

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 части: область гладкого поведения сечений при малых энергиях, область разрешенных резонансов, область неразрешенных резонансов и область 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 положения и ширины каждого из этих резонансов. Именно поэтому эта 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 χ^2 – квадрат с заданным числом степеней свободы. Число степеней свободы подбирается так, чтобы при соответствующем усреднении получались экспериментальные сечения с грубым разрешением. При работе модуля RECONR создается отдельный файл с поточечной системой параметров неразрешенных резонансов. С помощью этого файла можно получить средние и случайные значения параметров резонансов и построить поточечную систему сечений взаимодействия.

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. С другой стороны известно, что при создании ядерного оружия и конструировании реакторов на тепловых нейтронах можно ограничиться обычным уравнением переноса с грубо разрешенными сечениями. В то же время при конструировании 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 этой проблемы можно решить 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 серии расчетов. Однако этот способ никогда не использовался по двум причинам. Во-первых, проведение достаточно представительной серии расчетов требует больших вычислительных затрат. Во-вторых, поточечное описание сечений в этой области требует огромных массивов. В этой 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], но в отличие от метода подгрупп 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 обстоятельство является недостатком метода вероятностных таблиц.

В связи с развитием вычислительной техники (созданием многопроцессорных систем) становится реальной идея прямого учета неразрешенных резонансов, предложенная в статье [2]. Настоящей доклад содержит описание реализации двух методов учета неразрешенных резонансов в методике С-007 [4]. Первый метод – это широко используемый метод вероятностных таблиц. Второй метод основан на приближениях одинаковых с методом вероятностных таблиц, но не требует предварительного расчета таблиц и, следовательно, не содержит ошибок, связанных с расчетом таблиц. Одинаковость приближений гарантирует близость результатов расчетов по двум методам и позволяет проводить сравнение расчетов по методике С-007 с расчетами по зарубежным программам, в которых обычно используется метод вероятностных таблиц.

1. Формулы расчета резонансных сечений

В области неразрешенных резонансов сечения трех процессов: упругого рассеяния, деления и γ -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 число их входят ширины указанных выше процессов, среднее расстояние между центрами резонансов и степени свободы соответствующих статистических распределений χ^2 -квадрат. 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 λ . Квантовые числа имеют следующий смысл: l – орбитальный момент количества движения, J – полный угловой момент. В зависимости от энергии нейтрона учитываются до трех значений орбитального момента: $l = 0, 1, 2$. В совокупности получается порядка 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:

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

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

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

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

где σ_p – гладкая потенциальная компонента сечения упругого рассеяния, обусловленная резонансами. Сечения σ_s , σ_f , σ_{γ} – резонансные компоненты в сечениях упругого рассеяния, деления и γ -захвата. Внешняя сумма пробегает порядка по пяти типам резонансов $\lambda = (l, J)$. С ростом расстояния центров $E_{\lambda r}$ резонансов от точки E их вклады в сечение быстро убывают, но, тем не менее, внутренняя сумма содержит обычно сотни членов. Каждый резонанс характеризуется несколькими параметрами: $\Gamma_{\lambda r}^n = \Gamma_{\lambda r}^n(E, \omega)$ – нейтронной шириной, $\Gamma_{\lambda r}^f = \Gamma_{\lambda r}^f(E, \omega)$ – шириной деления, $\Gamma_{\lambda r}^{\gamma} = \Gamma_{\lambda r}^{\gamma}(E, \omega)$ – шириной γ -захвата 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 расстоянием $D_{\lambda r}(E, \omega)$ 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, $k = 2,19677 \cdot 10^{-3} \times \sqrt{E} / (A+1)$ [10⁻¹²/см] – волновое число нейтрона, A – отношение массы изотопа к массе нейтрона.

В приведенных формулах аргумент ω является элементом некоторого вероятностного пространства и служит для обозначения случайного характера соответствующих функций. Фиксированным значениям аргумента ω отвечают выборочные значения функций. Выборочные значения параметров резонансов определяются из статистических законов. Законы распределения ширин имеют вид распределения χ^2 -квадрат с ν -степенями свободы

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

$$\int_0^{\infty} P_{\nu}(y) dy = 1,$$

где $G(x)$ – гамма-функция, $\bar{\Gamma}_{\lambda r}^c$ – средняя ширина процесса «с». Расстояние между резонансами одного типа подчиняется распределению Вигнера

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

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 порядка 100 кэВ. Поэтому при усреднении сечений в точке E резонансные параметры считаются постоянными, равными своим значениям в рассматриваемой энергии E . В результате формулы для расчета тепловых сечений удастся выразить через реальную и мнимую компоненты интеграла ошибок [6]

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

$$\sigma_f(E, \omega) = \sum_{\lambda} \sum_r \sigma_{\lambda r}^m \frac{\Gamma_{\lambda r}^f}{\Gamma_{\lambda r}} \psi(a, x),$$

$$\sigma_{\gamma}(E, \omega) = \sum_{\lambda} \sum_r \sigma_{\lambda r}^m \frac{\Gamma_{\lambda r}^{\gamma}}{\Gamma_{\lambda r}} \psi(a, x).$$

Введенные здесь функции ψ и χ связаны с комплексным интегралом ошибок $W(a, x)$ соотношениями

$$\psi(a, x) = a\sqrt{\pi} \operatorname{Re} W(x, a), \quad \chi(a, x) = a\sqrt{\pi} \operatorname{Im} W(x, a),$$

$$W(a, x) = \frac{i}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-t^2} dt}{x + ia - t},$$

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

Подробный вывод приведенных формул расчета тепловых сечений можно найти в монографии [7]. Из вывода следует, что точность формул зависит от малости величины $\delta = \sqrt{kT/(AE)}$. Например, для ядра с $A = 238$, температуры $kT = 0,1$ эВ и энергии нейтрона $E = 10$ эВ имеем $\delta < 0,01$. Поэтому можно ожидать, что упрощенные формулы имеют достаточную точность в области неразрешенных резонансов.

1.2. Формулы расчета экспериментальных сечений

В данной 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. Рассмотрим схему расчета экспериментальных сечений из формул расчета холодных резонансных сечений. Для этого возьмем окрестность ΔE 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 видим, что в окрестности ΔE будет в среднем порядка $N_{\lambda} = \Delta E / \bar{D}_{\lambda}$ резонансов типа λ . Кроме того, считая окрестность ΔE достаточно большой, пределы интегрирования при усреднении резонансов можно распространить до бесконечности. Нетрудно видеть, что тогда интеграл от каждого резонанса будет равен π и что внутренняя сумма будет состоять из N_{λ} 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 ширины резонансов. В результате приходим к следующим формулам расчета экспериментальных сечений в точке E :

$$\sigma_s(E) = \sum_l \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2 \theta_l + \frac{2\pi^2}{k^2} \sum_{\lambda} \frac{2J+1}{I+1} \frac{1}{\bar{D}_{\lambda}} \left[\left\langle \frac{\Gamma_{\lambda}^n \Gamma_{\lambda}^n}{\Gamma_{\lambda}} \right\rangle - 2\bar{\Gamma}_{\lambda}^n \sin^2 \theta_l \right],$$

$$\sigma_f(E) = \frac{2\pi^2}{k^2} \sum_{\lambda} \frac{2J+1}{I+1} \frac{1}{\bar{D}_{\lambda}} \left\langle \frac{\Gamma_{\lambda}^n \Gamma_{\lambda}^f}{\Gamma_{\lambda}} \right\rangle,$$

$$\sigma_{\gamma}(E) = \frac{2\pi^2}{k^2} \sum_{\lambda} \frac{2J+1}{I+1} \frac{1}{\bar{D}_{\lambda}} \left\langle \frac{\Gamma_{\lambda}^n \Gamma_{\lambda}^{\gamma}}{\Gamma_{\lambda}} \right\rangle.$$

В библиотеке NJOY имеется модуль, который численно вычисляет выражения типа $\langle \cdot \rangle$.

Отметим, что эти формулы получены из холодных резонансных сечений. Для получения 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 порядка 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 ΔE тепловых резонансных сечений, приведенных в подразделе 1.1. Это наблюдение говорит, 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

В данном докладе рассмотрены два способа учета неразрешенных резонансов при решении задач переноса нейтронов методом Монте-Карло. Первый способ – это широко используемый за рубежом метод вероятностных таблиц [8, 9]. 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 изменением с энергией, но и статистическими законами распределения параметров резонансов. Метод вероятностных таблиц имеет некоторые недостатки. Для его обоснования используются интуитивные соображения. Предварительное формирование таблиц затрудняет контроль результатов расчета задач от параметров таблиц. Второй метод основан на идее прямого учета резонансов, высказанной в 1972 году в статье [1]. Идея заключается в проведении серии расчетов, каждый из которых выполняется с табличными сечениями, вычисленными по случайному независимому набору параметров резонансов и последующему усреднению серии расчетов. Ниже будет показано, как эта идея может быть осуществлена на современных многопроцессорных ЭВМ. Рассмотрим отдельно каждый метод.

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 $[E_n, E_x]$ энергий из некоторой окрестности узла E . Предполагается, что окрестность узла $[E_{low}, E_{high}]$ удовлетворяет двум условиям. Она содержит достаточно много резонансов, и в ней параметры резонансов можно считать постоянными, равными своим значениям в узле E . Последнее 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 $[E_n, E_x]$ дают вклад также резонансы, лежащие вне интервала. В качестве окрестности $[E_{low}, E_{high}]$ естественно выбрать границы 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 $N_r = 1000$ – заданное максимальное число резонансов, d_{min} – минимальное среднее расстояние между резонансами. Интервал энергий $[E_n, E_x]$ для расчета таблиц сечений выбирается следующим образом:

$$E_n = E_{low} + N_0 d, \quad E_x = E_{high} - N_0 d, \quad \text{где } N_0 \approx 300,$$

$$d = \left(\sum_{\lambda} 1/\bar{D}_{\lambda} \right)^{-1}.$$

В точках этого интервала сечения с достаточной точностью определяются резонансами из окрестности $[E_{low}, E_{high}]$. Кроме того, при $N_0 \gg 1$ 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 λ – 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 $\zeta = \sqrt{-\frac{4 \ln \xi}{\pi}}$ – случайная величина, распределенная по закону Вигнера.

Для учета температуры среды T вероятностные таблицы должны определять распределение значений тепловых сечений на интервале $[E_n, E_x]$. 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 $[E_n, E_x]$. Предполагается, что порядка $N = 5000$ случайных точек E_i достаточно для описания изменения сечений как функций энергии. Для упрощения алгоритма точки E_i полезно упорядочить по возрастанию. Формулы расчета значений сечений содержат два суммирования: внешняя сумма – по типам резонансов, внутренняя сумма – по последовательности резонансов одного типа. Для вычисления внутренней суммы последовательно разыгрываются положения $E_{\lambda r}$ резонансов типа λ . Для каждого нового резонанса разыгрываются значения всех ширин: $\Gamma_{\lambda r}^n$ – нейтронной ширины, $\Gamma_{\lambda r}^f$ – ширины деления, $\Gamma_{\lambda r}^\gamma$ – ширины γ -захвата и $\Gamma_{\lambda r}^x$ – ширины конкурирующих процессов. Вычисляется $\Gamma_{\lambda r}$ – полная ширина резонанса, как сумма всех ширин: $\Gamma_{\lambda r} = \Gamma_{\lambda r}^n + \Gamma_{\lambda r}^f + \Gamma_{\lambda r}^\gamma + \Gamma_{\lambda r}^x$. 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 $c_1 \approx 32$, $c_2 \approx 20$ и Δ – 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 $[E_n, E_x]$ полного сечения из заданной полосы значений. Предполагается, что границы полос выбраны так, что в соседних полосках вероятности мало отличаются и что число полосок невелико, порядка 20 штук. Очевидно, что практически невозможно заранее выбрать границы полос. В модуле PURR предлагается границы полос выбирать на первом

испытании путем анализа полученной структуры полного сечения на интервале энергий $[E_n, E_x]$. При известных границах оценка таблиц сводится к подсчету числа попаданий в полоски рассчитанных в точках E_i значений полного сечения. Одновременно производится оценка средних значений в полосках сечений для процессов: рассеяния, деления и γ -захвата.

После окончания заданного числа испытаний L выполняется нормировка результатов серии испытаний. Накопленные по полоскам суммы сечений процессов нормируются на число попаданий в данную полосу значений полного сечения. В результате получают средние значения сечений процессов в каждой полосе. Вероятностные таблицы находятся нормировкой чисел попаданий в полосы значений полного сечения. При этом нормировка равна произведению NL , где N – число используемых точек E_i на интервале $[E_n, E_x]$. Средние значения сечений процессов по полоскам можно рассматривать как условные средние для соответствующей вероятности значения полного сечения. Входными данными для расчета таблиц служат два файла, которые вычисляются при запуске модуля PURR. В первом файле находятся данные по сечению подложки, а во втором файле записаны параметры статистических законов для каждого типа резонанса. Таким образом, с помощью запуска модуля PURR для любого изотопа можно получить входные файлы и затем рассчитать вероятностные таблицы.

2.2. Метод прямого учета неразрешенных резонансов

Метод прямого учета резонансов основан на идее, предложенной в 1972 году в статье [1]. Идея 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 серии расчетов. В этой формулировке и при том уровне развития ЭВМ идея была практически нереализуема из-за больших вычислительных затрат на расчет серии задачи и большего объема памяти для хранения таблиц с резонансными сечениями.

В настоящее время объем памяти порядка 1–2 млн слов на изотоп не является запретным, тем более число изотопов, на 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 удобно 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. Учет неразрешенных резонансов в методике С-007

3.1. Реализация метода прямого учета неразрешенных резонансов

Прямой метод учета неразрешенных резонансов, описанный в предыдущем разделе, был реализован в методике С-007. Для применения этого метода в расчете в постановке задачи необходимо описать нужные параметры

$$UNREZ:SCS(DE = 2):U34,U35,U38,$$

где DE – шаг по энергии для точек, в которых будут рассчитываться резонансные сечения; $U34,U35,U38$ – список изотопов, для которых будут учитываться неразрешенные резонансы. Для данных изотопов в начале расчета происходит считывание средних параметров резонансов, заданных в некоторых точках по энергии. Далее для каждой точки по энергии каждого изотопа происходит расчет размера равномерной сетки с шагом DE в окрестности этой точки и выделение памяти под соответствующие массивы сечений. Сами резонансные сечения пересчитываются многократно в процессе расчета задачи. Расчет по методике С-007 происходит таким образом, что все MPI-процессы моделируют траектории частиц независимо друг от друга, а через определенные промежутки времени происходит их синхронизация и обмен некоторой информацией. При использовании метода прямого учета неразрешенных резонансов в моменты синхронизации происходит также перерасчет резонансных сечений.

При моделировании траекторий частиц в методике С-007 используется метод максимальных куросочно-постоянных сечений. Для этого перед началом моделирования в процедуре SMAX для каждого изотопа происходит расчет массива SMAXG максимальных сечений для 2000 энергетических групп. Для резонансных изотопов в этой процедуре рассчитывается также массив SMAXG_UR максимальных сечений по всем реакциям, кроме деления, γ -захвата и упругого рассеяния. При розыгрыше пробега частицы вычисляется суммарное максимальное сечение по всем изотопам области для данной энергетической группы нейтрона. Если энергия частицы не принадлежит резонансной области данного изотопа, то его максимальное сечение берется из массива SMAXG, как при стандартном расчете. Если же энергия частицы принадлежит резонансной области изотопа, то его сечение складывается из резонансных сечений реакций деления, γ -захвата, упругого рассеяния и значения из массива SMAXG_UR (в него входят все остальные реакции). Для получения резонансных сечений сначала разыгрывается один из двух ближайших к данной энергии частицы узлов, в которых заданы средние параметры резонансов. После этого значения резонансных сечений берутся в случайно разыгранной точке в окрестности выбранного узла. Аналогично при розыгрыше изотопа, на котором произошло столкновение, и при розыгрыше реакции используются резонансные сечения для деления, γ -захвата, упругого рассеяния, для остальных реакций используются сечения из стандартной нейтронной библиотеки.

3.2. Реализация метода вероятностных таблиц

В методике С-007 также был реализован метод вероятностных таблиц. Для его использования в подготовке задачи задаются следующие параметры:

$$UNREZ:PT(NLADR = 10000, NE = 500):U38,PU39,$$

где $NLADR$ – число испытаний при расчете вероятностных таблиц методом Монте-Карло, NE – количество случайных точек по энергии. Вероятностные таблицы в данном методе заполняются один раз в начале расчета для каждого изотопа в каждой точке резонансной области, в которой заданы средние параметры резонансов. Ввиду того, что данная процедура занимает достаточно продолжительное время, она была распараллелена таким образом, что каждый MPI-процесс заполняет таблицу для одной точки одного изотопа. После этого заполненные таблицы рассылаются всем MPI-процессам.

Моделирование траекторий частиц осуществляется аналогично предыдущему методу. Если энергия частицы попадает в резонансную область изотопа, то сначала разыгрывается один из двух ближайших узлов, в котором заданы средние параметры резонансов. После этого значения сечений берутся из случайно выбранной полосы таблицы для данного узла. Вероятностные таблицы не меняются в процессе расчета.

3.3. Результаты тестирования

Для тестирования методов учета неразрешенных резонансов в методике С-007 были использованы две задачи. Первая задача использовалась при тестировании метода вероятностных таблиц в программе MCNP [10]. Она представляет собой бесконечную однородную среду со следующим составом (в процентах атомов): 8,9286 % ^{239}Pu , 89,2857 % ^{238}U , 1,7857 % Н. В табл. 1 приводятся значения $k_{\text{эфф}}$, полученные по методикам MCNP и С-007.

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}U (0,00005), ^{235}U (0,00484), ^{238}U (0,04268), состав отражателя ^{235}U (0,0001), ^{238}U (0,04797). Результаты расчета представлены в табл. 2.

Из проведенных тестов видно, что в ряде задач на перенос нейтронов учет неразрешенных резонансов

Таблица 1

Результаты расчета первой задачи

	MCNP (метод вероятностных таблиц)	С-007 (метод прямого учета)	С-007 (метод вероятностных таблиц)
$k_{\text{эфф}}$ с учетом неразрешенных резонансов	1,51068 (0,00129)	1,513182 (0,001)	1,512849 (0,001)
$k_{\text{эфф}}$ без учета неразрешенных резонансов	1,49337(0,00165)	1,48931 (0,001)	1,48931 (0,001)
$\Delta k_{\text{эфф}}$	0,01731	0,023872	0,023539

Таблица 2

Результаты расчета задачи BIG TEN

	MCNP (метод вероятностных таблиц)	С-007 (метод прямого учета)	С-007 (метод вероятностных таблиц)
$k_{\text{эфф}}$ с учетом неразрешенных резонансов	1,0112 (0,0005)	1,011381 (0,002)	1,011127 (0,002)
$k_{\text{эфф}}$ без учета неразрешенных резонансов	1,0069 (0,0005)	1,002156 (0,002)	1,002156 (0,002)
$k_{\text{эфф}}$	0,0043	0,009225	0,008971

оказывает существенное влияние на результаты расчета. Схожее смещение результатов, полученных по методикам MCNP и С-007, говорит о корректной реализации алгоритма модуля PURR библиотеки NJOY в методике С-007. Метод прямого учета неразрешенных резонансов и метод вероятностных таблиц дают близкие результаты.

Литература

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 // Nuclear Science and Engineering. 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. Житник А. К., Донской Е. Н., Огнев С. П. и др. Методика С-007 решения методом Монте-Карло

связанных линейных уравнений переноса нейтронов, гамма-квантов, электронов и позитронов // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2011. Вып. 1. С. 17–24.

5. Cullen D., Weisbin C. Exact Doppler broadening of tabulated cross sections // Nuclear Science and Engineering. 1976. Vol. 60. P. 199–229.

6. Абрамовиц М., Стиган И. Справочник по специальным функциям. М.: Наука, 1979. С. 119.

7. Белл Д., Глессон 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 // Nuclear Science and Engineering. 1998. Vol. 128. P. 321.

10. 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.