

Ордена Ленина
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
им. М.В. Келдыша
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

А.В. Воронков, В.В. Сеница

GNPDL-30/19:
БИБЛИОТЕКА НЕЙТРОННО-ФОТОННЫХ ГРУППОВЫХ КОНСТАНТ
ДЛЯ РАСЧЕТА ПОДКРИТИЧЕСКИХ СИСТЕМ С ВНЕШНЕЙ
ПОДСВЕТКОЙ

Часть 1. Структура микросечений

Москва-2001

АННОТАЦИЯ

На основе оцененных данных ENDF/B-6 с помощью пакета программ NJOY-94 сформирована библиотека GNPDL-30/19-групповых нейтронно/фотонных сечений для расчетов подкритических систем с внешней подсветкой. Приведены описания содержания библиотеки и структуры групповых данных.

Работа выполнена при финансовой поддержке
Международного научно-технического центра
(код проекта № 115-95)

A.V. Voronkov, V.V. Sinitsa

GNPDL-30/19:
LIBRARY OF NEUTRON-PHOTON GROUP CONSTANTS
FOR ADS CALCULATIONS
Part 1. Structure of microcrosssections.

ABSTRACT

On the base of estimated data ENDF/B-6 with the help of the packet of programs NJOY-94 the library of GNPDL-30/19-group neutron/photon cross sections was formed for ADS calculations. Here are the descriptions of the contents of the library and structure of group data.

The work was supported by the International Science-Technical Center
(project № 115-95)

ОГЛАВЛЕНИЕ

1. Введение	4
1.1 Общие сведения о библиотеке ENDF/B-6	5
1.2 Адаптация и верификация процессинговых программ	5
1.3 Особенности переработки ядерных данных	6
2. Групповые микроскопические сечения	7
2.1 Многогрупповое приближение	7
2.2 Групповые нейтронные константы	9
2.3 Источник деления	11
2.4 Константы образования и переноса фотонов	11
3. Библиотека микроконстант	12
3.1 Групповая структура	12
3.2 Типы взаимодействий	13
3.3 Структура микроконстант	18
3.4 Программы сопровождения и доступа	19
Литература	25
ПРИЛОЖЕНИЕ А. Каталог библиотеки нейтронных данных	26
ПРИЛОЖЕНИЕ В. Формат микроконстант MATXS	32

1. ВВЕДЕНИЕ

Библиотека нейтроно-фотонных групповых констант GNPDL-30/19 сформирована в рамках системы константного обеспечения, разработанной для проведения экспертных работ с библиотеками оцененных ядерных данных. Библиотека получена на основе американской национальной библиотеки оцененных данных ENDF/B-6 [1] в групповой структуре, совпадающей с используемой в отечественной практике расчетов реакторов и защиты системой констант БНАБ-93 [2]. Цель ее создания состоит в следующем.

Разработка системы групповых констант представляет собой длительный и трудоемкий процесс, включающий этап экспертной оценки ядерных данных и ревизию существующих файлов; переработку файлов оцененных данных в групповой вид и формирование библиотеки групповых констант в специально разработанном формате (который обычно менялся от версии к версии); разработку программ расчета макро-констант и обеспечение интерфейса с программами расчета полей излучения; тестирование констант на основе интегральных экспериментов и, в случае необходимости, их корректировку. Только после этого система констант получает право на существование и внедряется в практические расчеты. Обычно период обновления константной базы составлял около десяти лет. Как следствие этого, к системе групповых констант предъявлялось требование достаточной универсальности, что, вообще говоря, не является необходимым.

Производительность современной вычислительной техники вселяет надежду на то, что в недалеком будущем будет сформирована достаточно надежная база оцененных данных и достигнута необходимая точность их переработки, что позволит оптимизировать константы в зависимости от задачи. Разработка констант превратится в техническую задачу, в технологический процесс.

На протяжении последних нескольких лет ведется освоение существующих технологий, их развитие и адаптация к имеющимся условиям на базе персональных компьютеров, с перспективой их переноса на мультипроцессорные вычислительные системы. В настоящее время в систему включены все основные мировые библиотеки оцененных ядерных данных и набор имеющих наибольшее распространение процессинговых программ. Представляемая работа является опытом применения этих технологий для разработки константной системы, аналогичной системе БНАБ-93. В качестве основного инструмента для формирования библиотеки групповых констант использовался пакет программ NJOY-94[3]. Для отдельных типов данных, для выполнения вспомогательных расчетов и разрешения сомнительных случаев привлекались пакеты RECENT[4] и ГРУКОН[5].

Расчеты проводились на вычислительной базе Института Прикладной Математики им. М.В. Келдыша РАН (ИПМ РАН, Москва) и ГНЦ РФ Физико-энергетического института (ГНЦ РФ ФЭИ, Обнинск).

1.1. Общие сведения о библиотеке ENDF/B-6

Американская национальная библиотека оцененных данных ENDF/B версия 6 (ENDF/B-6) была выпущена для открытого пользования в 1990 году после интенсивных работ по измерению микро-сечений и оценке данных, длившихся около 10 лет. Координация работ велась рабочей группой по оценке при Национальном Ядерном Центре Брукхэвенской Национальной Лаборатории США (NNDC BNL). В результате этих работ были обновлены данные для 74 нуклидов из 320, имевшихся в предыдущих версиях. Для большинства из них были изменены сечения и способы их параметризации, из которых наиболее существенными являются:

- новая оценка сечений в резонансной области энергий для нуклидов ^{235}U , ^{238}U , ^{239}Pu и ^{241}Pu
- использование формализма Reich-Moore в резонансной области энергий
- представление энерго-угловых распределений для ядер отдачи и вторичных частиц в файле 6
- поизотопное представление данных для конструкционных материалов (Cr, Fe, Ni, ...)

В работе использовались следующие файлы библиотеки ENDF/B-6:

- нейтронные данные общего назначения (320 материалов)
- фотонные данные (100 материалов)
- данные о выходах продуктов деления (31 материал)

Для всех этих данных были получены соответствующие групповые представления, которые и составили содержание библиотеки GNPDL-30/19.

1.2. Адаптация и верификация процессинговых программ

Переработке данных предшествовали работы по адаптации и верификации основных процессинговых программ NJOY-94 и GRUCON. Они включали:

- оптимизацию используемой памяти путем наложения общих областей автономно работающих модулей; расширение границ некоторых массивов (в частности, число сечения разбавления было увеличено с 10 до 30 для более подробного описания зависимости и уменьшения погрешности интерполяции)
- расширение возможностей GRUCON для переработки данных по выходам продуктов деления (файл 8)

- постановку пакета NJOY на компьютеры CYBER-960 с длиной слова 64 бита и IBM PC с 32-х разрядным словом и проведение сравнительных расчетов для оценки влияния длины слова на погрешность вычислений (полученной значение $\text{eps} < 0.1\%$)
- проведение сравнительных расчетов сечений по пакетам NJOY и GRUCON для оценки влияния алгоритмов на погрешность вычислений (для наиболее важных величин $\text{eps} < 1\%$)

Обнаруженные дефекты программ и файлов оцененных данных устранялись и протоколировались. Редакции в тексты программ вносились с помощью программы UPDATE [6] посредством UPN-файлов, что обеспечивало их аддитивность и полную обратимость.

1.3. Особенности переработки ядерных данных

Переработка библиотеки оцененных данных производилась с помощью командных процедур, генерирующих файлы исходных данных для перерабатывающих программ в процессе запуска. Имя нуклида, номер материала и некоторые другие переменные величины задавались в виде параметров процедуры. Это избавляло от необходимости тиражировать исходные данные и гарантировало идентичность расчетных условий, не подлежащих изменению. В процессе формирования библиотеки микро-констант GNPDL-30/19 можно выделить следующие этапы:

- восстановление детальных нейтронных сечений и формирование архива файлов PENDF
- преобразование детальных зависимостей нейтронных сечений в групповую форму и формирование архива GENDF-N
- преобразование детальных зависимостей фотонных сечений и формирование архива GENDF-G
- переработка данных по выходам продуктов деления и формирование архива GENDF-FP
- формирование файлов обобщенных продуктов деления в формате GENDF для архива GENDF-N
- формирование файлов нейтронно-фотонных групповых констант в формате MATXS.

Библиотека микроскопических данных GNPDL-30/19 может использоваться непосредственно программой подготовки макро-констант и скоростей реакций TRANSX, либо другими аналогичными программами.

2. ГРУППОВЫЕ МИКРОСКОПИЧЕСКИЕ СЕЧЕНИЯ

2.1 Групповое приближение

Групповые константы используются программами расчета пространственных и энергетических распределений нейтронов и/или фотонов, а также их функционалов, таких как критичность, доза, активация и др. Эти распределения являются решением уравнения переноса для незаряженных частиц, которое следуя работе [3], запишем в виде:

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} \phi(x, \mu, E) + \sigma_t(x, E) \phi(x, \mu, E) = \int d\Omega' \int dE' \sigma_x(x, E' \rightarrow E, \Omega' \rightarrow \Omega) \phi(x, \mu', E') + Q(x, \mu, E) \quad , \quad (1)$$

где ϕ - поток, зависящий от координаты x , μ - косинус полярного угла для направления Ω , E - энергия (для упрощения формул рассмотрение ведется в одномерной плоской геометрии). Полное сечение σ_t предполагается зависящим от координаты и энергии. Правая часть уравнения описывает источник, состоящий из двух компонент: внутренний, обусловленный образованием нейтронов с направлением Ω и энергией E в результате различных взаимодействий с ядрами нейтронов с направлением движения Ω' и энергией E' (вероятность этого процесса характеризуется "сечением переноса" σ_x) и внешний, независимый источник Q .

Макроскопические сечения (в единицах см^{-1}) в уравнении (1) вычисляются из микроскопических сечений отдельных изотопов и элементов (в барнах) по формуле:

$$\sigma_t(x, E) = \sum_i \rho_i \sigma_t^i(T[x], E) \quad , \quad (2)$$

где ρ_i - ядерная плотность в смеси изотопа/элемента ($\text{барн}^{-1} \text{см}^{-1}$), зависящая от координаты, T - температура, которая также может меняться в пространстве. Аналогичная формула может быть записана для сечения σ_x . Это сечение включает процессы рассеяния и деления, угловую зависимость которых обычно ограничивают только одной переменной - косинусом угла рассеяния $\mu_0 = \Omega \cdot \Omega'$. Это позволяет разложить σ_x по полиномам Лежандра:

$$\sigma_x(x, E' \rightarrow E, \Omega \rightarrow \Omega) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{4\pi} \sigma_{xl}(x, E' \rightarrow E) P_l(\mu_0) \quad . \quad (3)$$

Интегрируя по азимутальному углу и применяя теорему сложения, получим:

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} \phi(x, \mu, E) + \sigma_t(x, E) \phi(x, \mu, E) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2} P_l(\mu) \int \sigma_{xl}(E' \rightarrow E) \phi_l(x, E') dE' + Q(x, \mu, E) \quad , \quad (4)$$

где

$$\phi_l(x, E) = \int P_l(\mu) \phi(x, \mu, E) d\mu \quad . \quad (5)$$

Требуемые функционалы запишем в виде:

$$R(x) = \int \sigma_r(x, E) \phi_0(x, E) dE \quad , \quad (6)$$

где σ_r - сечение реакции для этого функционала.

Для того, чтобы получить групповое приближение, проинтегрируем уравнения (4) и (6) в групповом интервале g . Получим, соответственно:

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} \phi_g(x, \mu) + \sum_{l=0}^N P_l(\mu) \sigma_{tlg}(x) \phi_{lg} = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2} P_l(\mu) \sum_{g'} \sigma_{xlg' \rightarrow g}(x) \phi_{lg'} + Q_g(x, \mu) \quad , \quad (7)$$

и

$$R(x) = \sum_g \sigma_{rg}(x) \phi_{0g}(x) \quad , \quad (8)$$

$$\phi_{lg}(x) = \int_g \phi_l(x, E) dE \quad , \quad (9)$$

$$\sigma_{tlg}(x) = \frac{\int_g \sigma_t(x, E) \phi_l(x, E) dE}{\int_g \phi_l(x, E) dE} \quad (10)$$

где

$$\sigma_{rg}(x) = \frac{\int_g \sigma_r(x, E) \phi_0(x, E) dE}{\int_g \phi_0(x, E) dE}, \quad (11)$$

$$\sigma_{Xlg' \rightarrow g}(x) = \frac{\int_g dE \int_{g'} dE' \sigma_{Xl}(x, E' \rightarrow E) \phi_l(x, E)}{\int_g \phi_l(x, E) dE}. \quad (12)$$

Последние три уравнения являются основными определениями групповых сечения и матриц переходов. Отметим, что групповые константы зависят как от сечений, данные о которых имеются в библиотеках, так и от формы ϕ внутри группы.

2.2 Групповые нейтронные константы

В общей постановке задачи вид весовой функции ϕ не известен: ведь она по сути и является искомым распределением частиц. Однако зачастую удается получить довольно точные значения констант, если в широких энергетических интервалах с малым числом групп поток имеет характерные зависимости (например, спектр деления, или $1/E$, или спектр Максвелла). С другой стороны, можно выбрать столь узкие группы, чтобы форма весовой функции не оказывала существенного влияния на средние величины. Успех применения метода групп во многом определяется умением находить баланс между выбором весовой функции и числа групп.

Для задач переноса нейтронов задача усложняется тем, что поток $\phi(E)$ обнаруживает глубокие провалы, вызванные поглощением в резонансах сечений. Эти провалы могут существенно уменьшать (экранировать) скорость реакции $\sigma(E)\phi(E)$. Для того, чтобы учесть этот эффект при получении констант, обычно используют модель Бондаренко [9], особенно хорошо зарекомендовавшая себя в случае узких резонансов и протяженных систем (для других случаев рекомендуется использовать более строгий подход, основанный на решении детального уравнения замедления).

Согласно этой модели, поток представляется в виде:

$$\phi_l(E) = \frac{W_l(E)}{[\sigma_t(E)]^{l+1}}, \quad (13)$$

где $\phi_l(E)$ - l -я компонента разложения углового потока по полиномам Лежандра, $W_l(E)$ - плавная функция энергии (например, $1/E$ +спектр Уатта), $\sigma_t(E)$ - полное макроскопическое сечение материала. Обычно зависимостью функции $W_l(E)$ от l пренебрегают и оставляют за пользователем право выбора

одной из встроенных в программу функций $C(E)$. Предполагая, что суммарное влияние всех изотопов на самоэкранирование выделенного i -изотопа можно характеризовать одним параметром σ_0^i - "сечением разбавления", с учетом вышесказанного, получим:

$$\phi_i^i(E) = \frac{C(E)}{[\sigma_t^i(E) + \sigma_0^i]^{l+1}} \quad (14)$$

где σ_t^i - полное микроскопическое сечение изотопа i .

Таким образом, каждая компонента смеси имеет свою весовую функцию. Полное макроскопическое сечение вычисляется по формуле:

$$\sigma_{tlg} = \sum_i \rho_i \sigma_{tlg}^i(\sigma_0^i, T) \quad (15)$$

где

$$\sigma_{tlg}^i(\sigma_0, T) = \frac{\int_g \frac{\sigma_t^i(E, T)}{[\sigma_0 + \sigma_t^i]^{l+1}} C(E) dE}{\int_g \frac{1}{[\sigma_0 + \sigma_t^i]^{l+1}} C(E) dE} \quad (16)$$

Аналогичные выражения получаются для σ_r и $\sigma_{Xlg \rightarrow g'}$.

Для вычисления сечений разбавления в многокомпонентных средах обычно используется итерационная процедура, построенная на уравнении:

$$\sigma_{0g}^i = \frac{1}{\rho_i} \sum_{j \neq i} \rho_j \sigma_{t0g}^j(\sigma_{0g}^j, T) \quad (17)$$

где ρ_i - ядерная плотность или отношение концентраций.

В области неразрешенных резонансов детальная зависимость сечений от энергий неизвестна. Подынтегральные выражения заменяются в этом случае ожидаемыми значениями:

$$\sigma_{xlg}(\sigma_0, T) = \frac{\int_g \left\langle \frac{\sigma_x(E, T)}{[\sigma_0 + \sigma_t]^{l+1}} \right\rangle C(E) dE}{\int_g \frac{1}{[\sigma_0 + \sigma_t]^{l+1}} C(E) dE} \quad (18)$$

где ожидаемые значения являются результатом усреднения по распределениям ширин и расстояний между уровнями в окрестности точки E .

2.3 Источник деления

Сечение переноса σ_X в уравнении (1) содержит все процессы, приводящие к возникновению нейтронов и изменению их фазовых координат, включая реакции упругого и неупругого рассеяния, (n,2n), деления и др. Иногда удобно отделить процесс деления от остальных. Предполагая деление изотропным, источник деления в группе g запишем в виде:

$$S_g = \sum_{g'} \sigma_{fg' \rightarrow g} \phi_{0g'} , \quad (19)$$

где матрица межгрупповых переходов определяется уравнением (12) с $l=0$. Зависимость спектра деления от начальной энергии нейтронов становится заметной лишь для довольно высоких энергий; там, где ею можно пренебречь, справедливо выражение:

$$S_g = \chi_g \sum_{g'} \bar{\nu}_{g'} \sigma_{fg'} \phi_{0g'} , \quad (20)$$

здесь $\bar{\nu}_g$ - выход нейтронов деления, σ_{fg} - сечение деления, χ_g - усредненный по начальной энергии нейтронов спектр деления. Вновь определенные величины определяются формулами:

$$\chi_g = \frac{\sum_{g'} \sigma_{fg' \rightarrow g} \phi_{0g'}}{\sum_g \sum_{g'} \sigma_{fg' \rightarrow g} \phi_{0g'}} , \quad (21)$$

$$\bar{\nu}_g = \sum_{g'} \sigma_{fg \rightarrow g'} / \sigma_{fg} . \quad (22)$$

2.4 Константы образования и переноса фотонов

Уравнение переноса фотонов аналогично (7), если все входящие в него величины и определения - потоки, сечения, группы отнести не к нейтронам, а к фотонам. Внешний источник фотонов зависит от нейтронного потока и сечения образования фотонов в нейтронных реакциях:

$$Q_g(x, \mu) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2} P_l(\mu) \sum_{g'} \sigma_{\gamma lg' \rightarrow g}(x) \phi_{lg'}(x) , \quad (23)$$

где $\sigma_{\gamma lg' \rightarrow g}$ определяется уравнением (12), если заменить X на γ .

Совместная задача переноса нейтронов и фотонов может быть сведена к решению уравнения (7), в котором фотонные группы рассматриваются как дополнительные низкоэнергетические нейтронные группы. Если процессы (γ, n) не играют существенной роли, образование фотонов $n \rightarrow \gamma$ может рассматриваться аналогично процессу замедления нейтронов $n \rightarrow n$. Ниже схематически показана структура набора констант для решения обобщенного уравнения переноса нейтронов и фотонов.

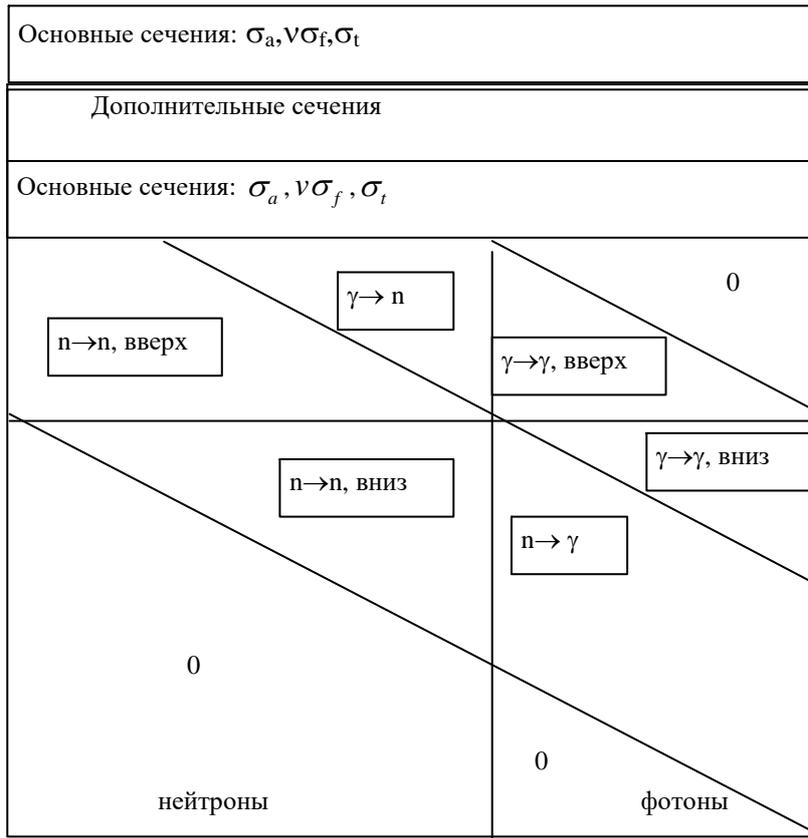


Рис.1 Структура набора констант.

3. БИБЛИОТЕКА МИКРОКОНСТАНТ

Библиотека групповых микроскопических данных GNPDL-30/19 включает следующие разделы:

- данные о взаимодействии нейтронов с веществом: сечения реакций, матрицы межгрупповых переходов, - в области энергий 0.0001эВ - 20МэВ (30 групп);
- матрицы образования фотонов в нейтронных реакциях и данные о взаимодействии фотонов с веществом в области энергий от 0.01 - 20МэВ (19 групп);

- кумулятивные и независимые выходы осколков деления, усредненные по типичному спектру реактора на быстрых нейтронах (1 группа).

3.1. Групповая структура

Структура группового разбиения до 10.5МэВ практически совпадает с разбиением БНАБ, в верхней области добавлены группы с тем, чтобы сохранить информацию, имеющуюся в файлах оцененных данных (таблицы 1,2). В качестве весовой функции при усреднении групповых сечений использовался стандартный спектр быстрого реактора

Таблица 1. Структура нейтронных групп

N	Границы групп		Ширина ΔE	Ширина ΔU	
	верхняя МэВ	нижняя			
1	20.0000	-	17.0000	3.0000	1.1765
2	17.0000	-	15.0196	1.9804	1.1319
3	15.0196	-	13.9818	1.0378	1.0742
4	13.9818	-	10.5000	3.4818	1.3316
5	10.5000	-	6.5000	4.0000	1.6154
6	6.5000	-	4.0000	2.5000	1.6250
7	4.0000	-	2.5000	1.5000	1.6000
8	2.5000	-	1.4000	1.1000	1.7857
9	1.4000	-	0.8000	0.6000	1.7500
кэВ					
10	800.0000	-	400.0000	400.0000	2.0000
11	400.0000	-	200.0000	200.0000	2.0000
12	200.0000	-	100.0000	100.0000	2.0000
13	100.0000	-	46.4159	53.5841	2.1544
14	46.4159	-	21.5443	24.8716	2.1544
15	21.5443	-	10.0000	11.5443	2.1544
16	10.0000	-	4.6416	5.3584	2.1544
17	4.6416	-	2.1544	2.4872	2.1544
18	2.1544	-	1.0000	1.1544	2.1544
эВ					
19	1000.0000	-	464.1589	535.8411	2.1544
20	464.1589	-	215.4434	248.7155	2.1544
21	215.4434	-	100.0000	115.4434	2.1544
22	100.0000	-	46.4159	53.5841	2.1544
23	46.4159	-	21.5443	24.8715	2.1544
24	21.5443	-	10.0000	11.5443	2.1544
25	10.0000	-	4.6416	5.3584	2.1544

26	4.6416	-	2.1544	2.4872	2.1544
27	2.1544	-	1.0000	1.1544	2.1544
28	1.0000	-	0.4642	0.5358	2.1544
29	0.4642	-	0.2154	0.2487	2.1544
30	0.2154	-	0.0001	0.2153	-

Таблица 2. Структура фотонных групп

N	Границы групп		Ширина ΔE	Ширина ΔU
	верхняя МэВ	нижняя		
1	20.0000	17.0000	3.0000	1.1765
2	17.0000	15.0000	2.0000	1.1333
3	15.0000	13.0000	2.0000	1.1538
4	13.0000	11.0000	2.0000	1.1818
5	11.0000	9.0000	2.0000	1.2222
6	9.0000	7.0000	2.0000	1.2857
7	7.0000	5.5000	1.5000	1.2727
8	5.5000	4.5000	1.0000	1.2222
9	4.5000	3.5000	1.0000	1.2857
10	3.5000	2.5000	1.0000	1.4000
11	2.5000	1.7500	0.7500	1.4286
12	1.7500	1.2500	0.5000	1.4000
13	1.2500	0.7500	0.5000	1.6667
14	0.7500	0.3500	0.4000	2.1429
15	0.3500	0.1500	0.2000	2.3333
16	0.1500	0.0800	0.0700	1.8750
17	0.0800	0.0400	0.0400	2.0000
18	0.0400	0.0200	0.0200	2.0000
19	0.0200	0.0100	0.0100	2.0000

3.2. Типы взаимодействий

Каждому набору данных в архивах библиотеки GNPDL-30/19 поставлены в соответствие идентифицирующие номера: МАТ - номер материала, MF - номер типа данных, МТ - номер типа взаимодействия. Номер материала МАТ однозначно определяет нуклид или элемент или вещество, к которому относятся эти данные. Он в точности соответствует номеру, принятому в библиотеке ENDF/B-6. Номер типа данных MF определяет структуру записи данных с учетом типа налетающей частицы. Групповые данные могут быть векторного и матричного вида. Для их хранения используются следующие структуры:

3 - групповые нейтронные сечения

- 6 - матрицы межгрупповых переходов для нейтронов
- 16 - матрицы образования фотонов в нейтронных реакциях
- 23 - групповые сечения взаимодействия фотонов с веществом
- 26 - матрицы межгрупповых переходов для фотонов.

Внутри каждого типа данные подразделяются по видам взаимодействия или другим характеристикам. Для идентификации этих характеристик служит номер МТ.

Список номеров материалов МАТ и типов взаимодействий МТ, включенных в библиотеку GNPDL-30/19 приведен в **Приложении А**. Ниже приводится расшифровка значений МТ.

Суммы процессов

1	(n,tot)	102	(n,g)	105	(n,t)
2	(n,n)	103	(n,p)	106	(n,He3)
4	(n,n')	104	(n,d)	107	(n,a)

Реакции с возбуждением дискретных уровней (N=0,1,2,3,...40)

50 +N(n,n'N)	650+N	(n,d'N)	750+N	(n,He3'N)	
600+N	(n,p'N)	700+N	(n,t'N)	800+N	(n,a'N)

Реакции с возбуждением уровней в области континуума

91	(n,n [^])	699	(n,d [^])	799	(n,He3 [^])
649	(n,p [^])	749	(n,t [^])	849	(n,a [^])

Многочастичные реакции

11	(n,2nd)	32	(n,nd)	108	(n,2a)
16	(n,2n)	33	(n,nt)	109	(n,3a)
17	(n,3n)	34	(n,nHe3)	111	(n,2p)
22	(n,na)	35	(n,nd2a)	112	(n,pa)
23	(n,n3a)	36	(n,nt2a)	113	(n,t2a)
24	(n,2na)	37	(n,4n)	114	(n,d2a)
25	(n,3na)	41	(n,2np)	115	(n,pd)
26	(n,np)	42	(n,3np)	116	(n,pt)
29	(n,n2a)	44	(n,n2p)	117	(n,da)
30	(n,2n2a)	45	(n,npa)		

Процессы деления

18	(n,ftot)	20	(n,nf)
19	(n,f)	21	(n,2nf)
		22	(n,3nf)

Специальные величины

- 452 полное число нейтронов деления
 455 выход запаздывающих нейтронов
 456 выход мгновенных нейтронов

Часть данных, включенных в архив, отсутствует в библиотеке оцененных данных и получена расчетным путем. Это данные следующих типов:

- 221 тепловое сечения рассеяния
 251 средний косинус рассеяния ($\bar{\mu}$)
 252 средний логарифм потери энергии при замедлении ($\bar{\xi}$)
 253 средний квадрат логарифмической потери энергии ($\bar{\gamma}$)
 301 керма-фактор, полученный из балансных соотношений
 443 керма-фактор, полученный из уравнений кинематики (верхний предел)
 444 сечение радиационного повреждения

Фотонные данные содержат сечения и матрицы фото-атомных взаимодействий. В архив включены данные для следующих элементов:

Имя	МАТ	Имя	МАТ	Имя	МАТ	Имя	МАТ
01H	100	26Fe	2600	51Sb	5100	76Os	7600
02He	200	27Co	2700	52Te	5200	77Ir	7700
03Li	300	28Ni	2800	53I	5300	78Pt	7800
04Be	400	29Cu	2900	54Xe	5400	79Au	7900
05B	500	30Zn	3000	55Cs	5500	80Hg	8000
06C	600	31Ga	3100	56Ba	5600	81Tl	8100
07N	700	32Ge	3200	57La	5700	82Pb	8200
08O	800	33As	3300	58Ce	5800	83Bi	8300
09F	900	34Se	3400	59Pr	5900	84Po	8400
10Ne	1000	35B	3500	60Nd	6000	85At	8500
11Na	1100	36Kr	3600	61Pm	6100	86Rn	8600
12Mg	1200	37Rb	3700	62Sm	6200	87Fr	8700
13Al	1300	38Sr	3800	63Eu	6300	88Ra	8800
14Si	1400	39Y	3900	64Gd	6400	89Ac	8900
15P	1500	40Zr	4000	65Tb	6500	90Th	9000
16S	1600	41Nb	4100	66Dy	6600	91Pa	9100
17Cl	1700	42Mo	4200	67Ho	6700	92U	9200
18Ar	1800	43Tc	4300	68Er	6800	93Np	9300
19K	1900	44Ru	4400	69Tm	6900	94Pu	9400
20Ca	2000	45Rh	4500	70Yb	7000	95Am	9500
21Sc	2100	46Pd	4600	71Lu	7100	96Cm	9600
22Ti	2200	47Ag	4700	72Hf	7200	97Bk	9700
23V	2300	48Cd	4800	73Ta	7300	98Cf	9800
24Cr	2400	49In	4900	74W	7400	99Es	9900

25Mn 250

50Sn 5000

75Re 7500

100Fm 9920

Для каждого элемента имеются данные:

- 501 полное взаимодействие
- 502 когерентное рассеяние
- 504 некогерентное рассеяние
- 516 образование пар
- 522 фотоэлектрическое поглощение
- 525 тепловыделение

Выходы осколков деления приведены для следующих материалов:

90Th227 9025 92U0236 9231 94Pu241 9443 96Cm245 9640
 90Th229 9031 92U0237 9234 94Pu242 9446 96Cm246 9643
 90Th232 9040 92U0238 9237 95Am241 9543 96Cm248 9649
 91Pa231 9131 93Np237 9346 95Am242M 9547 98Cf249 9852
 92U0232 9219 93Np238 9349 95Am243 9549 98Cf251 9858
 92U0233 9222 94Pu238 9434 96Cm242 9631 99Es254 9914
 92U0234 9225 94Pu239 9437 96Cm243 9634 100Fm255 9936
 92U0235 9228 94Pu240 9440 96Cm244 9637

Внутри каждого материала они подразделяются на:

- 454 независимые выходы
- 459 кумулятивные выходы

Таблица 3. Кумулятивные выходы для важнейших материалов и осколков деления

		Th232	U233	U235	U238	Np237	Pu239	Pu240	Pu242	Am241
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
1	Kr-83	0.0211	0.0101	0.0053	0.0042	0.0034	0.0029	0.0025	0.0013	0.0017
2	Mo-95	0.0556	0.0634	0.0650	0.0511	0.0568	0.0481	0.0468	0.0378	0.0397
3	Tc-99	0.0283	0.0491	0.0610	0.0611	0.0661	0.0621	0.0596	0.0599	0.0662
4	Ru-101	0.0078	0.0317	0.0517	0.0614	0.0664	0.0601	0.0592	0.0609	0.0599
5	Ru-103	0.0024	0.0157	0.0303	0.0608	0.0577	0.0699	0.0596	0.0623	0.0622
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
6	Rh-103	0.0024	0.0157	0.0303	0.0608	0.0577	0.0699	0.0596	0.0623	0.0622
7	Rh-105	0.0017	0.0049	0.0096	0.0395	0.0264	0.0564	0.0565	0.0600	0.0664
8	Pd-105	0.0017	0.0049	0.0096	0.0395	0.0264	0.0564	0.0565	0.0600	0.0664
9	Pd-108	0.0020	0.0007	0.0005	0.0067	0.0177	0.0216	0.0326	0.0445	0.0425
10	Ag-109	0.0022	0.0003	0.0003	0.0035	0.0110	0.0147	0.0214	0.0350	0.0249
11	Cd-113	0.0023	0.0001	0.0001	0.0014	0.0003	0.0008	0.0010	0.0025	0.0019
12	In-115	0.0021	0.0001	0.0001	0.0012	0.0001	0.0004	0.0006	0.0011	0.0004
13	I-127	0.0021	0.0055	0.0015	0.0029	0.0018	0.0050	0.0035	0.0020	0.0058

14	I-135	0.0547	0.0503	0.0628	0.0677	0.0690	0.0654	0.0673	0.0738	0.0516
15	Xe-131	0.0176	0.0360	0.0289	0.0337	0.0315	0.0385	0.0334	0.0261	0.0356
16	Xe-135	0.0549	0.0625	0.0653	0.0683	0.0767	0.0760	0.0723	0.0749	0.0699
17	Cs-133	0.0411	0.0595	0.0669	0.0667	0.0647	0.0701	0.0671	0.0585	0.0550
18	Cs-134	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
19	Cs-135	0.0549	0.0626	0.0653	0.0683	0.0767	0.0762	0.0723	0.0749	0.0701
20	Nd-143	0.0646	0.0596	0.0595	0.0453	0.0503	0.0441	0.0448	0.0454	0.0367
21	Nd-145	0.0502	0.0344	0.0393	0.0371	0.0360	0.0298	0.0307	0.0343	0.0331
22	Pm-147	0.0569	0.0347	0.0449	0.0506	0.0500	0.0400	0.0424	0.0477	0.0406
23	Pm-148	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
24	Pm-149	0.0105	0.0077	0.0108	0.0160	0.0154	0.0121	0.0139	0.0159	0.0143
25	Sm-147	0.0284	0.0173	0.0224	0.0253	0.0250	0.0200	0.0212	0.0238	0.0203
26	Sm-149	0.0105	0.0077	0.0108	0.0160	0.0154	0.0121	0.0139	0.0159	0.0143
27	Sm-150	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
28	Sm-151	0.0034	0.0031	0.0041	0.0080	0.0074	0.0073	0.0085	0.0102	0.0083
29	Sm-152	0.0008	0.0021	0.0026	0.0053	0.0036	0.0057	0.0065	0.0080	0.0072
30	Eu-153	0.0003	0.0010	0.0015	0.0041	0.0019	0.0036	0.0045	0.0062	0.0060
31	Eu-154	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
32	Eu-155	0.0000	0.0002	0.0003	0.0014	0.0007	0.0016	0.0025	0.0031	0.0030
33	Gd-157	0.0000	0.0000	0.0000	0.0004	0.0002	0.0007	0.0009	0.0016	0.0016

3.3. Структура микроконстант

Файл MATXS предназначен для хранения сечений в виде векторов и матриц для всех частиц, материалов и реакций; спектров запаздывающих нейтронов по временным группам; константы тепловыделения и спектры фотонов при распаде.

Формат MATXS хранит данные в компактном, удобном для доступа виде. Рабочая форма файла - бинарная. Текстовые записи используются только для переноса данных. Описание формата приведено в **Приложении В**.

Библиотека микроконстант состоит из файлов. Имя файла однозначно определяет материал. Длина его ограничена 6-ю символами. Обычно для естественной смеси изотопов имя состоит из названия химического элемента (Fe,Cr,Ni); для отдельных изотопов к названию химического элемента добавляется массовое число (Fe56,U235,Pu239); в случае изомерии указывается изомерное состояние (Am242m).

Внутри каждого файла данные распределены по типам частиц налетающих частиц. В библиотеке MATXS-30/19 это нейтроны N и фотоны G. В результате нейтронных реакций могут образовываться:

N - нейтрон D - дейтрон A - альфа (ядро ^4He)
G - фотон T - тритон B - бета частица
P - протон H - гелион (ядро ^3He) R - остаточное ядро

Материал содержит данные различных типов, данные каждого типа могут дифференцироваться по типам взаимодействия.

Имена типов данных:

NSCAT	рассеяние нейтронов
NG	образование фотонов в нейтронных реакциях
GSCAT	рассеяние фотонов
NTHERM	тепловые данные
PN	образование нейтронов в протонных реакциях
DKN	данные по запаздывающим нейтронам
DKHG	образование тепла при распаде и взаимодействия фотонов
DKB	данные по бета-распаду

Для типов взаимодействия система образования имен довольно очевидна. Дадим здесь расшифровку некоторых из них.

Символы NWTO, NWT1, NTOT0, NTOT1 относятся к усредненным с весом потока и тока весовым функциям и полным сечениям взаимодействия нейтронов. Данные по делению могут быть дифференцированы по парциальным процессам: NF, NNF, N2NF; суммарное сечение обозначается NFTOT. Сечения неупругого рассеяния на дискретных уровнях содержат номер уровня: N01 - неупругое рассеяние на первом уровне; неупругое рассеяние на континууме - NCN; суммарное неупругое рассеяние - INELAS. Если уровень распадается с излучением частиц, после номера уровня указываются имена частиц, например: N22A, N28P, N29DAA.

Нейтронные данные могут также содержать специальные величины. HEAT и DAME - сечения локального тепловыделения и энергии радиационного повреждения; NUBAR, XI, GAMMA - параметры модели непрерывного замедления μ , ξ , γ ; INVEL - среднегрупповая обратная скорость; NU, NUD - среднее число нейтронов на деление для мгновенных и запаздывающих, NUTOT - полное число нейтронов на деление, аналогично CHI и CHID - для спектров нейтронов деления.

Для фотонных взаимодействий используются имена:

GWTO	- весовая функция, усредненная по потоку,
GTOTO	- полное сечение взаимодействия фотонов, нулевой момент
GCON	- когерентное рассеяние фотонов
GINCH	- некогерентное рассеяние фотонов
GPAIR	- образование пар
GABS	- полное поглощение
GHEAT	- тепловыделение.

3.4. Программы сопровождения и доступа

Программа ВВС [7] предназначена для выполнения различных преобразований файлов. Ее возможности включают: изменение типа представления (из бинарного - в текстовый и наоборот), объединение

несколько материалов в один файл, извлечения нужного материала из составного файла, получение листингов и каталогов данных.

При выполнении опции изменения типа представления, ВВС читает бинарный "matxs" или текстовый "text", преобразует каждую запись из бинарного вида в текстовый или из текстового в бинарный, и записывает новый текстовый "text" или бинарный "matxs" файл.

Если требуется получить листинг, ВВС выдает записи на системное устройство вывода в виде, удобном для чтения. Обычно листинг выводится для выходного файла, если он не задан, выводится входной файл. Признак "ird" указывает, какой из MATXS-файлов - входной или выходной выдать в виде листинга.

Если задано получение каталога, ВВС формирует файл "index", содержащий в компактном виде листинг всех материалов, субматериалов и реакций, имеющихся в выходном файле. Если выходной файл не задан, выдается каталог входного файла.

С помощью ВВС можно модифицировать бинарный MATXS файл, извлекая из него материалы или вставляя новые материалы из бинарного файла "modinp". Новый файл при этом получает имя "modout". Таким образом можно менять порядок материалов в файле.

Файл из нескольких материалов может быть распакован на отдельные файлы, состоящие из одного материала с изменением способа представления, если необходимо. Можно изменить способ представления сразу целого набора файлов отдельных материалов или объединить их в один файл, одновременно изменив тип представления и получив листинг и каталог выходного файла.

Таким образом, программа ВВС дает возможность формировать компактные файлы и осуществлять их перенос из одной системы программирования в другую.

Список используемых файлов:

matxs	входной или выходной бинарный matxs файл
text	входной или выходной текстовый matxs файл
modinp	входной бинарный matxs файл для модификации
modout	выходной бинарный или текстовый модифицированный matxs файл
index	каталог библиотеки

Исходные данные

карта 1

- iiinpф тип входного файла
- 2 бинарный файл (с именем mat)
- 1 бинарный файл (matxs)
- 1 текстовый файл (text)

- 2 текстовый файл (с именем mat)
- iousf тип выходного файла
 - 2 бинарный файл (с именем mat)
 - 1 бинарный файл (matxs или modout)
 - 0 файл отсутствует
 - 1 текстовый файл (text)
 - 2 текстовый файл (с именем mat)
- imodf признак модификации
 - 0 модификации отсутствуют (по умолчанию)
 - 1 требуются модификации (modinp)
- list признак выдачи листинга
 - 0 листинг не нужен (по умолчанию)
 - 1 требуется листинг
- indx признак выдачи каталога
 - 0 каталог не нужен
 - 1 требуется каталог (по умолчанию)

карта 2 (iinp=2 или iinp=-2)

- diri имя директории с входными файлами.
указать *name/*/ (не более 24 символов).

карта 3 (ious=2 или ious=-2)

- diro имя директории для выходных файлов.
указать *name/*/ (не более 24 символов).

карта 4 (ilist≠0)

- ird признаки типа печати записи.
 - 1 идентификатор файла
 - 2 параметры файла
 - 3 текстовое описание
 - 4 данные файла
 - 5 групповая структура
 - 6 параметры материала
 - 7 параметры вектора
 - 8 блок векторов
 - 9 параметры матрицы рассеяния
 - 10 суб-блоки рассеяния
- одно значение на каждый тип записи
- 0 - не печатать, 1 - печатать.

карта 5 (imodf≠0)

- hoper тип модификации
 - s выбрать материалы из входного matxs файла
 - i ввести материалы из modinp файла
- hmat1 первый материал в наборе
- hmat2 последний материал (по умолчанию hmat2=hmat1)

повторить карту 3 пока не встретится пустая строка

карта 6 (iinpf=2 или iinpf=-2)

hmatl список материалов в наборе, который нужно записать
в выходной файл matxs (в любом порядке)

карта 7 (только при модификации и дозаписи)

модификация применяется при imodf \neq 0

при дозаписи |iinpf|=2 и |ioutf| \neq 2.

newver номер версии нового файла

huser строка-идентификатор нового пользователя
(не более 16 символов)

карта 8 (модификация или дозапись)

hline новое текстовое описание данных (не более 72 символов)

повторить карту 8 для каждой строки нового текстового блока данных.

Для прекращения ввода ввести пустую строку. Если входные данные отсутствуют, старый блок сохраняется прежним.

Программы доступа включают в себя семейство процедур, предназначенных для извлечения данных нужного типа из бинарного файла MATXS. Эти функции, как правило, ориентированы на заполнение конкретной библиотеки констант. Они учитывают особенность представления данных в этой библиотеке и готовят для нее информацию соответствующим образом. Например, для заполнения библиотеки групповых констант GNDL [8] служат следующие процедуры.

ReadIsot:- поиск данных для указанного нуклида и запись требуемых таблиц в буферный массив с предварительной переработкой, учитывающей структуру данных в библиотеке GNDL; контрольные параметры данных заносятся в область данных

COMMON /BGETMATXS/ NG,NL,NT,NZ,EG(100),TEM(10),SIGZ(30)

где:

NG - число групп,

NL - максимальный порядок представления индикатрисы рассеяния,

NT - число температур,

NZ - число сечений разбавления,

EG(NG+1) - массив групповых границ (эВ)

TEM(NT) - массив температур (К),

SIGZ(NZ) - массив сечений разбавления (барн)

Буферный массив определяется в вызывающей программе:

PARAMETER (LBUF=1000000)

DIMENSION BUF(LBUF),MBUF(LBUF)

EQUIVALENCE BUF(1),MBUF(1)

и передается функциям доступа месте с указанием максимальной длины LBUF.

Вызов процедуры:

call ReadIsot (HFILE,BUF,MBUF,LBUF)

где HFILE - имя файла MATXS с данными для материала (переменная типа CHARACTER, определенная в вызывающей программе)

GroupXS: извлечение таблицы сечений для заданной группы IG. Таблица сечений - вектор XSR(16), позиции которого определены следующим образом:

XSR(1)=NU	- число нейтронов деления в группе IG
XSR(2)=SIGT	- полное сечение
XSR(3)=SIGE	- сечение упругого рассеяния
XSR(4)=SIGC	- сечение радиационного захвата
XSR(5)=SIGF	- сечение деления
XSR(6)=SIGFNU	- произведение NU*SIGF
XSR(7)=SIGIN	- сечение неупругого рассеяния
XSR(8)=SGINZ	- сечение неупругого замедления
XSR(9)=SIGIN1	- 1-й момент сечения неупругого рассеяния
XSR(10)=SGINZ1	- 1-й момент сечения неупругого замедления
XSR(11)=SIGN2N	- сечение реакции (n,2n)
XSR(12)=MU	- средний косинус упругого рассеяния
XSR(13)=SGELZ	- сечение упругого замедления
XSR(14)=XI	- среднее значение изменения летаргии в результате упругого рассеяния
XSR(15)=SIGPOT	- сечение потенциального рассеяния (не определено, =0)
XSR(16)=CHI	- спектр деления

Вызов процедуры:

call GroupXS(IG,XSR,BUF)

GroupFact: извлечение факторов резонансной самоэкранировки для заданного

типа взаимодействия HTYPE и группы IG - таблица XFACT (NZ,NT)

Тип взаимодействия - текстовая переменная, определяющая тип сечения, для которого требуются факторы резонансной самоэкранировки, имеющая допустимые значения:

TOT0 - полное сечение, усреднение по потоку

TOT1 - полное сечение, усреднение по току

ELAS - сечение упругого рассеяния

FISS - сечение деления

CAPT - сечение радиационного захвата

INEL - сечение неупругого рассеяния

Зависимости от температуры и сечения разбавления задаются в порядке возрастания значений аргумента.

Вызов процедуры:

call GroupFact(IG,HTYPE,XFACT,BUF)

GroupMel: извлечение вектора переходов из группы IG в результате упругого рассеяния - таблица XMATR(NG,NL)

Вызов процедуры:

call GroupMel(IG,XMATR,BUF)

GroupMin: извлечение вектора переходов из группы IG в результате неупругого рассеяния - таблица XMATR(NG,NL)

Вызов процедуры:

call GroupMin(IG,XMATR,BUF)

ЛИТЕРАТУРА

1. P.F.Rose and C.L.Dunford .”ENDF-102, Data Formats and Procedures for the Evaluated Nuclear Data File, ENDF-6,” Brookhaven National Laboratory report BNL-NCS-44945, (July 1990)
2. Г.Н.Мантуров, М.Н.Николаев, А.М.Цибуля. "Система групповых констант БНАБ-93", ВАИТ, серия "Ядерные константы", вып.1 (1996), с.59
3. R.E.MacFarlane et al. “NJOY 94.10 Code System for Producing Pointwise and Multigroup Neutron and Photon Sections form ENDF/B Data”. RSIC Peripheral Shielding Routine Collection, PSR-355
4. D.E.Cullen et al. “The ENDF Pre-Processing Code (PRE-PRO 94)” Rep. IAEA-NDS-39, Rev.8, Vienna (1994)
5. V.V.Sinitsa,A.A.Rineiskiy. “GRUCON - A Package of Applied Computer Programs”, Rep. INDC(CCCP)-344, IAEA, Vienna(1993)
6. R.E.MacFarlane, D.C.George. “UPD: A portable Version-Control Program” Rep.LA-12057-MS UC-705
7. R.E.MacFarlane "TRANSX-2: A Code for Interfacing MATXS Cross-Section Libraries to Nuclear Transport Codes", LA-12312-MS (1992)
8. A.V. Voronkov, V.I. Zhuravlev et al. “GNDL – a Program System of Group Constants to Provide Calculations of Neutron and Photon Fields”. Advances in Mathematics, Computations and Reactor Physics, Pittsburgh, PA, USA, 1991

Приложение А. Каталог библиотеки нейтронных данных

Имя	МАТ	Тип взаимодействия МТ
1H1	125	1,2,102
1H2	128	1,2,16,102
1H3	131	1,2,16
2He3	225	1,2,102-104
2He4	228	1,2
3Li6	325	1,2,4,24,51-81,102,103,105
3Li7	328	1,2,4,16,24,25,51-82,102,104
4Be9	425	1,2,16,102-105,107,600,650,700,701,800
5B10	525	1,2,4,51-85,102-104,107,113,600-605,800,801
5B11	528	1,2,4,16,22,28,51-60,91,102,103,105,107
6C	600	1,2,4,28,51-62,91,102-104,107,203,204,207
7N14	725	1,2,4,16,51-82,102-105,107,108,600-606,650-653,700,701,800-810
7N15	728	1,2,4,16,22,28,51-57,91,102-105,107
9F19	925	1,2,4,16,22,28,51-71,91,102-105,107
11Na23	1125	1,2,4,16,51-68,91,102,103,107
12Mg	1200	1,2,4,16,22,28,51-91,102,103,107
13Al27	1325	1,2,4,16,51-90,102-105,107,203,207
14Si	1400	1,2,4,16,22,28,51-72,91,102-104,107,203,207,600-614,649, 800-811,849
15P31	1525	1,2,4,16,28,91,102,103,107
16S	1600	1,2,4,16,22,28,51-91,102-105,107,111,203-205,207
16S32	1625	1,2,4,16,28,91,102,103,105,107
17Cl	1700	1,2,4,16,22,28,51-63,91,102,103,107
19K	1900	1,2,4,16,22,28,51-67,91,102,103,107
20Ca	2000	1,2,4,16,22,28,51-69,91,102-108,111,112
22Ti	2200	1,2,4,16,17,22,28,51-62,91,102-107,111,112,203,207
23V	2300	1,2,4,16,22,28,32,51-74,91,102-107,111,112
24Cr50	2425	1,2,4,16,22,28,51-56,91,102-104,107
24Cr52	2431	1,2,4,16,22,28,51-60,91,102,103,107
24Cr53	2434	1,2,4,16,22,28,51-63,91,102,103,107
24Cr54	2437	1,2,4,16,51-54,91,102,103,107
25Mn55	2525	1,2,4,16,22,28,51-79,91,102-107
26Fe54	2625	1,2,4,16,22,28,51-57,91,102-104,107
26Fe56	2631	1,2,4,16,22,28,51-75,91,102-107
26Fe57	2634	1,2,4,16,22,28,51-55,91,102,103,107
26Fe58	2637	1,2,4,16,22,28,51,52,91,102,103,107
27Co59	2725	1,2,4,16,22,28,32,33,51-69,91,102-108,111,112
28Ni58	2825	1,2,4,16,22,28,51-58,91,102-104,107
28Ni60	2831	1,2,4,16,22,28,51-61,91,102-104,107
28Ni61	2834	1,2,4,16,28,51-58,91,102,103,107,111
28Ni62	2837	1,2,4,16,22,28,51-54,91,102-104,107
28Ni64	2843	1,2,4,16,22,28,51,52,91,102-104,107
29Cu63	2925	1,2,4,16,22,28,51-72,91,102-104,106,107
29Cu65	2931	1,2,4,16,22,28,51-63,91,102-107
31Ga	3100	1,2,4,16,91,102,103,107
32Ge73	3234	1,2,4,51-54,91,102

32Ge74	3237	1,2,4,51-55,91,102
32Ge76	3243	1,2,4,51,52,91,102
33As75	3325	1,2,4,51-63,91,102
34Se74	3425	1,2,4,91,102
34Se76	3431	1,2,4,51-54,91,102
34Se77	3434	1,2,4,51-60,91,102
34Se78	3437	1,2,4,51-59,91,102
34Se80	3443	1,2,4,51-58,91,102
34Se82	3449	1,2,4,51-53,91,102
35Br79	3525	1,2,4,51-61,91,102
35Br81	3531	1,2,4,51-54,91,102
36Kr78	3625	1,2,4,16,51-53,91,102-107
36Kr80	3631	1,2,4,16,51-56,91,102-107
36Kr82	3637	1,2,4,16,51-59,91,102-107
36Kr83	3640	1,2,4,16,17,51-56,91,102-107
36Kr84	3643	1,2,4,16,51-63,91,102-107
36Kr85	3646	1,2,4,51,91,102
36Kr86	3649	1,2,4,16,17,51-64,91,102-105
37Rb85	3725	1,2,4,16,22,28,51-55,91,102-107,203-207
37Rb86	3728	1,2,4,51,91,102
37Rb87	3731	1,2,4,16,22,28,51-60,91,102-107,203-207
38Sr84	3825	1,2,4,91,102
38Sr86	3831	1,2,4,51-57,91,102
38Sr87	3834	1,2,4,51-57,91,102
38Sr88	3837	1,2,4,51-55,91,102
38Sr89	3840	1,2,4,51-62,91,102
38Sr90	3843	1,2,4,51-54,91,102
39Y89	3925	1,2,4,16,22,28,51-62,91,102-107
39Y90	3928	1,2,4,51,52,91,102
39Y91	3931	1,2,4,51-58,91,102
40Zr	4000	1,2,4,16,51-69,91,102,103,107
40Zr90	4025	1,2,4,16,51-55,91,102,103,107
40Zr91	4028	1,2,4,16,51-61,91,102,103,107
40Zr92	4031	1,2,4,16,51-56,91,102,103,107
40Zr93	4034	1,2,4,51-60,91,102
40Zr94	4037	1,2,4,16,51-58,91,102,103,107
40Zr95	4040	1,2,4,51-54,91,102
40Zr96	4043	1,2,4,16,51-54,91,102,107
41Nb93	4125	1,2,4,16,17,22,28,32,33,51-73,91,102-105,107
41Nb94	4128	1,2,4,51-58,91,102
41Nb95	4131	1,2,4,51-55,91,102
42Mo	4200	1,2,4,16,17,91,102
42Mo94	4231	1,2,4,51-57,91,102
42Mo95	4234	1,2,4,51-69,91,102
42Mo96	4237	1,2,4,51-56,91,102
42Mo97	4240	1,2,4,51-69,91,102
42Mo99	4246	1,2,4,51-56,91,102
43Tc99	4325	1,2,4,16,51-61,91,102
44Ru96	4425	1,2,4,91,102

44Ru98	4431	1,2,4,91,102
44Ru99	4434	1,2,4,51-62,91,102
44Ru100	4437	1,2,4,51-57,91,102
44Ru101	4440	1,2,4,51-69,91,102
44Ru102	4443	1,2,4,51-69,91,102
44Ru103	4446	1,2,4,51-64,91,102
44Ru104	4449	1,2,4,51,52,91,102
44Ru105	4452	1,2,4,51-59,91,102
44Ru106	4455	1,2,4,51-54,91,102
45Rh103	4525	1,2,4,16,51-64,91,102
45Rh105	4531	1,2,4,51-53,91,102
46Pd102	4625	1,2,4,91,102
46Pd104	4631	1,2,4,51-58,91,102
46Pd105	4634	1,2,4,51-63,91,102
46Pd106	4637	1,2,4,51-61,91,102
46Pd107	4640	1,2,4,51-65,91,102
46Pd108	4643	1,2,4,51-60,91,102
46Pd110	4649	1,2,4,51-62,91,102
47Ag107	4725	1,2,4,16,17,22,28,51-63,91,102-107,203-207
47Ag109	4731	1,2,4,16,17,22,28,51-70,91,102-107,203-207
47Ag111	4737	1,2,4,51-60,91,102
48Cd	4800	1,2,4,16,51-54,91,102,103,107
48Cd106	4825	1,2,4,91,102
48Cd108	4831	1,2,4,51-62,91,102
48Cd110	4837	1,2,4,51-57,91,102
48Cd111	4840	1,2,4,51-59,91,102
48Cd112	4843	1,2,4,51-56,91,102
48Cd113	4846	1,2,4,16,51-53,91,102,103,107
48Cd114	4849	1,2,4,51-56,91,102
48Cd116	4855	1,2,4,51-54,91,102
49In	4900	1,2,4,16,17,22,28,32,33,51-78,91,102-105,107
49In113	4925	1,2,4,51-56,91,102
50Sn112	5025	1,2,4,91,102
50Sn115	5034	1,2,4,51-54,91,102
50Sn116	5037	1,2,4,51-67,91,102
50Sn117	5040	1,2,4,51-55,91,102
50Sn118	5043	1,2,4,51-64,91,102
50Sn119	5046	1,2,4,51-58,91,102
50Sn123	5058	1,2,4,51-59,91,102
50Sn125	5064	1,2,4,51-53,91,102
50Sn126	5067	1,2,4,51-60,91,102
51Sb121	5125	1,2,4,51-57,91,102
51Sb123	5131	1,2,4,51-56,91,102
51Sb124	5134	1,2,4,51-58,91,102
51Sb125	5137	1,2,4,51-69,91,102
51Sb126	5140	1,2,4,51-55,91,102
52Te120	5225	1,2,4,91,102
52Te122	5231	1,2,4,51-54,91,102
52Te123	5234	1,2,4,51-58,91,102

52Te124	5237	1,2,4,51-61,91,102
52Te125	5240	1,2,4,51-56,91,102
52Te126	5243	1,2,4,51-63,91,102
52Te127m	5247	1,2,4,91,102
52Te128	5249	1,2,4,51-56,91,102
52Te129m	5253	1,2,4,91,102
52Te130	5255	1,2,4,51-60,91,102
52Te132	5261	1,2,4,51-56,91,102
53I129	5331	1,2,4,51-59,91,102
53I130	5334	1,2,4,91,102
53I131	5337	1,2,4,51-54,91,102
53I135	5349	1,2,4,91,102
54Xe124	5425	1,2,4,16,17,51-54,91,102-107
54Xe126	5431	1,2,4,16,17,51-54,91,102-107
54Xe128	5437	1,2,4,16,17,51-53,91,102-107
54Xe129	5440	1,2,4,16,17,51-56,91,102-105,107
54Xe130	5443	1,2,4,16,17,51-56,91,102-105,107
54Xe131	5446	1,2,4,16,17,51-56,91,102-105,107
54Xe132	5449	1,2,4,16,17,51-54,91,102-105,107
54Xe133	5452	1,2,4,51,91,102
54Xe134	5455	1,2,4,16,17,51-53,91,102-105,107
54Xe135	5458	1,2,4,51,91,102
54Xe136	5461	1,2,4,16,17,51-53,91,102-105,107
55Cs133	5525	1,2,4,16,51-55,91,102,103,107
55Cs134	5528	1,2,4,51-55,91,102
55Cs135	5531	1,2,4,51-53,91,102
55Cs136	5534	1,2,4,91,102
55Cs137	5537	1,2,4,51-62,91,102
59Pr141	5925	1,2,4,16,17,22,28,51-60,91,102-107
59Pr142	5928	1,2,4,91,102
59Pr143	5931	1,2,4,51-56,91,102
60Nd142	6025	1,2,4,51-58,91,102
60Nd144	6031	1,2,4,51-58,91,102
60Nd145	6034	1,2,4,16,17,22,28,51-64,91,102-107
60Nd146	6037	1,2,4,16,17,22,28,51-53,91,102-107
60Nd147	6040	1,2,4,51-53,91,102
60Nd148	6043	1,2,4,16,17,22,28,51-53,91,102-107
60Nd150	6049	1,2,4,16,17,22,28,51-59,91,102-105,107
61Pm148	6152	1,2,4,91,102
61Pm148m	6153	1,2,4,91,102
61Pm149	6155	1,2,4,51-56,91,102
61Pm151	6161	1,2,4,51-56,91,102
62Sm144	6225	1,2,4,91,102
62Sm148	6237	1,2,4,51-66,91,102
62Sm150	6243	1,2,4,51-66,91,102
62Sm151	6246	1,2,4,16,17,22,28,51-61,91,102-107
62Sm152	6249	1,2,4,16,17,22,28,51-64,91,102-107
62Sm153	6252	1,2,4,51-62,91,102
63Eu155	6337	1,2,4,16,17,22,28,51-59,91,102-107

63Eu156	6340	1,2,4,51-55,91,102
63Eu157	6343	1,2,4,91,102
64Gd152	6425	1,2,4,16,22,28,51-64,91,102,103,107
64Gd154	6431	1,2,4,16,22,28,51-64,91,102,103,107
64Gd156	6437	1,2,4,16,22,28,51-64,91,102,103,107
64Gd158	6443	1,2,4,16,22,28,51-64,91,102,103,107
64Gd160	6449	1,2,4,16,22,28,51-58,91,102,103,107
65Tb159	6525	1,2,4,51-66,91,102
65Tb160	6528	1,2,4,91,102
66Dy160	6637	1,2,4,51-64,91,102
66Dy161	6640	1,2,4,51-57,91,102
66Dy162	6643	1,2,4,51-56,91,102
66Dy163	6646	1,2,4,51-56,91,102
67Ho165	6725	1,2,4,16,17,51-63,91,102
68Er166	6837	1,2,4,51-69,91,102
61Pm147	6149	1,2,4,16,17,22,28,51-55,91,102-107
62Sm147	6234	1,2,4,16,17,22,28,51-64,91,102-107
62Sm149	6240	1,2,4,16,17,51-60,91,102,103,107
63Eu151	6325	1,2,4,16,17,51-67,91,102-107
63Eu152	6328	1,2,4,16,17,22,28,51-55,91,102-107
63Eu153	6331	1,2,4,16,17,51-60,91,102-107
63Eu154	6334	1,2,4,16,17,22,28,51-55,91,102-107
64Gd155	6434	1,2,4,16,22,28,51-64,91,102,103,107
64Gd157	6440	1,2,4,16,22,28,51-64,91,102,103,107
66Dy164	6649	1,2,4,16,17,51-62,91,102,103,107
68Er167	6840	1,2,4,51-63,91,102
71Lu175	7125	1,2,4,16,17,51-58,91,102,103,107
71Lu176	7128	1,2,4,16,17,51-58,91,102,103,107
72Hf	7200	1,2,4,16,51-62,91,102,103
72Hf174	7225	1,2,4,16,51-53,91,102,103
72Hf176	7231	1,2,4,16,51-53,91,102,103
72Hf177	7234	1,2,4,16,51-60,91,102,103
72Hf178	7237	1,2,4,16,51-53,91,102,103
72Hf179	7240	1,2,4,16,51-54,91,102,103
72Hf180	7243	1,2,4,16,51-53,91,102,103
73Ta181	7328	1,2,4,16,17,51-60,91,102,103
73Ta182	7331	1,2,4,16,17,51-58,91,102,107
74W	7400	1,2,4,16,17,28,51-91,102,103,107
74W182	7431	1,2,4,16,17,28,51-69,91,102,103,107
74W183	7434	1,2,4,16,17,28,51-64,91,102,103,107
74W184	7437	1,2,4,16,17,28,51-68,91,102,103,107
74W186	7443	1,2,4,16,17,28,51-68,91,102,103,107
75Re185	7525	1,2,4,16,17,51-59,91,102
75Re187	7531	1,2,4,16,17,51-66,91,102
79Au197	7925	1,2,4,16,17,51-63,91,102,103,107
82Pb206	8231	1,2,4,16,17,51-89,91,102,103,105,107
82Pb207	8234	1,2,4,16,17,51-89,91,102,103,105,107
82Pb208	8237	1,2,4,16,17,51-61,91,102,103,105,107
83Bi209	8325	1,2,4,16,17,22,28,32,33,51-69,91,102-107

90Th230	9034	1,2,4,16-18,51-67,91,102,452
90Th232	9040	1,2,4,16-18,51-65,91,102,452,455,456
91Pa233	9137	1,2,4,16-18,51-55,91,102,452
92U233	9222	1,2,4,16-18,51-54,91,102,452,455,456
92U234	9225	1,2,4,16-21,51-56,91,102,452,455,456
92U235	9228	1,2,4,16-21,37,38,51-84,91,102,452,455,456
92U236	9231	1,2,4,16-21,51-77,91,102,452,455,456
92U237	9234	1,2,4,16-18,91,102,452,455,456
92U238	9237	1,2,4,16-21,37,38,51-77,91,102,452,455,456
92U238	9237	1,2,4,16-21,37,38,51-77,91,102,452,455,456
93Np239	9352	1,2,4,16-18,51-58,91,102,452
94Pu236	9428	1,2,4,16-20,51-54,91,102,452
94Pu237	9431	1,2,4,16-20,51-60,91,102,452
94Pu238	9434	1,2,4,16-20,51-65,91,102,452,455,456
94Pu239	9437	1,2,4,16-21,37,38,51-81,91,102,452,455,456
94Pu240	9440	1,2,4,16-21,51-69,91,102,452,455,456
94Pu241	9443	1,2,4,16-18,51-65,91,102,452,455,456
94Pu242	9446	1,2,4,16-18,51-69,91,102,452
94Pu243	9449	1,2,4,16-18,37,91,102,452
94Pu244	9452	1,2,4,16-20,37,51-55,91,102,452
94Pu244	9452	1,2,4,16-20,37,51-55,91,102,452
95Am241	9543	1,2,4,16-18,51-68,91,102,452
95Am243	9549	1,2,4,16-20,37,51-67,91,102,452,455,456
96Cm241	9628	1,2,4,16-20,51-54,91,102,452
96Cm242	9631	1,2,4,16-20,51-53,91,102,452,455,456
96Cm244	9637	1,2,4,16-20,51-53,91,102,452
96Cm245	9640	1,2,4,16-18,37,91,102,452,455,456
96Cm246	9643	1,2,4,16-18,37,51-61,91,102,452
96Cm247	9646	1,2,4,16-18,37,91,102,452
96Cm248	9649	1,2,4,16-20,37,51-57,91,102,452
97Bk249	9752	1,2,4,16-18,51-68,91,102,103,107,452,455,456
98Cf249	9852	1,2,4,16-18,51-65,91,102,103,107,452,455,456
98Cf250	9855	1,2,4,16-18,37,91,102,452
98Cf251	9858	1,2,4,16-18,37,91,102,452,455,456
98Cf252	9861	1,2,4,16-18,37,91,102,452,455,456

Приложение В. Формат MATXS

```

CS  структура файла
CS
CS  тип записи      условие наличия
CS  =====
CS  заголовок файла      всегда
CS  параметры файла      всегда
CS  текстовое описание файла  всегда
CS  данные файла        всегда
CS
CS ***** (в цикле по частицам)
CS * групповая структура  всегда
CS *****
CS
CS ***** (в цикле по материалам)
CS * параметры материала  всегда
CS *
CS * ***** (в цикле по секциям материала)
CS * * параметры векторов  n1db.gt.0
CS * *
CS * * ***** (в цикле по всем блокам векторов)
CS * * * блок векторов  n1db.gt.0
CS * * *****
CS * *
CS * * ***** (в цикле по всем блокам матриц)
CS * * * параметры матриц  n2d.gt.0
CS * * *
CS * * * ***** (в цикле по всем блокам матриц)
CS * * * * блок матриц  n2d.gt.0
CS * * * *****
CS * * *
CS * * * блок констант  jconst.gt.0
CS * * *
CS *****
C
C-----
C
C
C-----
C  заголовок файла
C
C  hname,(huse(i),i=1,2),ivers
C
C  1+3*mult
C
C  format(4h 0v ,a8,1h*,2a8,1h*,i6)
C

```

```

cd hname имя файла - matxs - (a8)
cd huse имя пользователя (a8)
cd ivers номер версии файла
cd mult признак двойной точности
cd 1- a8 короткое слово
cd 2- a8 слово с двойной точностью
с
с-----
с
с
с-----
сг параметры файла
с
cl npart,ntype,nholl,nmat,maxw,length
с
сw 6
с
сb format(6h 1d ,6i6)
с
сd npart число частиц, для которых приведены групповые
сd данные
сd ntype число типов данных
сd nholl число слов в текстовом описании
сd nmat число материалов
сd maxw максимальная длина блока записи
сd length длина файла
с
с-----
с
с
с-----
сг текстовое описание
с
cl (hsetid(i),i=1,nholl)
с
сw nholl*mult
с
сb format(4h 2d /(9a8))
с
сd hsetid текстовое описание набора (a8)
сd (до 72 позиций в строке)
с
с-----
с
с
с-----
сг данные файла
с
cl (hprt(j),j=1,npart),(htype(k),k=1,ntype),(hmatn(i),i=1,nmat),

```

```

cl 1(ngrp(j),j=1,npart),(jinp(k),k=1,ntype),(joutp(k),k=1,ntype),
cl 2(nsubm(i)i=1,nmat),(locm(i),i=1,nmat)
с
cw (npart+ntype+nmат)*mult+2*ntype+npart+2*nmат
с
cb format(4h 3d ,4x,8a8/(9a8)) hpri,htype,hmatn
cb format(12i6)   ngrp,jinp,joutp,nsubm,locm
с
cd hpri(j) текстовое имя частицы j
cd   n нейтрон
cd   g фотон
cd   p протон
cd   d дейтон
cd   t тритон
cd   h гелион ( ядро he-3 )
cd   a альфа ( ядро he-4 )
cd   b бета
cd   r остаточное ядро
cd     (тяжелее чем альфа)
cd htype(k) текстовое имя типа данных k
cd   nscat рассеяние нейтронов
cd   ng образование фотонов в нейтронных реакциях
cd   gscat рассеяние фотонов
cd   rp образование нейтронов в протонных реакциях
cd   . .
cd   . .
cd   . .
cd   dkn данные по запаздывающим нейтронам
cd   dkhg остаточное тепловыделение и образование фотонов
cd   dkb данные для бета-распада
cd hmatn(i) текстовое имя материала i
cd ngrp(j) число энергетических групп для частицы j
cd jinp(k) тип налетающей частицы, связанный с данными типа k; для данных
    типа dk jinp = 0.
cd joutp(k) тип вылетающей частицы для данных типа k
cd nsubm(i) число секций для материала i
cd locm(i) адрес материала i
с
с-----
с
с
с-----
сг групповые границы
с
cl (gpb(i),i=1,ngр),emin
с
сс ngr=ngр(j)
с
cw ngrp(j)+1

```

```

c
cb format(4h 4d ,8x,1p,5e12.5/(6e12.5))
c
cd gpb(i) верхняя граница энергии группы i для частицы j
cd emin минимальная граница области энергий для частицы j
c
c-----
c
c-----
cr параметры материала
c
cl hmat,amass,(temp(i),sigz(i),itype(i),n1d(i),n2d(i),
cl llocs(i),i=1,nsubm)
c
cw mult+1+6*nsubm
c
cb format(4h 5d ,a8,1p,2e12.5/(2e12.5,5i6))
c
cd hmat текстовое имя материала
cd amass атомный вес
cd temp температура среды или другие параметры для
cd секции материала i
cd sigz сечение разбавления или другие параметры для
cd секции материала i
cd itype тип данных для секции материала i
cd n1d число векторов для секции материала i
cd n2d число блоков в матрице для секции материала i
cd llocs адрес секции материала i
c
c-----
c
c-----
cr параметры векторов
c
cl (hvps(i),i=1,n1d),(nfg(i),i=1,n1d),(nlg(i),i=1,n1d)
c
cw (mult+2)*n1d
c
cb format(4h 6d ,4x,8a8/(9a8)) hvps
cb format(12i6) iblk,nfg,nlg
c
cd hvps(i) текстовые имена векторов
cd nelas упругое рассеяние нейтрона
cd n2n (n,2n)
cd nnf деление второго шанса
cd gabs поглощение фотона
cd p2n (p,2n)
cd . .

```

```

cd      . .
cd      . .
cd nfg(i) номер первой группы в векторе i
cd nlg(i) номер последней группы в векторе i
c
c-----
c
c
c-----
cr блок векторов
c
cl (vps(i),i=1,kmax)
c
cc kmax=суммарное число групп для векторов блока j
c
cw kmax
c
cb format(4h 7d ,8x,1p,5e12.5/(6e12.5))
c
cd vps(i) данные векторов блока j;
cd   размер записи равен сумме числа
cd   не превышающей maxw.
c
c-----
c
c
c-----
cr параметры матриц рассеяния
c
cl hmtx,lord,jconst,
cl 1(jband(l),l=1,noutg(k)),(ijj(l),l=1,noutg(k))
c
cw mult+2+2*noutg(k)
c
cb format(4h 8d ,4x,a8/(12i6)) hmtx,lord,jconst,
cb      jband,ijj
c
cd hmtx   текстовое имя блока
cd lord   число моментов
cd jconst число групп с постоянным спектром
cd jband(l) число групп в блоке l
cd ij(j) номер нижней группы в блоке l
c
c-----
c
c
c-----
cr блоки матриц рассеяния
c
cl (scat(k),k=1,kmax)

```

```

c
cc kmax= сумма числа групп jband, принадлежащих блоку,
cc умноженная на число моментов lord
c
cb format(4h 9d ,8x,1p,5e12.5/(6e12.5))
c
cw kmax
c
cd      scat(k)      в записи элементы матриц объединяются по признаку
cd      принадлежности к одной конечной группе.
cd      Порядок записи: переходы с моментом p0 в группу i,
cd      переходы с моментом p1 в группу i, ... , переходы
cd      с моментом p0 в группу i+1, переходы с моментом p1
cd      группу i+1, и т.д. Размер записи равен сумме числа групп,
cd      не превышающей maxw.
cd
cd      Если jconst>0, вклады от jconst нижних групп
cd      приводятся отдельно.
c
c-----
c
c
c-----
c
cг блок констант
c
cl (spec(l),l=1,noutg(k)),(prod(l),l=1,ning(k))
c
cc l1=ning(k)-jconst+1
c
cw noutg(k)+jconst
c
cb format(4h10d ,8x,1p,5e12.5/(6e12.5))
c
cd spec  нормированный спектр вылетающих частиц для исходной
cd      частицы в группах с l1 по ning(k)
cd prod  сечения образования частиц (например, nu*sigf)
cd      для начальных групп с l1 по ning(k)
cd
cd      эта опция обычно используется для независимых от энергии
cd      спектров нейтронов и фотонов, образующихся в процессах
cd      деления и радиационного захвата, что обычно имеет место
cd      при низких энергиях.
c
c-----

```

