

**СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА**

P10-86-124

**Л.С.Нефедьева, А.Матеева, В.Н.Тарасова,
С.Тошков, В.Ф.Украинцев, Н.Янева**

**НАБОР ПРОГРАММ
МОДЕЛИРОВАНИЯ НЕЙТРОННЫХ СЕЧЕНИЙ
ТРАНСАКТИНИЕВЫХ ЯДЕР
В ОБЛАСТИ НЕРАЗРЕШЕННЫХ РЕЗОНАНСОВ**

1986

В работе /1/ дается подробное описание методики, алгоритма и программ для моделирования нейтронных сечений и их функционалов в области неразрешенных резонансов. Алгоритм основан на методе Монте-Карло, на использовании функции распределения плотности вероятности сечений, сравнении расчетных величин сечений и пропусков с экспериментальными данными. Данный набор программ был включен в проблемно-ориентированную библиотеку программ обработки спектрометрической информации /2/ на машинах БЭСМ-6 и типа ЕС. Были проведены расчеты характеристик структуры сечений для изотопов

^{232}Th , ^{235}U , ^{236}U , ^{238}U , ^{239}Pu , ^{240}Pu , ^{242}Pu .

Получены ядерные константы и средние резонансные параметры топливных изотопов ^{235}U , ^{239}Pu и ^{238}U .

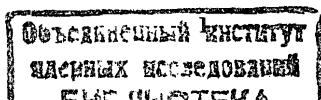
В результате эксплуатации у авторов возникла необходимость провести модернизацию данного комплекса и оптимизировать ряд программ с целью сокращения времени счета и объема оперативной памяти машины.

В первоначальном варианте детальная энергетическая зависимость сечений сохранялась в оперативной памяти, занимая ~ 30 тыс. слов, что делало невозможным применение комплекса в качестве составной части пакета программ расчета реакторов.

В оптимизированном варианте в памяти сохраняется только интервал энергии 50Δ (Δ - доплеровская ширина). По мере продвижения расчетной точки по шкале энергии (если справа от нее остается интервал $\Delta E < 5\Delta$) происходит отбрасывание зависимости слева, перенос оставшегося интервала в левый край массива и дополнение его зависимостью справа (45Δ). Теперь память под массивы занимает 3 тыс. слов.

Относительно большое время расчета сечений в точке ($0,03$ с) поставило вопрос об оптимизации ряда программ. Вместо двух программ обращения матриц (MATRX1 , MATRX2) введена одна оптимизированная программа MATRX .

Напомним, что в R - матричной теории основной характеристикой перехода системы нейтрон-ядро из канала "с" в канал "с" является k - матрица, элементы которой определяются:



$$K_{CC'}(E) = \sum_{\lambda} \frac{\gamma_{\lambda c} \gamma_{\lambda c'}}{\lambda E_{\lambda} - E - i\bar{\gamma}_{\lambda}/2}, \quad \text{где} \quad (1)$$

E_{λ} - энергии связанных состояний λ ;
 $\gamma_{\lambda c}$ - амплитуды приведенных ширины в нерadiационных каналах c ;
 $\bar{\gamma}_{\lambda}$ - средняя радиационная ширина, которая появляется в формуле, когда используется специальное приближение Райха-Мура $^{1/3}$. Матрица столкновений, которая определяет величины сечений, вычисляется следующим образом :

$$s = \Omega [(1+ik)(1-ik)^{-1}] \Omega, \quad (2)$$

где Ω - диагональная матрица с элементами $\Omega_c = \exp[-i\varphi_c]$, а φ_c - фаза потенциального рассеяния.

В программе MATRX элементы матрицы столкновений $s_{CC'}$ вычисляются через матрицу $(1-ik)^{-1}$ не по общим формулам обращения, а по аналитическим, выведенным специально для унитарной матрицы третьего ранга.

Введем промежуточные величины:

$$M = (1-ik_{22})(1-ik_{33}) + k_{23}^2, \quad (3a)$$

$$N = ik_{12} * (1-ik_{33}) - k_{13}k_{23}, \quad (3б)$$

$$Q = -k_{12}k_{23} + ik_{13}(1-ik_{22}), \quad (3в)$$

$$\Delta = (1-ik_{11})M - ik_{12}N - ik_{13}Q. \quad (3г)$$

Тогда сечения в состоянии с известным полным моментом J будут выражаться через них:

$$\sigma_{\xi}^J = 4\pi\lambda^2 \left[\cos^2\varphi - \cos 2\varphi \cdot \text{Re}(M/\Delta) - \sin 2\varphi \cdot \text{Im}(M/\Delta) \right], \quad (4a)$$

$$\sigma_{\xi}^J = \frac{4\pi\lambda}{|\Delta|^2} \left[|N|^2 + |Q|^2 \right], \quad (4б)$$

$$\sigma_{e\ell}^J = 4\pi\lambda \left\{ \cos^2\varphi \left[1 - 2\text{Re}(M/\Delta) \right] - \sin 2\varphi \cdot \text{Im}(M/\Delta) + \left| \frac{M}{\Delta} \right|^2 \right\}, \quad (4в)$$

$$\sigma_{n\gamma}^J = \frac{4\pi\lambda^2}{|\Delta|^2} \left\{ |M|^2 \text{Im}(k_{11}) + \text{Re} \left[(ik_{12}^* - N) \cdot N^* \right] + \text{Re} \left[(ik_{13}^* - Q) \cdot Q^* \right] \right\}, \quad \text{где} \quad (4г)$$

λ - длина волны нейтрона;

φ - фаза рассеяния;

* - символ комплексного сопряжения соответствующей величины;

$\text{Re}(\)$ - символы означают, что берутся реальная и мнимая части соответствующих комплексных величин.

Продоланная оптимизация позволила уменьшить время счета с 0,03 до 0,01 с/точка. В ряд программ внесены некоторые изменения, которые улучшают их эксплуатационные характеристики, но не носят радикального характера.

I. Описание программ

Набор программ, реализующий данный алгоритм, состоит из головной MNSARL и ряда программ, реализующих определенные части алгоритма.

1. MNSARL - осуществляет ввод и подготовку исходных данных; обращение к модулям, реализующим моделирование "решетки" резонансов и одно из альтернативных приближений Брейта-Вигнера или Райха-Мура; сравнение расчетных величин с экспериментальными данными. Все вводимые данные выдаются на печать в виде таблиц с комментариями.

2. MATRX - производит расчет сечений в энергетической точке с помощью приближения Райха-Мура в предположении наличия одного нейтронного и одного-двух каналов деления соответственно.

3. BREIT - рассчитывает сечения в энергетической точке с использованием формул Брейта-Вигнера.

4. DOPLER - производит процедуру численного интегрирования сечений по функции распределения скоростей теплового движения ядер-мишеней методом Монте-Карло.

5. PSIХI - вычисляет значения доплеровских функций ψ и χ аналитическим методом.

6. RND1, RDD1 (для БЭСМ-6) и URAND (для ЕС ЭВМ) - генерируют псевдослучайные числа x_i , равномерно распределенные на интервале (0,1). RND1, RDD1 и URAND машинно-ориентированные генераторы, зависящие от разрядности машин.

7. BETA, BET - производят перевод случайных чисел x_i , равномерно распределенных на интервале (0,1), в случайные числа β_{λ} , распределенные по закону Гаусса с нулевым средним и единичной дисперсией.

8. ZETA, ZET - переводят случайные числа x_i в случайные числа z_{λ} , подчиняющиеся распределению Вигнера.

9. SIKALA - производит разметку шкалы полного сечения σ_{ξ} на интервалы, в которых будет производиться преобразование $\sigma_{\xi}(E) \rightarrow P(\sigma_{\xi})$.

10. SORT - производит преобразования $\sigma_{\xi}(E) \rightarrow P(\sigma_{\xi})$, $\sigma_{\alpha}(E) \rightarrow \sigma_{\alpha}(\sigma_{\xi})$.

II. PSIГМА - производит нормировку функции плотности вероятности $P(\sigma)$ и корреляции $\sigma_{\alpha}(\sigma_{\xi})$.

I2. МОМЕНТ - вычисляет средние на интервале характеристики, структуры сечений (моменты сечений, величины пропусканый).

I3. PRONC - рассчитывает факторы проницаемости орбитального барьера, нейтронные ширины, фазы рассеяния и доплеровские ширины.

I4. VERT - рассчитывает параметры новых резонансов по мере продвижения точек по энергии.

I5. PERTU - вводит возмущения параметров и рассчитывает значения вектора $(\vec{p} + \delta\vec{p})$.

I6. SNUVS - вычисляет матрицу коэффициентов чувствительности функционалов к параметрам.

I7. ALAM - обеспечивает случайными числами, подчиняющимися нормальному распределению, подпрограмму DOPLER.

II. Обращение

CALL MNCARL (FIL) , где
FIL - имя файла (БЭСМ-6),
имя массива (ЕС ЭВМ), куда будут занесены результаты расчета функции плотности вероятности полного сечения $P(\sigma_t)$ и коррелирующий парциальных сечений с полным $\sigma_f(\sigma_t)$, $\sigma_\gamma(\sigma_t)$, $\sigma_{el}(\sigma_t)$ для температуры (300 К).

Замечания:

1. В системе СОС на БЭСМ-6 в задании надо указать COMMON/SOC1/A(4810)
2. В задании на ЕС ЭВМ надо задать DIMENSION FIL(1000)

III. Подготовка информации

С перфокарт вводятся:

1-я карта - LEVEL, IPRI, IPUN(3110)

LEVEL $\begin{cases} 0 - \text{используются формулы Брейта-Вигнера;} \\ 1 - \text{используются формулы Райха-Мура;} \end{cases}$
IPRI $\begin{cases} \neq 0 - \text{будет выдана печать распределений } P(\sigma) \\ \sigma_\alpha(\sigma); \\ = 0 - \text{печать блокируется;} \end{cases}$
IPUN $\begin{cases} \neq 0 - \text{будет выдана перфорация коэффициентов чувствительности;} \\ = 0 - \text{перфорация блокируется.} \end{cases}$

2-я карта - NBR, MTE, MNV(314)

NBR - число реализаций метода Монте-Карло при усреднении сечений по эффекту Доплера;
MTE - число температур, при которых производится расчет;
MNV - число параметров, по отношению к которым вычисляются коэффициенты возмущений.

3-я карта - массив толщин числом MT (8E10.4).

4-я карта - IS, JS, JP, JD, NST(514)

IS - атомный вес исследуемого ядра;
JS - число состояний с орбитальным моментом $\ell = 0$ (s - состояний);
JP - число состояний с орбитальным моментом $\ell = 1$ (p - состояний);
JD - число состояний с $\ell = 2$ (d - состояний);
NST - общее число состояний.

5-я карта - NNUF (E10.4) - среднее число вторичных нейтронов на одно деление.

6-я карта - GE - массив статистических факторов составного ядра (8E10.4).

Группа NST перфокарт со значениями средних резонансных параметров:

$\bar{D}^J, \bar{r}_y^J, \bar{s}_n^J, \bar{r}_f^J, f_1, f_2, \nu_n, \nu_f$ (7E10.4, I1):

\bar{D}^J - среднее расстояние между уровнями;

\bar{r}_y^J, \bar{r}_f^J - средние ширины захвата и деления;

\bar{s}_n^J - среднее значение приведенной нейтронной силовой функции ($\bar{s}_{no}^J = \bar{r}_{no}^J / \bar{D}^J$);

f_1, f_2 - взвешенные вклады первого и второго каналов деления в среднюю делительную ширину;

ν_n, ν_f - число степеней свободы в нейтронном и делительном каналах.

Перфокарта - NG, EMI, EMA (I10, 2E10.4)

NG - условный номер энергетической группы;

EMI, EMA - границы энергетического интервала.

Перфокарта - IMAX, AKRAT (I10, E10.4)

IMAX - число реализаций интервала методом Монте-Карло;

AKRAT - кратность энергетического шага интегрирования (превращение сечений в функцию $P(\sigma)$ доплеровской ширине Δ).

Перфокарта - SN(1), SN(2), GF(1), GF(2), RAS (6E10.4) - значения флуктуирующих от интервала к интервалу средних резонансных параметров:

SN(1), SN(2) - приведенные силовые функции в состояниях $J=I+\frac{1}{2}$, $J=I-\frac{1}{2}$;

GF(1), GF(2) - делительные ширины в тех же состояниях;

RAS - радиус рассеяния (в единицах 10^{-12} м).

IV. Вид печати

Все исходные данные выводятся на печать с комментариями. На каждой реализации метода Монте-Карло происходит выдача на печать значений средних сечений $\bar{\sigma}_t, \bar{\sigma}_f, \bar{\sigma}_\gamma, \bar{\sigma}_{el}$. На последней реализации выдается на печать заголовки:

AVERAGE CHARACTERS

Далее следует печать средних характеристик и их дисперсий. Печатаются средние сечения с дисперсиями, таблица пропусков и самоиндикаций с комментариями, таблица так называемых факторов резонансной самоэкранировки с дисперсиями и комментариями.

Если идет расчет коэффициентов чувствительности функционалов по отношению к средним резонансным параметрам ($\nu \neq 0$), то они также печатаются с заголовком

SENSITIVITY COEFFICIENT $\nu \neq 0$

Литература

1. Нефедьева Л.С., Украинцев В.Ф., Янева Н. ОИЯИ, IO-83-659, Дубна, 1983.
2. Аврамов С.Р. и др. ОИЯИ, BI-IO-83-698, Дубна, 1983.
3. Reich C.W., Moore M.S. Multilevel Formula for the Fission Process. Phys. Rev. , 1958, v. 111, p.929.

Рукопись поступила в издательский отдел
3 июля 1986 года.

НЕТ ЛИ ПРОБЕЛОВ В ВАШЕЙ БИБЛИОТЕКЕ?

Вы можете получить по почте перечисленные ниже книги, если они не были заказаны ранее.

| | | |
|---------------|--|-------------|
| D2-82-568 | Труды совещания по исследованиям в области релятивистской ядерной физики. Дубна, 1982. | 1 р. 75 к. |
| D9-82-664 | Труды совещания по коллективным методам ускорения. Дубна, 1982. | 3 р. 30 к. |
| D3,4-82-704 | Труды IV Международной школы по нейтронной физике. Дубна, 1982. | 5 р. 00 к. |
| D11-83-511 | Труды совещания по системам и методам аналитических вычислений на ЭВМ и их применению в теоретической физике. Дубна, 1982. | 2 р. 50 к. |
| D7-83-644 | Труды Международной школы-семинара по физике гажельх ионов. Алушта, 1983. | 6 р. 55 к. |
| D2,13-83-689 | Труды рабочего совещания по проблемам излучения и детектирования гравитационных волн. Дубна, 1983. | 2 р. 00 к. |
| D13-84-63 | Труды XI Международного симпозиума по ядерной электронике. Братислава, Чехословакия, 1983. | 4 р. 50 к. |
| D2-84-366 | Труды 7 Международного совещания по проблемам квантовой теории поля. Алушта, 1984. | 4 р. 30 к. |
| D1,2-84-599 | Труды VII Международного семинара по проблемам физики высоких энергий. Дубна, 1984. | 5 р. 50 к. |
| D17-84-850 | Труды III Международного симпозиума по избранным проблемам статистической механики. Дубна, 1984. /2 тома/ | 7 р. 75 к. |
| D10,11-84-818 | Труды V Международного совещания по проблемам математического моделирования, программированию и математическим методам решения физических задач. Дубна, 1983 | 3 р. 50 к. |
| | Труды IX Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц. Дубна, 1984 /2 тома/ | 13 р. 50 к. |
| D4-85-851 | Труды Международной школы по структуре ядра, Алушта, 1985. | 3 р. 75 к. |
| D11-85-791 | Труды Международного совещания по аналитическим вычислениям на ЭВМ и их применению в теоретической физике. Дубна, 1985. | 4 р. |
| D13-85-793 | Труды XII Международного симпозиума по ядерной электронике. Дубна 1985. | 4 р. 80 к. |

Заказы на упомянутые книги могут быть направлены по адресу:
101000 Москва, Главпочтамт, п/я 79
Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований

**ТЕМАТИЧЕСКИЕ КАТЕГОРИИ ПУБЛИКАЦИЙ
ОБЪЕДИНЕННОГО ИНСТИТУТА ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ**

| Индекс | Тематика |
|--------|--|
| 1. | Экспериментальная физика высоких энергий |
| 2. | Теоретическая физика высоких энергий |
| 3. | Экспериментальная нейтронная физика |
| 4. | Теоретическая физика низких энергий |
| 5. | Математика |
| 6. | Ядерная спектроскопия и радиохимия |
| 7. | Физика тяжелых ионов |
| 8. | Криогеника |
| 9. | Ускорители |
| 10. | Автоматизация обработки экспериментальных данных |
| 11. | Вычислительная математика и техника |
| 12. | Химия |
| 13. | Техника физического эксперимента |
| 14. | Исследования твердых тел и жидкостей ядерными методами |
| 15. | Экспериментальная физика ядерных реакций при низких энергиях |
| 16. | Дозиметрия и физика защиты |
| 17. | Теория конденсированного состояния |
| 18. | Использование результатов и методов фундаментальных физических исследований в смежных областях науки и техники |
| 19. | Биофизика |

Нефедьева Л.С. и др.
Набор программ моделирования нейтронных сечений
трансактиниевых ядер в области неразрешенных резонансов

P10-86-124

Проведена модернизация комплекса программ для моделирования нейтронных сечений и их функционалов в области неразрешенных резонансов. Алгоритм основан на методе Монте-Карло, на использовании распределения плотности вероятности сечений, сравнении расчетных величин сечений и пропусканний с экспериментальными данными. Усовершенствование программ связано с необходимостью их применения в качестве составной части пакета программ расчета реакторов. Был оптимизирован метод расчета детальной энергетической зависимости сечений. Теперь массивы сечений занимают существенно меньшую память. Элементы матрицы столкновений вычисляются через матрицу $(1 - ik)^{-1}$ не по общим формулам обращения, а по аналитическим, выведенным специально для унитарной матрицы третьего ранга. Время счета на точку энергетической шкалы уменьшилось в три раза. В работе дается описание комплекса программ, подготовки входной информации и выдачи результатов на печать.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации и в Лаборатории нейтронной физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1986

Перевод О.С.Виноградовой.

Nefedieva L.S. et al
Program Complex for Transactinium Nuclear Neutron Cross Section
Simulation in the Unresolved Resonance Region

P10-86-124

The modernization of the program complex for simulation of neutron cross sections and their functionals in the unresolved resonance region has been performed. The algorithm is based on the Monte Carlo method, on using the function of density distribution of cross section probability and on comparison of the calculated cross section and transmission values. The program refinement was connected with the necessity of their application as a part of the reactor calculation code. The method for calculation of the cross section detailed energy dependence has been optimized. Now the computer memory requested is significantly smaller. The collision matrix elements are calculated by the $(1 - ik)^{-1}$ matrix without common reversion formulae, but using analytical expressions derived for the unitary matrix of rank three. The computing time for one energy scale point is diminished by a factor of three. The program complex, necessary input information and the result printing are described.

The investigation has been performed at the Laboratory of Computing Techniques and Automation and at the Laboratory of Neutron Physics, JINR. Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1986