

# МЕТОДИКА И ПРОГРАММА РАСЧЕТА ГРУППОВЫХ КОНСТАНТ ДЛЯ ВТОРИЧНЫХ ЧАСТИЦ, ОБРАЗУЮЩИХСЯ В МНОГОЧАСТИЧНЫХ РЕАКЦИЯХ. МОДЕЛЬ ФАЗОВО-ПРОСТРАНСТВЕННОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ

*Д. С. Барабанова, Н. В. Колобянина, С. В. Мжачих, А. В. Алексеев*

ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», г. Саров Нижегородской обл.

## Введение

Для численного решения задач термоядерного (ТЯ) синтеза необходимо осуществлять численное решение согласованных между собой кинетических уравнений переноса нейтронов и быстрых заряженных частиц (БЗЧ). Например, для решения задач выхода нейтронов из DT-мишени, обжимаемой лазерным излучением.

БЗЧ – ядра основных изотопов водорода и гелия, образуются в тепловых ТЯ процессах, в реакциях «на лету» и в нейтронно-ядерных (НЯ) процессах. Для многочастичных реакций, рождающих от 3-х частиц и более, в отличие от двухчастичных, пока не удается построить точные математические модели. Одна из проблем – нехватка экспериментальных данных. Зачастую точно не известен механизм протекания таких реакций. Для математического моделирования таких процессов исследователи вынуждены применять приближенные теории, сохраняющие энергетический баланс. Так для описания многочастичных процессов широко используется модель фазово-пространственного распределения.

Для расчета многогрупповых констант используется программный комплекс GROUND [1], созданный в 2011 г. с использованием собственных программных модулей и программных модулей пакета NJOY (США) [2]. В состав комплекса GROUND была включена собственная программа расчета групповых констант RМК2 для различных типов двухчастичных НЯ [3] и ТЯ реакций, которая в отличие

от реализации в NJOY имеет расширенные возможности расчета.

В связи с вышесказанным было решено в составе программы RМК2 реализовать расчет групповых констант для многочастичных реакций по методике фазово-пространственного распределения. В качестве исходных данных в программе RМК2 используются международные библиотеки оцененных данных и отечественные базы данных в формате ENDF [4].

## Расчет групповых констант для двухчастичных реакций

В таблице представлены примеры двухчастичных НЯ и ТЯ взаимодействий, для которых программа RМК2 на сегодняшний момент рассчитывает групповые константы, где

$$Q^n = (m_1 + m_2)c^2 - (m_3 + m_4)c^2 - \text{калорийность процесса (энергия дефекта масс),}$$

$m_k = M_k / N_A$  – масса частицы/ядра с индексом  $k$ ,  $k$  – индекс частицы/ядра,  $M_k$  – масса, выраженная в атомных углеродных единицах (а.у.е.), константа  $N_A$  – число Авогадро.

На рис. 1 представлена общая кинематическая схема двухчастичных реакций, где  $\alpha$  – углы вылета в лабораторной системе координат (ЛСК), а  $\theta$  и  $\phi$  – углы вылета в системе центра масс (СЦМ).

## Примеры двухчастичных реакций

Тип реакции	Нейтронно-ядерные	Термоядерные
Упругое рассеяние ( $Q^n = 0$ )	$n + p \rightarrow p + n + Q^n$	$p + d \rightarrow d + p + Q^n$
Неупругое рассеяние ( $Q^n < 0$ )	$n + {}^6\text{Li} \rightarrow n + {}^6\text{Li}^* + Q^n$	$d + {}^6\text{Li} \rightarrow d + {}^6\text{Li}^* + Q^n$
Экзотермическое поглощение ( $Q^n > 0$ )	$n + h \rightarrow t + p + Q^n$	$d + t \rightarrow n + \alpha + Q^n$
Эндотермическое поглощение ( $Q^n < 0$ )	$n + h \rightarrow 2d + Q^n$	$p + t \rightarrow 2d + Q^n$

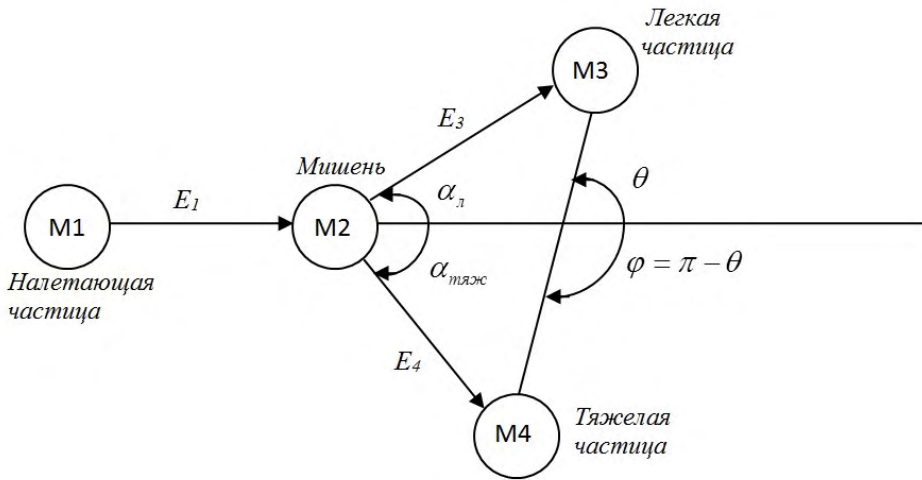
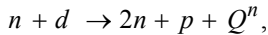


Рис. 1. Кинематическая схема двухчастичных реакций

### Расчет групповых констант для многочастичных реакций

Для расчета групповых констант кинематика многочастичных реакций с образованием трех и более частиц описывается сначала в системе центра масс, а затем переводится в лабораторную. При выполнении законов сохранения энергии и импульса вторичные частицы будут распределены в конечном объеме фазового пространства продуктов реакции. В основе данной модели лежит метод равных фазовых объемов. Предполагается, что вторичные частицы распределены независимо в некотором объеме.

В качестве примера рассмотрим 3х-частичную реакцию



где  $Q^n < 0$ .

Данная реакция интересна тем, что вторичные нейтроны и протон имеют примерно равные массы, что идеально подходит для описания методикой фазово-пространственного распределения.

Перейдем к алгоритму расчета групповых констант. Задаются групповые разбиения:  $g'$  – индекс группы частицы до столкновения,  $g_k$  – индекс группы частицы  $k$  после столкновения.

Групповые сечения рассчитываются по формуле

$$\sigma_{g'} = \frac{\int_{E_{g'}^*}^{E_{g'-1}} \psi(E') \sigma(E') dE'}{\Psi_{g'}},$$

где

$$E_{g'}^* = \left\{ \begin{array}{l} \max(\bar{E}, E_{g'}) \text{ для пороговых процессов} \\ E_{g'} \text{ в других случаях} \end{array} \right\},$$

$$\bar{E} = \frac{M}{A_2}(-Q) - \text{энергетический порог реакции,}$$

$\sigma(E')$  – сечение процесса в точке  $E'$ ,

$\psi(E')$  – весовая функция, имеющая физический смысл потока частиц.

Групповой поток вычисляется по формуле

$$\Psi_{g'} = \int_{E_{g'}}^{E_{g'-1}} \psi(E') dE'.$$

Так как функции в формулах расчета групповых сечений и группового потока кусочно-линейные, то интегралы в них рассчитываются аналитически.

Элементы матрицы групповых переходов рассчитываются по формуле

$$\xi_{k,g' \rightarrow g_k} = \frac{1}{\sigma_{g'} \Psi_{g'}} \int_{E_{g'}^*}^{E_{g'-1}} \sigma(E') \psi(E') dE' \int_{E_{k,g_k}^{\min}(E')}^{E_{k,g_k}^{\max}(E')} dE \times \int_{\mu_k^{\min}(E',E)}^1 f_k^{CM}(E', e, \chi) J_k(E', E, \mu) d\mu,$$

где

$N$  – число вторичных частиц:  $N \geq 3$ ;  $m_k$  – масса частицы с индексом  $k$ ;

$E' = E_1$  – энергия налетающей частицы в ЛСК;

$E = E_k$  – энергия вторичной частицы с индексом  $k$  ( $k \geq 3$ ), измеряемая в ЛСК;

$e = e_k$  – энергия частицы  $k$  в СЦМ;

$\mu = \mu_k$  – косинус угла вылета частицы  $k$ , измеряемый в ЛСК;

$\chi = \chi_k$  – косинус угла вылета частицы  $k$  в СЦМ;

$J_k(E', E, \mu)$  – якобиан преобразования из элемента  $de d\chi$  в СЦМ в элемент  $dE d\mu$  в ЛСК:

$$J_k(E', E, \mu) = \frac{1}{\sqrt{C_k^2 + 1 - 2C_k \mu}};$$

$$C_k(E', E) = \frac{1}{M} \sqrt{\frac{A_k E'}{E}};$$

$f_k^{CM}(E', e, \chi)$  – функция энерго-углового распределения частицы  $k$  в СЦМ:

$$f_k^{CM}(E', e, \chi) = D_{k,N} \sqrt{e} \left( e_k^{\max} - e \right)^{\frac{3N}{2} - 4};$$

$$\chi(E', E, \mu) = J_k(\mu - C_k);$$

$$e(E', E, \mu) = E/J_k^2;$$

$e_k^{\max}(E') = \frac{M - A_k}{M} \left( \frac{A_2}{M'} E' + Q \right)$  – максимальная энергия частицы  $k$  в СЦМ;

$$D_{k,3}(E') = \frac{4}{\pi \left( e_k^{\max} \right)^2}, \quad D_{k,4}(E') = \frac{105}{32 \left( e_k^{\max} \right)^{7/2}},$$

$$D_{k,5}(E') = \frac{256}{14\pi \left( e_k^{\max} \right)^5} - \text{нормировочные множители}$$

спектра, представленные для разного числа  $N$ .

Сложность расчета по формуле матрицы групповых переходов заключается в трехкратном интегрировании по переменным пределам.

В отличие от NJOY программа RMK2 имеет возможность рассчитывать групповое распределение кинетической энергии быстрой частицы сорта  $k$  для иницирующей частицы группы  $g'$

$$\begin{aligned} & [\xi E]_{k,g' \rightarrow g_k} = \\ & = \frac{1}{\sigma_{g'} \Psi_{g'}} \int_{E_{g'}^*}^{E_{g'-1}} \sigma \Psi dE' \int_{E_{k,gk}^{\min}}^{E_{k,gk}^{\max}(E')} E dE \int_{\mu_k^{\min}}^1 f_k^{CM} J_k d\mu. \end{aligned}$$

Данная формула является аналогом формулы матрицы групповых переходов, но с добавлением под интегралом энергии.

Контроль вычислений выполняется через расчет баланса энергий. Он определяется равенством

$$\begin{aligned} E_{g'}^n + Q^n &= \sum_{g_3=1}^{G_3} [\xi E]_{3,g' \rightarrow g_3} + \\ &+ \sum_{g_4=1}^{G_4} [\xi E]_{4,g' \rightarrow g_4} + \sum_{g_5=1}^{G_5} [\xi E]_{5,g' \rightarrow g_5}, \end{aligned}$$

где

$$E_{g'}^n = \frac{\int_{E_{g'}}^{E_{g'-1}} \Psi(E') \sigma^n(E') E' dE'}{\Psi_{g'} \sigma_{g'}^n} - \text{энергия иницирующей частицы группы } g' \text{ для процесса } n.$$

С одной стороны, имеем среднюю энергию налетающей частицы и калорийность рассматриваемого процесса, а с другой стороны, вклады в кинетическую энергию вторичных частиц, просуммированных по выходящим группам  $g_k$ . Анализ проведенных расчетов показал, что баланс выполняется с высокой точностью.

Программа RMK2 рассчитывает калорийности процессов, на слайде продемонстрированы формулы расчета калорийностей с учетом БЗЧ и без учета БЗЧ.

$$\begin{aligned} \varepsilon_{g'} &= E_{g'}^n + Q^n - \sum_{g_3=1}^{G_3} [\xi E]_{3,g' \rightarrow g_3} - \\ &- \sum_{g_4=1}^{G_4} [\xi E]_{4,g' \rightarrow g_4} - \sum_{g_5=1}^{G_5} [\xi E]_{5,g' \rightarrow g_5}. \end{aligned}$$

Отметим, что должно выполняться условие

$$\frac{|\varepsilon_{g'}|}{E_{g'}^n + Q^n} \leq 10^{-4}.$$

Калорийность процесса без учета БЗЧ рассчитывается по формулам

$$\varepsilon_{g'} = E_{g'}^n + Q^n - \sum_{g_3=1}^{G_4} [\xi E]_{g' \rightarrow g_3}^{3,n} - \sum_{g_4=1}^{G_4} [\xi E]_{g' \rightarrow g_4}^{4,n} -$$

в результате реакции образуются два нейтрона ( $k = 3, 4$ ),

$\varepsilon_{g'} = E_{g'}^n + Q^n$  в результате реакции не образуются нейтроны.

Элементы матрицы коэффициентов Фурье определяются по формуле

$$\omega_{k,g' \rightarrow g_k}^{(l)} = \frac{1}{\sigma_{g'} \Psi_{g'} \xi_{k,g' \rightarrow g_k}} \int_{E_{g'}^*}^{E_{g'-1}} \sigma \psi dE' \times$$

$$\times \int_{E_{k,g_k}^{\min}(E')}^{E_{k,g_k}^{\max}(E')} dE \int_{\mu_k^{\min}}^1 f_k^{CM} J_k P_l(\mu) d\mu.$$

Для расчета  $P_l(\mu)$  в точке  $\mu$  используются рекуррентные соотношения.

Свойство функции  $f_k^{CM}$ :

$$\int_0^\infty dE \int_{-1}^1 f_k^{CM} J_k d\mu = 1 \Rightarrow \sum_{g_k=1}^{G_k} \xi_{k,g' \rightarrow g_k} = 1.$$

Для расчета индикатрисы выхода частиц в ЛСК при фиксированном групповом переходе используется функция, которая представляется конечным рядом Фурье по полиномам Лежандра

$$\omega_{k,g' \rightarrow g_k}(\mu) = \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} \omega_{k,g' \rightarrow g_k}^{(l)} P_l(\mu).$$

На рис. 2 представлен график зависимости нейтронной индикатрисы от угловой переменной  $\mu$ .

График построен для перехода из 1-й группы в 4-ю, которая является самой первой группой, куда нейтрон может вылететь.

Из рис. 2 видно, что при увеличении числа гармоник индикатриса стремится к табулированному, точному представлению, т. е. для более корректного описания индикатрисы необходимо использовать большее число гармоник.

Также видно, что для конкретного группового перехода индикатрисе свойственны интервалы с узкой областью определения.

### Особенности расчета и программной реализации

Во всех формулах интегралы по энергии рассчитывались методом численного интегрирования с помощью квадратур Гаусса [5–7], а интегралы по углу двумя способами: методом численного интегрирования и аналитическим методом.

Расчеты показали, что первый вариант оказался затратным по времени, поэтому нами было уделено большое внимание вниманию к ускорению и оптимизации расчета. В связи с этим был реализован аналитический расчет интеграла по угловой переменной.

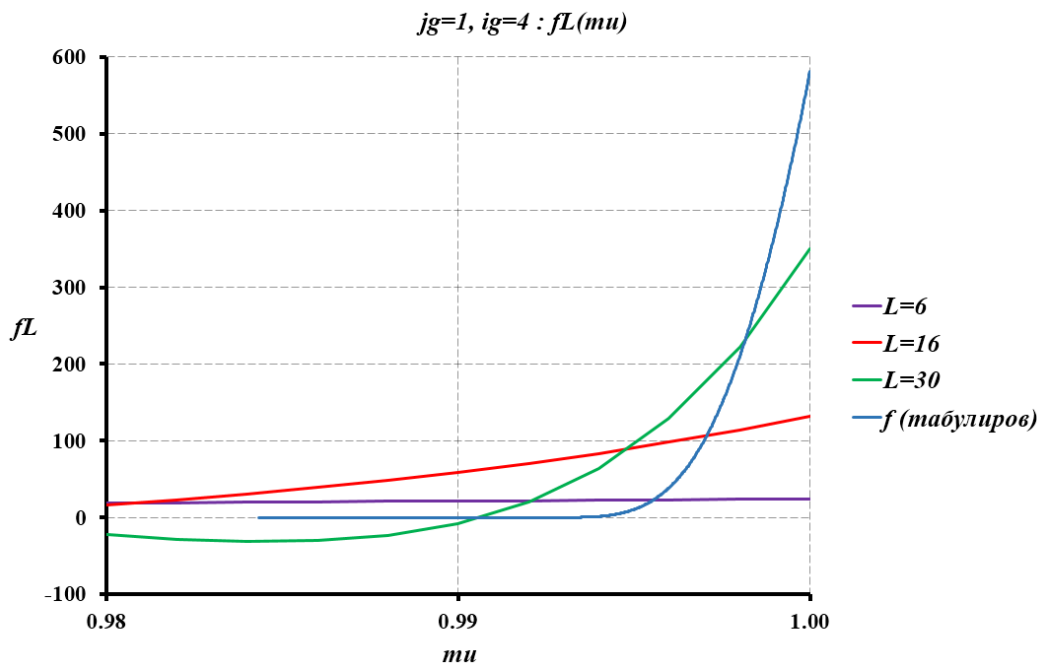


Рис. 2. График зависимости нейтронной индикатрисы по угловой переменной для группового перехода [13.91; 14.19] МэВ  $\Rightarrow$  [10.94; 11.98] МэВ: 1, 2, 3 – графики соответствуют индикатрисе, полученной с помощью  $P_L$ -приближения; 4 – график – табулированная индикатриса

Полиномы Лежандра представляются в виде

$$P_l(\mu) = \sum_{m=0}^{\lfloor l/2 \rfloor} B_l^{(m)} \mu^{l-2m}.$$

Для расчета коэффициентов  $B_l^{(m)}$  используются рекуррентные соотношения:

$$B_0^{(0)} = B_1^{(0)} = 1;$$

$$\text{при } l \geq 2: B_l^{(m)} = \left(1 - \frac{l-0,5}{m}\right) B_{l-2}^{(m-1)}, \quad m = \overline{1, \lfloor l/2 \rfloor}$$

$$B_l^{(0)} = \left(2 - \frac{1}{l}\right) B_{l-1}^{(0)} \quad \text{или} \quad B_l^{(0)} = 1 - \sum_{m=1}^{\lfloor l/2 \rfloor} B_l^{(m)} \quad (\text{для контроля точности}).$$

Сначала величины  $B_l^{(m)}$  рассчитываются в рабочий массив типа `real(16)`, но в дальнейших расчетах используется массив значений  $B_l^{(m)}$  типа `real(8)`. Заметим, массив  $B_l^{(m)}$  не зависит от процесса, группового перехода и индекса  $k$ .

Таким образом, в программе RMK2: используются вещественные переменные только типа `real(8)`, расчет матриц  $\xi$ ,  $[\xi E]$  и  $\omega^{(l)}$  ведется одновременно, т. е. на единых узлах  $E'$  и  $E$ . В результате чего было получено ускорение расчета в 20–30 раз. Но есть ограничение: аналитика работает хуже для большого числа гармоник, в таком случае необходимо использовать метод численного интегрирования.

### Заключение

В составе собственной программы RMK2 реализован алгоритм расчета групповых констант для многочастичных НЯ и ТЯ реакций на основе модели фазово-пространственного распределения.

Результатами расчета являются групповые сечения, матрицы групповых переходов, групповое распределение кинетической энергии вторичных частиц, матрицы коэффициентов Фурье индикатрисы выхода частиц, индикатриса вылета в ЛСК. Проведен расчет баланса энергий и калорийностей процес-

са. В качестве примера была рассмотрена трехчастичная реакция  $n + d \rightarrow 2n + p$ .

В ходе работы было проведено сравнение результатов расчетов групповых констант программы RMK2 с помощью двух способов определения интеграла по угловой переменной (аналитического и численного). Анализ показал совпадение результатов с высокой точностью. Аналитический метод предпочтительнее из-за экономии времени счета.

Были проведены сравнительные расчеты с NJOY, в результате которых получили совпадение результатов с высокой точностью.

### Литература

1. Алексеев А. В., Крутько Н. А., Бнятов А. В., Касаткин С. С. Программный комплекс GROUND константного обеспечения ядерно-физическими данными / 66-я международная конференция «Ядро-2016» по проблемам ядерной спектроскопии и структуре атомного ядра // Сб. докл. Саров: ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», 2016
2. MacFarlane R. E., Muir D. W. The NJOY Nuclear Data Processing System. Version 91, LA-12740-M, October 1994.
3. Барабанова Д. С., Колобянина Н. В., Мжачих С. В., Алексеев А. В. Методика и программа расчета групповых констант для вторичных частиц, образующихся в нейтронно-ядерных реакциях на изотопах водорода и гелия / 16-я научно-техническая конференция «Молодежь в науке» // Сб. докл. Саров: ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», 2018. Т. 1.
4. Herman M. and members of the cross section evaluation working group ENDF-6 Formats Manual. Report BNL-NCS-44945-05-Rev. July 1990 // N. Y.: BNL, Revised June 2005.
5. Крылов В. И., Шульгина Л. Т. Справочная книга по численному интегрированию. М.: Наука, 1966.
6. Davis P., Rabinowitz P. Abscissas and weights for Gaussian quadratures of high order // J. Research NBS. 1956. Vol. 56, N 1. P. 35–37.
7. Davis P., Rabinowitz P. Additional abscissas and weights for Gaussian quadratures of high order: Values for  $n = 64, 80, \text{ and } 96$  // J. Research NBS. 1958. Vol. 60, N 6. P. 613–614.