

Программный пакет для определения средних резонансных параметров из  
экспериментальных данных по пропусканию с использованием оцененных  
ядерных данных

(система FEDFIT)

П. Вертеш

Резюме

Использованы возможности программного пакета FDMXPC [1] для поправки экспериментального пропускания с целью получения средних нейтронных ширин. Представлены модули, которые 1 - рассчитывает средние параметры из разрешенных резонансных параметров, 2- корректирует экспериментальные данные по эффекту самоэкранирования с целью получения среднегрупповых полных сечений. 3- производит подгонку средних нейтронных ширин к экспериментальным среднегрупповым сечениям.

Program package for determination of average resonance parameters  
from experimental transmission data by making use of evaluated  
neutron data

*P. Vertes*

Abstract

The possibilities of FDMXPC [1] package are used for the self-shielding correction of measured neutron transmission in order to gain average neutron width. The following modules are presented: 1 - calculating average neutron parameters from the statistics of the resolved ones. 2 - correcting experimental data in order to get group-averaged total cross-sections, 3 - fitting average neutron widths to group averaged total cross-sections.

25 дек. 89

## 1. Введение

С помощью моделирования экспериментов пропускания возможно корректировать результаты для больших толщин применяя следующие формулы

$$\sigma_{\text{ЭКС}}^i = (\ln T_c^i + \sigma_c h_i - \ln T_{\text{ЭКС}}^i) / h_i$$

и

$$\sigma_{\text{ЭКС}} = \sum_i w_i^{-2} \sigma_{\text{ЭКС}}^i / \sum_i w_i^{-2}$$

где

$$w_i = \frac{\Delta T_{\text{ЭКС}}^i}{T_{\text{ЭКС}}^i h_i}$$

$\Delta T_{\text{ЭКС}}^i$  экспериментальная погрешность пропускания. Погрешность среднегруппового полного сечения

$$\Delta \sigma_{\text{ЭКС}} = \sqrt{(\sum w_i^2) / N^{3/2}}$$

где  $N$  число образцов разных толщин,  $h_i$  толщина образца  $i$ . Индексы экс и с указывают на экспериментальные и на расчетные величины.

Корректированные полные сечения могут быть использованы для уточнения средних резонансных параметров с помощью подгонки. Исходным значением для подгонки могут быть приняты те средние параметры которые получаем из статистики параметров разрешенных резонансов. Подробности о проведения этой статистики можно найти в [2].

Минимизируемой функцией подгонки является

$$L = \sum_{k=1}^M \sum_{j=1}^G \frac{(\sigma_{jk}^{\text{ЭКС}} - \sigma_{jk}^{\text{HF}})^2}{\Delta \sigma_{jk}^{\text{ЭКС}2} + z_{jk}^2}$$

где  $\sigma_{jk}^{\text{HF}}$  сечение рассчитанное по теории Хаузера-Фешбаха,

$z_{jk}$  оцененная флуктуационная ошибка сечения.  $G$  - число групп,  $M$  - число типов сечений т. е. индекс  $k$  может означать полное, упругое, делительное и  $(n, \gamma)$  сечение.

## 2. Общие сведения о модулях FEDFIT

В большинстве модули FEDFIT происходят из программной системы

FEDMIX [2]. Эти модули являются отдельной программой.

В головной подпрограмме любой программы описан массив используемый для динамического программирования, передаваемый через список формальных параметров. В головной программе вызываются и функции времени, даты которые распечатываются.

Фортрановский номер файлов в модулях в большинстве случаев являются зафиксированными и связь с актуальными файлами устанавливается с помощью команды SET.

Любая программа запускается командой:

имя программы/R 4096 < программа .INP > программа .OUT

В пакете даются образцовые файлы .BAT, которые облегчают запуск задачи.

Система ввода по сравнению с FEDMIX полностью изменена из-за отсутствия оператора NAMELIST. Контрольный ввод происходит в свободном формате где в одном ряду находится только один-два элемента ввода. С модулями дается образец ввода, где комментарий текст, находящийся в остальной части ряда, облегчает составление ввода в конкретном случае. Кроме того, дается рекомендованное значение для некоторых параметров.

Ниже кратко описываются модули пакета и даются самые важные сведения о их использовании. В описании файлов ввода величины означенные знаком # имеют рекомендованные значения.

### 3. Описание отдельных модулей системы FEDFIT

#### 3.1 Средние резонансные параметры из статистики разрешенных резонансных параметров

Модуль вызывается как CALL RESGES(W,W,L).

Для этой программы следует составить следующий файл ввода:

MATN название материала в РФОД-е  
'CIRC' или 'FRONN' используемый метод статистики  
SIG2 постоянная для формулы плотности уровней #  
ANUF число делительных каналов #  
NIF максимальное число итерации в процедуре Фронер-а #

Программа может быть запущена следующей командой:

RESGE <путь:название файла РФОД, где разрешенные параметры>  
<путь:название РФОД файла, где средние параметры будут>

### 3.2 Модуль для ввода экспериментальных и прочих данных

Данные, прочитанные через контрольный ввод, записываются в СФГК файл. Для каждой энергетической группы отдельный набор. (Соединение может быть совершено с модулем SFGKS см. [1].) Модуль вызывается как CALL SFGKI(W,W,L)

Ввод для модуля

LAA =1 открывает новый СФГК; >0 СФГК продолжается от этого слова; =-1 то СФГК продолжается от конца.

MATN, NTNAM, NFEL, KDAT первые четыре идентификатора записываемого набора

T температура

NSI число слоев

(D(I), I=1, NSI) толщины слоев

IG номер группы (если =0, то ввод кончается)

Далее для каждой толщины:

разбавленные сечения (полное,  $(n, \gamma)$ , упругое и деление), пропускание,  $(n, \gamma)$ , упругое и деление самоиндикация;

- средний поток в группе

Ввод продолжается со следующей группой пока номер группы 0 не станет.

При использовании предполагается что файл вводимых данных имеет название <...>. INP и подготовлен файл ввода для соединения наборов с помощью SFGKS под названием SFGKCOMP.INP (см. [1]). Тогда можно вызвать пакет

SFGI <путь:<...>> <путь:название СФГК файла >

### 3.3 Модуль для получения экспериментального среднегруппового полного сечения

Рассчитанные пропускания используются для получения поправки на самоэкранировки. Таким образом станет возможным использовать пропускание каждой толщины для определения полного сечения [1].

Рассчитанные среднегрупповые сечения и пропускания должны находиться в СФГК файле. В том же файле должны быть заведены

экспериментальные пропускания и экспериментальные ошибки как отдельные наборы СФГК. Полученные экспериментальные полные сечения образуют набор СФГК и заведутся в другой СФГК файл. Название материала в вводном файле для всех материалов должно быть одинаково.

Модуль вызывается как CALL EXPER(W,W,L).

Ввода для этого модуля:

LAA =-1 открывает новый СФГК; >0 СФГК продолжается от этого слова; --1 то СФГК продолжается от конца.  
XGRU 8-значная константа для определения групповой системы (см. [1])  
NR1,NR2 первая и последняя группа в расчете  
MATN название материала во вводном файле  
NTNC название типа расчетных данных  
NFEL =4 (константа)  
KDAT название счета  
NR(1) первая группа расчетных сечений  
NR(2) последняя группа расчетных сечений  
ND(1),ND(2) первая и последняя толщина  
NTNE название типа для экспериментального набора  
NTNR название типа для набора ошибками  
MATNI название материала для набора полного сечения  
NTNI название типа для набора полного сечения

Программа может быть запущена следующей командой:

EXPE <путь:название файла СФГК, где вводимые величины>  
<путь:название СФГК файла, где полные сечения будут>

### 3.4 Оценка средних резонансных параметров с помощью экспериментальных среднегрупповых сечений

В подгонке принимаются во внимание экспериментальная ошибка измеренных сечений и флуктуационная ошибка расчетных среднегрупповых сечений. Последние получают оценкой статистики проводимой модулем STATFU [1]. Исходные значения средних резонансных параметров можно получить статистической оценкой разрешенных параметров. Эти исходные параметры должны быть в формате РФОД. Экспериментальные сечения, их погрешность и флуктуационные ошибки должны находиться в наборе СФГК. Подгоненные параметры записываются в новый файл в форме РФОД.

Вызов модуля: CALL FITVE(W,W,L).

Управляющий ввод следующий:

|             |  |
|-------------|--|
| NTNI        | название типа для набора экспериментального сечения                              |
| NTNF        | название типа для набора расчетной флуктуации                                    |
| KDATI       | название счета для набора экспериментального сечения                             |
| KDATF       | название счета для набора расчетной флуктуации                                   |
| EMAX        | максимальная энергия групповой системы   |
| ND(1),ND(2) | первая и последняя толщина   |
| NR1,NR2     | первая и последняя группы  |
| MATN        | название материала ( В РФОД-е и в наборах СФГК должно быть одинаковое название ) |
| EPS         | точность подгонки#   |
| NITE        | максимальное число итерации при подгонки#  |
| ITP         | частота печатание результатов при подгонке#                                      |
| NLETH       | величина определяющее точность расчета#  |
| XFLU        | 8-значная константа для определения потока                                       |
| PK          | точка сшивки спектра 1/E со спектром деления#                                    |

Вводятся элементы матрицы  $JL(1:4,1:LMAX)$ , где LMAX является числом серии разных орбитальных моментов  $\ell$  и  $JL(I,L)$  - относится параметрам  $D^\ell$ ,  $\Gamma_{n0}^\ell$ ,  $\Gamma_f^\ell$ , и  $\Gamma_\gamma^\ell$  соответственно  $I=1, 2, 3, 4$  и может иметь следующие значения:

- 1 то соответствующий параметер не изменяется при подгонке
- >0 то соответствующий параметер подгоняется скоростью  $1/JL(I,L)$

После этой матрицы в новом ряду следует 4 целых числа значение которых 1 или 0 в зависимости от того что полное сечение, упругое сечение,  $(n, \gamma)$  сечение или сечение деления участвует или нет в процессе подгонки.

Программа может быть запущена следующей командой:

```
FITV <путь:название файла РФОД с исходными средними параметрами>  
<путь:название файла СФГК, где имеются сечения и флуктуации>  
<путь:название файла РФОД, где новые средние параметры будут>
```

## Приложение 1

### Програмный пакет FEDFIT

Програмный пакет FEDFIT составлен из следующих единиц:

- Общая головная программа на языке фортран:

FDPI.for

- Подпрограммы на языке фортран

RESGES.FOR, SFGKI.FOR, EXPER.FOR FITVE.FOR

Используются некоторые подпрограммы из системы FDMXPC поэтому при составлении работающих модулей следует использовать FDMXL1.LIB и FDMXL2.LIB из пакета FDMXPC. Добавляется еще библиотека

FDPI.LIB.

Имеются следующие файлы образцы ввода:

RESGES.INP, EXPER.INP, FITVE.INP.

Файлы .BAT для счета:

RESGE.BAT, SFGI.BAT, EXPE.BAT, FITV.BAT

## Приложение 2

### Схема получения средние резонансные параметры с помощью модулей систем FDMXPC и FEDFIT

Оцененные данные  $\Rightarrow$  модуль предварительной обработки  $\Rightarrow$  РФОД-1

РФОД-1  $\Rightarrow$  модуль MIXMAT  $\Rightarrow$  набор СФГК расчетных пропусканий (СФГК-1)

Экспериментальные данные  $\Rightarrow$  модуль SFGKI  $\Rightarrow$  набор СФГК экспериментальных данных (СФГК-2)

Ошибки экспериментальных данных  $\Rightarrow$  модуль SFGKI  $\Rightarrow$  набор СФГК ошибок (СФГК-3)

СФГК-1 + СФГК-2 + СФГК-3  $\Rightarrow$  модуль SFGKS  $\Rightarrow$  СФГК файл-1

СФГК файл-1  $\Rightarrow$  модуль EXPER  $\Rightarrow$  полное сечение с ошибкой в СФГК файл-2

РФОД-1  $\Rightarrow$  модуль RESGES  $\Rightarrow$  средние параметры из разрешенных параметров в файле РФОД-2

РФОД-2  $\Rightarrow$  модуль STATFU  $\Rightarrow$  набор СФГК расчетными ошибками (СФГК-4)

СФГК файл-2 + СФГК-4  $\Rightarrow$  модуль SFGKS  $\Rightarrow$  СФГК файл-3

СФГК файл-3 + РФОД-2  $\Rightarrow$  модуль FITVE  $\Rightarrow$  улучшенный набор средниму параметрами (РФОД-3).

## Литература

- [1] П. Вертеш, Обработка файлов оцененных нейтронных данных на персональных ЭВМ, Сообщение ОИЯИ
- [2] P. Vertes, Code for the calculation of neutron transmission functions and lumped averaged cross-sections from standardized evaluated neutron data, Computer Physics Communication