полудлину 27,94 см. Радиус отражателя 41,91 см, полудлина 48,26 см. Состав ядра:  $^{234}\text{U}$  (0,00005),  $^{235}\text{U}$  (0,00484),  $^{238}\text{U}$  (0,04268); состав отражателя:  $^{235}\text{U}$  (0,0001),  $^{238}\text{U}$  (0,04797). Значения коэффициентов размножения нейтронов без учета неразрешенных резонансов, полученные по программам MCNP и TDMCC, равны соответственно 1,0069 (0,0005) и 1,006983 (0,002). Результаты расчетов с учетом неразрешенных резонансов представлены в табл. 2.

Таблица 1

#### Результаты расчета первой задачи

Критический параметр	MCNP, метод вероятностных таблиц	TDMCC, метод прямого учета	TDMCC, метод вероятностных таблиц
$k_{эф}$ с учетом неразрешенных резонансов	1,51068 (0,00129)	1,513182 (0,001)	1,512849 (0,001)
$\Delta k_{эф}$	0,01731	0,023872	0,023539

Таблица 2

#### Результаты расчета второй задачи

Критический параметр	MCNP, метод вероятностных таблиц	TDMCC, метод прямого учета	TDMCC, метод вероятностных таблиц
$k_{эф}$ с учетом неразрешенных резонансов	1,0112 (0,0005)	1,011381 (0,002)	1,011127 (0,002)
$\Delta k_{эф}$	0,0043	0,004398	0,004144

Достаточная близость результатов расчета двух задач, полученных авторами, и результатов по программе MCNP, взятых из статей [8, 10], свидетельствует о корректном использовании алгоритма модуля PURR библиотеки NJOY.

**3.2. Модельные задачи атомной энергетики.** Следующие две задачи демонстрируют необходимость учета неразрешенных резонансов при рассмотрении важного для физики реакторов вопроса — температурного эффекта, или эффекта Доплера. Эффект Доплера играет существенную роль в реакторах. В результате деления ядер температура в реакторе изменяется, а значит, изменяется и соотношение между высотой и шириной резонансов (известно, что влияние теплового движения ядер (атомов) среды сводится к уменьшению высоты и увеличению ширины резонансов).

Рассмотрим систему, которая представляет собой бесконечную среду, состоящую из чередующихся плоских слоев, моделирующих топливную зону с отражателем. Топливная зона представляет собой диоксид урана плотностью  $10,6 \text{ г/см}^3$  с обогащением 15 % по  $^{235}\text{U}$ . В качестве отражателя в одной задаче использовался карбид бора, в другой — диоксид урана с обогащением 90 %. Исходные данные задач приведены в табл. 3.

Расчеты проводились для температур 273, 500, 1 000, 1 500, 2 000 К. Результаты представлены в табл. 4, где  $k_{эф0}$ ,  $k_{эф1}$ ,  $k_{эф2}$  — эффективные коэффициенты размножения нейтронов без учета неразрешенных резонансов, с учетом прямым методом и методом вероятностных таблиц соответственно;  $\Delta k_{эф1} = k_{эф1} - k_{эф0}$ ;  $\Delta k_{эф2} = k_{эф2} - k_{эф0}$ . Точность всех расчетов  $\sim 0,003 \%$ .

Как видно из табл. 4, с ростом температуры разница между эффективными коэффициентами размножения нейтронов, полученными с учетом и без учета резонансов, уменьшается.

На рис. 1, 2 для двух задач представлены графики отклонений коэффициента размножения нейтронов от начального значения с ростом температуры. Из рисунков видно, что при учете нераз-

Таблица 3

**Исходные данные двух модельных задач атомной энергетики**

Задача	Топливо		Отражатель	
	Ядерные концентрации, $10^{24}/\text{см}^3$	Толщина слоя, см	Ядерные концентрации, $10^{24}/\text{см}^3$	Толщина слоя, см
1	O ( $4,735423 \cdot 10^{-2}$ )	17	C ( $2,673694 \cdot 10^{-2}$ )	3
	$^{238}\text{U}$ ( $2,012555 \cdot 10^{-2}$ )		$^{10}\text{B}$ ( $5,347388 \cdot 10^{-2}$ )	
	$^{235}\text{U}$ ( $3,551567 \cdot 10^{-3}$ )		$^{11}\text{B}$ ( $5,347388 \cdot 10^{-2}$ )	
2	O ( $4,735423 \cdot 10^{-2}$ )	10	O ( $4,775370 \cdot 10^{-2}$ )	10
	$^{238}\text{U}$ ( $2,012555 \cdot 10^{-2}$ )		$^{238}\text{U}$ ( $2,387685 \cdot 10^{-3}$ )	
	$^{235}\text{U}$ ( $3,551567 \cdot 10^{-3}$ )		$^{235}\text{U}$ ( $2,148916 \cdot 10^{-2}$ )	

Таблица 4

**Результаты расчетов двух модельных задач**

Задача	T, К	$k_{эф0}$	$k_{эф1}$	$k_{эф2}$	$\Delta k_{эф1}$	$\Delta k_{эф2}$
1	273	0,85319	0,85543	0,85544	0,00224	0,00225
	500	0,85274	0,85455	0,85453	0,00181	0,00179
	1 000	0,85221	0,85362	0,85364	0,00141	0,00143
	1 500	0,85195	0,85318	0,85319	0,00124	0,00124
	2 000	0,85176	0,85296	0,85293	0,00120	0,00117
2	273	1,96164	1,96544	1,96545	0,00380	0,00381
	500	1,96141	1,96438	1,96438	0,00297	0,00297
	1 000	1,96108	1,96348	1,96347	0,00240	0,00238
	1 500	1,96084	1,96294	1,96300	0,00210	0,00215
	2 000	1,96076	1,96262	1,96268	0,00186	0,00191



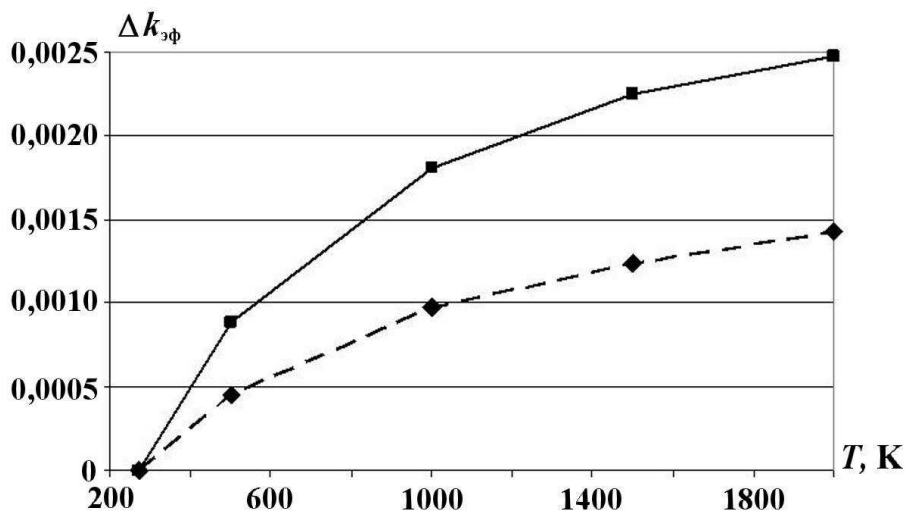


Рис. 1. Отклонения коэффициента размножения нейтронов от начального значения с ростом температуры для модельной задачи с отражателем из карбида бора: ---◆--- без учета неразрешенных резонансов; —■— с учетом неразрешенных резонансов

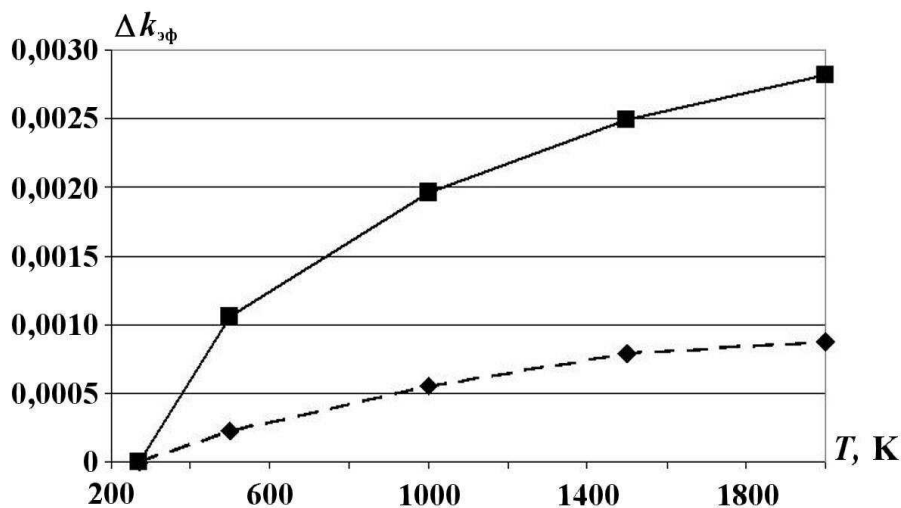


Рис. 2. Отклонения коэффициента размножения нейтронов от начального значения с ростом температуры для модельной задачи с отражателем из 90 %  $^{235}\text{U}$ : ---◆--- без учета неразрешенных резонансов; —■— с учетом неразрешенных резонансов

решенных резонансов температурная зависимость эффективного коэффициента размножения нейтронов выражена более ярко.

Проведенные расчеты показывают, что в ряде задач на перенос нейтронов учет неразрешенных резонансов оказывает существенное влияние на результаты. Метод прямого учета неразрешенных резонансов и метод вероятностных таблиц дают близкие результаты.

### Список литературы

1. MacFarlane R., Muir D. The NJOY Nuclear Data Processing System. Version 91. Los Alamos National report LA-12740-M, 1994.

2. *Levitt B.* The probability table method for treating unresolved neutron resonances in Monte-Carlo calculations // Nucl. Sci. and Eng. 1972. Vol. 49. P. 450—457.
3. *Николаев М. Н., Хохлов В. Ф.* Система подгрупповых констант: Бюллетень информационного центра по ядерным данным. Вып. 4. М.: Атомиздат, 1967. С. 392.
4. Программа TDMCC (Time Dependent Monte-Carlo Code). Свидетельство о государственной регистрации № 2010614412 // Электронный бюллетень. 2010. № 2. <http://www.fips.ru>.
5. *Cullen D., Weisbin C.* Exact Doppler broadening of tabulated cross sections // Nucl. Sci. and Eng. 1976. Vol. 60. P. 199—229.
6. *Абрамовиц М., Стиган И.* Справочник по специальным функциям. М.: Наука, 1979. С. 119.
7. *Белл Д., Глестон С.* Теория ядерных реакторов. М.: Атомиздат, 1974. С. 336.
8. *Little R., MacFarlane R.* ENDF/B-VI Neutron Library for MCNP with Probability Tables. Los Alamos National report LA-UR-98-5718, 1998.
9. *Zheng S., Vergnaud T., Nimal J.* Neutron cross-sections probability tables in TRIPOLI-3 Monte-Carlo transport code // Nucl. Sci. and Eng. 1998. Vol. 128. P. 321.
10. *Martin N., Hebert A.* A Monte-Carlo lattice code with probability tables and optimized energy meshes // Ibid. 2011. Vol. 167. P. 177—195.
11. *Carter L., Little R., Hendricks J., MacFarlane R.* New Probability Table Treatment in MCNP for Unresolved Resonances. Los Alamos National report LA-UR-98-26, 1998.

Статья поступила в редакцию 18.07.13.

---