

**Государственный комитет по использованию
атомной энергии СССР**

ЦЕНТР ПО ЯДЕРНЫМ ДАННЫМ

СБОРНИК АННОТАЦИЙ

**ЯДЕРНО-ФИЗИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ
В СССР**

Выпуск 15

АННОТАЦИИ ПРОГРАММ

Атомиздат—1973

ГОСУДАРСТВЕННЫЙ КОМИТЕТ ПО ИСПОЛЬЗОВАНИЮ
АТОМНОЙ ЭНЕРГИИ СССР

Сборник аннотаций

ЯДЕРНО - ФИЗИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ В СССР

Выпуск № 15

АННОТАЦИИ ПРОГРАММ

Центр по ядерным данным

Обнинск-1973

Редакционная коллегия

Кузнецов В.А. (гл.научный редактор), Усачев Л.Н. (зам.гл. научного редактора), Адамчук Ю.В., Андреев В.Н., Борухович Г.З., Зоммер В.П., Корж И.А., Наумов Б.А., Обухов А.И., Попов Ю.П., Игнатьев А.В. (отв.редактор), Кардашев Д.А. (отв. редактор).

ОБЪЕМО-ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ

ПРОГРАММА РАСЧЕТА НЕЙТРОННЫХ СЕЧЕНИЙ ПО ОПТИЧЕСКОЙ
МОДЕЛИ ЯДРА (ПРС-2)

А.Г.Довбенко, В.Е.Колесов

Программа [I] предназначена для расчета следующих величин:

$$\sigma_s = \frac{\pi}{2K^2} \sum_{\ell=0}^{\ell_{\max}} \sum_{j=\ell-1/2}^{\ell+1/2} (2j+1) |1 - S_{\ell j}|^2,$$

$$\sigma_c = \frac{\pi}{2K^2} \sum_{\ell=0}^{\ell_{\max}} \sum_{j=\ell-1/2}^{\ell+1/2} (2j+1) (1 - |S_{\ell j}|^2),$$

$$\sigma_t = \frac{\pi}{2K^2} \sum_{\ell=0}^{\ell_{\max}} \sum_{j=\ell-1/2}^{\ell+1/2} (2j+1) (1 - \operatorname{Re} S_{\ell j}),$$

$$\sigma_{in}(E, E_m) = \frac{\pi}{2K^2(2L_0+1)} \sum_{\ell j} T_{\ell j}(E) \sum_J (2J+1) \frac{\sum_{\ell' j'} T_{\ell' j'}(E - E_m)}{\sum_{\ell' j' m'} T_{\ell' j' m'}(E - E_m)}$$

$$\sigma_{ny}(E) = \frac{\pi}{2K^2(2L_0+1)} \sum_{\ell j} T_{\ell j}(E) \sum_J \frac{2J+1}{1 + \zeta_J(B_n + E) \sum_{\ell' j' m'} T_{\ell' j' m'}(E - E_m)}$$

σ_s - сечение "оптического" упругого рассеяния, σ_c - сечение, характеризующее все процессы, при которых квантовое состояние конечного ядра отлично от состояния ядра-мишени, $\sigma_t = (\sigma_s + \sigma_c)$ - полное сечение,

$\sigma_{in}(E, E_m)$ - сечение неупругого рассеяния нейтронов энергии E при возбуждении уровня с энергией E_m , $\sigma_{ny}(E)$ - сечение радиационного захвата нейтрона энергии E атомным ядром:

ℓ - орбитальный момент и j - полный момент нейтрона, L_0 - спин ядра-мишени, J - полный момент количества движения для составного ядра;

$$\zeta_J(B_n + E) = \frac{\mathfrak{D}^J(B_n)}{2\mathfrak{I} \Gamma_J^J(B_n)} \psi(E)$$

$$f(E) = \frac{\int_{E+B_n}^{B_n} \varepsilon^3 \exp 2 \sqrt{a(B_n - \varepsilon)} d\varepsilon}{\int_E^{E+B_n} \varepsilon^3 \exp 2 \sqrt{a(B_n + E - \varepsilon)} d\varepsilon},$$

где B_n - энергия связи нейтрона, $\bar{D}^j(B_n)$ - экспериментально наблюдаемая плотность нейтронных резонансов для S - нейтронов, $\Gamma_j(B_n)$ - средняя радиационная ширина, a - параметр плотности уровней модели ферми-газа.

Исходными данными для расчета являются $B_n, \bar{D}(B_n), \Gamma_j(B_n), a$, параметры оптического потенциала:

$$V(r) = V_0 - \frac{\alpha}{r} \cdot \frac{dV(r)}{dr} \bar{\sigma} \bar{l}, \quad V_0(r) = -\frac{V_0(1+i\zeta)}{1 + \exp(\frac{r-R}{a_1})},$$

т.е. V_0, α, a_1, ζ , A - массовое число, $R \approx r_0 A^{1/3}$,

а также схема уровней ядра-мишени ($m' \leq 16$). Точность окончательных результатов определяется величиной ε .

ν_{max} - неравенством $\nu_{max j}(E) < \varepsilon$.

Программа позволяет производить расчет указанных выше сечений для произвольного набора энергий. Программа написана в кодах машины типа М-20.

Время работы для одного из значений E зависит от значения спина ядра-мишени, числа возбуждаемых уровней и значения ε (~ 1 мин при $E = 1$ Мэв и $\varepsilon = 10^{-6}$).

ЛИТЕРАТУРА

1. Г.И.Марчук, В.Е.Колесов. Применение численных методов для расчета нейтронных сечений. Атомиздат. 1970.

ПРОГРАММА "РОПТ"

В.М.Бычков, В.И.Попов

Программа предназначена для расчета на основе оптической модели сечений взаимодействия нейтронов с ядрами. В программе использован сферический потенциал:

$$-V(r) = V_0 \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{r-R_v}{a_v}\right)} + 4i a_w W_0 \left[-\frac{d}{dr} \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{r-R_w}{a_w}\right)} \right] + \left(\frac{\hbar}{\mu c}\right)^2 \frac{V_{so}}{r} \left[-\frac{d}{dr} \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{r-R_v}{a_v}\right)} \right] (\vec{l} \cdot \vec{\sigma}) \quad (1)$$

$$R_v = r_v \cdot A^{1/3}; \quad R_w = r_w \cdot A^{1/3}.$$

Интегрирование уравнения Шредингера проводится методом Милна-Нумерова с шагом:

$$\Delta\rho = \Delta(k \cdot r) = \begin{cases} 0.1; & \text{при } E_n \geq 1 \text{ МэВ} \\ 0.0322\sqrt{E_n} & \text{при } E_n < 1 \text{ МэВ} \end{cases} \quad (2)$$

$$\text{где } K = \frac{\mu}{\hbar} \sqrt{2E}$$

Радиус шивки выбирается как $1,5(R_v + 8a_v)$. Программа вычисляет действительную и мнимую части матрицы S_{ej} , коэффициенты проницаемости T_{ej} , полное сечение σ_{tot} , сечение образования составного ядра σ_c , интегральное и дифференциальное сечения упругого рассеяния σ_{el} и $\frac{d\sigma_{el}}{d\Omega}$. В сечение рассеяния вводится изотропная добавка, соответствующая упругому рассеянию через составное ядро, которая рассчитывается как:

$$\sigma_{se}(\theta) = (\sigma_c - \sigma_{non})/4\pi,$$

где σ_{non} - экспериментальное сечение всех неупругих процессов.

Программа написана на языке "АЛГОЛ-60" (ТА-1М). Время работы программы ~ 10 сек для машин типа М-220.

Программа "РОПТ" может работать в режиме подгонки параметров потенциала (I) под экспериментальные данные по полным сечениям и угловым распределениям упругого рассеяния. При этом могут варьироваться до 7 параметров. Реализована релаксационная схема поиска минимума.

$$\chi^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left(\frac{\sigma_i^{\text{э}} - \sigma_i^{\text{т}}}{\Delta \sigma_i^{\text{э}}} \right)^2$$

Используемая в настоящее время программа несколько усовершенствована по сравнению с опубликованной в работе [1].

ЛИТЕРАТУРА

Г. В.И. Попов, И.Е. Кашуба, В.И. Трыкова. БИЦЯД. 1967, вып. 4, стр. 327.

ПРОГРАММЫ ДЛЯ ОЦЕНКИ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ СЕЧЕНИЙ УПРУГОГО РАССЕЯНИЯ НЕЙТРОНОВ

В.И. Попов, В.М. Бычков, Н.В. Васильева

Составлена серия программ для обработки и оценки угловых распределений упруго рассеянных нейтронов. Программы содержат расчеты сечений по оптической модели ядра, расчеты коэффициентов разложения угловых распределений в ряд по полиномам Лежандра, а также вывод на машинные графики соответствующих расчетных кривых, одновременно с экспериментальными точками и их ошибками для визуального контроля за ходом обработки данных. В программе разложения в ряд предусмотрено введение в экспериментальные данные дополнительных точек (или исключение), используемые в тех случаях, когда требуется корректировка аппроксимирующей кривой. Дополнительные точки вводятся путем линейной или квадратичной интерполяции или экстраполяции на основе уже имеющихся экспериментальных точек.

Оптимальное число членов разложения вычисляется по эмпирической формуле, выведенной в результате анализа теоретических кривых, рассчитанных по оптической модели ядра.

Программы написаны на языке "АЛГОЛ-60" и используют автономно-транслированную программу "РОПТ", включенную в настоящий сборник, а также оператор "ФОРМАТ", составленный для транслятора ТА-1М [1].

ЛИТЕРАТУРА

Г. В.М. Паньков. Оператор "ФОРМАТ" в АЛГОЛе. Препринт ФЭИ (в печати).

ПРОГРАММЫ " CSROT " И " CSVIV "

А.В.Игнатюк, В.П.Лунов, В.С.Шоржи

Программа " CSROT " предназначена для расчета сечений взаимодействия нейтронов с ротационными четно-четными ядрами методом сильной связи каналов [1].

В программе используется разложение по полиномам Лежандра деформированного оптического потенциала:

$$V(r_0) = -(V + iW)f + 4iW_D \frac{d}{dr}g + V_{se} (\vec{\sigma} \cdot \vec{e}) \left(\frac{\hbar}{m_p c}\right)^2 \left(\frac{d}{dr}g\right); \quad (1)$$

$$f = \frac{1}{1 + \exp\{(r-R_a)/a\}}; \quad g = \frac{1}{1 + \exp\{(r-R_b)/b\}}; \quad (2)$$

$$R_a = R_{a0} \left(1 + \sum_{\lambda} a_{\lambda} Y_{\lambda 0}(\theta)\right); \quad (3)$$

$$R_b = R_{b0} \left(1 + \sum_{\lambda} b_{\lambda} Y_{\lambda 0}(\theta)\right);$$

При рассмотрении возбуждений ядра-мишени сделаны предположения:
 а) спектр возбуждений ядра мишени представляет собой идеальную ротационную полосу;
 б) рассчитываются возбуждения только первых двух ротационных состояний, принадлежащих основной полосе.

Решение уравнения Шредингера приводится по двухточечной схеме с коррекцией. Радиус сшивки выбирается равным $R_a + 10$ а.

Программа " CSVIV " рассчитывает сечения взаимодействия нейтронов с четно-четными ядрами вибрационной природы. В программе используется разложение в ряд оптического потенциала (1), (2), где

$$R_a = R_{a0} \left(1 + \sum_{\lambda \mu} a_{\lambda \mu} Y_{\lambda \mu}(\theta, \varphi)\right); \quad (4)$$

$$R_b = R_{b0} \left(1 + \sum_{\lambda \mu} b_{\lambda \mu} Y_{\lambda \mu}(\theta, \varphi)\right).$$

Программы вычисляют действительную и мнимую части матрицы S которая связана с S - матрицей соотношением:

$$S_{i,j; k,ej}^x = \delta_{on}^i \delta_{ee}^k \delta_{jj}^e + 2i C_{ij; k,ej}^x \quad (5)$$

Вычисляются коэффициенты проницаемости T_{ej} , полное сечение $\bar{\sigma}_{tot}$, интегральные и дифференциальные сечения:

- а) упругого рассеяния σ_{ee} и $\frac{d\sigma_{ee}}{d\Omega}$;
- б) возбуждения нижних коллективных уровней ядра мишени:
 $\bar{\sigma}_{rx}$ и $\frac{d\sigma_{rx}}{d\Omega}$.

Программа написана на языке "АЛГОЛ-60" для транслятора ТА-1М. Время работы программы зависит от конкретной схемы связи каналов и колеблется в интервале от 0,5 до 2 часов.

ЛИТЕРАТУРА

1. T. Tamura. Rev. Mod. Phys. 37, 679, 1965.

ПРОГРАММА " ADARE "

А.В.Игнатюк, В.П.Луцев

Программа позволяет рассчитать сечения взаимодействия нейтронов с ядрами ротационной природы методом связанных каналов в адиабатическом приближении [1], [2], которое использует следующие предположения:

а) энергия налетающего нейтрона гораздо больше энергии возбуждения ротационных состояний;

б) учитывается связь всех уровней ротационной полосы для основного состояния ядра-мишени.

В программе использовано разложение по полиномам Лежандра ($\lambda = 2, 4$) деформированного оптического потенциала:

$$V(r) = -(\nu + iW) \frac{1}{1 + \exp[(r - R_a/a)]} - 4iW_D \frac{\exp[(r - R_b/b)]}{\{1 + \exp[(r - R_b/b)]\}^2} - V_{se} (\vec{\sigma} \vec{e}) \left(\frac{\hbar}{m_p c} \right)^2 \cdot \frac{1}{ar} \frac{\exp[(r - R_a/a)]}{\{1 + \exp[(r - R_a/a)]\}^2};$$

$$R_a = R_{a0} \left(1 + \sum_{\lambda} \beta_{\lambda} Y_{\lambda 0}(\theta) \right); \quad R_b = R_{b0} \left(1 + \sum_{\lambda} \beta_{\lambda} Y_{\lambda 0}(\theta, \varphi) \right).$$

Программа вычисляет полное сечение σ_{tot} , интегральные сечения рассеяния σ_{el} , сечения возбуждения ротационных уровней σ_{γ} и дифференциальные сечения $\frac{d\sigma_{el}}{d\Omega}$ и $\frac{d\sigma_{\gamma}}{d\Omega}$.

Программа написана в кодах машины М-20. Время работы программы для максимального значения орбитального момента налетающего нейтрона приблизительно 2 часа.

ЛИТЕРАТУРА

1. Т. Tamura. Rev. Mod. Phys. 37, 679, 1965.
2. F. Fabbri, L. Zuffi. C.N.E.N., Bologna, RT/FI (69) 7.

ПРОГРАММА РАСЧЕТА СЕЧЕНИЙ РАДИАЦИОННОГО ЗАХВАТА
НЕЙТРОНОВ ПО СТАТИСТИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ

В.С.Шорин

Расчет сечений захвата нейтронов проводится в рамках теории Хаузера-Фешбаха, причем параметрами теории являются приведенные нейтронные и радиационная силовые функции. В этой модели сечение захвата нейтронов $\sigma_{n\gamma}$ с энергией E имеет вид:

$$\sigma_{n\gamma}(E) = \frac{\mathcal{K}}{K_n^2 (2I+1)} \sum_{2J} \frac{T_e^{J\kappa}(E)(2J+1)S(\alpha, \beta)}{1 + \xi(J) \sum_{2J'\kappa} T_e^{J'\kappa}(E-E_{\kappa})};$$

где
$$\xi(J) = \frac{\bar{D}}{2I\Gamma_{\gamma}} \frac{2(2I+1)}{2J+1};$$

$$S(\alpha, \beta) = (\alpha + \sum_i \beta_i + 1) \int_0^{\infty} \frac{\exp(-t) dt}{(1+2\alpha t)^{1/2} \prod_i (1+2\beta_i t)^{1/2}};$$

- поправка на флуктуацию нейтронных ширин;

$$\alpha = \xi(J) T_e^J(E); \quad \beta_i = \xi(J) T_e^i(E-E_i);$$

$$T_e^J = 2\pi S_e^{(0)} \frac{\sqrt{E_0}}{G_e^2 (K_n R) + F_e^2 (K_n R)};$$

$S_e^{(0)}$ - приведенная нейтронная силовая функция для момента e ;
 G_e, F_e - функции Ганкеля.

$E_0 = I$ эв; R - радиус ядра.

Программа написана на языке АЛГОЛ-60 (альфа). Объем транслированной программы 1100₈ ячеек, среднее время работы 1 мин.

Исходные данные

A - атомный вес; Γ_0, Γ_I - параметры размеров ядра в формуле для радиуса $R = r_0 A^{1/3} + \nu_1$; $\bar{\alpha}, \Gamma_{\gamma}$; характеристики уровней ядра мишени $E_{\kappa}, I_{\kappa}, \mathcal{K}$, таблица приведенных силовых функций $S_e^{(0)}$ и энергий E падающего нейтрона.

Программа выводит на печать парциальные и полное сечения радиацион-

ного захвата. при заданной энергии нейтрона. Программу можно использовать для расчета сечений захвата нейтронов в области энергий ниже 300 кэв. Это связано с тем, что:

- 1) предполагается для $c \gg 3$; $T_e = 0$;
- 2) принято $\Gamma_{\gamma \text{ захвата}} \approx \Gamma_{\gamma \text{ полной}}$, то есть не учитывается возможность испарения нейтронов при испускании мягких γ - квантов;
- 3) пренебрегается энергетической зависимостью величины $\xi(J)$.

ПРОГРАММЫ РАСЧЕТА УГЛОВЫХ РАСПРЕДЕЛЕНИЙ И СПЕКТРОВ НЕУПРУГО
РАССЕЯННЫХ НЕЙТРОНОВ В СТАТИСТИЧЕСКОЙ
МОДЕЛИ "СИГМА"

Г.Я.Тертычный, Ю.Н.Шубин

Программа "Сигма" предназначена для расчета спектров и угловых распределений неупруго рассеянных нейтронов в области энергий, где плотность состояний остаточного ядра достаточно велика и может быть описана плавной функцией энергии, а также полного сечения образования составного ядра. Расчет проводится согласно статистической модели Хаузера-Фешбаха, где сечение поглощения, спектр $d\sigma/dE$ и дважды дифференциальное сечение $d^2\sigma/dE d\Omega$ определяются соотношениями:

$$\sigma_{\text{tot}}(E, i_0) = \frac{\pi \lambda^2}{2(2i_0+1)} \sum_{l_0=0}^{l_0 \text{ max}} \sum_{j_0=i_0-1/2}^{l_0+1/2} \sum_{j_0+l_0}^{j_0+l_0} (2J+1) T_{l_0}^{j_0}(E_0). \quad (1)$$

$$\frac{d\sigma}{dE_1}(E_0, i_0; E_1) = \frac{\pi \lambda^2}{2(2i_0+1)} \sum_{l_0=0}^{l_0 \text{ max}} \sum_{j_0=i_0-1/2}^{l_0+1/2} \sum_{j_0+l_0}^{j_0+l_0} (2J+1) T_{l_0}^{j_0}(E_0) \times \sum_{l_1=0}^{l_1 \text{ max}} \sum_{j_1=l_1-1/2}^{j_1+l_1} \sum_{i_1=i_0-1/2}^{j_1+1/2} \frac{T_{l_1}^{j_1}(E_1) P(E_0-E_1, i_1)}{F(E_0, J)}. \quad (2)$$

$$\frac{d^2\sigma(E_0, i_0; E_1, J)}{dE_1 d\Omega} = \frac{\pi \lambda^2}{2(2i_0+1)} \frac{1}{4\pi} \sum_{l_0=0}^{l_0 \text{ max}} \sum_{j_0=i_0-1/2}^{l_0+1/2} \sum_{j_0+l_0}^{j_0+l_0} (2l_0+1)(2J+1)^2 T_{l_0}^{j_0}(E_0) \times \sum_{l_1=0}^{l_1 \text{ max}} \sum_{j_1=l_1-1/2}^{j_1+l_1} \sum_{i_1=i_0-1/2}^{\min(2l_0, 2l_1, 2J)} \sum_{L=0}^{L=0} (-1)^{j_1-j_0} (2l_1+1)(l_0 l_0 0 0 | l_0 l_1 0 0 | l_0) \times \times W(J J l_0 l_0; L i_0) W(J J l_1 l_1; L i_1) T_{l_1}^{j_1}(E_1) \frac{P(E_0-E_1, i_1)}{F(E_0, J)} P_L(\cos \vartheta). \quad (3)$$

Здесь $F(E_0, J) = \sum_{l_1=0}^{l_1 \text{ max}} \sum_{j_1=l_1-1/2}^{j_1+l_1} \sum_{i_1=i_0-1/2}^{j_1+1/2} \int_0^{E_0} T_{l_1}^{j_1}(E_1) P(E_0-E_1, i_1) dE_1. \quad (4)$

В программе используется выражение для плотности возбужденных состояний $\rho(U, J)$, полученное в модели ферми-газа с феноменологическим учетом остаточных взаимодействий.

Существует упрощенный вариант программы, который рассчитывает сечение поглощения $\sigma_{\text{tot}}(E_0)$ и спектр неупруго рассеянных нейтронов $d\sigma/dE$ согласно соотношениям (1) и (2).

Программы составлены таким образом, что позволяют выборочно рассчитывать любую интересующую часть спектра.

В качестве исходных данных используются ξ , A , E_0 , I_0 , угол ϑ , ν_{max} и ν_{min} , параметр плотности уровней A и спаривания δ , таблицы коэффициентов Клебша-Гордона и коэффициентов $T_{\ell,0}[\nu_{\text{min}}]$ и $T_{\ell,0}[\nu_{\text{min}},0:N]$, где N - число точек, в которых рассчитывается спектр.

Программа написана на языке АЛГОЛ-60 (альфа). Время работы $\sim 0,1 \times \nu_{\text{max}}^2 \times N$ (мин), и в пять раз быстрее в упрощенном варианте.

РАСЧЕТ ФУНКЦИЙ ВОЗБУЖДЕНИЯ И СПЕКТРОВ НЕУПРУГО
РАССЕЯННЫХ НЕЙТРОНОВ

В.Г.Проняев

1. Программа "НУР" предназначена для вычисления функций возбуждения нейтронами с энергией до 14,5 Мэв дискретных уровней с известными характеристиками $\varepsilon_i^{I\kappa}$:

$$\sigma(E_n, \varepsilon_i^{I\kappa}) = \frac{\mathcal{I}}{2(2I_0+1)\kappa^2} \sum_{e,j} T_{e,j}^{I\kappa} \sum_{j'} \frac{2j'+1}{D^{I\kappa}} \sum_{e',j'} T_{e',j'} (E - \varepsilon_i^{I\kappa}) ; \quad (1)$$

и групп неразрешенных уровней шириной $\Delta\varepsilon_i$: при их статистическом описании:

$$\sigma(E_n, \varepsilon_i) = \frac{\mathcal{I}}{2(2I_0+1)\kappa^2} \sum_{e,j} T_{e,j}^{I\kappa}(E_n) \sum_{j'} \frac{2j'+1}{D^{I\kappa}} \sum_{I_f, I_f'} \sum_{j, j'} T_{e',j'}(E_n - \varepsilon_i) \times \rho(I_f, I_f', \varepsilon_i) \Delta\varepsilon_i ; \quad (2)$$

где

$$D^{I\kappa} = \sum_{\nu} \left\{ \sum_{n, e', j', \nu} T_{e',j'}^{I\kappa}(E_n - \varepsilon_{n'}^{I\kappa'} + Q_{\nu}) + \int_{E_n - \varepsilon_{\max} + Q_{\nu}}^{E_n - Q_{\nu}} \sum_{e', j'} T_{e',j'}^{I\kappa}(E_n - \varepsilon + Q_{\nu}) \rho(j', \varepsilon) d\varepsilon \right\} \quad (3)$$

и суммирование по ν соответствует различным вылетающим частицам.

В качестве исходных данных использованы массивы коэффициентов прилипания $T_{e,j}^{I\kappa}(E)$, полученные в рамках оптической модели для нейтронов, протонов и α -частиц.

Для плотности уровней использованы соотношения модели ферми-газа с феноменологическим учетом спаривания. Программа написана на языке АЛГОЛ-60 (для транслятора ТА-ПМ), объем транслированной программы без массивов исходных данных 3400₈. Работа программы организована так, что для данной энергии падающего нейтрона рассчитываются функции возбуждения всех уровней, которые могут быть возбуждены в остаточном ядре. Время работы программы для заданной начальной энергии E_n можно оценить как:

$$t(E_n) \sim 0,5 \cdot \frac{(2I+1)}{u^2} (E_n - \epsilon_{\max}) + 0,5 \text{ (мм)};$$

где I - спин ядра мишени в основном состоянии;

u - шаг по энергии рассеянного нейтрона (в Мэв);

ϵ_{\max} - энергия последнего разрешенного уровня в схеме уровней остаточного ядра (в Мэв).

Существует модифицированная версия программы "НУРмод", которая в дополнение к (I) включает вероятность испускания нейтронов на предравновесной стадии [1] и, соответственно этому, перенормирует остальную часть (I).

$$\begin{aligned} \sigma(E_n, \epsilon_i) = & \frac{\mathcal{K}}{2(2I_0+1) \kappa^2} \sum_{l', j'} (2J+1) T_{l' j'}^{\mathcal{K}}(E_n) \times \\ & \times \sum_{I_f} \left\{ \sum_{\substack{n=n_i \\ (\Delta n=2)}}^{\bar{n}} \frac{\rho_{n-1}(E_n, \epsilon_i, I_f) g_n \Delta \epsilon_i}{\rho_n(E_n + B_n, \mathcal{J})} \times \right. \\ & \frac{\sum_{l', j'} \frac{2m_n \epsilon_i}{\mathcal{K}^2 n^3 g_n} \cdot \frac{\mathcal{K}}{\kappa^2 2(2I_0+1)} (2J+1) T_{l' j'}^{\mathcal{K}}(\epsilon_i)}{\sum_{l', j'} \frac{2m \epsilon_i}{\mathcal{K}^2 n^3 g_n} \cdot \frac{\mathcal{K}}{\kappa^2 2(2I_0+1)} (2J+1) T_{l' j'}^{\mathcal{K}}(\epsilon_i) + [1,4 \cdot 10^{21} (\epsilon_i + B_n) - 6 \cdot 10^{18} (\epsilon_i + B_n)^2] \cdot \frac{1}{\kappa}} \times \\ & \left. \times (1 - P_{n-2}) \right\}. \end{aligned} \quad (4)$$

Плотность частично-дырочных конфигураций определяется в рамках модели сверхтекучего ядра.

ЛИТЕРАТУРА

1. I.I.Griffin. Phys. Rev. Letters 17, 478 (1966).
M.Blann. Phys. Rev. Letters 27, 337 (1971).

ПРОГРАММА РАСЧЕТА НЕЙТРОННЫХ СЕЧЕНИЙ (ПРО-2М)

А.Г.Довбенко

Программа предназначена для расчета в рамках оптической модели сечения упругого рассеяния σ_s , сечения поглощения σ_a , полного сечения σ_t [1], а также сечений неупругого рассеяния и радиационного захвата в рамках модифицированных соотношений Хаузера-Фешбаха [2]:

$$\sigma_{ln}(E, E_m) = \frac{\pi}{2k^2(2I_0+1)} \sum_{lj} (2J+1) \theta_{lj}^{jk}(E) \frac{\sum_{l'm'} \theta_{l'm'}^{jk}(E-E_m)}{\sum_{l'm'} \theta_{l'm'}^{jk}(E-E_m) + \frac{2\pi\Gamma(B_n)(2J+1)}{D(B_n)2(2I_0+1)} \zeta(E)} S^{jk}$$

$$\sigma_{n,j}(E) = \frac{\pi}{2k^2(2I_0+1)} \sum_{lj} (2J+1) \theta_{lj}^{jk}(E) \frac{\epsilon(E)}{1 + \frac{D(B_n)}{2\pi\Gamma(B_n)} \frac{2(2I_0+1)}{2J+1} \zeta(E) \sum_{l'm'} \theta_{l'm'}^{jk}(E-E_m)} S^{jk}$$

Здесь S^{jk} - поправка на флуктуацию ширины, а $\theta_{lj}^{jk}(E)$ связано с оптическими коэффициентами проницаемости $T_{lj}^{jk}(E)$ следующим образом:

$$\theta_{lj}^{jk}(E) = \frac{2}{q} (1 - \sqrt{1 - q T_{lj}^{jk}(E)}),$$

где q ($0 \leq q \leq 1$) параметр, определяющий корреляционные свойства составного ядра.

Выражения для $\epsilon(E)$ и $\zeta(E)$ определяют энергетическую зависимость ширины радиационного захвата и полной радиационной ширины.

$$\epsilon(E) = \frac{\int_0^{B_n+E} \epsilon_j^2 f(\epsilon_j) \rho(B_n+E-\epsilon_j, 0) d\epsilon_j}{\int_0^{B_n+E} \epsilon_j^2 f(\epsilon_j) \rho(B_n+E-\epsilon_j, 0) d\epsilon_j},$$

$$\zeta(E) = \frac{\int_0^{B_n} \epsilon_j^2 f(\epsilon_j) \rho(B_n-\epsilon_j, 0) d\epsilon_j}{\int_0^{B_n+E} \epsilon_j^2 f(\epsilon_j) \rho(B_n+E-\epsilon_j, 0) d\epsilon_j},$$

Здесь $f(\epsilon_j)$ учитывает дополнительную по отношению к ϵ_j^2 энергетическую зависимость радиационной силовой функции [3].

Зависимость плотности уровней от спина и исходности взята в виде

$$\rho(u, J, X) = \frac{1}{2} \rho(u, 0) (2J+1) \exp \left\{ - \frac{(J + \frac{1}{2})^2}{2 \sigma^2(u)} \right\}$$

и для энергетической зависимости плотности уровней $\rho(E; J=0)$ используются соотношения модели ферми-газа или модели сверхтекучего ядра [3] .

Наряду с исходными данными, описанными в [1] , для расчетов по ПРС-2М необходимы значения параметра ϱ и дополнительных параметров плотности уровней. Время работы машины для одного значения E зависит от значения спина ядра-мишени, числа возбуждаемых уровней ($m' \leq 25$) и значения ε .

ЛИТЕРАТУРА

1. А.Г.Довбенко, В.Е.Колесов. Программа расчета нейтронных сечений по оптической модели ядра (ПРС-2). См. настоящий сборник. Стр. 3.
2. P.A.Moldauer. Rev.Mod. Phys. 36, 1079 (1964).
3. А.Г.Довбенко, А.В.Игнатки, В.А.Толстикова. Препринт ФЭИ-293 (1971).

ПРОГРАММА РАСЧЕТА СЕЧЕНИЙ РАДИАЦИОННОГО ЗАХВАТА
 БЫСТРЫХ НЕЙТРОНОВ ПО СТАТИСТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ЯДРА
 (ПРС-3)

А.Г.Довбенко

Программа предназначена для расчета парциальных и полного сечений радиационного захвата нейтронов с энергией до 20 Мэв. Сечение радиационного захвата представлено в виде:

$$\sigma_{n\gamma}(E) = \frac{\chi}{2k^2(2I_0+1)} \sum_l T_l(E) \sum_J \frac{\sigma_{T_{lc}}^J(2J+1) \Gamma_{lc}(u, J)}{\Gamma_{\gamma}(u, J) + \frac{D(u, J)}{\chi} \left[\sum_{l'} \epsilon_{T_{lc}'} T_{l'}(E-E_c) + \mathcal{L}(E, J) \right]}$$

где
$$\mathcal{L}(E, J) = \frac{1}{2} \int_{E'}^E \sum_{l'} \epsilon_{T_{lc}'} T_{l'}(E-\omega) \sum_{i_k} \rho(\omega - \delta, i_k) d\omega$$

учитывает конкуренцию уровней неупругого рассеяния, характеристики которых определяются плотностью уровней $\rho(v_{i_k})$.

Здесь $\Gamma_{\gamma}(u, J)$ - полная радиационная ширина,
 $\Gamma_{\gamma c}(u, J) = \sum_{m=1}^{m_{\max}} \Gamma_{m\gamma}(u, J)$ - радиационная ширина, соответствующая радиационному захвату нейтрона и отличная от полной радиационной ширины из-за конкуренции процесса вылета нейтрона с процессом испускания каскадных J - квантов,

$\Gamma_{m\gamma}(u, J)$ - определяет вероятность перехода ядра в состояние с энергией возбуждения, меньшей энергии связи нейтрона, путем испускания m фотонов.

$$\Gamma_n(u, J) = \frac{D(u, J)}{\chi} \left[\sum_{l'} \epsilon_{T_{lc}'} T_{l'}(E-E_c) + \mathcal{L}(E, J) \right] - \text{нейтронная ширина,}$$

коэффициент $\epsilon_{T_{lc}}^J$ учитывает сохранение закон момента количества движения и четности.

Исходными данными для расчета являются E^* , B_n ; δ_1 и δ_2 - поправки на спаривание нуклонов для составного ядра и ядра-мишени;
 a_1 и a_2 - параметры плотности уровней для составного ядра и ядра-мишени соответственно, а также энергии, спины и четности известных дискретных уровней и параметры оптического потенциала.

В качестве окончательных результатов на печать выдаются парциальные и полное сечения реакции (n, γ). Программа позволяет производить расчет для произвольного набора энергий.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПАРАМЕТРА И ВЫЧИСЛЕНИЕ ПЛОТНОСТИ
ВОЗБУЖДЕННЫХ СОСТОЯНИЙ ЯДЕР

А.Г.Довбенко, А.В.Игнатюк, Ю.Н.Шубин

По заданной плотности нейтронных резонансов $D_{\text{нрбн}}(B_n, I_0)$ при энергии связи нейтрона B_n и спина ядра мишени I_0 определяется параметр плотности уровней α и вычисляется для заданного энергетического диапазона плотность возбужденных состояний ядра.

Для определения плотности состояний использованы соотношения модели сверхтекучего ядра в приближении непрерывного спектра, параметрами модели являются корреляционные функции Δ_p и Δ_n для протонов и нейтронов. При $\Delta_p = \Delta_n = 0$ программа определяет параметры модели ферми-газа с эффективной энергией возбуждения.

ПРОГРАММА РАСЧЕТА СЕЧЕНИЙ ПРЯМОГО И КОЛЛЕКТИВНОГО
РАДИАЦИОННОГО ЗАХВАТА НЕЙТРОНОВ

А.Г.Довбенко, А.В.Игнатюк

Программа предназначена для вычисления парциальных сечений радиационного захвата и жесткой части спектра γ - лучей на основе схематической модели прямого и полупрямого захвата [1] :

$$\sigma_{ej} = \frac{8\pi}{9} \frac{M\kappa_j^3}{\hbar^2 \kappa} \left(\frac{Z_e}{A}\right)^2 \sum_{j'} (2j'+1) S_{jj'} F_{ejj'} \times \\ \times \left| \int_0^\infty u_{ej}(r) u_{ej'}(r) r^3 dr \right|^2$$

Здесь κ_γ и κ - волновые числа γ - квантов и нейтрона, M - приведенная масса, $S_{jj'}$ - геометрический множитель для дипольных переходов, u_{ej} - волновые функции модели оболочек для конечного одночастичного состояния, $u_{ej'}$ - волновые функции оптической модели для падающего нейтрона, $F_{ejj'}$ - коэффициент увеличения сечения за счет коллективного механизма испускания γ - кванта. Предусмотрены различные модификации для коэффициента $F_{ejj'}$, связанные с его различным описанием в существующих моделях [1].

Более подробное описание методов вычисления приведено в работе [2].

ЛИТЕРАТУРА

1. G.E.Brown. Nucl. Phys. 57, 339 (1964).
C.F.Clement, A.M.Lane, J.R.Rook. Nucl. Phys. 66, 273 (1965).
Д.Ф.Зарицкий, А.А.Лушников, М.Г.Урин. ЯФ. 3, 432 (1966).
2. А.Г.Довбенко, А.В.Игнатюк. ФВИ-311 (1971).

ПРОГРАММЫ ДЛЯ ИНТЕРПОЛЯЦИИ И КОМПАКТНОГО ПРЕДСТАВЛЕНИЯ
ДАНЫХ ПО НЕУПРУГОМУ РАССЕЯНИЮ НЕЙТРОНОВ МЕТОДОМ
ПСЕВДОУРОВНЕЙ

В.И.Попов, В.Г.Проняев

Программы предназначены для интерполяции и компактного представления данных по неупругому рассеянию нейтронов в интервале энергий 0-15 Мэв. Основой метода является использование простой параметризации формы функции возбуждения уровня или группы уровней шириной $\Delta u = 0,2$ Мэв. Функция возбуждения $S(x)$ аппроксимируется функцией максвелловского типа:

$$S(x) = \sum_{i=1}^3 \left\{ AT^{-d_i} \exp d_i \right\} P_i x^{d_i} \exp(-b_i x) \quad (I)$$

где

$$\begin{aligned} d_i &= b_i T, \\ P_1 &= 1-f-F, \\ P_2 &= f, \\ P_3 &= F, \\ x &= E_n - E_j \end{aligned}$$

здесь E_n и E_j - энергии падающего нейтрона и энергия уровня или группы уровней.

$P_1, P_2, P_3, b_1, b_2, b_3$ - парциальные вклады и коэффициенты, определяющие ширины максвелловских функций;

A и T - максимальные величины сечения возбуждения уровня и расстояние от порога до максимального значения функции возбуждения уровней.

Таким образом для описания функции возбуждения каждого уровня необходимо знать 7 параметров: $A, T, b_1, b_2, b_3, f, F$. Область разрешенных уровней остаточного ядра включает 8 групп уровней, для описания которых задается 56 параметров.

В области континуума уровней считается, что параметры плавно меняются от одной группы уровней к другой и подбираются восемь коэффициентов разложения в степенной ряд энергетической зависимости для каждого из 7 параметров. Подбор параметров осуществляется по наилучшему описанию имеющихся экспериментальных данных для функций возбуждения уровней, полных сечений и спектров неупруго рассеянных нейтронов.

Имеющиеся программы по подобранным параметрам позволяют рассчитать:

I. Функции возбуждения групп ядерных уровней в интервале энергий уровней остаточного ядра 0-15 Мэв;

2. Сечение неупругого рассеяния, искаженное вкладом n - кратного испускания нейтронов, т.е. $\sigma_n + 2\sigma_{n,2n} + 3\sigma_{n,3n} \dots$.

3. Суммарный спектр рассеянных нейтронов из реакций (n,n') , $(n,2n)$ и $(n,3n)$.

4. Матрицу групповых сечений неупругих переходов при любом разбиении на группы (число групп не больше 26).

Программы написаны на языке АЛГОЛ-60(ТА-2). Время работы программ для машины класса М-20 от 2 до 20 мин. Тексты программ опубликованы в работе [1].

ЛИТЕРАТУРА

1. В.И.Попов, В.И.Трынова, В.М.Случевская. Бюллетень Центра по ядерным данным. 1968, вып. 5, стр. II6.

АЛГОР-ПРОГРАММА ДЛЯ АППРОКСИМАЦИИ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ
ДАННЫХ ОРТОГОНАЛЬНЫМИ ПОЛИНОМАМИ СО СТАТИСТИ-
ЧЕСКИМ АНАЛИЗОМ

А.Н.Давлетшин, В.А.Толстикова

Программа реализует алгоритм нахождения методом наименьших квадратов коэффициентов степенного полинома, аппроксимирующего исходную совокупность экспериментальных данных.

Экспериментальные данные представляются в виде 3-х массивов x_k , y_k , z_k , где $k = 1, \dots, m$. Здесь x_k, y_k - абсцисса и ордината экспериментальной точки, а z_k - либо абсолютная, либо относительная ошибка измерения ординаты y_k .

При вычислениях, независимо от вида представления величин z_k , могут быть использованы веса w_k трех видов:

1. $w_k = 1$;
2. $w_k = \frac{1}{\sigma_k^2}$, где σ_k - абсолютная ошибка величины y_k ;
3. $w_k = \frac{1}{\delta_k^2}$, где $\delta_k = \frac{\sigma_k}{y_k}$ - относительная ошибка величины y_k .

Аппроксимирующий полином ищется в виде:

$$y_n(x) = \sum_{i=0}^n b_i \varphi_i(x) \quad (I)$$

где $\varphi_i(x)$ - ортогональные на множестве точек $\{x_k\}$, $k=1, \dots, m$ полиномы степени i , нормированные на 1.

Степень аппроксимирующего полинома n_0 определяется путем проверки гипотезы $b_i = 0$ для всех коэффициентов b_i полинома (I). Для этого сравниваются табличная величина для распределения Фишера $F_{1, \nu}^{(1-\rho)}$ и подчиняющаяся этому распределению величина $\frac{b_i^2}{\sigma_n^2}$. Здесь $\nu = m - n - 1$, ρ - уровень значимости, а σ_n^2 - полученная для полинома степени n оценка дисперсии измеренной величины с весом, равным 1. Все коэффициенты b_i , для которых указанная гипотеза оказывается верной, приравняются нулю. Исходная задаваемая степень полинома n должна быть такой, чтобы по крайней мере $b_n = 0$. В результате такого статистического анализа определяется степень полинома $n_0 < n$ и вычисляется новая оценка $\sigma_{n_0}^2$. Полином (I) преобразуется к виду (2).

Основные выводимые результаты аппроксимации:

1. Матрицы коэффициентов полиномов $\varphi_i(x)$;
2. Массив коэффициентов $b_i, i=0, \dots, n$;
3. Массив коэффициентов степенного полинома

$$y_{n_0}(x) = \sum_{i=0}^{n_0} c_i x^i \quad (2)$$

4. Массив коэффициентов полинома для вычисления дисперсии величины $y_{no}(x)$;

5. Таблица значений $y(x_j)$ с шагом Δx , вычисленных по формуле (2), их дисперсии и относительные ошибки.

Шаг Δx может быть выбран постоянным в линейном или логарифмическом масштабе.

Программа написана на α - языке. Длина программы приблизительно 2000₈.

ПРОГРАММА РАСЧЕТА СПЕКТРА РЕАКЦИИ $(n,2n)$ -РВС

Н.О.Базазянц, Л.В.Горбачева

Программа "РВС" предназначена для расчета спектров первых и вторых нейтронов реакции $(n,2n)$ [1].

Если энергия нейтрона превышает энергию связи в ядре-мишени, то остаточное ядро, образующееся в результате неупругого рассеяния, может иметь достаточную энергию возбуждения для испускания еще одного нейтрона.

Спектр вторых нейтронов при фиксированной энергии возбуждения остаточного ядра можно записать следующим образом:

$$I_{E_2}(E_2) dE_2 = C_2 \cdot E_2 \cdot e^{-\frac{E_2}{\theta(E_2-B)}} dE_2, \quad (1)$$

где

E_0 - энергия налетающих нейтронов;

B - порог реакции $(n,2n)$;

E_1 - энергия первичных нейтронов;

E_2 - энергия вторичных нейтронов;

$E_0 - E_1$ - энергия возбуждения остаточного ядра.

Общий спектр вторых нейтронов, полученный путем интегрирования (1) по E_1 с весом вероятности испускания первого нейтрона с энергией E_1 от 0 до $E_0 - B - E_2$:

$$I_2(E_2) dE_2 = C_3 \cdot E_2 \cdot dE_2 \int_0^{E_0-B-E_2} e^{-\frac{E_2}{\theta(E_0-B-E_1)}} \cdot E_1 \cdot e^{-\frac{E_1}{\theta(E_0)}} dE_1, \quad (2)$$

где $\theta(E_0)$ - термодинамическая температура.

Если принять

$$\theta(E_0 - B - E_1) = \theta(E_0) \cdot \frac{\sqrt{E_0 - B - E_1}}{\sqrt{E_0}};$$

то для спектра вторых нейтронов получится выражение:

$$I_2(E_2) dE_2 = C_3 \cdot dE_2 \cdot E_2 \int_0^{E_0-B-E_2} E_1 \cdot e^{-\frac{E_2 \sqrt{E_0 - B - E_1} + E_1}{\theta(E_0)}} dE_1; \quad (3)$$

Спектр первых нейтронов рассчитывается следующим образом:

$$L_1(E_1) dE_1 = C_1 \cdot E_1 \cdot e^{-\frac{E_1}{\theta(E_0)}}, \quad (4)$$

где $E_1 < (E_0 - B)$

Расчет термодинамической температуры $\theta(E_0)$ в программе проводится по формуле:

$$\theta(E_0) = \frac{\sqrt{\frac{\mu}{a}}}{1 - (\frac{5}{4} \sqrt{\frac{\mu}{a}}) / a},$$

$$\mu = E_0 - 2\theta'(E_0) + \Delta, \quad \text{где } \Delta = 0; \quad a = 12,2;$$

$\theta'(E_0)$ - первое приближение термодинамической температуры, принимается равным $\sim (0,5 + 1,0)$. Предусмотрено: отключение блока расчета $\theta(E_0)$, ввод соответствующего массива $\theta(E_0)$ с перфокарт.

Программа РВС позволяет получить спектры первых и вторых нейтронов в соответствии с формулами (3) и (4).

В программе принималось число точек по энергии E_0 , равное 150. Написана программа на языке АЛГОЛ-60 (транслятор ТА-2). Время счета - на расчет и выдачу информации для одного значения E_0 - ~ 1 мин.

ЛИТЕРАТУРА

1. Н.О.Базазянц. Оценка сечений и составление многогрупповых констант упругого и неупругого рассеяния нейтронов для расчета реакторов и защиты. Кандидатская диссертация, Обнинск, 1971.

ПРОГРАММА РАСЧЕТА КОЭФФИЦИЕНТОВ РАЗЛОЖЕНИЯ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ
СЕЧЕНИЙ РАССЕЯНИЯ В РЯД ПО ПОЛИНОМАМ ЛЕЖАНДРА
"ПАРАЛЕНК"

М.Н.Николаев, Н.О.Базазянц

Программа "ПАРАЛЕНК" [1] предназначена для расчета коэффициентов (B_e) при полиномах Лежандра в разложении дифференциальных сечений рассеяния вида:

$$\sigma_{расч.}(\mu) = \frac{1}{4x} \sum_{l=0}^N B_l P_l(\mu) \quad (1)$$

Коэффициенты разложения (B_e) в программе ПАРАЛЕНК находятся по способу наименьших квадратов, а оптимальное число полиномов Лежандра (N_0) определяется из условия минимума среднеквадратичного отклонения дифференциального сечения (измеренного при M углах) от его расчетной величины:

$$S(N) = \sum_{i=1}^M [\sigma_n(\mu_i) - \frac{1}{4x} \sum_{l=0}^N B_l P_l(\mu_i)]^2 W_i, \quad (2)$$

Здесь $W_i = \frac{1}{d_i^2} / \sum_l \frac{1}{d_l^2}$ (d_i^2 - среднеквадратичная ошибка измерения дифференциального сечения).

Для определения коэффициентов B_e , обращающих (2) в минимум, в программе решается система линейных уравнений, получаемых путем дифференцирования выражения (2) по всем B_e и приравнивания соответствующих частных производных нулю:

$$\hat{A} \vec{B} = \vec{C}, \quad (3)$$

где элементы матрицы \hat{A} и вектора \vec{C} равны.

$$A_{en} = \frac{1}{(4x)^2} \sum_{i=1}^M P_e(\mu_i) W_i P_n(\mu_i), \quad (4)$$

$$C_n = \frac{1}{4x} \sum_{i=1}^M \sigma_n(\mu_i) W_i P_n(\mu_i)$$

Из (3) получаем:

$$\vec{B} = \hat{A}^{-1} \vec{C} \quad (5)$$

где \hat{A}^{-1} - матрица обратная \hat{A} .

Дисперсии рассчитанных таким образом коэффициентов разложения определяются диагональными элементами обратной матрицы:

$$\mathcal{D}(B_e) = \delta \cdot A_{ee}^{-1}, \quad (6)$$

где δ - так называемая генеральная дисперсия, для которой в программе используется наибольшая из следующих двух оценок:

$$\delta^2(N_0) = S_{min}(N_0)/(M - N_0 - 1), \quad (7)$$

или

$$\delta^2 = \frac{1}{\sum_{i=1}^n 1/d_i^2}. \quad (8)$$

N_0 - рассчитывается в программе из условия минимума $\delta^2(N)$, определяемого выражением (7), то есть исходя из критерия Гаусса.

Если в зависимости δ^2 от N наблюдается несколько минимумов, то программа выбирает тот, в котором $\delta^2(N)$ оказывается сравнимой с оценкой δ^2 по ошибкам измерений (8). Если минимум на кривой $\delta^2(N)$ очень плавный, то в качестве N_0 в области этого минимума в программе выбирается наименьшее число N , при котором $\delta^2(N)$ достаточно близко к оценке (8) (то есть отличается от нее не более, чем в два раза).

Программа "ПАРАЛЕНК" считает:

1. Коэффициенты B_e при полиномах Лежандра в разложении (I) угловых распределений.
2. Ошибки коэффициентов B_e .
3. Матрицу коэффициентов корреляции ошибок B_e .
4. Угловое распределение, восстановленное с помощью рассчитанных коэффициентов.
5. Ошибку восстановленной функции в каждой расчетной точке (с учетом корреляции ошибок B_e).
6. Дифференциальное сечение упругого рассеяния для произвольно заданных дополнительных значений косинуса угла рассеяния (до 17 дополнительных значений).

Все эти величины считаются как в лабораторной системе координат, так и в системе центра инерции.

Максимально возможное число точек в задаваемом угловом распределении, предусмотренное в программе "ПАРАЛЕНК", составляет 41; максимальное число членов разложения - 20.

Программа написана на языке АЛГОЛ-60 (ТА-2). Время счета типичного варианта (6-8 членов разложения, 15-20 точек по углу с выдачей данных в лабораторной системе координат и в системе центра инерции) определяется в основном временем ввода и вывода информации и составляет ~ 3-4 минуты. Программа "ПАРАЛЕНК" может считать последовательно произвольное количество вариантов.

ЛИТЕРАТУРА

1. М.Н. Николаев, Н.О. Базазянец. Разложение экспериментальных данных по угловому распределению упруго рассеянных нейтронов по полиномам Лежандра. БИЦЯД, вып. 4, Атомиздат, 1967.

ПРОГРАММА " SIGMARES "

В.П.Лунев, А.А.Лукьянов

Программа рассчитывает энергетический ход сечений реакций в резонансной области энергий с учетом межрезонансной интерференции и конечного энергетического разрешения [1] :

$$\langle \sigma_R(E) \rangle = \frac{65.2 \cdot 10^4}{\sqrt{E}} \sum_i \left\{ \frac{2\alpha_i}{\Delta} u(z_i, \xi_i) + \frac{2\beta_i}{\Delta} v(z_i, \xi_i) \right\}$$

Программа написана на языке "АЛГОЛ-60" для транслятора ТА-1М. Использование оператора "ФОРМАТ" позволяет на АЦПУ графически представить введенные экспериментальные данные и рассчитанное сечение для энергетического интервала 100 эв в 1000 точках. Время работы программы 1 час.

ЛИТЕРАТУРА

1. В.П.Лунев, А.А.Лукьянов. Препринт ФЭИ-312 (1971).

ПРОГРАММЫ РАСЧЕТА СРЕДНИХ РАССТОЯНИЙ МЕЖДУ УРОВНЯМИ (TAD)
И ИХ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ (RAD)

И.А.Корчагина

Программа "TAD" предназначена для расчета и распечатки результатов различных оценок среднего расстояния между уровнями в зависимости от числа рассмотренных разрешенных резонансов. Предусмотрен ввод не более 480 резонансов.

Результаты выводятся в виде таблиц, в которые входят:

E_l - энергия l -го резонанса;

$\bar{\varpi}_l$ - расстояние между $(l-1)$ и l -тым резонансами;

$\bar{\varpi}_1, \bar{\varpi}_2, \bar{\varpi}_3$ - различные оценки среднего расстояния между уровнями

$$\bar{\varpi}_{1,l} = \frac{E_l - E_{l-1}}{l-1},$$

$$\bar{\varpi}_{2,l} = \frac{\sum_{k=1}^l E_k^2 - \frac{1}{l} \left(\sum_{k=1}^l E_k \right)^2}{\sum_{k=1}^l k E_k - \frac{l+1}{2} \sum_{k=1}^l E_k},$$

$$\bar{\varpi}_{3,l} = \sqrt{\frac{l}{2} \frac{E_l^2 - \bar{\varpi}_l^2}{l-1}}.$$

Смысл оценки $\bar{\varpi}_1$ очевиден. $\bar{\varpi}_2$ представляет собой оценку $\bar{\varpi}$ по наклону кривой зависимости $N(E)$, где N - число резонансов рассматриваемой системы уровней в интервале $0 \leq E_l \leq E$ [1].

$\bar{\varpi}_3$ - оценка $\bar{\varpi}$ через величину $\bar{\varpi}^2 = \frac{2}{N} \bar{\varpi}^2$ [2], полученную в предположении, что распределение расстояний между резонансами описывается распределением Вигнера.

Оценка $\bar{\varpi}_3$ наиболее чувствительна к пропуску слабых уровней, оценка $\bar{\varpi}_2$ наименее чувствительна к нему. Зависимость величин оценок $\bar{\varpi}_1, \bar{\varpi}_2$ и $\bar{\varpi}_3$ от энергии помогает определить ту область энергий, где пропуск резонансов несущественен.

Для каждого 50-го и (или) для последнего резонансов рассматриваются дисперсии ϖ_1 и ϖ_2 . Дисперсия ϖ_1 рассчитывается согласно [2], как $(10 \cdot N)^{-1}$, где N - число рассмотренных резонансов (предполагается, что это число больше 10).

Дисперсия ϖ_2 оценивается по среднеквадратичному отклонению $N(E)$ от прямой [1].

В качестве исходных данных задаются:

а) массив резонансных энергий;

б) массив признаков того, к какой системе уровней γ^x относится данный резонанс.

Программа выбирает те уровни, которые относятся к заданной системе, и печатает таблицу результатов для этой системы уровней.

В конце всей таблицы печатается значение l или γ рассмотренной системы уровней.

Программа написана на языке АЛГОЛ-60. После трансляции на ТА-2 объем программы составляет $\sim 4000_{10}$ ячеек. На расчет средних расстояний между уровнями и распечатку таблицы из 50 резонансов требуется ~ 3 мин.

Для анализа полноты данных по E_i обычно сравнивают экспериментальные распределения $\frac{x_i}{\bar{x}}$ с теоретическим.

Программа "RAD" предназначена для этой цели. Теоретическое распределение расстояний между уровнями $f(x) = \frac{1}{\sigma} e^{-\frac{x}{\sigma}}$ представляется в виде прямой $y = \frac{N}{20}$, если по оси x -ов отложить в линейном масштабе величины u_k , полученные из равенства: $\int_0^{u_k} f(x) dx = \frac{k}{n}$.

Границы интервалов u_k для $n = 20$ взяты из работы [1]. Программа "RAD" позволяет рассчитать количество $\Delta_i = E_i - E_{i-1}$, которое попадает в k -тый интервал распределения. Результаты выдаются в виде таблицы. Программа также написана на языке АЛГОЛ-60. После трансляции на ТА-2 объем программы составляет $\sim 2088_{10}$ ячеек. На работу программы со сложной выдачей требуется не более 3 минут.

ЛИТЕРАТУРА

1. Л.П.Абагян. Методы учета резонансных эффектов в групповых константах для расчета быстрых реакторов. Диссертация. Мелекес, 1971.

2. Х.Малэцки, Л.Б.Пикельнер, И.М.Саламатин, Э.И.Шарапов. Статистический анализ спиновой зависимости нейтронных силовых функций ядер. ОИЯИ Р3-4484, Дубна, 1969.

ПРОГРАММА РАСЧЕТА СЕЧЕНИЙ В ОБЛАСТИ НЕРАЗРЕШЕННЫХ РЕЗОНАНСОВ

Л.П.Абагян, М.Н.Николаев

Комплекс программ "НЕРПА" предназначен для получения подгрупповых параметров, позволяющих учитывать резонансную структуру сечений в области неразрешенных резонансов. "НЕРПА" включает в себя программы "РЕПА" и "СДМ" [1].

В программе "РЕПА" для заданной энергетической точки вычисляются моменты $\langle \sigma_x \sigma_x^n \rangle$ ($-5 \leq n \leq 3$). Угловые скобки означают усреднение по резонансной структуре в окрестности энергии E в предположении о справедливости статистических законов распределений ширин и расстояний между уровнями и в отсутствии корреляций между резонансными параметрами.

Исходной информацией программы "РЕПА" являются средние резонансные параметры для каждой системы уровней с данными спином J и четностью

λ :

- $\bar{\Gamma}_f^{J\lambda}$ - средняя радиационная ширина,
- $S^{J\lambda}$ - силовая функция,
- $\bar{\Gamma}_{in}^{J\lambda}$ - средняя ширина для неупругого рассеяния (или $\bar{\Gamma}_f^{J\lambda}$ - средняя делительная ширина).

Число систем уровней не должно превышать десяти. Для рассматриваемой энергии генерируются параметры квазислучайной последовательности 20 резонансов [2,3], которая описывается теоретическими распределениями отношений:

$$\frac{\Gamma_{n_i}^0}{\Gamma_n^0}; \quad \frac{\Gamma_{n,i}}{\Gamma_{in}} \left(\text{или} \frac{\Gamma_{ii}}{\Gamma_f} \right); \quad \frac{\partial \gamma_i}{\partial \gamma}; \quad \frac{\Gamma_{n_i}^0}{\Gamma_{n,i}^0}; \quad \frac{\Gamma_{n_i}^0}{\partial \gamma_i}$$

Таким образом, при расчете сечений учитываются флуктуации нейтронных ширин упругого и неупругого рассеяния, флуктуации расстояний между уровнями в предположении об отсутствии корреляций между параметрами соседних резонансов и между величинами нейтронной ширины и ширины неупругого рассеяния (или деления).

По параметрам 20 полученных резонансов рассчитывается резонансная структура сечений. При этом в рассматриваемую энергетическую точку помещается каждый из 20 резонансов поочередно.

Как и в программе "УРАН" [4] сечения описываются формулой Брайта-Вигнера с учетом эффекта Доплера и интерференции резонансного и потенциального рассеяния. При расчете сечений учитываются вклады 10 резонансов справа и 9 резонансов слева от рассматриваемого. На основе энергетического хода сечений для каждой системы уровней (J, λ) вычисляются

моменты $\langle \sigma_x^n \sigma_{t,\gamma} \rangle$ ($0 \leq n \leq 3$). Вычисление средних проводится путем интегрирования, методом трапеций соответствующих величин в пределах каждого из 20 уровней с последующим усреднением результатов по всем резонансам.

Из моментов, полученных для каждой системы уровней, составляются общие моменты $\langle \sigma_x \sigma_t^n \rangle$ (для $0 \leq n \leq 3$) в предположении о независимости систем уровней с разными спинами и четностью.

Для получения "отрицательных" моментов (т.е. $-5 \leq n < 0$) на основе энергетической зависимости сечений определяются полные (T) и парциальные (T_x) функции пропускания для каждой системы уровней (γ, κ) в зависимости от толщины t :

$$T^{(\gamma, \kappa)}(t) = \langle e^{-\sigma(E)t} \rangle$$

$$T_x^{(\gamma, \kappa)}(t) = \frac{1}{\Delta \sigma_x} \langle \sigma_x e^{-\sigma(E)t} \rangle$$

Далее по этим данным рассчитываются полные и парциальные функции пропускания с учетом всех рассматриваемых систем уровней.

При сделанном предположении о том, что положения и ширины резонансов, относящиеся к разным системам уровней, не коррелируют друг с другом, функции пропускания выражаются как:

$$T(t) = \prod_{\gamma, \kappa} T^{(\gamma, \kappa)}(t),$$

$$T_x(t) = T(t) \cdot \sum_{\gamma, \kappa} \frac{T_x^{(\gamma, \kappa)}(t)}{T^{(\gamma, \kappa)}(t)}.$$

Расчет функций пропускания ведется для 50 значений толщин t , выбираемых программой РЕПА таким образом, чтобы обеспечить приемлемую точность вычисления (по формуле Симпсона) интегралов:

$$\langle \frac{\sigma_x}{\sigma^k} \rangle = \frac{\langle \sigma_x \rangle}{(k-1)!} \int_0^\infty t^{k-1} T_x(t) dt$$

На основе полученных в программе РЕПА моментов по программе ССМ можно рассчитать подгрупповые параметры для каждой энергии в области неразрешенных резонансов.

Программа написана на языке АЛГОЛ-60. После трансляции на ТА-2 объем программы составляет ~ 4000 ячеек.

На расчет подгрупповых параметров в одной энергетической точке в случае 3-х систем уровней необходимо \approx 1 час времени ЭВМ М-220.

ЛИТЕРАТУРА

1. М.М.Савоськин, Э.Ф.Синица, В.В.Синица. Программа расчета подгрупповых параметров - СОМ. См. настоящий сборник.
2. Л.П.Абагян. Методы учета резонансных эффектов в групповых константах для расчета быстрых реакторов. Диссертация. Мелекес. 1971.
3. М.Н.Николаев, Л.П.Абагян, Л.В.Петрова, Т.А.Поплавская, Ж.А.Корчагина. Методика расчета групповых сечений в области неразрешенных резонансов. Доклад на Советско-французском симпозиуме. Мелекес, 1970.
4. Л.П.Абагян, М.Н.Николаев. Программа расчета сечений в резонансной области энергий - УРАН. Настоящий сборник.

ПРОГРАММА РАСЧЕТА СЕЧЕНИЙ В РЕЗОНАНСНОЙ ОБЛАСТИ
ЭНЕРГИЙ - "УРАН"

М.Н. Николаев, Л.П. Абагян

Программа "УРАН" предназначена для описания сечений неделящихся ядер в области разрешенных резонансов. Программа позволяет рассчитывать резонансную структуру полного сечения ($\bar{\sigma}_t$), сечения захвата ($\bar{\sigma}_c$) и упругого рассеяния ($\bar{\sigma}_s$). Сечения рассчитываются на основе формулы Брайта-Вигнера с учетом эффекта Доплера.

$$\bar{\sigma}_t(E) = \bar{\sigma}_p + \sum_j \bar{\sigma}_{m,j}(E) [\chi_j(E, T) \cos(2\psi_j(E)) + \chi_j(E, T) \sin(2\psi_j(E))];$$

$$\bar{\sigma}_c(E) = \sum_j \bar{\sigma}_{m,j}(E) \chi_j(E, T) \cdot \frac{\Gamma_{c,j}}{\Gamma_j},$$

где $\bar{\sigma}_p$ - сечение потенциального рассеяния;
 $\bar{\sigma}_{m,j}$ - сечение в максимуме резонанса, умноженное на концентрацию изотопа;
 χ, ψ - функции доплеровского уширения резонанса;
 ψ - фаза интерференции резонансного и потенциального рассеяния - рассчитывается из сечения, обусловленного соседними резонансами той же системы уровней, что и данный, и сечения потенциального рассеяния.

Программа "УРАН" позволяет рассчитывать сечения для смеси изотопов. Кроме энергетического хода сечений программа позволяет в заданных интервалах энергий (группах) получать:

- а) среднегрупповые сечения $\bar{\sigma}_t$, $\bar{\sigma}_c$, $\bar{\sigma}_s$;
- б) коэффициенты самоэкранировки в зависимости от температуры среды (Т) и от сечения разбавления ($\bar{\sigma}_0$) данного элемента другими нерезонансными элементами $f_t(T, \bar{\sigma}_0)$, $f_c(T, \bar{\sigma}_0)$; $f_s(T, \bar{\sigma}_0)$ (см. работу [1]);
- в) полные и парциальные функции пропускания в зависимости от толщины образца:

$$T(t) = \frac{\int e^{-\bar{\sigma}_t(E)t} \phi(E) dE}{\int \phi(E) dE},$$

$$T_x(t) = \frac{1}{\bar{\sigma}_x} \int \bar{\sigma}_x^{-1}(E) e^{-\bar{\sigma}_t(E)t} \phi(E) dE;$$

г) моменты вида $\bar{\sigma}_t^m$ и $\bar{\sigma}_x \bar{\sigma}_t^n$ для $-5 \leq m \leq -1$; $-5 \leq n \leq 3$.
Все усреднения по энергии в пределах группы проводятся методом трапеций

по спектру $\Phi = E^R$ (R - любое задаваемое число). Выбор метода интегрирования обусловлен переменным шагом по энергии.

В программе "УРАН" предусмотрена возможность одновременного расчета сечений в 10 энергетических группах, которые могут содержать до 60 резонансов.

Энергетические точки выбираются в соответствии с формой σ_t и их количество может достигать 200 в каждом резонансе.

Коэффициенты самоэкранировки могут быть рассчитаны для 5 значений температуры и 7 различных значений b_0 .

Программа написана на языке АЛГОЛ-60. После трансляции на ТА-2 объем программы составляет ~ 4000 ячеек. Время работы при полном объеме выдачи составляет ~ 1 мин. на резонанс. Предварительный текст и результаты расчетов по программе "УРАН" опубликованы в работах [2], [3].

Некоторые блоки программы в настоящее время усовершенствованы и осуществлена привязка к программе "СОМ" (совместная обработка моментов) для расчета подгрупповых констант [4].

ЛИТЕРАТУРА

1. Л.П.Абагян, Н.О.Базазянц, И.И.Бондаренко, М.Н.Николаев. Групповые константы для расчета ядерных реакторов. Атомиздат, М., 1964.
2. Л.П.Абагян, М.Н.Николаев, Л.В.Петрова. УРАН-программа расчета сечений и коэффициентов гомогенной резонансной самоэкранировки в области разрешенных резонансов. БИЦЯД, вып. III, 418, Атомиздат, М., 1966.
3. Л.П.Абагян, М.Н.Николаев, Л.В.Петрова. Расчет сечений урана-238 по программе "УРАН". БИЦЯД, вып. IV, 392, Атомиздат, М., 1967.
4. М.М.Савоськин, Э.Ф.Синица, В.В.Синица. Программа расчета подгрупповых параметров - СОМ. См. настоящий сборник.

ПРОГРАММА РАСЧЕТА ПРОПУСКНИЙ В РЕЗОНАНСНОЙ ОБЛАСТИ
ЭНЕРГИЙ - "ЭЗАП"

Л.П.Абагян, М.Н.Николаев

Программа "ЭЗАП" (энергетическая зависимость пропусканий) предназначена для описания энергетической зависимости пропусканий в области разрешенных резонансов неделящихся ядер.

Как и в программе "УРАН" [1], резонансная структура полного сечения рассчитывается по формуле Брайта-Вигнера с учетом эффекта Доплера и интерференции потенциального и резонансного рассеяния. Считается, что энергетическое разрешение изменяется по закону:

$$\Delta E = \kappa \cdot E^{3/2} \text{ (эВ)}, \quad \text{где}$$

κ - коэффициент, вводимый в программу. При расчете сечений доплеровское уширение резонансов Δ увеличивается на энергетическое разрешение ΔE . На основе энергетического хода полного сечения рассчитывается функция пропускания для заданной толщины образца - tol

$$T(E) = e^{-\sigma_t(E) \cdot tol}$$

В программе ЭЗАП предусмотрена возможность одновременного расчета сечений для 100 резонансов. Расчетные точки по энергии выбираются в соответствии с формой σ_t и их количество может достигать 200 в каждом резонансе.

Расчет сечений и пропусканий может проводиться для пяти различных температур. Программа написана на языке АЛГОЛ-60. После трансляции на ТА-2 объем программы составляет ~ 3000 ячеек. Время работы программы ЭЗАП составляет ~ 1 мин на резонанс.

ЛИТЕРАТУРА

1. М.Н.Николаев, Л.П.Абагян. Программа расчета сечений в резонансной области энергий - УРАН. См. настоящий сборник.

ПРОГРАММА МНОГОУРОВНЕВОГО РАСЧЕТА СЕЧЕНИЙ ПО
РЕЗОНАНСНЫМ ПАРАМЕТРАМ - "МУФ"

Л.П.Абагян, М.Н.Николаев, В.В.Синица

Программа "МУФ" предназначена для описания сечений неделящихся ядер в области разрешенных резонансов. Программа позволяет рассчитывать резонансную структуру полного сечения (σ_t), сечения захвата (σ_c) и упругого рассеяния (σ_s) для смеси изотопов. Программа предназначена для расчета сечений тех ядер, для которых эффектом Доплера можно пренебречь.

В основу программы "МУФ" положена многоуровневая формула, полученная в рамках формализма Вигнера-Айзенбуда [1].

$$\sigma_t(E) = 4\pi\lambda^2 \sum_l (2l+1) \sin^2 \psi_l + 4\pi\lambda^2 \sum_l g_l \frac{(B_1 + B_1^2 + B_2^2) \cos 2\psi_l - B_2 \sin 2\psi_l}{(1+B_1)^2 + B_2^2},$$

$$\sigma_c(E) = 4\pi\lambda^2 \sum_l g_l \frac{B_1}{(1+B_1)^2 + B_2^2},$$

где $B_1 = \sum_l \frac{\Gamma_{ni}/\Gamma_{yl}}{1 + (2 \frac{E_{oi}-E}{\Gamma_{yl}})^2}$, $B_2 = \sum_l \frac{\Gamma_{ni}/\Gamma_{yl} (2 \frac{E_{oi}-E}{\Gamma_{yl}})}{1 + (2 \frac{E_{oi}-E}{\Gamma_{yl}})^2}$

λ - длина волны нейтрона,

g_l - статистический вес состояния с данным l .

Для каждой системы уровней l задаются также:

b_l - доля изотопа в рассматриваемой смеси,

A_l - атомный вес изотопа.

Если ψ_l - фаза рассеяния на отражающей сфере.

$$\psi_0 = \kappa r,$$

$$\psi_1 = \kappa r - \text{arctg}(\kappa r),$$

$$\psi_2 = \kappa r - \text{arctg}\left(\frac{3\kappa r}{1-(\kappa r)^2}\right),$$

где r - радиус взаимодействия, κ - волновое число.

Приведенная выше формула получена в приближении большого числа независимых радиационных каналов и одноканального упругого рассеяния.

Кроме детального энергетического хода сечений программа МУФ позволяет в заданных интервалах энергий (группах) получать:

- а) среднегрупповые сечения $\langle \sigma_t \rangle$, $\langle \sigma_c \rangle$, $\langle \sigma_s \rangle$;
- б) коэффициенты самоэкранировки f_t , f_c , f_s (см. [2]) в зависимости от сечения разбавления (σ_0) данного элемента другими нерезонансными элементами;
- в) полные и парциальные функции пропускания в зависимости от толщины образца:

$$T(t) = \frac{1}{\Delta E} \int_{\Delta E} e^{-\sigma(E)t} E^R dE,$$

$$T_x(t) = \frac{1}{\langle \sigma_x \rangle \Delta E} \int_{\Delta E} \sigma_x(E) e^{-\sigma(E)t} E^R dE,$$

г) моменты $\langle \sigma_x \sigma^n \rangle$, где

$$x \leq 3$$

$$-5 \leq n \leq 3$$

R определяет форму внутригруппового спектра, с весом которого производится усреднение. Интегралы по группам вычисляются методом трапеций. В программе МУФ предусмотрена возможность одновременного расчета сечений в 26 группах, которые могут содержать до 100 резонансов. Расчетные энергетические точки выбираются в соответствии с формой полного сечения и их количество может достигать 200 в каждом резонансе. Коэффициенты самоэкранировки могут быть рассчитаны для 7 различных σ_0 .

Получаемые в данной программе моменты могут служить исходной информацией для программы СОМ [3]. Таким образом, комплекс программ МУФ и СОМ позволяют рассчитывать подгрупповые константы.

Программа МУФ написана на языке АЛГОЛ-60 (ТА-2). Объем программы в кодах составляет ~ 4000. Время работы при полном объеме выдачи составляет ~ 1 минута на резонанс. Текст программы и расчет по ней будут опубликованы в работе [4].

ЛИТЕРАТУРА

1. А.А.Лукьянов. Приближенная многоуровневая модель нейтронных сечений в резонансной области. Препринт ФЭИ-124 (1968).
2. Л.П.Абагян, Н.О.Базаянц, И.И.Бондаренко, М.Н.Николаев. Групповые константы для расчета ядерных реакторов. Атомиздат, 1964.
3. М.М.Савоськин, Э.Ф.Синица, В.В.Синица. Программа расчета подгрупповых параметров. Настоящий сборник.
4. Л.П.Абагян, М.Н.Николаев, В.В.Синица. МУФ-программа многоуровневого расчета сечений неделящихся ядер по резонансным параметрам. "Ядерные константы", вып.9, 146 (1972).

ПРОГРАММА УСРЕДНЕНИЯ СЕЧЕНИЙ

В.В.Синица

(Программа Усреднения Сечений для АРАМАКО Каталога)

Программа "ПРУССАК" - представляет собой комплекс из двух программ, позволяющий на основе известной детальной энергетической зависимости сечений получать в заданных энергетических интервалах (группах) следующие величины:

- а) среднегрупповые сечения $\langle \sigma_x \rangle$, где скобки $\langle \rangle$ означают усреднение по группе с весом $\mathcal{Y}_g(E)$;
- б) коэффициенты самоэкранировки в зависимости от сечения разбавления (σ_0) данного элемента другими нерезонансными изотопами (см. [2])
- в) моменты $\langle \sigma_x \sigma^n \rangle$, нужные для расчета подгрупповых констант [3], где

$$x \leq 3$$

$$-5 \leq n \leq 3$$

В каждой группе предусмотрена возможность усреднения по одному из трех видов спектров:

- 1) по спектру $\mathcal{Y}_g = E^R$, $|R| < 7$;
- 2) по спектру деления

$$\mathcal{Y}_g = 2 \exp\left(-\frac{\sqrt{E}}{T}\right) \operatorname{th}(\sqrt{bE});$$

$$\text{где } T = 0,965(0,76 + 0,1\nu);$$

$$b = 2,29/(0,76 + 0,1\nu)^2;$$

E - энергия (Мэв)

ν - число вторичных нейтронов.

3) по произвольному спектру, заданному по точкам (число энергетических точек не более 200). Интегрирование производится методом трапеций.

Ограничений по количеству точек в массивах E и σ нет. Число групп не должно превышать 100. Энергии E могут быть заданы в эв, кэв и Мэв. Программа рассчитана на ЭЕМ М-220.

Программы комплекса помещены на магнитный барабан МБ-1. Нулевая программа комплекса производит подготовку информации о детальном ходе сечения для записи на магнитный барабан МБ-2 и запись на барабан в порядке, необходимом для работы первой программы. Первая программа вычисляет перечисленные выше интегралы и производит выдачу на печать. Если использована не вся информация, происходит переход к нулевой программе. Нулевая программа вводит следующую порцию исходных данных и т.д.

В зависимости от полноты набора сечений предусмотрены следующие режимы работы программы:

1. Набор сечений полный, т.е. содержит полное сечение (σ_t) и все парциальные сечения (σ_x). В этом случае определяется полный набор групповых констант и моментов, усредненных по заданному спектру.

2. В наборе сечений недостает лишь одного парциального сечения, которое можно рассчитать как $\sigma_t(E) - \sum \sigma_x(E)$. В этом случае также определяется полный набор групповых констант и моментов, усредненных по требуемому спектру.

3. Имеется неполный набор сечений, содержащий σ_t . В этом случае полный набор групповых констант и моментов, усредненных по требуемому спектру, определяется лишь для сечений заданных реакций.

4. Набор сечений не содержит σ_t . В этом случае коэффициенты самоэкранировки и моменты не определяются. На печать выдаются лишь усредненные по требуемому спектру групповые сечения.

Получаемые в данной программе моменты могут служить исходной информацией для программы получения подгрупповых параметров COM.

Текст программы ПРУССАК написан на языке АЛГОЛ-60 (ТА-2). При объеме исходной информации ~ 4000 время работы программы составляет ~ 20 минут.

ЛИТЕРАТУРА

1. В.Ф.Хохлов, М.М.Савоськин, М.Н.Николаев. БИЦЯД, вып. У1, приложение, т. 2, стр. 7. Атомиздат, М., 1971.
2. Л.П.Абагян, Н.О.Базазянц, И.И.Бондаренко, М.Н.Николаев. Групповые константы для расчета ядерных реакторов. М., Атомиздат, 1964.
3. М.М.Савоськин, Э.Ф.Синица, В.В.Синица. Программа расчета подгрупповых параметров - COM. Настоящий сборник, стр. 42.

ПРОГРАММА РАСЧЕТА ПОДГРУППОВЫХ ПАРАМЕТРОВ - "СОМ"

М.М.Савоськин, Э.Ф.Синица, В.В.Синица

Программа "СОМ" (Совместная Обработка Моментов) предназначена для расчета подгрупповых параметров на основе моментов сечений: $\langle \sigma_x \sigma^n \rangle$. Угловые скобки означают усреднение по некоторому интервалу энергий, x - номер реакции, $x \leq 3$,

$$-5 \leq n \leq 3.$$

Подгрупповые параметры [1,2] определяются как набор вероятностей Q_i (называемых долями подгрупп) иметь в интервале усреднения полное сечение σ_i и соответствующие сечения реакций σ_{xi} . Подгрупповые параметры подбираются таким образом, чтобы сохранить с точностью не хуже заданной набор моментов сечений.

Расчет подгрупповых параметров проводится путем аналитического решения системы уравнений (см., [3]):

$$\langle \sigma_x \sigma^n \rangle = \sum a_i \sigma_{xi} \sigma_i^n; \quad n_1 \leq n \leq n_2$$

Величины n_1, n_2 определяются числом подгрупп и фиксированы в программе. Подгрупповые параметры определяются последовательно для одной, двух, трех и четырех подгрупп. Переход к большему числу подгрупп осуществляется в том случае, если моменты, окаймляющие систему, восстанавливаются при помощи полученных из этой системы подгрупповых параметров с точностью, хуже заданной.

Программа "СОМ" написана на языке АЛГОЛ-60 (ТА-2). Объем программы составляет ~ 1500 р. Время, необходимое для определения подгрупповых параметров из найденных моментов ≈ 2 минут.

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. М.Н.Николаев, А.А.Игнатов, Н.В.Исаев, В.Ф.Хохлов. Метод подгрупп для учета резонансной структуры сечений в нейтронных расчетах (часть I). "Атомная энергия" 29, I, 1970.
2. М.Н.Николаев, А.А.Игнатов, Н.В.Исаев, В.Ф.Хохлов. Метод подгрупп для учета резонансной структуры сечений в нейтронных расчетах (часть II). "Атомная энергия" 30, 5, 1971.
3. Р.Беллман. Введение в теорию матриц. "Наука", М., 1969.

ПРОГРАММА РАСЧЕТА СРЕДНЕГРУППОВЫХ ЗНАЧЕНИЙ УГЛОВЫХ МОМЕНТОВ
СЕЧЕНИЯ РАССЕЯНИЯ И ФУНКЦИЙ ПРОПУСКАНИЯ - "УМБЛОК"

М.Н. Николаев, Н.О. Базазянц

Программа "УМБЛОК" предназначена для усреднения угловых моментов сечения рассеяния (B_m) и расчета функций пропускания (*см. Тк*).

Программа позволяет производить усреднение для любого энергетического разбиения с числом групп, не превышающем 50. В программе имеется возможность усреднения 8-и угловых моментов при задании не более 450 точек в каждом из массивов - как энергетическом (E), так и угловых моментов (B_m).

Если необходимо, в программе "УМБЛОК" усреднение угловых моментов может производиться по спектру (ψ_m), учитывающему резонансную структуру сечений [1] :

$$\psi_m(E') = \varphi(E') \cdot \sum_{n=0}^m a_{m-n} \cdot \frac{1}{\Sigma^{n+1}(E')}, \quad (1)$$

(Σ - полное сечение среды).

Коэффициенты a_m вычисляются по рекуррентной формуле:

$$a_0 = 1, \\ a_m = \left(\sum_{n=0}^{m-1} a_{m-n-1} \left\langle \frac{B_m(E')}{\Sigma^{n+2}(E')} \right\rangle \right) / \left(1 - \left\langle \frac{B_m(E')}{\Sigma(E')} \right\rangle \right); \quad (2)$$

а формулы усреднения имеют вид:

$$\langle B_m \cdot \psi_m \rangle = \sum_{n=0}^m a_{m-n} \left\langle \frac{B_m}{\Sigma^{n+1}} \right\rangle, \quad (3)$$

где знак $\langle \rangle$ означает усреднение по "стандартному" спектру $\varphi(E')$, который рассчитывается в соответствии с работой [2] следующим образом:

$$\begin{array}{l} \text{ниже энергии } 2,5 \text{ Мэв} \\ \varphi(E') = (E')^{R_i} \end{array} \quad (4)$$

где R_i - действительное число $|R_i| \leq 9$ (i - номер рассматриваемой группы);

выше энергии 2,5 Мэв:

$$\varphi(E') = \sqrt{\frac{4}{\pi a^2 b}} \cdot e^{-\frac{a \cdot b}{4}} \cdot e^{-E/a} \cdot \text{sh} \sqrt{b E'}, \quad (5)$$

(спектр Уатта)

Здесь $\alpha = 0,965 (0,76 + 0,1 \cdot \sqrt{v})$
 $\beta = 2,29 / (0,76 + 0,1 \cdot \sqrt{v})^2$;

ν - среднее число вторичных нейтронов, испускаемых при делении.

В случае слабо выраженной резонансной структуры сечений спектр $\psi(E) \rightarrow \varphi(E)$, и усреднение угловых моментов в программе ведется только по стандартному спектру.

В программе рассчитываются функции пропускания вида:

$$\text{sum } T [l] = \frac{\int_{\Delta E_l} \ell^{-\Sigma(E) t_l [l]} \psi(E) dE}{\int_{\Delta E_l} \psi(E) dE}, \quad (6)$$

$$\text{sum } TK^m [l] = \frac{\int_{\Delta E_l} B_m(E) \ell^{-\Sigma(E) t_l [l]} \psi(E) dE}{\int_{\Delta E_l} B_m(E) \varphi(E) dE} \quad (7)$$

$$(m = 0, 1, \dots, 7)$$

$t_l [l]$ толщина образца ($tol [l]$), отнесенная к среднегрупповому полному сечению ($\sigma_{g [l]}$), l - номер рассматриваемой группы:

$$t_l [l] = \frac{tol [l]}{\sigma_{g [l]}} ; \quad l = 1, 2, \dots, 40 \quad (8)$$

$tol [l]$ выбирается таким образом, чтобы достаточно подробно описать форму кривой пропускания в широком диапазоне толщин.

Программа написана на языке АЛГОЛ-60 (ТА-2), занимает 2078₈ ячеек. Время счета одного варианта вместе с вводом исходных данных и выдачей результатов расчета составляет \sim 8 минут и определяется в основном вводом и выводом информации.

ЛИТЕРАТУРА

1. Л.П.Абагян, Ф.Ф.Михайлус, М.Н.Николаев, В.В.Орлов. Распространение резонансных нейтронов в гомогенных средах. БИЯД. Приложение, Атомиздат, 1968.

2. Л.П.Абагян, Н.О.Базазяц, И.И.Бондаренко, М.Н.Николаев. Групповые константы для расчета ядерных реакторов. М., Атомиздат, 1964.

ПРОГРАММА РАСЧЕТА МНОГОГРУППОВЫХ МАТРИЦ УГЛОВЫХ МОМЕНТОВ
СЕЧЕНИЯ УПРУГОГО И НЕУПРУГОГО РАССЕЯНИЯ НЕЙТРОНОВ С
УЧЕТОМ САМОЭКРАНИРОВКИ
"МАННЕРС"

Н.О.Базазянц, Старостенко М.В.*

Программа "МАННЕРС" предназначена для расчета матриц упругого и неупругого замедления нейтронов при произвольной анизотропии рассеяния с точным учетом потери энергии на отдачу ядра-продукта, для любого разбиения энергетического интервала на группы. Программа может рассчитывать любое число моментов, ограничивается возможностями данной ЭВМ, в настоящее время программа включает расчет 6-ти моментов. В программе предусмотрен учет резонансной структуры сечений.

l -ый момент вероятности неупругого рассеяния нейтрона из группы i в группу j , рассчитываемый в программе МАННЕРС в многогрупповом приближении имеет следующий вид (см. [1]):

$$W_{m(ij)}^{l \rightarrow j} = \frac{\sigma_{in}^{l \rightarrow j}}{\sigma_{in}^l} = (2m+1) \cdot \sum_{k=1}^K \frac{\sum_{E_0=0}^{\infty} \int_{E_l}^{E_{l+1}} \int_{E_l}^{E_{l+1}} \sigma_{in}(E, E_0^k) \cdot \omega_l^k(E') dE'}{2 q_l \int_{E_l}^{E_{l+1}} \sigma_{in}(E') \cdot F_0(E') dE'} \int_{\mu_k(E_{jk-1}, E')}^{\mu_k(E_{jk}, E')} P_l(\mu_k) P_m(\mu_k) d\mu_k \quad (1)$$

где $\sigma_{in}^l = \frac{\int_{E_l}^{E_{l+1}} \sigma_{in}(E') F_0(E') dE'}{\int_{E_l}^{E_{l+1}} F_0(E') dE'}$ - среднегрупповое сечение неупругого рассеяния;

$$\mu_k = \cos \theta_k = \frac{A+1}{2} \sqrt{\frac{E}{E'}} - \frac{A-1}{2} \sqrt{\frac{E'}{E}} + \frac{A}{2} \cdot \frac{E_0^k}{\sqrt{E E'}} \quad (2)$$

E' - энергия нейтрона до рассеяния;

E - энергия нейтрона после рассеяния;

E_0^k - энергия k -го уровня возбуждения ядра-мишени;

$\sigma_{in}(E, E_0^k)$ - сечение неупругого рассеяния нейтрона с энергией E' на уровне E_0^k (упругое рассеяние рассматривается как неупругое на уровне с нулевой энергией возбуждения);

$$\omega_l^k = (2l+1) \frac{\int_{-1}^{+1} \sigma_{in}(E', \mu_k) P_l(\mu_k) d\mu_k}{\int_{-1}^{+1} \sigma_{in}(E', \mu_k) d\mu_k}, \quad (3)$$

* Обнинский филиал МИФИ

$P_l(\mu_k)$ и $P_m(\mu_k)$ - полиномы Лежандра;
 k - индекс лабораторной системы координат;
 \bar{E}_i и \bar{E}_{i-1} - границы той области энергий в группе i ,
откуда возможно рассеяние в группу j^k ;
 \bar{E}_{jk} и \bar{E}_{j^k-1} - границы той области энергий в группе j^k ,
откуда возможно попадание нейтронов, рассеянных из группы i .
 $F_m(E)$ - спектр m -ой гармоники нейтронного потока в
среде. Предполагается, что в пределах рассматриваемых энергетических групп
этот спектр не зависит от пространственных координат.

$$F_m \sim \varphi_m(E, \vec{r}) \sum_{n=0}^m a_{m-n} \frac{1}{\Sigma^{(n)}(E)}, \quad (4)$$

где $\varphi_m(E, \vec{r})$ - плавно меняющаяся функция энергии и координат. В про-
грамме МАННЕРС принимается, что эта функция не зависит ни от координат,
ни от m :

$$\varphi_m(E, \vec{r}) = \varphi(E) \quad (5)$$

коэффициенты a_{m-n} в программе МАННЕРС не рассчитываются, а в
случае необходимости учета резонансной структуры они считаются в програм-
ме ЭМБЛОК 4.

В программе МАННЕРС спектр $\varphi(E)$ может иметь либо форму

$$\varphi(E) = E^{R_L} \quad (6)$$

где R_L - действительное число $|R_L| \leq 0$;
либо

$$\varphi(E) = \sqrt{\frac{4}{\pi a^2 b}} \cdot e^{-\frac{ab}{4}} \cdot e^{-E/a} \operatorname{erfc} \sqrt{bE} \quad (7)$$

(спектр Уатта)

$$\begin{aligned} a &= 0,965(0,76 + 0,1 \nu) ; \\ b &= 2,29/(0,76 + 0,1 \nu)^2, \end{aligned} \quad (8)$$

ν - среднее число вторичных нейтронов, испускаемых при деле-
нии.

Программа написана на языке АЛГОЛ-60 (ТА-2М), транслированная про-
грамма занимает 2734₈ ячеек без учета массивов исходных данных. Время сче-
та одного варианта (шести моментов матрицы замедления в 26-ти групповом
разбиении [2]) составляет $\sim 40'$ при дополнительном разбиении интервала
между двумя заданными точками на 400 частей и при полном числе заданных
энергетических точек ~ 80 .

В программе МАННЕРС имеется возможность последовательного счета произвольного числа вариантов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Н.О.Базазянц, А.С.Забродская, М.Н.Николаев. Групповые параметры анизотропии рассеяния нейтронов. "Ядерные константы", вып. 8, часть 2, стр. 3. ЦНИИАТОМИНФОРМ, М., 1972 г.
2. Л.П.Абагян, Н.О.Базазянц, И.И.Бондаренко, М.Н.Николаев. Групповые константы для расчета ядерных реакторов. М., Атомиздат, 1964 г.
3. М.Н.Николаев, Н.О.Базазянц. Программа расчета среднегрупповых угловых моментов сечения рассеяния и функций пропускания - "УМБЛОК." Настоящий сборник, стр. 43.

ПРОГРАММА КРИТС ДЛЯ КОРРЕКЦИИ ГРУППОВЫХ КОНСТАНТ ПО
ДАННЫМ ИНТЕГРАЛЬНЫХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ

М.Н.Николаев, Н.О.Базазянц, Л.В.Горбачева

Программа КРИТС позволяет вычислить поправки к групповым сечениям основных реакторных материалов, позволяющие в известном смысле наилучшим образом согласовать результаты расчета ряда нейтронно-физических характеристик критических сборок с результатами их экспериментального определения, не отклоняясь при этом за пределы оцененных ошибок групповых констант.

В программе КРИТС предусмотрена возможность учета корреляций между допустимыми изменениями различных сечений в различных группах. Учет корреляции производится путем параметризации хода корректируемых сечений.

Пусть $\bar{\sigma}_g(E, \bar{a}^g)$ - параметрическая аппроксимация хода сечения S -ой реакции, оцененного по имеющимся ядерным данным. Групповые константы ищутся в виде:

$$\bar{\sigma}^g = \bar{\sigma}_0^g + \hat{T}^g \bar{\delta a}^g \quad (1)$$

где компонентами вектора $\bar{\sigma}^g$ являются групповые константы всех рассматриваемых реакций во всех группах:

$\bar{\sigma}^g$ - искомый вектор откорректированных констант;

\hat{T}^g - матрица производных групповых констант по параметрам;

$\bar{\delta a}^g$ - вектор поправок к параметрам, который должен быть определен в процессе коррекции.

$\bar{\sigma}_0^g$ определяются непосредственно из оцененных данных. Таким образом, параметрическое описание энергетических зависимостей сечений используется лишь для вычисления матрицы \hat{T}^g . Поэтому от параметрической аппроксимации не требуется передачи деталей энергетического хода сечений; нужно лишь описать основные закономерности этого хода.

Определение поправок $\bar{\delta a}^g$ производится путем минимизации квадратичного функционала:

$$S = \sum_j \frac{1}{\Delta^2 k_j} (K_j^0 - 1 + \sum_g \chi \alpha_s^{jg} \cdot \frac{1}{\sigma_s^{jg}} \sum_n T_{sn}^{jg} \delta a_n)^2 + \sum_g \frac{(\sigma_s^{jg})^2}{\Delta^2 \sigma_s^{jg}} \left[\frac{\sigma_s^{jg} \sum_n T_{sn}^{jg} \delta a_n}{\sigma_s^{jg}} \right]^2 \quad (2)$$

Здесь K_j^0 - отношение расчетного и экспериментального значений j -го интегрального параметра (функционала потоков и (или) ценностей);

$\Delta^2 k_j$ - дисперсия этого отношения;

$\chi \alpha_s^{jg}$ - коэффициент чувствительности j -го функционала к изменению s -го сечения в g -той группе [1].

В первом члене предусмотрена возможность учета зависимости групповых констант от состава критсборки (эта зависимость обусловлена эффектами ре-

зонансной и (или) гетерогенной блокировки сечений).

Во втором, регуляризирующем члене фигурируют незаблокированные сечения. Использование для регуляризации групповых сечений (а не параметров $\bar{\alpha}$) связано со сложностью определения корреляционной матрицы ошибок этих параметров. Неучет корреляций ошибок групповых констант в регуляризирующем члене не ведет к искажению результата расчета. Эти корреляции автоматически учитываются при определении поправок к сечениям через поправки к параметрам (см. (I)).

Вектор $\bar{\alpha}$ определяется путем решения системы линейных уравнений, получающихся путем приравнивания производных $\partial \chi^2 / \partial \alpha_k$ к нулю. Обратная матрица системы является матрицей ошибок откорректированных параметров. Откорректированные значения групповых констант вычисляются по формуле (I). Матрица ошибок групповых констант в программе не вычисляется, так как она может быть при необходимости легко получена из более компактных матрицы ошибок параметров и матрицы \hat{T} .

Программа КРИТС привязана к каталогу коэффициентов чувствительности СЭМАФОР-1 [2], а также согласована с программами СИГМА-1 и СИГМА-2, определяющими полиномиальную параметризацию энергетического хода сечений в нерезонансной области и вычисление матрицы \hat{T} для найденных параметров.

Элементы матрицы \hat{T} , соответствующие резонансной области, должны вводиться в программу в качестве исходных данных. При этом для урана-238 могут быть использованы данные работы [3].

Программа написана на языке АЛГОЛ-60 (1А-2). Максимальное число параметров $n = 15$. Максимальное число энергетических групп, в которых коэффициенты $\chi_{a_j}^{i,j}$ существенны = 15. Число функционалов χ_j неограничено. Время счета типичного варианта - 10'.

ЛИТЕРАТУРА

1. Л.Н.Усачев, С.М.Зарицкий. Точность расчета характеристик быстрых реакторов в зависимости от точности элементарных констант. Конференция по ядерным данным. Париж, 1966.

2. С.М.Зарицкий. Обобщенная теория возмущений и некоторые задачи физики быстрых реакторов. Диссертация. Мелекес. 1970.

3. Л.П.Абагян и др. Влияние величины средних резонансных параметров на заблокированные сечения урана-238. БЖД, вып. 8, часть I, стр. 154, 1972 г.

РАСЧЕТ СФЕРИЧЕСКОГО ПРОПУСКАНИЯ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

М.В.Орлов, А.М.Дибуля

Программы серий "АПУЛРОКС" и "СКОРЛУПА" предназначены для расчета сферических пропусканий методом Монте-Карло в обратной (серия "АПУЛРОКС") и прямой (серия "СКОРЛУПА") геометриях. Имеется возможность одновременно или порознь учитывать следующие эффекты:

1. Резонансную структуру сечений материала сферы в подгрупповом приближении;
2. Замедление (упругое и неупругое) нейтронов в рамках многогруппового подхода с учетом деления и реакции (ν, ν_n) в транспортном приближении (26 групп);
3. Анизотропию рассеяния нейтронов (индикатриса рассеяния задается в виде разложения по полиномам Лежандра до 5-го порядка);
4. Конечные размеры детектора и депрессия потока за счет поглощения нейтронов в детекторе;
5. Конечность расстояния детектор-источник. Возможности отдельных программ указаны в таблице.

Название	1	2	3	4	5	$\Delta T/T$	t
СКОРЛУПА I (2)	X					σ	I'
СКОРЛУПА II		X				σ	I'
СКОРЛУПА IV (3)	X	X				σ	I'
АПУЛРОКС I (2)	X		X	X		$\frac{R_2}{R_d} \sigma$	80'
АПУЛРОКС II (2)	X		X	X		$\frac{R_2}{R_d} \sigma$	10'
АПУЛРОКС III	X	X	X	X		$\frac{R_2}{R_d} \sigma$	5'
АПУЛРОКС IV (3)	X	X	X	X	X	$\leq \sigma$	4'
АПУЛРОКС VП	X	X	X	X	X	$\leq \sigma$	4'

В скобках первого столбца указывается число подгрупп. $\Delta T/T$ - относительная ошибка в пропускании. $\sigma = 1/\sqrt{N \cdot T}$, где N - число разыгрываемых историй. T - время счета десяти тысяч историй при толщине сферы, равной одной длине свободного пробега.

Многогрупповые программы рассчитывают вероятности регистрации нейтронов (P_i) i -ой группы спектра источника при заданной эффективности детектора (ϵ_i) и вероятности регистрации нейтронов (K_i) в i -ой группе детектора при заданном спектре источника (S_i).

$$T = \sum_i P_i \cdot S_i / \sum_i S_i = \sum_i K_i \cdot S_i / \sum_i \epsilon_i$$

Однoгрупповые программы, кроме программы "СКОРЛУПА-I" рассчитывают вероятности регистрации нейтронов $P_{em}(R_{em})$, принадлежавших первой (второй) подгруппе до попадания в сферу, испытавших "e" соударений и побывавших "m" раз во второй (первой) подгруппе. Сечение поглощения в этом случае считается равным 0. Эти вероятности позволяют записать аналитическое выражение пропускания для сферы с поглощением (T). Относительная ошибка в эффекте поглощения ($\sigma = T_0 - T$), где T_0 - пропускание сферы без поглощения, равна относительной ошибке в T.

В однoгрупповой программе "СКОРЛУПА-I" рассчитывается пропускание нейтронов одной группы с учетом поглощения в материале сферы и возможного увода нейтронов за пределы группы за счет замедления.

Все программы написаны на языке АЛГОЛ-60. Время работы указано в таблице.

СОЮТ-СИСТЕМА ПРОГРАММ ПО ПЛАНИРОВАНИЮ ЭКСПЕРИМЕНТОВ И
ОПРЕДЕЛЕНИЮ ПОТРЕБНОСТЕЙ В ТОЧНОСТЯХ ИЗМЕРЕНИЙ ОЦЕНОК
ЯДЕРНО-ФИЗИЧЕСКИХ КОНСТАНТ ДЛЯ ОБЕСПЕЧЕНИЯ РЕАКТОРНЫХ
РАСЧЕТОВ С ТРЕБУЕМОЙ ТОЧНОСТЬЮ

Ю.Г.Бобков

В рамках системы могут быть решены следующие задачи:

1. Планирование оптимальной совокупности микроэкспериментов и оценок для обеспечения заданной точности расчета реакторного параметра.
2. Планирование интегральных измерений, что включает в себя исследование информативности эксперимента или набора экспериментов по отношению к какому-то реакторному параметру, определение необходимых точностей эксперимента и поиск наилучшего набора экспериментов по отношению к какому-то реакторному параметру.
3. Предсказание реакторных параметров и их дисперсий на основе совокупности микро- и макроэкспериментов и подгонка групповых параметров для наилучшего описания набора экспериментов.
4. Совместное планирование дифференциальных и интегральных экспериментов.

Все процедуры написаны на языке "АЛГОЛ," применительно к транслятору ТА-1М.

Число независимых параметров при решении всех перечисленных задач - 190_{10} . При незначительной передаче число параметров может быть доведено до 2000_8 .

ЛИТЕРАТУРА

1. Ю.Г.Бобков. СОЮТ - система программ по планированию экспериментов. Отчет ФЭИ ТР-1007, 1972 г.

СОДЕРЖАНИЕ

	Стр.
I. <u>Физико-энергетический институт</u>	
1. А.Г.Довбенко, В.Е.Колесов. Программа расчета нейтронных сечений по оптической модели ядра (ПРС-2).....	3
2. В.М.Бычков, В.И.Попов. Программа "РОПТ".....	5
3. В.И.Попов, В.М.Бычков, Н.В.Васильева. Программы для оценки дифференциальных сечений упругого рассеяния нейтронов.....	6
4. А.В.Игнатик, В.П.Дунев, В.С.Шорин. Программы "ССРОТ" и "ССВИВ"	7
5. А.В.Игнатик, В.П.Дунев. Программа "ADARE"	8
6. В.С.Шорин. Программа расчета сечений радиационного захвата нейтронов по статистической теории.....	10
7. Г.Я.Тертычный, Ю.Н.Шубин. Программы расчета угловых распределений и спектров неупруго рассеянных нейтронов в статистической модели "СИГМА".....	12
8. В.Г.Проняев. Расчет функций возбуждения и спектров неупруго рассеянных нейтронов.....	14
9. А.Г.Довбенко. Программа расчета нейтронных сечений (ПРС-2М).....	16
10. А.Г.Довбенко. Программа расчета сечений радиационного захвата быстрых нейтронов по статистической модели ядра (ПРС-3).....	18
11. А.Г.Довбенко, А.В.Игнатик, Ю.Н.Шубин. Определение параметра и вычисление плотности возбужденных состояний ядер.....	19
12. А.Г.Довбенко, А.В.Игнатик. Программа расчета сечений прямого и коллективного радиационного захвата нейтронов	20
13. В.И.Попов, В.Г.Проняев. Программы для интерполяции и компактного представления данных по неупругому рассеянию нейтронов методом псевдоуровней.....	21
14. А.Н.Давлетшин, В.А.Толстиков. АЛГОЛ-программа для аппроксимации экспериментальных данных ортогональными полиномами со статистическим анализом.....	23
15. Н.С.Базазянц, Л.В.Горбачева. Программа расчета спектра реакции $(n,2n)$ -РВС	25

16. М.Н.Николаев, Н.О.Базазянц. Программа расчета коэффициентов разложения дифференциальных сечений рассеяния в ряд по полиномам Лежандра "ПАРАЛЕНК".....	27
17. В.П.Лунев, А.А.Лукьянов. Программа "SIGMARES" (.....)	29
18. Ж.А.Корчагина. Программы расчета средних расстояний между уровнями (TAD) и их распределения (PAD)......	30
19. Л.П.Абагян, М.Н.Николаев. Программа расчета сечений в области неразрешенных резонансов.....	32
20. М.Н.Николаев, Л.П.Абагян. Программа расчета сечений в резонансной области энергий "УРАН".....	35
21. Л.П.Абагян, М.Н.Николаев. Программа расчета пропусканий в резонансной области энергий "ЭЗАП".....	37
22. Л.П.Абагян, М.Н.Николаев, В.В.Синица. Программа многоуровневого расчета сечений по резонансным параметрам "МУФ".....	38
23. В.В.Синица. Программа усреднения сечений.....	40
24. М.М.Савоськин, Э.Ф.Синица, В.В.Синица. Программа расчета подгрупповых параметров - СОМ.....	42
25. М.Н.Николаев, Н.О.Базазянц. Программа расчета среднегрупповых значений угловых моментов сечения рассеяния и функций пропускания - "УМБЛОК".....	43
26. Н.О.Базазянц, М.В.Старостенко. Программа расчета многогрупповых матриц угловых моментов сечения упругого и неупругого рассеяния нейтронов с учетом самоэкранировки "МАННЕРС".....	45
27. М.Н.Николаев, Н.О.Базазянц, Л.В.Горбачева. Программа КРИТС для коррекции групповых констант по данным интегральных экспериментов.....	48
28. М.Ю.Орлов, А.М.Цибуля. Расчет сферического пропускания методом Монте-Карло.....	50
29. Ю.Г.Бобков. СОПОТ-система программ по планированию экспериментов и опеределению потребностей в точностях измерений оценок ядерно-физических констант для обеспечения реакторных расчетов с требуемой точностью.....	51

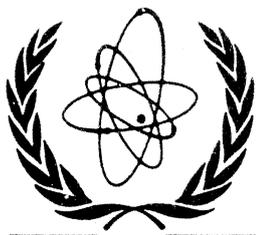
Технический редактор Н.П.Герасимова Корректор Г.И.Семенова
ТБ 02842 от 1.УШ.73 г. Заказ №490 . Тираж 250 экз. Объем 2,6 уч.изд.л.
Цена 26 коп.

Отпечатано на ротапринте Физико-энергетического института, август 1973 г.

595E

INDC(CCP)-35/U

International Atomic Energy Agency



INDC

INTERNATIONAL NUCLEAR DATA COMMITTEE

USSR State Committee on the Utilization
of Atomic Energy

NUCLEAR PHYSICS RESEARCH IN THE USSR
COLLECTED ABSTRACTS

ISSUE 15

NDS LIBRARY COPY

Translated by the IAEA
October 1974

IAEA NUCLEAR DATA SECTION, KÄRNTNER RING 11, A-1010 VIENNA

74-4492
Translated from Russian

INDC(CCP)-35/U

USSR State Committee on the Utilization
of Atomic Energy

NUCLEAR PHYSICS RESEARCH IN THE USSR
COLLECTED ABSTRACTS

ISSUE 15

Translated by the IAEA
October 1974

Institute of Physics and Energetics (FEI)

PROGRAM FOR CALCULATING NEUTRON
CROSS-SECTIONS FROM AN OPTICAL
MODEL OF THE NUCLEUS (PRS-2)

A.B. Dovbenko and V.E. Kolesov

The program [1] is intended for calculating the following quantities:

$$\sigma_s = \frac{\hbar^2}{2k^2} \sum_{L=0}^{L_{\max}} \sum_{j=L-1/2}^{L+1/2} (2j+1) |1 - S_{Lj}|^2,$$

$$\sigma_c = \frac{\hbar^2}{2k^2} \sum_{L=0}^{L_{\max}} \sum_{j=L-1/2}^{L+1/2} (2j+1) (1 - |S_{Lj}|^2),$$

$$\sigma_t = \frac{\hbar^2}{2k^2} \sum_{L=0}^{L_{\max}} \sum_{j=L-1/2}^{L+1/2} (2j+1) (1 - \operatorname{Re} S_{Lj}),$$

$$\sigma_{in}(E, E_m) = \frac{\hbar^2}{2k^2(2I_0+1)} \sum_{Lj} T_{Lj}(E) \sum_J (2J+1) \frac{\sum_{L'j'} T_{L'j'}(E-E_m)}{\sum_{L''j''} T_{L''j''}(E-E_m)}$$

$$\sigma_{ny}(E) = \frac{\hbar^2}{2k^2(2I_0+1)} \sum_{Lj} T_{Lj}(E) \sum_J \frac{2J+1}{1 + \frac{1}{2} \sum_{L''j''} T_{L''j''}(E-E_m)}$$

- where σ_s is the "optical" elastic scattering cross-section;
- σ_c is a cross-section describing all processes in which the quantum state of the final nucleus differs from that of the target nucleus;
- $\sigma_t = (\sigma_s + \sigma_c)$ is the total cross-section;
- $\sigma_{in}(E, E_m)$ is the inelastic scattering cross-section for neutrons of energy E when a level with energy E_m is excited;
- $\sigma_{ny}(E)$ is the cross-section for radiative capture of a neutron with energy E by the atomic nucleus;

- l is the orbital angular momentum and j is the total neutron angular momentum;
- I_0 is the target nucleus spin;
- J is the total angular momentum of the compound nucleus;

$$\bar{\sigma}_j(B_n + E) = \frac{\bar{D}^J(B_n)}{2\pi \Gamma_\gamma^2(B_n)} \sigma_j(E)$$

$$\sigma_j(E) = \frac{\int_0^{B_n} \epsilon_0^3 \exp 2 \sqrt{a(B_n - \epsilon_f)} d\epsilon_f}{\int_E^{E+B_n} \epsilon_f^3 \exp 2 \sqrt{a(B_n + E - \epsilon_f)} d\epsilon_f},$$

where B_n is the neutron binding energy;

$\bar{D}^J(B_n)$ is the experimentally observed neutron resonance density for S neutrons;

$\Gamma_\gamma(B_n)$ is the mean radiation width, and

a is the level density parameter of the Fermi gas model

The basic data for the calculations are B_n , $\bar{D}^J(B_n)$, $\Gamma_\gamma(B_n)$, a ; the parameters of the optical potential:

$$V(r) = V_0 - \frac{\hbar^2}{2} \cdot \frac{dV(r)}{dr} \bar{\sigma} \bar{l}, \quad V_0(r) = -\frac{V_0(1+i\zeta)}{1 + \exp(\frac{r-R}{a_1})},$$

i.e. $V_0, \hbar, a_1, \zeta, A$ (mass number), $R \approx r_0 A^{1/3}$,

and also the scheme of target nucleus levels ($m' \leq 6$). The accuracy of the final results is governed by ϵ , and l_{\max} by the inequality $T_{l_{\max}j}(E) < \epsilon$.

The program makes it possible to calculate the above cross-sections for any set of energies. It is written in M-20-type computer codes.

The machine time required to compute one value of E depends on the target nucleus spin, the number of excited levels and ϵ (~ 1 min at $E \approx 1$ MeV and $\epsilon = 10^{-6}$).

REFERENCES

- [1] MARCHUK, G.I., KOLESOV, V.E., Use of numerical methods for calculating neutron cross-sections, Atomizdat (1970).

ROPT PROGRAM

V.M. Bychkov and V.I. Popov

The program is intended for calculating, on the basis of an optical model, neutron nucleus interaction cross-sections. It uses the spherical potential

$$\begin{aligned}
 -V(r) = & V_0 \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{r - R_V}{a_V}\right)} + 4iU_0 W_0 \left[-\frac{d}{dr} \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{r - R_W}{a_W}\right)} \right] + \\
 & + \left(\frac{\hbar}{m_n c} \right)^2 \frac{V_0 a_0}{r} \left[-\frac{d}{dr} \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{r - R_V}{a_V}\right)} \right] (\vec{L} \cdot \vec{\sigma})
 \end{aligned} \quad (1)$$

$$R_V = r_V \cdot A^{1/3}; \quad R_W = r_W \cdot A^{1/3}.$$

The Schrödinger equation is integrated by the Milne-Numerov method with the steps

$$\Delta\rho = \Delta(k \cdot r) = \begin{cases} 0.1; & \text{at } E_n \geq 1 \text{ MeV} \\ 0.033322\sqrt{E_n} & \text{at } E_n < 1 \text{ MeV} \end{cases} \quad (2)$$

where $K = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2E_n}$.

The cross-linking radius is selected as $1.5 (R_V + 8a_V)$. The program calculates the real and imaginary parts of the matrix s_{ej} , the penetration factors $T_{e,j}$, the total cross-section σ_{tot} , the cross-section for formation of the compound nucleus σ_r , and the integral and differential elastic scattering cross-sections σ_{ef} and $\frac{d\sigma_{ef}}{d\Omega}$. The scattering cross-section incorporates an additional isotropic term corresponding to elastic scattering through the compound nucleus, calculated as:

$$\sigma_{ce}(\vartheta) = (\sigma_r - \sigma_{non})/4\pi,$$

where σ_{non} is the experimental cross-section for all non-elastic processes.

The program is written in ALGOL-60 (TA-IM). The operating time is ~10 sec for computers of the M-220 type.

The ROPT program can be operated in a regime where the potential parameters (1) are adjusted to experimental data on total cross-sections and angular distributions of elastic scattering, in which case up to seven parameters can be varied. A relaxation mode is applied for finding the minimum:

$$\chi^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left(\frac{G_i^y - G_i^T}{\Delta G_i^y} \right)^2$$

The program now in use is a somewhat improved version of the program published in Ref. [1].

REFERENCES

- [1] POPOV, V.I., KASHUBA, I.E., TRYKOVA, V.I., Byull. Int. Tsentra Yad. Dannym No. 4 (1967) 327.

PROGRAMS FOR EVALUATING DIFFERENTIAL NEUTRON ELASTIC
SCATTERING CROSS-SECTIONS

V.I. Popov, V.M. Bychkov and N.B. Vasil'eva

The authors have compiled a series of programs for processing and evaluating the angular distributions of elastically scattered neutrons. The programs contain calculations of cross-sections from the optical model of the nucleus and calculations of coefficients for Legendre polynomial expansion of angular distributions, as well as computer graphs of the theoretical curves together with experimental points and their errors for a visual check on the data processing. The series expansion program permits the incorporation into (or removal from) the experimental data of additional points to be used in cases where correction of the approximating curve is required. The additional points are introduced by linear or quadratic interpolation or by extrapolation on the basis of experimental points already available.

The optimum number of expansion terms is calculated from an empirical formula derived from analysis of the theoretical curves calculated from the optical model of the nucleus.

The programs are written in ALGOL-60 and use the automatically translated ROPT program (described in this set of abstracts) as well as the FORMAT operator compiled for the TA-IM translator [1].

REFERENCES

- [1] PAN'KOV, V.M., FORMAT operator in ALGOL, FEI preprint (in press).

CCROT AND CCVIB PROGRAMS

A.V. Ignatyuk, V.P. Lunev
V.S. Shorin

The CCROT program is intended for calculating neutron/rotational even-even nucleus interaction cross-sections by the coupled-channel method [1].

The program is based on a Legendre polynomial expansion of the deformed optical potential:

$$V(r, \theta) = -(V + iW)f + 4iW_D \frac{d}{dr}g + V_{sc} (\vec{\sigma} \cdot \vec{e}) \left(\frac{\hbar}{m_p c} \right)^2 \left(\frac{d}{dr}g \right); \quad (1)$$

$$f = \frac{1}{1 + \exp\{(r - R_a)/a\}}; \quad g = \frac{1}{1 + \exp\{(r - R_b)/b\}}; \quad (2)$$

$$R_a = R_{a0} \left(1 + \sum_{\lambda} \beta_{\lambda} Y_{\lambda 0}(\theta) \right);$$

$$R_b = R_{b0} \left(1 + \sum_{\lambda} \beta_{\lambda} Y_{\lambda 0}(\theta) \right). \quad (3)$$

Consideration of the target nucleus excitations is based on the following assumptions:

- (a) The excitation spectrum for the target nucleus is an ideal rotational band;
- (b) Excitations are calculated only for the first two rotational states pertaining to the ground-state band.

The Schrödinger equation is solved by a two-point system with correction. The cross-linking radius is taken to be $R_a + 10 a$.

The CCVIB program calculates cross-sections for interactions between neutrons and even-even vibrational nuclei. It utilizes a series expansion of the optical potential (1) and (2), where

$$R_a = R_{a0} \left(1 + \sum_{\lambda \mu} \alpha_{\lambda \mu} Y_{\lambda \mu}(\theta, \varphi) \right);$$

$$R_b = R_{b0} \left(1 + \sum_{\lambda \mu} \alpha_{\lambda \mu} Y_{\lambda \mu}(\theta, \varphi) \right). \quad (4)$$

The two programs calculate the real and imaginary parts of the matrix C, which is related to the S matrix by the expression:

$$S_{L,j;n'L'j'}^{J\pi} = \delta_{nn'} \delta_{LL'} \delta_{jj'} + 2i C_{L,j;n'L'j'}^{J\pi} \quad (5)$$

They compute the penetration factors $T_{e,j}^J$, the total cross-section σ_{tot} , and the integral and differential cross-sections:

- (a) For elastic scattering $\sigma_{e\ell}$ and $\frac{d\sigma_{e\ell}}{d\Omega}$; and
- (b) For excitation of the lowest collective target nucleus levels, σ_I^π and $\frac{d\sigma_I^\pi}{d\Omega}$.

The program is written in ALGOL-60 for the TA-IM translator. The program operating time depends on the specific system by which the channels are coupled and ranges from 0.5 to 2 hours.

REFERENCES

- [1] TAMURA, T., Rev. Mod. Phys. 37 (1965) 679.

ADAPE PROGRAM

A.V. Ignatyuk
and V.P. Lunev

The program makes it possible to calculate the cross-sections for interaction between neutrons and rotational nuclei by the coupled-channel method in an adiabatic approximation [1, 2] which makes the following assumptions:

- (a) The energy of the incident neutron is much greater than the excitation energy of the rotational states;
- (b) Allowance is made for the coupling of all levels of the rotational band for the ground state of the target nucleus.

The program uses a Legendre polynomial expansion ($\lambda = 2, 4$) of the deformed optical potential:

$$V(r) = -(v + iw) \frac{1}{1 + \exp[(r - R_c/a)]} - \frac{1}{2} i W_D \frac{\exp[(r - R_t/b)]}{\{1 + \exp[(r - R_t/b)]\}^2} - V_{SE} (\vec{\sigma} \vec{e}) \left(\frac{\hbar}{m_x c}\right)^2 \frac{1}{ar} \frac{\exp[(r - R_0/a)]}{\{1 + \exp[(r - R_0/a)]\}^2};$$

$$R_a = R_{a0} \left(1 + \sum_{\lambda} \beta_{\lambda} Y_{\lambda 0}(\theta)\right); \quad R_b = R_{b0} \left(1 + \sum_{\lambda} \beta_{\lambda} Y_{\lambda 0}(\theta, \varphi)\right).$$

The program computes the total cross-section σ_{tot} , the integral scattering cross-sections σ_{el} , the cross-sections for excitation of the rotational levels σ_I^{π} , and the differential cross-sections $\frac{d\sigma_{el}}{d\Omega}$ and $\frac{d\sigma_I^{\pi}}{d\Omega}$.

The program is written in M-20 computer code and the operating time for the peak orbital angular momentum of the incident neutron is approximately 2 hours.

REFERENCES

- [1] TAMURA, T., Rev. Mod. Phys. 37 (1965) 679.
- [2] FABBVI, F., ZUFFI, L., CNEN, Bologna, RT/FI (69) 7.

PROGRAM FOR CALCULATING NEUTRON RADIATIVE CAPTURE
CROSS-SECTIONS BY STATISTICAL THEORY

V.S. Shorin

The neutron capture cross-sections are calculated in Hauser-Feshbach theory, the parameters of the theory being the reduced neutron and radiation force functions. In this model the neutron capture cross-section σ_{ng} with energy E takes the form

$$\sigma_{ng}(E) = \frac{\mathcal{L}^J}{k_n^2 (2I+1)} \sum_{lJ} \frac{T_l^{J\kappa}(E) S(\alpha, \beta)}{1 + \xi(J) \sum_{l'J'} T_{l'J'}^{J\kappa}(E-E_{\kappa})} ;$$

where

$$\xi(J) = \frac{\bar{D}}{2\pi\Gamma_J} \frac{2(2I+1)}{2J+1} ;$$

$$S(\alpha, \beta) = (\alpha + \sum_i \beta_i + 1) \int_0^{\infty} \frac{\exp(-t) dt}{(1+2\alpha t)^{3/2} \prod_i (1+2\beta_i t)^{1/2}} ;$$

is a correction for fluctuation of the neutron widths;

$$\alpha = \xi(J) T_l^J(E); \quad \beta_i = \xi(J) T_{l_i}^J(E-E_{l_i});$$

$$T_l^J = 2\pi S_l^{(0)} \frac{\sqrt{E_0}}{G_l^2(K_n R) + F_l^2(K_n R)} ;$$

$S_l^{(0)}$ is the reduced neutron force function for momentum e;

Ge, Fe are Hankel functions;

$E_0 = 1$ eV; and R is the nuclear radius.

The program is written in ALGOL-60 (alpha). The circumference of the translated program is 1100₈ cells, the mean operating time 1 minute.

Input data

A (atomic weight); Γ_o , Γ_I (parameters of nuclear dimensions in the equation for the radius, $R = r_o A^{1/3} + V_1$); \bar{D} , Γ_γ ; the characteristics of the target nucleus levels E_K , I_K , π ; the table of reduced force functions $S_\ell^{(o)}$ and energies E of the incident neutron.

The program prints out partial and total radiative capture cross-sections for given neutron energies. It can be used to calculate neutron capture cross-sections in the energy region below 300 keV, since

- (1) It is assumed that $\ell \geq 3$; $T_\ell = 0$;
- (2) It is taken that $\Gamma_{\gamma \text{ capt.}} \equiv \Gamma_{\gamma \text{ tot}}$, i.e. we do not take into account the possibility of neutron evaporation when soft gamma rays are emitted;
- (3) We disregard the energy dependence of $\xi(J)$.

PROGRAMS FOR CALCULATING ANGULAR DISTRIBUTIONS AND SPECTRA OF
INELASTICALLY SCATTERED NEUTRONS IN THE SIGMA
STATISTICAL MODEL

G.Ya. Tertychnyj and Yu.N. Shubin

The SIGMA program is intended for calculating (i) spectra and angular distributions of inelastically scattered neutrons in the energy region where the density of the residual nucleus states is large enough to be described by a smooth energy function, and (ii) the total cross-section for formation of the compound nucleus. The calculation is made on the basis of the Hauser-Feshbach statistical model in which the absorption cross-section, spectrum $d\sigma/dE$ and double-differentiated cross-section $d^2\sigma/dEd\Omega$ are determined by the relationships:

$$\sigma_{\text{tot}}(E, l_0) = \frac{\pi k^2}{2(2l_0+1)} \sum_{l_0=0}^{l_0 \text{ max}} \sum_{j_0=l_0-1/2}^{l_0+1/2} \sum_{J=l_0-l_1}^{j_0+l_0} (2J+1) T_{l_0}^{J l_0}(E_0). \quad (1)$$

$$\frac{d\sigma}{dE_1}(E_0, l_0; E_1) = \frac{\pi k^2}{2(2l_0+1)} \sum_{l_0=0}^{l_0 \text{ max}} \sum_{j_0=l_0-1/2}^{l_0+1/2} \sum_{J=l_0-l_1}^{j_0+l_0} (2J+1) T_{l_0}^{J l_0}(E_0) \times \sum_{l_1=0}^{l_1 \text{ max}} \sum_{j_1=J-l_1}^{J+l_1} \sum_{l_2=l_1-1/2}^{j_1+1/2} \frac{T_{l_1}^{J l_1}(E_1) \mathcal{P}(E_0-E_1, l_1)}{F(E_0, J)}. \quad (2)$$

$$\frac{d^2\sigma(E_0, l_0; E_1, \nu)}{dE_1 d\Omega} = \frac{\pi k^2}{2(2l_0+1)} \frac{1}{4\pi} \sum_{l_0=0}^{l_0 \text{ max}} \sum_{j_0=l_0-1/2}^{l_0+1/2} \sum_{J=l_0-l_1}^{j_0+l_0} (2l_0+1)(2J+1)^2 T_{l_0}^{J l_0}(E_0) \times \sum_{l_1=0}^{l_1 \text{ max}} \sum_{j_1=J-l_1}^{J+l_1} \sum_{l_2=l_1-1/2}^{j_1+1/2} \sum_{L=0}^{\min(2l_0, 2l_1, 2J)} (-)^{j_1-j_2} (2l_1+1)(l_0 l_0 00 | l_0 l_1 00 | l_0) \times W(JJ l_0 l_0; L l_0) W(JJ l_1 l_1; L J_1) T_{l_1}^{J l_1}(E_1) \frac{\mathcal{P}(E_0-E_1, l_1)}{F(E_0, J)} P_L(\cos \nu). \quad (3)$$

Here $F(E_0, J) = \sum_{l_1=0}^{l_1 \text{ max}} \sum_{j_1=J-l_1}^{J+l_1} \sum_{l_2=l_1-1/2}^{j_1+1/2} \int_0^{E_0} T_{l_1}^{J l_1}(E_1) \mathcal{P}(E_0-E_1, l_1) dE_1. \quad (4)$

The program uses an expression for the density of the excited states $\rho(U, J)$ derived in the Fermi gas model, with phenomenological consideration of residual interactions.

There is also a simplified version of the program which calculates the absorption cross-sections $\sigma_{\text{tot}}(E_0)$ and the spectrum of inelastically scattered neutrons $d\sigma/dE$ from relations (1) and (2).

The programs are compiled in such a way that any spectral region of interest can be selected for calculation.

The input data are z , A , E_0 , I_0 , the angle θ , l_{omax} , l_{lmax} , the level density parameter a and pair formation parameter δ , the tables of Clebsch-Gordon coefficients, and the coefficients $Te_0[0:l_{\text{omax}}]$ and $Te_1[0:l_{\text{lmax}}, 0:N]$, where N is the number of points at which the spectrum is calculated.

The program is written in ALGOL-60 (alpha), and the operating time is $\sim 0.1 \times l_{\text{omax}}^2 \times N$ (min); it is five times faster in the simplified version.

CALCULATION OF EXCITATION FUNCTIONS AND SPECTRA FOR
INELASTICALLY SCATTERED NEUTRONS

V.G. Pronyaev

1. The NUR program calculates excitation functions for the excitation of discrete levels with known characteristics $\varepsilon_i^{I\pi}$ by neutrons of up to 14.5 MeV:

$$G(E_n, \varepsilon_i) = \frac{I_0}{2(2I_0+1)\kappa^2} \sum_{e_j} T_{e_j}^{I\pi} \sum_{j'} \frac{2j'+1}{D^{I\pi}} T_{e_j'}^{I\pi}(E - \varepsilon_i^{I\pi}); \quad (1)$$

and also of groups of unresolved levels of width $\Delta\varepsilon_i$ for which in statistical description:

$$G(E_n, \varepsilon_i) = \frac{I}{2(2I_0+1)\kappa^2} \sum_{e_j} T_{e_j}^{I\pi}(E_n) \sum_{j'} \frac{2j'+1}{D^{I\pi}} \sum_{I_f, I_f'} T_{e_j'}^{I\pi}(E_n - \varepsilon_i) \times \quad (2)$$

$$\times \rho(I_f, I_f', \varepsilon_i) \Delta\varepsilon_i;$$

where

$$D^{I\pi} = \sum_{j'} \left\{ \sum_{n' e_j' I_{n'}'} T_{e_j'}^{I\pi}(E_n - \varepsilon_{n'}^{I_{n'}'} + Q_\nu) + \right.$$

$$\left. + \int_{E_n - \varepsilon_{\max} + Q_\nu}^{E_n - Q_\nu} \sum_{e_j' I_{n'}'} T_{e_j'}^{I\pi}(E_n - \varepsilon + Q_\nu) \rho(j, I_{n'}', \varepsilon) d\varepsilon_j \right\} \quad (3)$$

and the summation for ν corresponds to various escaping particles.

The input data are arrays of sticking coefficients $T_{e, j, \nu}(E_\nu)$ obtained with the optical model for neutrons, protons and alpha particles.

For level density, the relations of the Fermi gas model are used with phenomenological consideration of pair formation. The program is written in ALGOL-60 (for the TA-IM translator), the circumference of the translated program without the input arrays being 3400g. The program is organized in such a way that for a given incident neutron energy it calculates the excitation functions for all levels that might be excited in the residual nucleus. The operating time for a given initial energy E_n can be evaluated as:

$$t(E_n) \sim 0,5 \cdot \frac{(2I+1)}{st^2} (E_n - \varepsilon_{\max}) + 0,5 \text{ (min)};$$

where I is the spin of the target nucleus in the ground state;
 ΔE is the scattered neutron energy step (MeV); and
 $\epsilon_{\max n}$ is the energy of the last resolved level in the level scheme of the residual nucleus (MeV).

There is a modified version of the programme called NURmod, which supplements Eq. (1) by including the probability of neutrons being emitted at the pre-equilibrium stage [1] and accordingly renormalizes the rest of Eq. (1).

$$\begin{aligned}
 G(E_n, \epsilon_i) = & \frac{\pi}{2(2I_0 + 1) \kappa^2} \sum_{\epsilon_j, j} (2J+1) T_{\epsilon_j}^{J_x}(E_n) \times \\
 & \times \sum_{I_f} \left\{ \sum_{\substack{n=n_i \\ (\Delta n=2)}}^{\bar{n}} \frac{\rho_{n-1}(E_n - \epsilon_i, I_f) g_n \Delta \epsilon_i}{\rho_n(E_n + B_n, J)} \times \right. \\
 & \frac{\sum_{\epsilon_j, j} \frac{2m_n \epsilon_j}{\pi^2 \kappa^3 g_n} \cdot \frac{\pi}{\kappa^2 2(2I_0 + 1)} (2J+1) T_{\epsilon_j}^{J_x}(\epsilon_i)}{\sum_{\epsilon_j, j} \frac{2m \epsilon_j}{\pi^2 \kappa^3 g_n} \cdot \frac{\pi}{\kappa^2 2(2I_0 + 1)} (2J+1) T_{\epsilon_j}^{J_x}(\epsilon_i) \cdot [1 + 10 \frac{\epsilon_j}{(\epsilon_i + B_n)} - 6 \cdot 10 \frac{\epsilon_j^2}{(\epsilon_i + B_n)^2}]^{\frac{1}{2}}} \times \\
 & \left. \times (1 - P_{n-2}) \right\} \quad (4)
 \end{aligned}$$

The density of the particle-hole configurations is determined with the superfluid nucleus model.

REFERENCES

- [1] GRIFFIN, I.I., Phys. Rev. Letters 17 (1966) 478.
 BLANN, M., Phys. Rev. Letters 27 (1971) 337.

PROGRAM FOR CALCULATING NEUTRON CROSS SECTIONS (PRS-2M)

A.G. Dovbenko

The program calculates elastic scattering absorption and total cross-sections (σ_s , σ_c and σ_t) in the optical model [1] as well as inelastic scattering and radiative capture cross-sections in terms of the modified Hauser-Feshbach relationships [2]:

$$\sigma_{en}(E, E_{n'}) = \frac{\pi}{2k^2(2L_n+1)} \sum_{l,j} (2J+1) \delta_{lj}^{J\pi}(E) \frac{\sum_{l',j'} \delta_{l'j'}^{J\pi}(E-E_{n'})}{\sum_{l',j'} \delta_{l'j'}^{J\pi}(E-E_{n'}) + \frac{2\pi^2 \Gamma_{en}(E) (2J+1)}{D(E_n) 2(2L_n+1) \dots}}$$

$$\sigma_{n\gamma}(E) = \frac{\pi}{2k^2(2L_n+1)} \sum_{l,j} (2J+1) \delta_{lj}^{J\pi}(E) \frac{\xi(E)}{1 + \frac{2\pi^2 \Gamma_{en}(E) (2J+1)}{D(E_n) 2(2L_n+1) \dots} \sum_{l',j'} \delta_{l'j'}^{J\pi}(E-E_{n'})}$$

Here, $S^{J\pi}$ is a correction for width fluctuation, and $g_{ej}^{J\pi}(E)$ is associated with the optical penetration factors $T_{ej}^{J\pi}(E)$ in the following way:

$$g_{ej}^{J\pi}(E) = \frac{g}{g} (1 - \sqrt{1 - g T_{ej}^{J\pi}(E)}),$$

where $g(0 \leq g \leq 1)$ is a parameter determining the correlation properties of the compound nucleus.

The expressions for $E(E)$ and $\xi(E)$ determine the energy dependence of the radiative capture width and total radiation width:

$$E(E) = \frac{\int_0^{B_n+E} \epsilon_j^3 f(\epsilon_j) \rho(B_n+E-\epsilon_j, 0) d\epsilon_j}{\int_0^{B_n+E} \epsilon_j^3 f(\epsilon_j) \rho(B_n+E-\epsilon_j, 0) d\epsilon_j},$$

$$\xi(E) = \frac{\int_0^{B_n} \epsilon_j^3 f(\epsilon_j) \rho(B_n-\epsilon_j, 0) d\epsilon_j}{\int_0^{B_n+E} \epsilon_j^3 f(\epsilon_j) \rho(B_n+E-\epsilon_j, 0) d\epsilon_j},$$

Here $f(\epsilon_j)$ takes into account the additional energy dependence of the radiation force function with respect to ϵ_j^3 [3].

The dependence of the level density on spin and initial state is taken as

$$\rho(u, J, X) = \frac{1}{2} \rho(u, 0) (2J+1) \exp \left\{ - \frac{(J + \frac{1}{2})^2}{2 \sigma^2(u)} \right\}$$

and for the energy dependence of the level density $\rho(E; J = 0)$ we use the Fermi gas model or superfluid nuclear model equations [3].

In addition to the basic data described in Ref. [1], we need for PRS-2M computations values of the parameter g and of the additional level density parameters. Computer operating time for one value of E depends on the target nucleus spin, the number of excited levels ($m' \leq 25$) and ϵ .

REFERENCES

- [1] DOVBENKO, A.G., KOLESOV, V.E., Program for calculating neutron cross-sections from an optical model of the nucleus (PRS-2). See present collection of abstracts, page 3.
- [2] MOLDAUER, P.A., Rev. Mod. Phys. 36 (1964) 1079.
- [3] DOVBENKO, A.G., IGNATYUK, A.V., TOLSTIKOV, V.A., Preprint FEI-293 (1971).

PROGRAM FOR CALCULATING RADIATIVE FAST NEUTRON CAPTURE
CROSS-SECTIONS FROM THE STATISTICAL MODEL
OF THE NUCLEUS (PRS-3)

A.G. Dovbenko

The program is intended for calculation of partial and total radiative capture cross-sections for neutrons of up to 20 MeV. The radiative capture cross-section is represented as

$$\sigma_{n,\gamma}(E) = \frac{\chi}{2\kappa^2(2I_0+1)} \sum_{\mathcal{J}} T_{\mathcal{J}}(E) \sum_{\mathcal{J}'} \frac{\sigma_{T_{k\ell}}^{\mathcal{J}}(2\mathcal{J}+1) \Gamma_{\gamma}(u, \mathcal{J})}{\Gamma_{\gamma}(u, \mathcal{J}) + \frac{\mathcal{D}(u, \mathcal{J})}{\chi} \left[\sum_{\mathcal{K}} \sum_{\ell} \epsilon_{T_{k\ell}}^{\mathcal{J}} T_{\ell}(E-E_{\mathcal{K}}) + \mathcal{L}(E, \mathcal{J}) \right]}$$

where

$$\mathcal{L}(E, \mathcal{J}) = \frac{1}{2} \int_E^E \sum_{\ell} \epsilon_{T_{k\ell}}^{\mathcal{J}} T_{\ell}(E-\omega) \sum_{i_{\mathcal{K}}} \rho(\omega - \delta, i_{\mathcal{K}}) d\omega$$

takes into account the competition of inelastic scattering levels whose characteristics are determined by the level density $q(v_{i_{\mathcal{K}}})$.

Here $\Gamma_{\gamma_{\text{max}}}(u, \mathcal{J})$

is the total radiation width; and

$$\Gamma_{\gamma_e}(u, \mathcal{J}) = \sum_{m=1}^{\infty} \Gamma_{\gamma_e^m}(u, \mathcal{J})$$

is the radiation width corresponding to radiative neutron capture (different from the total radiation width because of competition between the neutron emission process and cascade gamma quantum emission);

$$\Gamma_{m\gamma}(u, \mathcal{J})$$

determines the probability of transition of the nucleus to a state with excitation energy less than the neutron binding energy through emission of m photons;

$$\Gamma_n(u, \mathcal{J}) = \frac{\mathcal{D}(u, \mathcal{J})}{\chi} \left[\sum_{\mathcal{K}} \sum_{\ell} \epsilon_{T_{k\ell}}^{\mathcal{J}} T_{\ell}(E-E_{\mathcal{K}}) + \mathcal{L}(E, \mathcal{J}) \right]$$

is the neutron width; and the coefficient $\epsilon_{I_e}^{\mathcal{J}}$ takes into account the law of conservation of angular momentum and parity.

The input data are E^* , B_n ; δ_1 and δ_2 - corrections for nucleon pair formation for the compound and target nuclei; a_1 and a_2 - the level density parameters for the compound nucleus and target nucleus, respectively; and the energies, spins and parities of the known discrete levels and the parameters of the optical potential.

The partial and total cross-sections for the (n,γ) reaction are printed out as final results. The program allows calculation for any set of energies.

DETERMINATION OF THE PARAMETER AND CALCULATION OF THE
DENSITY OF EXCITED NUCLEAR STATES

A.G. Dovbenko, A.V. Ignatyuk and Yu.N. Shubin

A given density of neutron resonances $D_{\text{obs}}(B_n, I_0)$ - with neutron binding energy B_n and target nucleus spin I_0 - is used to determine the level density α and to calculate the density of the excited nuclear states for a given energy range.

To determine the state density we use the superfluid nucleus model in the continuous spectrum approximation, the parameters of the model being the correlation functions Δ_z and Δ_N for protons and neutrons. For $\Delta_z = \Delta_N = 0$ the program determines the Fermi gas model parameters with effective excitation energy.

PROGRAM FOR CALCULATING DIRECT AND COLLECTIVE NEUTRON
RADIATIVE CAPTURE CROSS-SECTIONS

A.G. Dovbenko and A.V. Ignatyuk

The program is intended for calculating partial radiative capture cross-sections and the hard section of the gamma spectrum on the basis of a schematic model of direct and semi-direct capture [1]:

$$\sigma_{ej} = \frac{8\pi}{9} \frac{MK_A^5}{\hbar^2 k} \left(\frac{Ze}{A}\right)^2 \sum_{e'j'} (2j'+1) S_{jj'} F_{ejj'} \times$$

$$\times \left| \int_0^\infty u_{ej}(r) u_{e'j'}(r) r^3 dr \right|^2$$

Here K_γ and K are the wave numbers of the gamma quanta and neutron;
 M is the reduced mass;
 $S_{jj'}$ is the geometric factor for dipole transitions;
 U_{ej} are the wave functions of the shell model for the final single-particle state;
 $U_{e'j'}$ are the wave functions of the optical model for the incident neutron; and
 $F_{ejj'}$ is the coefficient for enlargement of the cross-section due to collective emission of the gamma quantum. Provision is made for various modifications of the coefficient $F_{ejj'}$ because of the various ways of describing it in existing models [1].

A more detailed description of the calculation methods is given in Ref. [2].

REFERENCES

- [1] BROWN, G.E., Nucl. Phys. 57 (1964) 339.
 CLEMENT, C.F., LANE, A.M., ROOK, J.R., Nucl. Phys. 66 (1965) 273.
 ZARITSKY, D.F., LUSHINKOV, A.A., URIN, M.G., Yad. Fiz. 3 (1966) 432.
- [2] DOVBENKO, A.G., IGNATYUK, A.V., FEI-311 (1971).

PROGRAM FOR THE INTERPOLATION AND COMPACT REPRESENTATION OF NEUTRON
INELASTIC SCATTERING DATA BY THE PSEUDO-LEVEL METHOD

V.I. Popov, V.G. Pronyaev

The programs are intended for the interpolation and compact representation of neutron inelastic scattering data over the energy range 0-15 MeV. The method relies on simple parametrization of the shape of the excitation function for a level or group of levels of width $\Delta U = 0.2$ MeV. The excitation function $s(x)$ is approximated by a Maxwellian-type function:

$$S(x) = \sum_{i=1}^3 \left\{ AT^{-d_i} \exp d_i \right\} P_i x^{d_i} \exp(-b_i x) \quad (1)$$

in which

$$\begin{aligned} d_i &= b_i T, \\ P_1 &= 1-f-F, \\ P_2 &= f, \\ P_3 &= F, \\ x &= E_n - E_j \end{aligned}$$

Here E_n and E_j are the energy of the incident neutron and of the level or group of levels, respectively;

$P_1, P_2, P_3, b_1, b_2, b_3$ are partial contributions and coefficients determining the widths of the Maxwellian functions;

A and T are the maximum values of the level excitation cross-section and the distance between the threshold and peak value of the level excitation function.

Thus, to describe the excitation function for each level we have to know seven parameters: A, T, b_1, b_2, b_3, f and F . The region of resolved levels of the residual nucleus includes eight groups of levels, and to describe these 56 parameters are given.

In the level continuum region we postulate that the parameters vary smoothly from one group of levels to the other and select, for each of the seven parameters, eight coefficients for a power series expansion of the energy dependence. Parameter selection is based on optimum description

of the available experimental data for the level excitation functions, total cross-sections and inelastically scattered neutron spectra.

The programs now available with the selected parameters enable us to calculate:

1. Excitation functions for groups of nuclear levels over the 0-15 MeV range of residual nucleus level energies;
2. The inelastic scattering cross-section deformed by the contribution of the n-th emission of neutrons, i.e. $\sigma_n + 2\sigma_{n,2n} + 3\sigma_{n,3n} \dots$;
3. The total scattered neutron spectrum from the reactions (n,n') , $(n,2n)$ and $(n,3n)$;
4. A matrix of group cross-sections for inelastic transitions, with any breakdown into groups (but not more than 26 groups).

The programs are written in ALGOL-60 (TA-2). The program operating time in an M-20 class computer ranges from 2 to 20 minutes. The texts of the programs are published in Ref. [1].

REFERENCES

- [1] POPOV, V.I., TRYKOVA, V.I., SLUCHEVSKAYA, V.M., Bulletin of the Nuclear Data Centre 5 (1968) 116.

ALGOL PROGRAM FOR APPROXIMATING EXPERIMENTAL DATA BY ORTHOGONAL
POLYNOMIALS WITH STATISTICAL ANALYSIS

A.N. Davletshin and V.A. Tolstikov

The program uses an algorithm to find (by the method of least squares) the coefficients of an exponential polynomial approximating the initial totality of experimental data.

The experimental data are presented in three arrays x_k, y_k, z_k where $k = 1, \dots, m$. Here x_k, y_k are the abscissa and ordinate of the experimental point, while z_k is either the absolute or the relative error in measurement of the ordinate y_k .

Irrespective of the way in which z_k is represented, in the calculations we can use weights w_k of three types:

1. $w_k = 1$;
2. $w_k = 1/\sigma_k^2$, where σ_k is the absolute error in y_k ;
3. $w_k = 1/\delta_k^2$, where $\delta_k = \frac{\sigma_k}{y_k}$ is the relative error in y_k .

The approximating polynomial is sought in the form

$$y_n(x) = \sum_{i=0}^n b_i \varphi_i(x) \quad (1)$$

where $\varphi_i(x)$ are polynomials of power i , normalized to 1, orthogonal at the set of points $\{x_k\}$, $k = 1, \dots, m$.

The power of the approximating polynomial n_0 is determined by checking the assumption that $b_i = 0$ for all coefficients b_i of the polynomial in Eq. (1). To do this we compare the tabulated value for the Fischer distribution $F_{1, \nu}^{(1-\varrho)}$ and the quantity b_i^2/σ_n^2 which obeys this distribution. Here $\nu = m-n-1$, ϱ is the level of significance, and σ_n is the dispersion of the measured value (with weight 1) obtained for a polynomial of power m . All coefficients b_i for which this assumption proves valid are equated to zero. The initial given power of the polynomial n should be such that at least $b_n = 0$. As a result of this statistical analysis we determine the power of the polynomial $n_0 < n$ and recalculate $\sigma_{n_0}^2$. The polynomial in Eq. (1) is transformed into Eq. (2).

The main results derived from the approximation are:

1. The matrices of the polynomial coefficients $\varphi_i(x)$;
2. The array of coefficients b_i , $i = 0, \dots, n$;
3. The array of coefficients of the exponential polynomial

$$y_{no}(x) = \sum_{i=0}^{no} c_i x^i \quad (2)$$

4. The array of polynomial coefficients for calculating the dispersion of $y_{no}(x)$;
5. A table of values for $y(x_j)$ with the step Δx , calculated from Eq. (2), together with their dispersions and relative errors.

The step Δx may be made constant on a linear or logarithmic scale.

The program is written in alpha language and its length is approximately 2000₈.

RVS PROGRAM FOR CALCULATING THE SPECTRUM OF THE (n,2n) REACTION

N.O. Bazazyants and L.V. Gorbacheva

The RVS program is designed to calculate the spectra of primary and secondary neutrons in the (n,2n) reaction [1].

If the neutron energy exceeds the binding energy in the target nucleus, then the residual nucleus formed through inelastic scattering may have enough excitation energy to emit one more neutron.

For a given excitation energy of the residual nucleus, the spectrum of secondary neutrons may be written

$$I_{Eb}(E_2) dE_2 = C_2 \cdot E_2 \cdot e^{-\frac{E_2}{\theta(E_2-B)}} dE_2, \quad (1)$$

where

E_0 is the energy of the incident neutrons;

B is the threshold of the (n,2n) reaction;

E_1 is the energy of the primary neutrons;

E_2 is the energy of the secondary neutrons; and

$E_b = E_0 - E_1$ is the excitation energy of the residual nucleus.

The general secondary neutron spectrum obtained by integrating Eq. (1) for E_1 , with a probability weighting for the emission of a primary neutron with energy E_1 from 0 to $E_0 - B - E_2$, takes the form

$$I_2(E_2) dE_2 = C_3 \cdot E_2 \cdot dE_2 \int_0^{E_0-B-E_2} e^{-\frac{E_2}{\theta(E_0-B-E_1)}} \cdot E_1 \cdot e^{-\frac{E_1}{\theta(E_0)}} dE_1, \quad (2)$$

where $\theta(E_0)$ is the thermodynamic temperature.

If we assume that

$$\theta(E_0 - B - E_1) = \theta(E_0) \cdot \frac{\sqrt{E_0 - B - E_1}}{\sqrt{E_0}};$$

we will get the following expression for the secondary neutron spectrum:

$$I_2(E_2) dE_2 = C_3 \cdot \alpha E_2 \cdot E_2 \int_0^{E_0-B-E_2} E_1 e^{-\frac{E_2 \sqrt{E_0} + E_1}{\theta(E_0)}} dE_1; \quad (3)$$

The primary neutron spectrum is calculated as

$$L_1(E_1) dE_1 = C_1 \cdot E_1 \cdot e^{-\frac{E_1}{\vartheta(E_0)}} , \quad (4)$$

where $E_1 < (E_0 - B)$

The thermodynamic temperature $\vartheta(E_0)$ is calculated in the program from the formula

$$\vartheta(E_0) = \frac{\sqrt{\frac{\mu}{\alpha}}}{1 - (\frac{5}{4} \sqrt{\frac{\mu}{\alpha}}) / \alpha} ,$$

$$\mu = E_0 - 2\vartheta'(E_0) + \Delta, \text{ where } \Delta = 0; \quad \alpha = 12.2;$$

in which $\vartheta(E_0)$ is a first approximation of the thermodynamic temperature, assumed to be $\sim 0.5-1.0$. Provision is made for uncoupling the unit that calculates $\vartheta(E_0)$ and inserting a corresponding array for $\vartheta(E_0)$ from punched cards.

The RVS program enables us to calculate spectra for primary and secondary neutrons in accordance with Eqs (3) and (4).

The number of points for energy E_0 in the program was set at 150. The program is written in ALGOL-60 (TA-2 translator). The counting time, i.e. time for computing and printing-out data for one value of E_0 , is approximately one minute.

REFERENCES

- [1] BAZAZYANTS, N.O., Evaluation of cross-sections and compilation of multigroup constants for elastic and inelastic neutron scattering to be used in calculating reactors and shielding. Dissertation for higher degree (Candidate), Obninsk (1971).

PROGRAM FOR CALCULATING THE COEFFICIENTS OF A LEGENDRE POLYNOMIAL
EXPANSION OF DIFFERENTIAL SCATTERING CROSS-SECTIONS (PARALENK)

M.N. Nikolaev and N.O. Bazazyants

The PARALENK program [1] calculates coefficients (B_l) for a Legendre polynomial expansion of differential scattering cross-sections of the type

$$G_{\text{calc}}(\mu) = \frac{1}{4\pi} \sum_{l=0}^N B_l \cdot P_l(\mu) \quad (1)$$

The expansion coefficients (B_l) in the PARALENK program are found by the method of least squares, while the optimum number of Legendre polynomials (N_0) is determined from the condition of minimum mean square deviation of the differential cross-section (as measured at U angles) from its theoretical value:

$$S(N) = \sum_{i=1}^M [\sigma_n(\mu_i) - \frac{1}{4\pi} \sum_{l=0}^N B_l \cdot P_l(\mu_i)]^2 W_i \quad (2)$$

Here $W_i = \frac{1}{d_i^2} / \sum \frac{1}{d_i^2}$ (d_i^2 is the mean square error in measurement of the differential cross-section).

To determine the coefficients B_l that minimize Eq. (2), the program solves a system of linear equations obtained by differentiating Eq. (2) with respect to all B_l and equating the relevant partial derivatives to zero:

$$\hat{A} \vec{B} = \vec{C} \quad (3)$$

where the elements of the matrix \hat{A} and vector \vec{C} are equal.

$$A_{ln} = \frac{1}{(4\pi)^2} \sum_{i=1}^M P_l(\mu_i) W_i P_n(\mu_i), \quad (4)$$

$$C_n = \frac{1}{4\pi} \sum_{i=1}^M \sigma_n(\mu_i) W_i P_n(\mu_i)$$

We get from expression (3)

$$\vec{B} = \hat{A}^{-1} \vec{C} \quad (5)$$

where \hat{A}^{-1} is the inverse matrix of \hat{A} .

The dispersions of the expansion coefficients calculated in this way are determined by the diagonal elements of the reciprocal matrix:

$$\mathcal{D}(B_l) = \delta \cdot A_{ll}^{-1} \quad (6)$$

where δ is the so-called general dispersion, for which the program uses the larger of the two following evaluations:

$$\delta^2(N_0) = S_{min}(N_0)/(M - N_0 - 1), \quad (7)$$

or

$$\delta^2 = \frac{1}{\sum_{i=1}^N 1/d_i^2}. \quad (8)$$

N_0 is calculated in the program from the condition of minimum $\delta(N)$ as determined by expression (7), i.e. on the basis of the Gaussian criterion.

If there are several minima in the $\delta(N)$ relation, the program selects the one in which $\delta(N)$ is comparable with the evaluation of δ from the measurement errors in (8). If the minimum on the $\delta(N)$ curve is very smooth, then in the area of this minimum the program selects for N_0 the least number N for which $\delta(N)$ is sufficiently close to the evaluation in (8) (in other words, when it does not differ from it by more than a factor of 2).

The PARALENK program records:

1. The coefficients B_ℓ for the Legendre polynomials in the angular distribution expansion (1);
2. The errors in the coefficients B_ℓ ;
3. The matrix of the correlation coefficients for the errors in B_ℓ ;
4. The angular distribution reconstructed with the calculated coefficients;
5. The error in the reconstructed function at each theoretical point (with allowance for the correlation of errors in B_ℓ);
6. The differential elastic scattering cross-section for arbitrarily set additional values of the scattering angle cosine (up to 17 additional values).

All these quantities are recorded both in the laboratory frame of reference and the centre-of-mass system.

The largest possible number of points in a given angular distribution in the PARALENK program is 41; the maximum number of expansion terms is 20.

The program is written in ALGOL-60 (TA-2). The counting time for a typical version (6-8 expansion terms, 15-20 angle points with output of

data in the laboratory frame of reference and centre of mass system) is mainly determined by the time taken for input and removal of the information, and amounts to approximately 3-4 minutes. The PARALENK program can handle any desired number of variations in sequence.

REFERENCES

- [1] NIKOLAEV, M.N., BAZAZYANTS, N.O., Legendre polynomial expansion of experimental data on angular distribution of elastically scattered neutrons, Byull. Inf. Tsentra Yad. Dannym 4 Atomizdat (1967).

SIGMARES PROGRAM

V.P. Lunev and A. Luk'yanov

The program calculates the energy dependence of reaction cross-sections in the resonance region with allowance for inter-resonance interference and finite energy resolution [1]:

$$\langle \tilde{\sigma}_R(E) \rangle = \frac{65.2 \cdot 10^4}{\sqrt{E}} \sum_i \left\{ \frac{2\alpha_i}{\Delta} u(z_i, \xi_i) + \frac{2\beta_i}{\Delta} v(z_i, \xi_i) \right\}$$

The program is written in ALGOL-60 for the TA-IM translator. Use of the FORMAT operator makes possible a graphic representation on an alphanumerical printer of the inserted experimental data and computed cross-section over a 100-eV energy range in 1000 points. The time taken for the program to operate is one hour.

REFERENCE

- [1] LUNEV, V.P., LUK'YANOV, A., Preprint FEI-312 (1971).

PROGRAMS FOR CALCULATING MEAN LEVEL SPACINGS (TAD)
AND THEIR DISTRIBUTION (PAD)

Zh.A. Korchagina

The TAD program is intended for calculation and print-out of the results of various assessments of the mean level spacings as a function of the number of resolved resonances considered. The system provides for the insertion of not more than 480 resonances.

The results are produced in the form of tables giving:

E_i - energy of the i -th resonance;

D_i - distance between the $(i-1)$ and i -th resonances; and

$\bar{D}_1, \bar{D}_2, \bar{D}_3$ - various assessments of the mean distance between levels:

$$\bar{D}_{1,i} = \frac{E_i - E_{i-1}}{i-1},$$

$$\bar{D}_{2,i} = \frac{\sum_{k=1}^i E_k^2 - \frac{1}{i} \left(\sum_{k=1}^i E_k \right)^2}{\sum_{k=1}^i k E_k - \frac{i+1}{2} \sum_{k=1}^i E_k},$$

$$\bar{D}_{3,i} = \sqrt{\frac{2}{i} \frac{\sum_{k=1}^i \bar{D}_{k,i}^2}{i-1}}.$$

The sense of the evaluation of \bar{D}_1 is clear. \bar{D}_2 represents an evaluation of \bar{D} from the slope of the $N(E)$ curve, where N is the number of resonances in the system of levels under consideration over the range $0 \leq E_1 \leq E$ [1].

\bar{D}_3 is an assessment of \bar{D} in terms of the quantity $\bar{D}^2 = \frac{2}{\pi} \bar{D}^2$ [2] obtained on the assumption that the distribution of spacings between resonances is a Wigner distribution.

\bar{D}_3 is most sensitive to weak level transmission, \bar{D}_2 the least sensitive. The energy dependence of $\bar{D}_1, \bar{D}_2, \bar{D}_3$ helps to determine the energy range where the transmission of resonances is insignificant.

The dispersions of D_1 and D_2 are considered for each fiftieth and/or for the last resonances. The dispersion of D_1 is calculated in accordance with Ref. [2] as $(10 \cdot N)^{-1}$, where N is the number of resonances considered (assuming the number to be greater than 10).

The dispersion of D_2 is evaluated from the mean square deviation of $N(E)$ from a straight line [1].

As basic data we have:

- (a) An array of resonance energies;
- (b) An array of characteristics showing to what system of levels y^π a given resonance belongs.

The program selects the levels that relate to a given system and prints a table of results for that system.

At the end of the whole table it prints out the value of ℓ or y for the given system of levels.

The program is written in ALGOL-60. After translation into TA-2 the circumference of the program is $\sim 4000_{10}$ cells. About 3 minutes are required to calculate the mean level spacings and print out a table of 50 resonances.

To analyse the totality of data on E_i , one normally compares the experimental and theoretical distributions of $\frac{D_i}{D}$.

The PAD program is intended for this purpose. The theoretical distribution of level spacings $f_B(x) = \frac{\pi}{2} x \ell - \frac{\pi x^2}{2}$ is given in the form of a straight line $y = n/20$ if we plot the U_k obtained from the equality $\int_0^{U_k} f(x) dx = \frac{k}{n}$ along the x axis on a linear scale.

The limits of the intervals U_k for $n = 20$ are taken from Ref. [1]. The PAD program enables us to calculate the number of $D_i = E_i - E_{i-1}$ which falls within the k -th distribution interval. The results are put out in the form of a table. This program is also written in ALGOL-60, and after translation into TA-2 the circumference of the program is $\sim 2088_{10}$ cells. Not more than 3 minutes is required for operation of the program with complex data emission.

REFERENCES

- [1] ABAGYAN, L.P., Methods of allowing for resonance effects in group constants for fast reactor calculations, Dissertation, Melekess (1971).
- [2] MALETSKI, Kh., PIKEL'NER, L.B., SALAMATIN, I.M., SHARAPOV, Eh.I., Statistical analysis of the spin dependence of neutron force functions in nuclei, JINRA R3-4484 Dubna (1969).

PROGRAM FOR CALCULATING CROSS-SECTIONS IN THE UNRESOLVED
RESONANCE REGION

L.P. Abagyan and M.N. Nikolaev

The set of programs called NERPA is used to derive sub-group parameters that make it possible to allow for the resonance structure of cross-sections in the unresolved resonance region. NERPA incorporates the REPA and SOM programs [1].

For a given energy point the REPA program calculates the momenta $\langle \sigma_x \sigma_t^n \rangle$ ($-5 \leq n \leq 3$), the brackets denoting averaging over the resonance structure in the neighbourhood of energy E on the assumption that the statistical laws of level width and spacing distribution are valid and that there is no correlation between the resonance parameters.

The basic data for the REPA program are the mean resonance parameters for each level system with a given spin J and parity π :

- $\Gamma_{j\pi}$ is the mean radiation width;
- $S_{j\pi}$ is the force function;
- $\Gamma_{in\ j\pi}$ is the mean width for inelastic scattering (or $\Gamma_{f\ j\pi}$ - the mean fission width).

The number of level systems should not exceed 10. For the energy under consideration, the program generates the parameters of a quasi-random sequence of 20 resonances [2, 3] described by theoretical distributions of the relations

$$\frac{\Gamma_{n_i}^0}{\Gamma_n^0}; \quad \frac{\Gamma_{n,i}}{\Gamma_{in}} \left(\text{or } \frac{\Gamma_{f,i}}{\Gamma_f} \right); \quad \frac{\partial \gamma_{f,i}}{\partial \gamma}; \quad \frac{\Gamma_{n_i}^0}{\Gamma_{n,i+1}^0}; \quad \frac{\Gamma_{n_i}^0}{\partial \gamma_{f,i}}$$

Thus in calculating cross-sections we take into account fluctuations in the neutron widths for elastic and inelastic scattering and in level spacings on the assumption that there is no correlation between the parameters of neighbouring resonances or between neutron widths and inelastic scattering (or fission) widths.

From the parameters of the 20 resonances obtained, the resonance structure of the cross-sections is calculated, each of the 20 resonances being placed in turn at the energy point of interest.

Just as in the URAN program [4], the cross-sections are described by the Bright-Wigner formula, with allowance for the Doppler effect and interference from resonance and potential scattering. In the cross-section calculation the contributions from 10 resonances to the right and 9 resonances to the left of the resonance under consideration are taken into account. On the basis of the cross-section energy curve, the momenta $\langle \sigma_x^n \sigma_t^j \rangle$ ($0 \leq n \leq 3$) are calculated for each level system (j, π) . Calculation of the mean values is based on integration, using trapezoids of the corresponding values within each of the 20 levels, followed by averaging of the results for all the resonances.

The momenta obtained for each level system are then used to compile overall momenta $\langle \sigma_x \sigma_t^n \rangle$ (for $0 \leq n \leq 3$) on the assumption that level systems with different spins and parity are independent.

To obtain the "negative" momenta (i.e. $-5 \leq n < 0$), the energy dependence of the cross-sections is used to determine the total (T) and partial (T_x) transmission functions for each system of levels (j, π) as a function of the thickness t :

$$T^{(j,\pi)}(t) = \langle e^{-\tilde{\sigma}(E)t} \rangle$$

$$T_x^{(j,\pi)}(t) = \frac{t}{4\tilde{\sigma}_x} \langle \tilde{\sigma}_x e^{-\tilde{\sigma}(E)t} \rangle$$

Further, these data are used to calculate the total and partial transmission functions for all level systems under consideration.

Under the assumption made that the resonance positions and widths corresponding to the different level systems do not correlate with each other, the transmission functions can be expressed in the form

$$T(t) = \prod_{j,\pi} T^{(j,\pi)}(t),$$

$$T_x(t) = T(t) \cdot \sum_{j,\pi} \frac{T_x^{(j,\pi)}(t)}{T^{(j,\pi)}(t)}.$$

The transmission functions are calculated for 50 thicknesses t selected by the REPA program in such a way as to ensure acceptable accuracy in the integral calculations (by the Simpson equation):

$$\langle \frac{\tilde{\sigma}_x}{\tilde{\sigma}^k} \rangle = \frac{\langle \tilde{\sigma}_x \rangle}{(k-1)!} \int_0^\infty t^{k-1} T_x(t) dt$$

On the basis of the momenta obtained by the REPA program, the SOM program can be used to calculate sub-group parameters from each energy in the unresolved resonance region.

The program is written in ALGOL-60 and after translation into TA-2 the volume of the program is ~ 4000 cells.

Calculation of sub-group parameters at one experimental point for three level systems takes \lesssim 1 hour of M-220 computer time.

REFERENCES

- [1] SAVOS'KIN, M.M., SINITSA, Eh.F., SINITSA, V.V., Program for calculating sub-group parameters (SOM), See present collection.
- [2] ABAGYAN, L.P., Methods of allowing for resonance effects in group constants for fast reactor calculations, Dissertation, Melekess (1971).
- [3] NIKOLAEV, M.N., ABAGYAN, L.P., PETROVA, L.V., POPLAVSKAYA, T.A., KORCHAGINA, Zh.A., Procedures for calculating group cross-sections in the unresolved resonance region, Paper presented at the Franco-Soviet Symposium, Melekess (1974).
- [4] ABAGYAN, L.P., NIKOLAEV, M.N., Program for calculating cross-sections in the resonance energy region, See present collection.

PROGRAM FOR CALCULATING CROSS-SECTIONS IN THE RESONANCE ENERGY REGION (URAN)

M.N. Nikolaev and L.P. Abagyan

The URAN program is intended for describing the cross-sections of non-fissionable nuclei in the resolved resonance region. The program makes it possible to calculate the resonance structure of the total cross-section (σ_t), the capture cross-section (σ_c) and the elastic scattering cross-section (σ_s). The cross-sections are calculated on the basis of the Bright-Wigner formula, with allowance for the Doppler effect.

$$\tilde{\sigma}_t(E) = \tilde{\sigma}_p + \sum_j \tilde{\sigma}_{m,j}(E) [\Psi_j(E, T) \cos(2\varphi_j(E)) + X_j(E, T) \sin(2\varphi_j(E))];$$

$$\tilde{\sigma}_c(E) = \sum_j \tilde{\sigma}_{m,j}(E) \Psi_j(E, T) \cdot \frac{\Gamma_{c,j}}{\Gamma_j},$$

where σ_p is the potential scattering cross-section;

$\sigma_{m,j}$ is the cross-section at the resonance peak multiplied by the isotope concentration;

Ψ, X are functions of the Doppler broadening of the resonance; and

φ is the phase of interference by resonance and potential scattering, calculated from a cross-section governed by neighbouring resonances in the same level system as the resonance of interest, and from the potential scattering cross-section.

The URAN program permits cross-section calculations for an isotope mixture. Apart from the energy dependence of the cross-sections, the program gives us in specified energy intervals (groups)

- (a) The average group cross-sections $\bar{\sigma}_t, \bar{\sigma}_c, \bar{\sigma}_s$;
- (b) The self-shielding coefficients as a function of the temperature of the medium (T) and the dilution cross-section (σ_0) for dilution of the element of interest by other non-resonance elements,
 $f_c(T, \sigma_0), f_s(T, \sigma_0); \psi_c(T, \sigma_0)$ (see Ref. [1]);
- (c) The total and partial transmission functions as a function of the specimen thickness;

$$T(t) = \frac{\int e^{-G_t(E)t} \phi(E) dE}{\int \phi(E) dE},$$

$$T_x(t) = \frac{1}{\bar{\sigma}_x} \int \bar{\sigma}_x(E) e^{-G_t(E)t} \phi(E) dE;$$

- (d) Momenta of the type $\bar{\sigma}_t^m$ and $\overline{\sigma_x \sigma^n}$ for $-5 \leq m \leq -1$; $-5 \leq n \leq 3$. All energy averagings within a group are done by the trapezoid method with respect to the $\Phi = E^R$ spectrum (R is any given number). Selection of the integration method is based on a variable energy step.

The URAN program provides for the possibility of simultaneous calculation of cross-sections in 10 energy groups which may contain up to 60 resonances.

The energy points are selected in accordance with the shape of σ_t and there may be as many as 200 for each resonance.

The self-shielding coefficients can be computed for five values of temperature and seven different values of σ_0 .

The program is written in ALGOL 60 and after translation into TA-2 the program volume is ~ 4000 cells. Operating time at full output volume is about 1 minute per resonance. The preliminary text and results of calculations in the URAN program have been published in Refs [2] and [3].

Parts of the program have now been perfected and there is a hook-up with the SOM (Combined Momenta Processing) program for calculating sub-group constants [4].

REFERENCES

- [1] ABAGYAN, L.P., BAZAZYANTS, N.O., BONDARENKO, I.I., NIKOLAEV, M.N., Group constants for nuclear reactor calculations, Atomizdat, Moscow (1964).
- [2] ABAGYAN, L.P., NIKOLAEV, M.N., PETROVA, L.V., URAN program for calculating cross-sections and coefficients of homogeneous resonance self-shielding in the resolved resonance region, Byull. Inf. Tsentra Yad. Dannym, III, Atomizdat, Moscow (1966) 418.
- [3] ABAGYAN, L.P., NIKOLAEV, M.N., PETROVA, L.V., Calculation of uranium-238 cross-sections with the URAN program, Byull. Inf. Tsentra Yad. Dannym, IV, Atomizdat, Moscow (1967) 392.
- [4] SAVOS'KIN, M.M., SINITSYA, E.F., SINITSYA, V.V., SOM program for calculating sub-group parameters, See present collection.

PROGRAM FOR COMPUTING TRANSMISSIONS IN THE RESONANCE
ENERGY REGION (EZAP)

L.P. Abagyan and M.N. Nikolaev

The EZAP (transmission energy dependence) program describes the energy dependence of transmissions in the region of resolved resonances for non-fissionable nuclei.

As in the URAN program [1], the resonance structure of the total cross-section is calculated from the Bright-Wigner equation, with allowance for the Doppler effect and interference from potential and resonance scattering. It is assumed that the energy resolution varies as

$$\Delta E = \kappa \cdot E^{3/2} \text{ (eV)}$$

where κ is a coefficient introduced into the program. In the cross-section calculations, the Doppler broadening of the resonances Δ increases by the energy resolution ΔE . On the basis of the energy dependence of the total cross-section, a transmission function is calculated for a given specimen thickness (t_0):

$$T(E) = e^{-\sigma_t(E) t_0}$$

The EZAP program allows simultaneous calculation of cross-sections for 100 resonances. The theoretical energy points are selected in accordance with the shape of σ_t and may be as many as 200 at each resonance.

The cross-sections and transmissions can be calculated for five different temperatures. The program is written in ALGOL-60. After translation into TA-2 the program volume is ~ 3000 cells. Operating time for the EZAP program is about one minute per resonance.

REFERENCE

- [1] NIKOLAEV, M.N., ABAGYAN, L.P., Program for calculating cross-sections in the resonance energy region (URAN), See present collection.

PROGRAM FOR MULTI-LEVEL CALCULATION OF CROSS-SECTIONS
FROM RESONANCE PARAMETERS (MUF)

L.P. Abagyan, M.N. Nikolaev and V.V. Sinitza

The MUF program is intended for describing the cross-sections of non-fissionable nuclei in the resolved resonance region. With it we can calculate the resonance structure of the total cross-section (σ_t), the capture cross-section (σ_c) and the elastic scattering cross-section (σ_s) for an isotope mixture. The program is intended for calculating the cross-sections of those nuclei for which the Doppler effect may be disregarded.

The MUF program is based on a multi-level equation derived in the Wigner-Eisenbud formalism [1]:

$$\sigma_t(E) = 4\pi\lambda^2 \sum_l (2l+1) \sin^2 \varphi_l + 4\pi\lambda^2 \sum_\nu g_\nu \frac{(B_1 + B_2^2 + K_\nu^2) (\cos 2\varphi_\nu - B_2 \sin 2\varphi_\nu)}{(1+B_1)^2 + B_2^2},$$

$$\sigma_c(E) = 4\pi\lambda^2 \sum_\nu g_\nu \frac{B_1}{(1+B_1)^2 + B_2^2},$$

where

$$B_1 = \sum_i \frac{\Gamma_{ni}/\Gamma_{si}}{1 + (2 \frac{E_{oi}-E}{\Gamma_{si}})^2}, \quad B_2 = \sum_i \frac{\Gamma_{ni}/\Gamma_{si} (2 \frac{E_{oi}-E}{\Gamma_{si}})}{1 + (2 \frac{E_{oi}-E}{\Gamma_{si}})^2}.$$

λ is the neutron wavelength; and

g_ν is the statistical weight of a state with given ν .

For each system of levels ν we also specify:

b_ν , the fraction of the isotope in the mixture considered; and

A_ν , the atomic weight of the isotope.

If φ_0 is the scattering phase on the reflecting sphere,

$$\varphi_0 = \kappa r,$$

$$\varphi_1 = \kappa r - \arctg(\kappa r),$$

$$\varphi_2 = \kappa r - \arctg\left(\frac{3\kappa r}{1-(\kappa r)^2}\right),$$

where r is the interaction radius and k the wave number.

The equation given above was derived in the approximation of a large number of independent radiation channels and single-channel elastic scattering.

Apart from the detailed energy dependence of the cross-sections, the MUF program gives us for specified energy intervals (groups):

- (a) The average group cross-sections $\langle \sigma_t \rangle$, $\langle \sigma_c \rangle$, $\langle \sigma_s \rangle$;
- (b) The self-shielding coefficients f_t , f_c , f_s (see Ref. [2]) as functions of the dilution cross-section (σ_o) for dilution of the element of interest by other non-resonance elements;
- (c) Total and partial transmission functions as related to specimen thickness:

$$T(t) = \frac{1}{\Delta E} \int_{\Delta E} e^{-\bar{\sigma}(E)t} E^R dE,$$

$$T_x(t) = \frac{1}{\langle \bar{\sigma}_x \rangle \Delta E} \int_{\Delta E} \bar{\sigma}_x(E) e^{-\bar{\sigma}(E)t} E^R dE,$$

- (d) The momenta $\langle \bar{\sigma}_x \bar{\sigma}^n \rangle$, where

$$x \leq 3$$

$$-5 \leq n \leq 3$$

R determines the shape of the intra-group spectrum, the weight of which is used for the averaging. The group integrals are calculated by the trapezoidal method. The MUF program provides for simultaneous calculation of cross-sections in 26 groups which may contain up to 100 resonances. The theoretical energy points are selected in accordance with the shape of the total cross-section and may number 200 in each resonance. The self-shielding coefficients can be calculated for 7 different σ_o .

The momenta obtained with this program can be used as basic input data for the SOM program [3]. In this way, the combined MUF and SOM programs make it possible to calculate the sub-group constants.

The MUF program is written in ALGOL-60 (TA-2), and its volume in codes is ~ 4000. Operating time for full volume output is about one minute per resonance. The program text and a calculation are to be published in Ref. [4].

REFERENCES

- [1] LUK'YANOV, A.A., Approximate multi-level model of neutron cross-sections in the resonance region. Preprint FEI-124 (1968).

- [2] ABAGYAN, L.P., BAZAZYANTS, N.O., BONDARENKO, I.I., NIKOLAEV, M.N.,
Group constants for nuclear reactor calculations, Atomizdat (1964).
- [3] SAVOS'KIN, M.N., SINITSA, Eh.F., SINITSA, V.V., Program for calculating
sub-group parameters, See this collection.
- [4] ABAGYAN, L.P., NIKOLAEV, M.N., SINITSA, V.V., MUF program for multi-level
calculation of non-fissionable nuclei cross-sections from resonance
parameters. Yad. Konst. 9 (1972) 146.

PROGRAM FOR AVERAGING CROSS-SECTIONS
(Averaging of cross-sections for the ARAMKO program)

V.E. Sinitza

The PRUSSAK program is a combination of two programs making it possible, on the basis of the known detailed energy dependence of the cross-sections, to obtain the following quantities for specified energy intervals (groups):

- (a) Average group cross-sections $\langle \sigma_x \rangle$, where the angle brackets denote averaging over the group with a weight $\varphi_g(E)$;
- (b) Self-shielding coefficients as a function of the dilution cross-section (σ_0) for dilution of the element of interest by other non-resonance isotopes (see Ref. [2]);
- (c) The momenta $\langle \sigma_x \sigma^{-n} \rangle$ required for calculating sub-group constants [3], where

$$x \leq 3$$
$$-5 \leq n \leq 3$$

Within each group the program allows averaging over any one of three types of spectrum:

- (1) The spectrum $\varphi_g = E^R$, $|R| < 7$;
- (2) The fission spectrum $\varphi_g = 2 \exp(-\frac{\sqrt{E}}{T}) \sinh(\sqrt{bE})$;

where

$$T = 0,965(0,76 + 0,1v) ;$$
$$b = 2,29/(0,76 + 0,1v)^2 ;$$

E is energy (MeV), and

v is the number of secondary neutrons

- (3) An arbitrary spectrum specified by points (not more than 200 energy points). Integration is done by the trapezoidal method.

There are no limitations on the number of points in the arrays E and σ . The number of groups must not exceed 100. The energies E can be specified in eV, keV and MeV. The program is run on an M-220 computer.

The programs in the set are placed in the MB-1 magnetic drum. The zero program prepares information on the detailed cross-section curve for recording on magnetic drum MB-2, and records on the drum in the order

required for the operation of the first program. The first program calculates the integrals described above and prints them out. If not all the information is used, the system reverts to the zero program. The zero program introduces the next batch of input data, and so on.

Depending on the completeness of the set of cross-sections, the following operational variants are foreseen:

- (1) The set of cross-sections is complete, i.e. it contains the total cross-section (σ_t) and all partial cross-sections (σ_x). In this case a complete set of group constants and momenta averaged over the specified spectrum is determined;
- (2) The set of cross-sections lacks only one partial cross-section, which can be calculated as $\sigma_t(E) - \sum_x \sigma_x(E)$. In this case, too, a complete set of group constants and momenta averaged over the required spectrum is determined;
- (3) There is an incomplete set of cross-sections, which contains σ_t . In this case a complete set of group constants and momenta averaged over the desired spectrum is determined only for the cross-sections of the reactions specified;
- (4) The set of cross-sections does not contain σ_t . In this case the self-shielding coefficients and momenta are not determined, and only the group cross-sections averaged over the desired spectrum are printed out.

The momenta obtained in this program can be used as input data for the SOM sub-group parameter program.

The text of the PRUSSAK program is written in ALGOL-60 (TA-2) and the operating time is about 20 minutes when the circumference of the input information is ~ 4000 .

REFERENCES

- [1] KHOKHLOV, V.F., SAVOS'KIN, M.M., NIKOLAEV, M.N., Byull. Inf. Tsentra Yad. Dannym, VI, Supplement, Vol. 2, Atomizdat, Moscow (1971) 7.
- [2] ABAGYAN, L.P., BAZAZYANTS, N.O., BONDARENKO, I.I., NIKOLAEV, M.N., Group constants for nuclear reactor calculations, Atomizdat, Moscow (1964).
- [3] SAVOS'KIN, M.M., SINITSА, Eh.F., SINITSА, V.V., Program for calculating sub-group parameters (SOM), See this collection (page 45).

PROGRAM FOR CALCULATING SUB-GROUP PARAMETERS (SOM)

M.M. Savos'kin, Eh.F. Sinitza and
V.V. Sinitza

The SOM (Combined Momentum Processing) program is intended for calculation of sub-group parameters on the basis of the cross-section momenta $\langle \sigma_x \sigma^n \rangle$. The brackets denote energies averaged over an interval, and x is the number of the reaction:

$$x \leq 3$$
$$-5 \leq n \leq 3.$$

The sub-group parameters [1, 2] are determined as a set of probabilities a_i (called sub-group fractions) of having within the averaging interval a total cross-section σ_i and the corresponding reaction cross-sections σ_{xi} . The sub-group parameters are selected in such a way as to preserve the set of cross-section momenta with an accuracy not inferior to the specified accuracy.

Calculation of the sub-group parameters relies on an analytical solution of a system of equations (see Ref. [3]):

$$\langle \sigma_x \sigma^n \rangle = \sum a_i \sigma_{xi} \sigma_i^n; \quad n_1 \leq n \leq n_2$$

The quantities n_1, n_2 are determined by the number of sub-groups and are fixed on the program. The sub-group parameters are determined successively for 1, 2, 3 and 4 sub-groups. Transition to a larger number of sub-groups is made when the momenta bounding the system are determined by the sub-group parameters obtained from the system with an accuracy inferior to the specified accuracy. The SOM programme is written in ALGOL-60 (TA-2) and the volume is ~ 1500₈. The time taken to determine the sub-group parameters from the derived momenta is ≤ 2 minutes.

REFERENCES

- [1] NIKOLAEV, M.N., IGNATOV, A.A., ISAEV, N.V., KHOKHLOV, V.F., Sub-group method of allowing for the resonance structure of cross-sections in neutron calculations (Part I), Atom. Ehnerg. 29 (1970) 1.
- [2] Idem (Part II), Atom. Ehnerg. 30 (1971) 5.
- [3] BELLMAN, R., Introduction to the theory of matrices, Nauka Press, Moscow (1969).

PROGRAM FOR CALCULATING AVERAGE GROUP ANGULAR MOMENTA FOR
SCATTERING CROSS-SECTIONS AND TRANSMISSION FUNCTIONS
(UMBLOK)

M.N. Nikolaev and N.O. Bazazyants

The UMBLOK program is intended for averaging the angular momenta of scattering cross-sections (B_m) and for calculating transmission functions (sum T_k).

It enables us to average for any energy breakdown with a number of groups not exceeding 50. The program provides the possibility of averaging eight angular momenta with not more than 450 points specified in each array - for both energy (E) and angular momenta (B_m).

If necessary, in the UMBLOK program the angular momenta can be averaged over a spectrum (Φ_m) taking into account the resonance structure of the cross-section [1]:

$$\Psi_m(E) = \Phi(E) \cdot \sum_{n=0}^m a_{m-n} \cdot \frac{1}{\Sigma^{n+1}(E)} \quad (1)$$

(Σ is the total cross-section of the medium.)

The coefficients a_m are calculated from the recurrent equation

$$a_0 = 1, \quad (2)$$

$$a_m = \left(\sum_{n=0}^{m-1} a_{m-n-1} \left\langle \frac{B_m(E')}{\Sigma^{n+2}(E')} \right\rangle \right) / \left(1 - \left\langle \frac{B_m(E')}{\Sigma(E')} \right\rangle \right);$$

while the averaging equations take the form

$$\langle B_m \cdot \Psi_m \rangle = \sum_{n=0}^m a_{m-n} \left\langle \frac{B_m}{\Sigma^{n+1}} \right\rangle, \quad (3)$$

where the sign $\langle \rangle$ denotes averaging over the "standard" spectrum $\Phi(E')$, calculated in accordance with Ref. [2] in the following way:

Below 2.5 MeV $\Phi(E') = (E')^{R_i} \quad (4)$

where R_i is a real number $|R_i| \leq 9$ (i is the number of the group considered);

Above 2.5 MeV

$$\Phi(E') = \sqrt{\frac{4}{\alpha a^3 b}} \cdot e^{-\frac{\alpha b}{4}} \cdot e^{-E'/a} \cdot \text{sh} \sqrt{b E'}, \quad (5)$$

(Watt's spectrum)

Here $a = 0.965 (0.76 + 0.1 \nu)$;

$b = 2.29 / (0.76 + 0.1 \nu)^2$; and

ν is the mean number of secondary neutrons emitted in fission.

If the resonance structure of the cross-sections is not clearly pronounced, the spectrum $\varphi(E) \rightarrow \Phi(E)$ and the angular momenta are averaged only on the basis of the standard spectrum.

The program calculates transmission functions with the form

$$\text{sum } T [\ell] = \frac{\int_{\Delta E_i} \ell^{-\Sigma(E) \cdot t_i[\ell]} \varphi(E) dE}{\int_{\Delta E_i} \varphi(E) dE}, \quad (6)$$

$$\text{sum } TK^m[\ell] = \frac{\int_{\Delta E_i} B_m(E) \ell^{-\Sigma(E) \cdot t_i[\ell]} \varphi(E) dE}{\int_{\Delta E_i} B_m(E) \cdot \varphi(E) \cdot dE} \quad (7)$$

($m = 0, 1, \dots ?$)

where $t_i [\ell]$ is the thickness of the specimen ($tol [\ell]$) referred to the mean group total cross-section ($Cig [i]$), i being the number of the group considered:

$$t_i [\ell] = \frac{tol [\ell]}{Cig [\ell]}; \quad \ell = 1, 2, \dots 40 \quad (8)$$

$tol [\ell]$ is selected in such a way as to provide a sufficiently detailed description of the transmission curve for a wide range of thicknesses.

The program is written in ALGOL-60 (TA-2) and occupies 2078₈ cells. The counting time for one variant, including the input of basic data and print-out of the results, is about eight minutes and is governed mainly by the input and output of information.

REFERENCES

- [1] ABAGYAN, L.P., MIKHAIJUS, F.F., NIKOLAEV, M.N., ORLOV, V.V., Propagation of resonance neutrons in homogeneous media, Byull. Inf. Tsentra Yad. Dannym, Supplement, Atomizdat (1968).
- [2] ABAGYAN, L.P., BAZAZYANTS, N.O., BONDARENKO, I.I., NIKOLAEV, M.N., Group constants for nuclear reactor calculations, Atomizdat, Moscow (1964).

PROGRAM FOR CALCULATING MULTIGROUP MATRICES OF
ANGULAR MOMENTA FOR ELASTIC AND INELASTIC
NEUTRON SCATTERING CROSS-SECTIONS WITH
ALLOWANCE FOR SELF-SHIELDING (MANNERS)

N.O. Bazazyants and M.V. Starostenko^{*/}

The MANNERS program calculates matrices for elastic and inelastic slowing down of neutrons in arbitrary scattering anisotropy, with accurate allowance for the energy loss on recoil of the product nucleus, for any breakdown of the energy interval into groups. The program can calculate any number of momenta, being limited only by the capacity of the computer; at present it handles six momenta. The program takes account of the resonance structure of the cross-sections.

The l -th momentum associated with the probability of inelastic scattering of a neutron from the group i into group jk , as calculated in the MANNERS program in the multigroup approximation, takes the following form [1]:

$$\begin{aligned} \tilde{\sigma}_{in}^{i \rightarrow jk} &= \frac{\tilde{\sigma}_{in}^{i \rightarrow jk}}{\tilde{\sigma}_{in}^i} = \\ &= (2m+1) \cdot \sum_{k=1}^K \frac{\sum_{l=0}^{\infty} \int_{E_i}^{E_{l+1}} \int_{E_l}^{E_{l+1}} \tilde{\sigma}_{in}(E', E_0^k) \cdot \omega_l^k(E') dE' \int_{\mu_L(\tilde{E}_{jk}, E')}^{\mu_L(\tilde{E}_{jk-1}, E')} P_l(\mu_L) \cdot P_m(\mu_L) d\mu_L}{2q_l \int_{E_i}^{E_{l+1}} \tilde{\sigma}_{in}(E') \cdot F_0(E') dE'} \end{aligned} \quad (1)$$

where $\tilde{\sigma}_{in}^i = \frac{\int_{E_i}^{E_{l+1}} \tilde{\sigma}_{in}(E') \cdot F_0(E') dE'}{\int_{E_i}^{E_{l+1}} F_0(E') dE'}$ is the mean group cross-section for inelastic scattering;

$$\mu_L = \cos \theta_k = \frac{A+1}{2} \sqrt{\frac{E}{E'}} - \frac{A-1}{2} \sqrt{\frac{E'}{E}} + \frac{A}{2} \cdot \frac{E_0^k}{\sqrt{E \cdot E'}} \quad (2)$$

E' is the neutron energy before scattering;

E is the neutron energy after scattering;

E_0^k is the energy of the k -th excited level of the target nucleus;

$\tilde{\sigma}_{in}(E', E_0^k)$ is the inelastic scattering cross-section for a neutron with energy E' at the level E_0^k (elastic scattering is treated as inelastic at the level with zero excitation energy);

^{*/} Obninsk branch of the Moscow Engineering Physics Institute (MIFI).

$$\omega_c^k = (2\ell + 1) \frac{\int_{\tilde{E}_i}^{\tilde{E}_i'} \tilde{\sigma}_{in}(E', \mu_L) P_\ell(\mu_L) d\mu_L}{\int_{\tilde{E}_i}^{\tilde{E}_i'} \tilde{\sigma}_{in}(E', \mu_L) d\mu_L}, \quad (3)$$

$P_\ell(\mu_L)$ and $P_m(\mu_L)$ are Legendre polynomials;

L is the index of the laboratory frame of reference;

\tilde{E}_i and \tilde{E}_{i-1} are the boundaries of the energy region in group i from which scattering to group jk is possible;

\tilde{E}_{jk} and \tilde{E}_{jk-1} are the boundaries of the energy region in group jk which may be entered by neutrons scattered from group i ;

$F_m(E)$ is the spectrum of the m -th harmonic of the neutron flux in the medium. It is assumed that within the energy groups considered, this spectrum does not depend on spatial co-ordinates.

$$F_m \sim \Phi_m(E, \vec{r}) \sum_{n=0}^{\infty} a_{m-n} \frac{1}{\sum_{n=0}^{\infty} a_n(E)}, \quad (4)$$

where $\Phi_m(E, \vec{r})$ is a smoothly varying function of the energy and co-ordinates. It is assumed in the MANNERS program that this function does not depend either on the co-ordinates or on m :

$$\Phi_m(E, \vec{r}) = \Phi(E). \quad (5)$$

The coefficients a_{m-n} are not calculated in the MANNERS program, but if it is necessary to allow for the resonance structure, they are taken into account in the UMBLOK 4 program.

In the MANNERS program the spectrum $\Phi(E)$ can take either the form

$$\Phi(E) = E^{R_i} \quad (6)$$

where R_i is a real number $|R_i| \leq 9$,
or

$$\Phi(E) = \sqrt{\frac{A}{2\alpha^2 b}} \cdot E^{-\frac{\alpha b}{4}} \cdot e^{-E/\alpha} \cdot \sinh \sqrt{b \cdot E} \quad (7)$$

(Watt's spectrum)

$$\begin{aligned} \alpha &= 0,965(0,76 + 0,1 \cdot \mu) \\ b &= 2,29/(0,76 + 0,1 \cdot \mu)^2 \end{aligned} \quad (8)$$

where μ is the average number of secondary neutrons emitted in fission.

The program is written in ALGOL-60 (TA-2M) and the translated program takes up 2734₈ cells, not counting the arrays of input data. The counting time for one variant (six momenta of the slowing-down matrix in a twenty-six group breakdown [2]) is about 40 minutes, with an additional breakdown of the interval between two given points into 400 parts and with a total number of specified energy points ~ 80.

With the MANNERS program any number of variants can be run consecutively.

REFERENCES

- [1] BAZAZYANTS, N.O., ZABRODSKAYA, A.S., NIKOLAEV, M.N., Group parameters for neutron scattering anisotropy, Yad. Konst. 8, Part 2, TSNIIATOMINFORM, Moscow (1972) 3.
- [2] ABAGYAN, L.P., BAZAZYANTS, N.O., BONDARENKO, I.I., NIKOLAEV, M.N., Group constants for nuclear reactor calculations, Atomizdat, Moscow (1964).
- [3] NIKOLAEV, M.N., BAZAZYANTS, N.O., Program for calculating average group angular momenta for scattering cross-sections and transmission functions (UMBLOK), See this collection.

KRITS PROGRAM FOR CORRECTING GROUP
CONSTANTS FROM INTEGRAL
EXPERIMENTAL DATA

M.N. Nikolaev, N.O. Bazazyants and L.V. Gorbacheva

The KRITS program enables us to calculate corrections to the group cross-sections of basic reactor materials. In a certain sense these corrections permit the best possible matching of a number of neutron physics characteristics calculated for critical assemblies with the experimentally determined results, without going beyond the bounds of the evaluated errors in the group constants.

The KRITS program makes it possible to introduce correlations between admissible variations of various cross-sections in different groups. These correlations are taken into account by parametrization of the behaviour of the corrected cross-sections.

Let $\bar{\sigma}_s(E, \vec{a}^0)$ be a parametric approximation of the behaviour of the cross-section for the s-th reaction, as evaluated from available nuclear data. The group constants are sought in the form

$$\vec{\sigma} = \vec{\sigma}_0 + \hat{T} \vec{\delta a} \quad (1)$$

where the group constants for all reactions considered in all the groups are components of the vector $\vec{\sigma}^0$:

$\vec{\sigma}$ is the unknown vector of the corrected constants;

\hat{T} is the matrix of group constant derivatives for the parameters;

$\vec{\delta a}$ is the vector of the corrections to the parameters (which has to be determined during the correction process).

The $\vec{\sigma}_0$ values are determined directly from evaluated data. Thus, a parametric description of the cross-section energy dependences is used only to calculate the matrix \hat{T} ; the parametric approximation does not have to give us the detailed energy dependence of the cross-sections - it need only describe the main features of that dependence.

The corrections $\vec{\delta a}$ are determined by minimizing the quadratic functional

$$S = \sum_j \frac{1}{\Delta^2 \kappa_j^0} (\kappa_j^0 - 1 + \sum_g \bar{\kappa} a_g^{jg}) \cdot \frac{1}{\bar{\sigma}_s^{jg}} \sum_n T_{sn}^{jg} \delta a_n)^2 + \sum_s \sum_g \frac{(\bar{\sigma}_s^{jg})^2}{\Delta^2 \bar{\sigma}_s^{jg}} \left[\frac{\bar{\sigma}_s^{jg} - \sum_n T_{sn}^{jg} \delta a_n}{\bar{\sigma}_s^{jg}} \right]^2 \quad (2)$$

Here k_j^0 is the ratio between the theoretical and experimental values of the j -th integral parameter (flux and/or importance functional);

$\overline{\Delta^2}_{kj}$ is the dispersion of this ratio;

Za_s^{jg} is the coefficient of sensitivity of the j -th functional to variation of the s -th cross-section in the g -th group [1].

The first term enables us to take the dependence of the group constants on the composition of a critical assembly into account (this dependence is governed by the effects of resonance and/or heterogeneous shielding of the cross-sections).

The second, regularizing term contains unshielded cross-sections. The use of group cross-sections (rather than the parameters \vec{a}) for regularization is associated with the difficulty of determining a correlation matrix for the errors in these parameters. Failure to allow for the correlations of group constant errors in the regularizing term does not distort the results of the calculation. These correlations are automatically taken into account in determining the corrections to the cross-sections through the parameter corrections (see (1)).

The vector $\vec{\delta a}$ is determined by solving a system of linear equations obtained by equating the derivatives $\partial S / \partial \delta a_r$ to zero. The inverse matrix of the system is an error matrix for the corrected parameters. The corrected values of the group constants are calculated from Eq. (1). A matrix of group constant errors is not calculated in the program since it can be found very easily when needed from the more compact parameter error matrix and the matrix \hat{T} .

The KRIPS program is tied in with the catalogue of sensitivity coefficients SEMAFOR-1 [2], and is also co-ordinated with the SIGMA-1 and SIGMA-2 programs, which determine the polynomial parametrization of the cross-section energy dependence in the non-resonance region and the calculation of the matrix \hat{T} for the parameters found.

The elements of the matrix \hat{T} corresponding to the resonance region have to be inserted in the program as input data. The information in Ref. [3] can be used for uranium-238.

The program is written in ALGOL-60 (TA-2). The maximum number of parameters is $a_n = 15$. The maximum number of energy groups in which the coefficients Za_s^{jg} are important is 15. The number of functionals k_j is unlimited. The counting time for a typical variant is 10 minutes.

REFERENCES

- [1] USACHEV, L.N., ZARITSKIJ, S.M., Accuracy of calculated fast-reactor characteristics as a function of the accuracy of the basic constants, Nuclear Data Conference, Paris (1966).
- [2] ZARITSKIJ, S.M., Generalized theory of perturbations and some problems of fast reactor physics, Dissertation, Melekess (1970).
- [3] ABAGYAN, L.P., et al., Effect of the magnitude of mean resonance parameters on blocking of the uranium-238 cross-section, Byull. Inf. Tsentra Yad. Dannym, 8, part I (1972) 154.

CALCULATION OF SPHERICAL TRANSMISSION BY THE MONTE CARLO METHOD

M.Yu. Orlov and A.M. Tsibulya

The programs in the APULROKS and SKORLUPA series are intended for calculation of spherical transmissions by the Monte Carlo method in inverse (APULROKS series) and direct (SKORLUPA series) geometries. It is possible to calculate the following effects simultaneously or separately:

1. The resonance structure of the cross-sections of the sphere material, in a sub-group approximation;
2. Neutron slowing down (elastic or inelastic) by a multigroup approach, with allowance for fission and the (n,2n) reaction in a 26-group transport approximation;
3. Neutron scattering anisotropy (the scattering indicatrix is given as a Legendre polynomial expansion to the fifth order);
4. The finite dimensions of the detector and flux depression due to neutron absorption in the detector;
5. The finite nature of the detector/source distance. Possibilities of individual programs are shown in the table.

Program	1	2	3	4	5	$\Delta T/T$	t
SKORLUPA I (2)	X					6	1'
SKORLUPA III	X	X				6	1'
SKORLUPA IV (3)	X	X	X			6	1'
APULROKS I (2)	X		X	X		$\frac{R_2}{R_d} \sigma$	80'
APULROKS II (2)	X		X	X		$\frac{R_2}{R_d} \sigma$	10'
APULROKS III	X	X				$\frac{R_e}{R_d} \sigma$	5'
APULROKS IV (3)	X	X	X		X	≤ 6	4'
APULROKS VII	X	X			X	≤ 6	4'

The first column shows the number of sub-groups in parentheses. $\Delta T/T$ is the relative error in transmission; $\sigma = 1/\sqrt{N} \times T$, where N is the number of histories; t is the counting time for 10 000 histories, given a sphere thickness of one free path length.

The multigroup programs calculate the probabilities (Pi) of recording neutrons belonging to the i-th source spectrum group at a given detector

efficiency (ϵ_i) and the probability is (k_i) of recording neutrons belonging to the i -th detector group with a given source spectrum (S_i).

$$T = \frac{\sum_i P_i \cdot S_i}{\sum_i S_i} = \frac{\sum_i k_i \cdot S_i}{\sum_i \epsilon_i}$$

The single-group programs, except for SKORLUPA I, calculate the probabilities P_{1em} (P_{2em}) of recording neutrons that belonged to the first (second) subgroups before reaching the sphere, underwent "e" collisions and were present "m" times in the second (first) subgroup. The absorption cross-section in this case is considered to be zero. These probabilities make it possible to write an analytical expression for transmission in the case of a sphere with absorption (T). The relative error in the absorption effect ($\delta = T_0 - T$), where T_0 is the sphere transmission without absorption, is equal to the relative error in T.

The single-group program SKORLUPA I calculates the transmission of neutrons from one group, with allowance for absorption in the sphere material and possible removal of neutrons beyond the group through slowing down.

All the programs are written in ALGOL-60 and the operating time is shown in the table.

A SYSTEM OF PROGRAMS (SOPOT) FOR PLANNING EXPERIMENTS AND
DETERMINING THE ACCURACY WITH WHICH NUCLEAR PHYSICS
CONSTANTS MUST BE EVALUATED TO ENSURE THE REQUISITE
ACCURACY IN REACTOR CALCULATIONS

Yu.G. Bobkov

The following problems can be solved with this system:

1. Planning of an optimum combination of micro-experiments and evaluations to ensure specified accuracy in a reactor parameter calculation;
 2. Planning of integral measurements, including assessment of the information yield of an experiment or set of experiments with respect to some particular reactor parameter, determination of the required experimental accuracy, and establishment of an optimum set of experiments for a particular reactor parameter;
 3. Prediction of reactor parameters and their dispersions on the basis of a complete programme of micro- and macro-experiments, and fitting of group parameters to obtain the best possible description of the set of experiments;
 4. Combined planning of differential and integral experiments.
- All these procedures are written in ALGOL for the TA-1M translator.

The number of independent parameters involved in solving all the enumerated problems is 190_{10} . When data transfer is small, the number of parameters can be increased to 2000_8 .

REFERENCES

- [1] BOBKOV, Yu.G., SOPOT - a system of programs for planning experiments. FEI Report TR-1007 (1972).