

ANABELLA TUDORA

BN
ENRICO SARTORI

**BIBLIOTECI
DE DATE NUCLEARE
ȘI CODURI DE CALCUL**

EDITURA UNIVERSITĂȚII DIN BUCUREȘTI



BIBLIOTECA CENTRALĂ
UNIVERSITARĂ
București

Cota III 469927
Inventar C199804076

171236

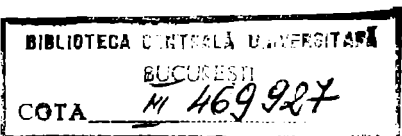
ANABELLA TUDORA
Universitatea din București
Facultatea de Fizică

ENRICO SARTORI
Agenția OCDE pentru
Energie Nucleară, Paris

**BIBLIOTECI
DE DATE NUCLEARE
ȘI CODURI DE CALCUL**

EDITURA UNIVERSITĂȚII DIN BUCUREȘTI
1998

Referenți științifici: Conf. dr. OCTAVIAN SIMA
C. P.I. Dr. ing. NICOLAE VÂLCOV



458

93

B.C.U. București



C199804076

© Editura Universității din București
Șos. Panduri, 90-92, București - 76235; Telefon 410.23.84

Aduc mulțumirile mele domnului profesor dr. Gheorghijă Vlăducă, care prin competența sa, prin tot ce m-a învățat și prin sprijinul pe care mi l-a acordat de-a lungul timpului, a făcut posibilă participarea mea, în cadrul colectivului pe care-l coordonează, la activitatea de evaluare de date nucleare și la colaborări internaționale.

Anabella Tudora

Lucrarea de față se adresează atât studenților care urmează anul de studii aprofundate în specialitatea Fizică Nucleară Aplicată cât și tinerilor cercetători din domeniul nuclear.

Am dorit să facem o informare a cititorilor români asupra situației actuale și de perspectivă a bibliotecilor de date nucleare și coduri de calcul din domeniul nuclear, să sistematizăm informațiile asupra modului de organizare și de accesare a acestor baze de date, cu prezentarea conținutului, formatelor, a necesităților și lipsurilor acestora precum și a unor elemente privitoare la activitatea de evaluare, prelucrare, validare a datelor nucleare și a codurilor de calcul.

Colaborarea noastră și documentarea autoarei românce au fost posibile ca urmare a bursei TEMPUS de care a beneficiat aceasta din urmă.

Informațiile cuprinse în această lucrare sperăm să încurajeze participarea unui număr mai mare de tineri cercetători din România la evaluarea de date nucleare, la actualizarea și completarea bibliotecilor de date nucleare și la îmbogățirea colecției de coduri de calcul din domeniul nuclear.

Autorii

Cuprins

1. <u>Situația actuală și de perspectivă a datelor nucleare</u>	1
1.1 Datele nucleare - utilizarea și procesarea lor	1
1.1.1 Utilizarea datelor nucleare	1
1.1.2 Măsurarea datelor nucleare	1
1.1.3 Compilarea datelor nucleare măsurate	5
1.1.4 Evaluarea datelor nucleare compilate	6
1.1.5 Procesarea datelor nucleare evaluate	7
1.1.6 Validarea și ajustarea datelor nucleare	7
1.1.7 Tratarea incertitudinilor	8
1.2 Recensământ al necesităților de date nucleare	9
1.2.1 Necesități rezultate din incertitudinile și lacunele în cunoașterea datelor nucleare	9
1.2.2 Necesități pentru reactorii actuali	10
1.2.3 Necesități pentru ciclul de combustibil	11
1.2.4 Necesități pentru reactorii de viitor	11
1.2.5 Necesități pentru acceleratori și transmutația deșeurilor	12
1.3 Sinteză asupra situației datelor nucleare	12
1.3.1 Situația datelor nucleare în Europa	12
1.3.2 Situația datelor nucleare în SUA	16
1.3.3 Situația datelor nucleare în Japonia	18
1.4 Riscuri privind neacoperirea necesităților de date nucleare	19
1.4.1 Situația mijloacelor materiale și a echipelor de cercetare	19
1.4.2 Mizele atașate incertitudinilor asupra datelor nucleare	19
1.4.3 Datele nucleare pentru care s-au identificat necesități	21
1.4.4 Scenarii ale evoluției mijloacelor și analiza consecințelor lor	26
1.5 Alte domenii de cercetare pentru care trebuie satisfăcute necesități de date nucleare	28
Bibliografie (1)	29
2. <u>Clasificarea datelor nucleare</u>	30
2.1 Date nucleare de bază	30
2.1.1 Producerea datelor nucleare de bază	32
2.1.2 Compilarea datelor nucleare de bază	32
2.2 Date nucleare evaluate	33

2.3 Date nucleare procesate	35
2.4 Coduri de procesare	35
Bibliografie (2)	36
3. <u>Centre de date nucleare</u>	38
4. <u>Biblioteci de parametri de intrare</u>	41
4.1 Motivația dezvoltării bibliotecilor de parametri de intrare	41
4.2 Scurtă trecere în revistă a bibliotecilor de parametri de intrare	41
4.2.1 China - CENPL	41
4.2.2 Japonia - EVLDF	41
4.2.3 Europa - NUBASE	42
4.2.4 IAEA - biblioteca de referință pentru parametri de intrare	42
4.3 Bibliotecile de referință de parametri de intrare	42
Bibliografie (4)	52
5. <u>Biblioteci de date nucleare</u>	53
5.1 Date neutronice experimentale	55
5.2 Formatul ENDF pentru fișiere de date evaluate	55
5.3 Coduri de procesare ENDF	56
5.4 Biblioteci majore de date neutronice evaluate	56
5.5 Biblioteci multigrup de date nucleare neutronice	
5.6 Standarde de date nucleare pentru măsurări	57
5.7 Secțiuni neutronice termale, parametri de rezonanță, integri de rezonanță	58
5.8 Legi de împrăștiere ale neutronilor termici	58
5.9 Actinide	58
5.10 Randamente de produși de fisiune	59
5.11 Produși de fisiune - date neutronice evaluate de reacții și dezintegrare	59
5.12 Radiații γ induse de neutroni	60
5.13 Date de activare cu neutroni, aplicații generale	60
5.14 Date de activare cu neutroni pentru dozimetrie	61
5.15 Biblioteci neutronice specializate de date amestecate	61
5.16 Date fotonucleare	61
5.17 Date de interacții foto-atomice	62
5.18 Date de reacții nucleare cu particule încărcate	62
5.19 Date nucleare pentru energii intermediare	63
5.20 Date pentru fuziune termonucleară	63
5.21 Date nucleare selectate pentru programe de fuziune	64
5.22 Date de structură și dezintegrare	64

5.23 Date de analiză cu radiații γ	60
5.24 Constante nucleare, hărți de radionuclizi	60
5.25 Date atomice	66
5.26 Fișiere bibliografice	65
5.27 Servicii online de date nucleare	69
Bibliografie (5)	69
6. <u>Notiuni de bază privind formatul ENDF</u>	
6.1 Descrierea generală a sistemului ENDF	77
6.1.1 Organizarea bibliotecii	77
6.1.2 Nomenclatura formatului ENDF	
6.2 Prezentarea succintă a câtorva fișiere MF	80
6.2.1 Fișierul MF=1	80
6.2.2 Fișierul MF=3	83
6.2.3 Fișierul MF=4	84
6.2.4 Fișierul MF=5	86
6.2.5 Fișierul MF=12	89
6.2.6 Fișierul MF=13	90
Bibliografie (6)	91
7. <u>Notiuni succinte privind formatul EXFOR</u>	97
8. <u>Biblioteci de coduri de calcul</u>	100
8.1 Achiziția de coduri de calcul	105
8.2 Testarea codurilor de calcul	106
8.3 Computerele utilizate	107
8.4 Distribuția codurilor de calcul	107
8.5 Feedback la codurile de calcul	107
8.6 Organizarea de cursuri de instruire	109
8.7 Distribuția de coduri în țările membre IAEA	109
8.7.1 Restricții la distribuția și folosirea codurilor de calcul	109
8.8 Activitatea de intercomparare a codurilor de calcul	111
8.8.1 Metode de comparare	111
8.8.2 Clasificarea intercomparărilor	112
8.8.3 Specificațiile problemei	113
8.8.4 Problema iterațiilor. Aprecierea rezultatelor	113

8.8.5 Descrierea succintă a principalelor intercomparări	114
Bibliografie (8)	122
9. <u>Situația bibliotecilor de date nucleare evaluate</u>	123
9.1 Realizări și deficiențe ale fișierelor actuale de date nucleare evaluate	123
9.2 Teste integrale ale bibliotecilor actuale de date nucleare evaluate	125
9.3 Concluzii asupra situației actuale a bazelor de date nucleare evaluate	125
9.4 Îmbunătățiri pe termen scurt ale bibliotecilor de date nucleare evaluate	126
9.5 Cerințe de noi date nucleare până în anul 2000	126
9.5.1 Reactori avansați și decomisionare de reactori	126
9.5.2 Reactori demonstrativi de fuziune incluzând proiectul ITER	127
9.5.3 Aplicații de energii intermediare	127
9.6 Cerințe privind codurile de modele necesare în evaluări	128
9.7 Elemente privind metodologiile de evaluare	129
9.7.1 Fitarea datelor și tehnici de evaluare pentru spectrele de neutroni	130
9.7.2 Evaluarea secțiunilor de captură și de împrăștiere inelastică ale ^{238}U	135
9.7.3 Evaluarea secțiunii de fisiune a ^{239}Pu între 1 keV și 100 keV	137
9.7.4 Metodologie de evaluare pe bază de canale cuplate (aplicație la împrăștierea neutronilor pe ^{208}Pb)	139
Bibliografie (9)	142
10. <u>Elemente privind bibliotecile de date nucleare procesate</u>	144
10.1 Biblioteci de constante multigrup independente de problemă	144
10.2 Biblioteci de constante multigrup	146
10.3 Biblioteci de constante cu grupe puține dependente de problemă	146
10.4 Definierea constantelor multigrup	147
10.4.1 Parametri dependenți de energie	147
10.4.2 Secțiuni multigrupale dublu-diferențiale	148

10.4.3 Tehnici de tratare a autoecranării de rezonanță	148
10.4.4 Colapsarea secțiunilor grupale	150
10.4.5 Omogenizarea spațială	150
10.5 Alegerea codurilor de procesare ale bibliotecilor de date punctuale evaluate	151
10.5.1 Sistemul NJOY	152
10.6 Actualizarea unei biblioteci multigrup (exemplu biblioteca WIMS)	154
10.7 Activitatea privind problemele test specifice (benchmark)	160
10.7.1 Probleme test de criticitate	161
10.7.2 Calcule test ale protecției recipienților de transport al combustibilului	161
10.7.3 Cazuri test referitoare la problemele de ardere la reactori de înaltă conversie cu apă ușoară	163
Bibliografie (10)	163
11. <u>Elemente privind incertitudinile datelor nucleare obținute din calcule de modele nucleare</u>	165
11.1 Probleme în analiza incertitudinilor calculelor	165
11.2 Metoda celor mai mici pătrate partiționate	166
11.2.1 Estimarea dispersiei minime	166
11.2.2 Eroare, incertitudine și covarianță	167
11.2.3 Noțiuni privind algebra analizei de incertitudine	168
11.2.4 Funcții liniare față de funcții neliniare	169
11.2.5 Surse experimentale față de surse teoretice de informare	173
11.3 Metoda celor mai mici pătrate partiționate. Obținerea dispersiei minime	173
11.4 Incertitudini de model	178
11.5 Sensibilitățile de model în codurile de calcul	181
11.6 Fișierul ENDF MF=30 pentru covarianța datelor, covarianța parametrilor și sensibilități	184
11.6.1 Descriere generală	184
11.6.2 Definiții	185
11.6.3 Tratarea diferitelor tipuri de date	186
11.6.4 Sensibilități multigrupale	187
11.6.5 Aplicații multigrup ale covarianței parametrilor	188

Bibliografie (11)	189
12. <u>Baze de date nucleare pentru viitor</u>	191
Bibliografie (12)	195

1. SITUATIA ACTUALA SI DE PERSPECTIVA A DATELOR NUCLEARE:

1.1 DATELE NUCLEARE - UTILIZAREA SI PROCESAREA LOR

1.1.1 Utilizarea datelor nucleare

Datele nucleare sunt absolut necesare pentru multiple aplicații ca:

- producerea de energie
- cercetarea și proiectarea reactorilor avansați
- gestionarea deșeurilor nucleare
- medicină nucleară și sănătate
- apărare și neproliferare a armelor nucleare
- aplicații în domeniul spațial
- cercetare și dezvoltare în domeniul energiei de fuziune
- prospecțiuni geologice
- științe fundamentale

Și la ora actuală interesul major este axat tot pe producerea de energie, conceperea reactorilor avansați și gestiunea deșeurilor nucleare.

Pentru producerea de energie: numeroase estimări asupra unor caracteristici importante depind hotărâtor de datele nucleare, cum ar fi: producerea și distribuția de putere, arderea combustibilului, variația de reactivitate în funcție de combustie, performanțele absorbanților, producerea de alte elemente, rata de degajare a căldurii locale, fragilizarea vasului reactorului, evacuările la oprirea reactorului, parametrii cinetici, protecțiile, stocarea combustibilului, retratarea combustibilului.

Aceste caracteristici sunt evaluate de coduri de calcul ce tratează în principal propagarea și interacțiile neutronilor și fotonilor cu materialele. Fenomenele de interacție depind de datele nucleare.

Cercetarea și proiectarea reactorilor nucleari: în acest caz accentul este pus pe calculele de zonă activă și de protecție.

Pentru gestionarea deșeurilor radioactive și urmărirea și închiderea ciclului de combustibil: incertitudinile evaluărilor sunt adesea mai mari ca în cazurile precedente indiferent dacă este vorba de produși de fisiune și de activare sau de actinide.

1.1.2 Măsurarea datelor nucleare

În abordarea globală a situației și perspectivei tuturor datelor nucleare clasificarea datelor se face de obicei în următoarele tipuri [1]:

a) Secțiuni eficace diferențiale:

Într-un domeniu de energii incidente mergând de la 0.001 eV la 15 sau 20 MeV (10 decade) este vorba de a clasifica în special interacțiile neutronice:

- secțiuni eficace de transfer, ce sunt clasificate după particula sau radiația emisă: γ , p, α etc.
- secțiuni eficace de fisiune

- secțiuni eficace de împrăștiere elastică
- secțiuni eficace de împrăștiere inelastică
- secțiuni eficace de activare și de producere a actinidelor secundare

h) Date de dezintegrare radioactivă

Aceste date privesc trei tipuri de elemente: produși de fisiune, actinidele și materialele de structură. În principal este vorba de două tipuri de date: timp de înjumătățire plus scheme de dezintegrare și spectre de energie ale particulelor emise

c) Alte date nucleare

În această categorie intră:

- numărul de neutroni emiși per act de fisiune
- fracțiunea de neutroni întârziați
- spectrele particulelor secundare (radiații γ și neutroni)
- emisia de particule α din unele reacții, în particular în materialele de structură ("umflarea" materialelor)
- randamentele în energie a diferitelor interacții
- randamentele produșilor de fisiune: acestea sunt relative la spectrul de elemente rezultante din fisiune. Acestea se repercutează asupra activării combustibilului, asupra problemei stocării deșeurilor și evacuării puterii reziduale
- datele de interacție γ : există necesități pentru diverse tipuri de date. În ceea ce privește calculul de protecție este vorba de atenuarea radiațiilor γ prin diversele materiale utilizate. În afara datelor primare de interacție, există un interes susținut și pentru alți parametri de utilizare directă în calcule. În particular factorii de acumulare (build-up) sunt folosiți pentru a corecta atenuarea exponențială a fasciculului γ de efectele de împrăștiere în mediul respectiv. De asemenea este nevoie de date de interacție γ ce conduc la produși radioactivi cum ar fi ^{237}Np ($^{237}\text{Np}(\gamma, n) ^{236}\text{Np} \rightarrow ^{236}\text{Pu}$). Foarte importantă este și contribuția radiațiilor γ la încălzirea componentelor reactorilor.
- datele de interacție α : sursele spontane de neutroni în combustibilul iradiat rezultă din fisiunea spontană și din reacții (α, n) cu nucleele ușoare consecutiv cu dezintegrarea α a actinidelor. Energiile particulelor α și secțiunile eficace pentru interacțiile cu izotopii ușori în diverse medii sunt date necesare.
- secțiunile eficace de deplasare atomică: pentru corelarea rezultatelor măsurărilor de deteriorare a materialelor se folosesc secțiuni de deplasare atomică (este procesul ce conduce la deteriorarea materialelor de structură). Este vorba de numărul de atomi deplasați din poziția lor în rețeaua cristalină prin difuzie și captură produsă de neutroni. Modelul standard utilizat pentru calculul acestei secțiuni eficace este modelul NRT (propus de Norgett, Robinson și Torrens). De altfel în codul NJOY/THEMIS există un modul pentru calculul acestor secțiuni.

Furnizarea de date nucleare pentru toate aplicațiile dar în special pentru aplicațiile legate de tehnologia reactorilor de fisiune (centrale, menținerea și transportul combustibilului, retratarea și gestionarea deșeurilor) implică activități în mai multe domenii distincte. Etapele sunt următoarele: măsurare, compilare, evaluare, tratare (procesare), validare, ajustare și estimare a incertitudinilor în calcule. Măsurările privesc fie secțiunile eficace în funcție de energia neutronilor și de alți parametri, fie caracteristici mai globale ale mediilor față de reproducerea de neutroni (măsurări integrale).

i) Măsurări diferențiale

Măsurările secțiunilor eficace diferențiale sunt făcute utilizând acceleratoare de particule încărcate și ținte ce produc neutroni. Măsurarea secțiunilor de înaltă rezoluție se realizează prin folosirea de surse "albe" de neutroni în impulsuri, rezoluția energetică ce poate fi obținută fiind determinată de lungimea acestor impulsuri (exprimată în ns). Aceste surse de neutroni dispun de game largi de energie. Energia neutronilor este determinată pe baza timpului de zbor între ținta producătoare de neutroni și probă (eșantion) sau captor de-a lungul tubului de zbor. Pentru a efectua acest traiect, fascicule de neutroni traversează tuburi menținute sub vid.

Un exemplu de un asemenea tip de instalație este acceleratorul liniar de electroni GELINA de la Laboratorul Geel din Belgia. Acesta poate fi folosit pentru măsurări de secțiuni eficace între 0.002 eV și 1 MeV. O altă instalație comparabilă este ORELA la Laboratorul National de la Oak Ridge în SUA. Au fost și mai sunt și alte echipamente destinate măsurării secțiunilor de înaltă rezoluție printre care HELIOS la Harwell în Anglia și instalația situată la JAERI în Japonia. În SUA instalația LAMPF/WNR de la Los Alamos produce o sursă "albă" de neutroni de energii mari (între 1 MeV și 600 MeV) iar instalația LAMPF/LANSCE situată tot la Los Alamos permite realizarea de măsurători la energii mici (peste 0.001 eV). Mai există firește și alte instalații de măsurare a secțiunilor eficace dar acestea au performanțe mult mai limitate. Astfel la KfK la Karlsruhe în Germania pot fi făcute măsurări de secțiuni eficace cu rezoluție slabă într-o gamă de energie de ordinul KeV-ilor; în prezent această instalație e folosită numai la studii de astrofizică. Universitatea din Kioto, Japonia dispune de un accelerator liniar de electroni asociat la un spectrometru legat de încetinirea neutronilor. Institutul "Laue Langevin" din Grenoble, Franța, poate realiza măsurări în domeniul energiilor termice (fasciculul de neutroni termici extras din reactor este "pulsat" de un "chopper" - disc rotativ echipat cu un orificiu ce permite fasciculului să treacă timp de o perioadă scurtă la fiecare ciclu- măsurările de secțiuni fiind făcute cu tehnica timpului de zbor.

Există de asemenea mai multe instalații cu surse de neutroni monoenergetice. Este vorba de acceleratori de particule cu ținte corespunzătoare care produc neutronii. Tehnica de măsură este tot timpul de zbor. Un exemplu de acest fel este acceleratorul Van-de-Graaff 7MV de la Geel cu care se pot face măsurări între 300 KeV și 15 MeV. Este singura instalație corespunzătoare aplicațiilor de reactori de fisiune în Europa occidentală. Laboratorul de la Bruyères Le Châtel (CEA-Franța) ar putea asigura măsurări similare dar instalația nu este operațională. La fel instalația DYNAMITRON de la Universitatea din Birmingham produce neutroni monoenergetici dar această instalație este folosită în principal pentru alte studii, cu precădere măsurări relative la neutronii întârziați.

În lumea întreagă sunt operaționale mai multe surse de 14 MeV. Acestea sunt în mod particular interesante pentru tehnologia reactorilor de fuziune. În același timp ele furnizează și date importante pentru dezvoltarea teoriei nucleare.

Unii reactori de cercetare permit producerea de fascicule de neutroni monoenergetici. Aceștia rezultă din "filtrarea" neutronilor proveniți din reactor. Pentru efectuarea acestei filtrări se folosesc materiale care au secțiuni eficace foarte mici în domenii înguste de energie; neutronii care sunt transmiși prin straturi groase de asemenea materiale au energiile acelor minime ale secțiunii eficace. Dar puține energii pot fi obținute pe aceasta cale. Unii reactori de cercetare sunt echipați cu dispozitive specifice, cu scopul de a produce neutroni de fisiune, neutroni termici sau neutroni de foarte joasă energie (reci). Aceste instalații pot fi folosite și la măsurări integrale.

În sfârșit există mai multe laboratoare unde sunt realizate măsurări de timpi de înjumătățire (de viață) și de spectre de energie relative la producții de dezintegrare radioactivă. Este în special cazul laboratorului de la Geel ca și cazul laboratoarelor naționale de standarde: Bureau International des Poids et Mesures - Franța, "Physikalisch Technische Bundesanstalt" - Braunschweig, Germania, "National Physical Laboratory" - Anglia, "National Institute for Standards and Technology" - SUA. Pe de altă parte puține centre de cercetare dispun de instalațiile necesare pentru producerea, separarea și măsurarea caracteristicilor izotopilor de viață foarte scurtă (de exemplu producții de fisiune de viața scurtă). Asemenea măsurări se pot face la laboratorul de la Studsvik al Universității Uppsala în Suedia și la Institutul "L. Langevin" de la Grenoble.

ii) Măsurări integrale

Măsurări integrale acoperă un spectru larg de energii neutronice, ceea ce le face diferite de măsurările diferențiale care se efectuează la energii particulare.

Măsurătorile integrale includ rate de reacție ca raportul captură $^{238}\text{U}/\text{fisiune } ^{235}\text{U}$ și unii parametri globali ai reactorului ca dimensiunile critice ale zonei active. Deși acestea din urmă depind de numeroase date nucleare elementare, interesul pentru ele este departe de a fi neglijabil. Pe de o parte măsurările asupra parametrilor globali ai reactorului permit validarea unor date nucleare, le ameliorează fiabilitatea, pe de altă parte precizia măsurărilor integrale (cum ar fi cele ale dimensiunilor critice ale zonei active) sunt superioare măsurări de secțiuni eficiente diferențiale. Metoda constă în analiza unui mare număr de măsurări efectuate cu compoziții variabile. Din "redocupare" se pot apoi determina date nucleare elementare. De fapt proiectarea primilor reactori s-a bazat pe asemenea tipuri de aproximări deoarece măsurarea secțiunilor diferențiale s-a dovedit a fi fost foarte imprecisă. Pe de altă parte, informațiile furnizate de asemenea tipuri de măsurări sunt mult mai aproape de parametrii reactorului decât se poate prevedea din calcule. În consecință, chiar dacă datele nucleare privitoare la materiale particulare nu sunt ameliorate, punctele de referință precise astfel obținute permit prevederea și normalizarea proprietăților reactorilor. Este de menționat că incertitudinile asociate valorilor extrapolate plecând de la punctele de referință depind de precizia datelor diferențiale [1].

Alte măsurări integrale sunt realizate în geometrie complexă pe machete de reactori "mock-up" incluzând barele absorbante și regiuni de combustibil de compoziții variabile. Acest tip de măsurări este în mod deosebit interesant pentru validarea globală a schemelor de calcul și normalizare a predicțiilor cu ajutorul punctelor de referință (determinarea factorilor de eroare).

Principalele tipuri de măsurări integrale sunt următoarele:

a) Ratele de reacție în cazul spectrelor simple

Este vorba de rapoartele secțiunilor eficiente mediate pe un spectru de neutroni. În acest sens se disting:

- spectrele de neutroni termici (produși de exemplu în blocuri mari de materiale atenuatoare și neabsorbante)
 - spectrele neutronilor de fisiune
 - "domeniile de benchmark (de referință)" pentru etalonarea reacțiilor de dozimetrie.
- Spectrele sunt cunoscute cu precizie și acoperă o bandă largă de energie.

b) Ratele de reacție în spectrele reactorului

Datele sunt mai direct legate de informațiile cerute pentru proiectarea reactorilor. Ca exemplu se pot da experiențele de iradiere PROFIL efectuate la reactorul rapid PHENIX cu

probe de izotopi ai actinidelor.

Informațiile obținute se referă la secțiunile eficace pentru formarea de alți izotopi prin transmutație (secțiuni $(n,2n)$ și de captură).

c) Experiențele integrale în geometrie simplă

Acestea se referă în special la măsurarea lui B^2 și la dimensiunile critice ale zonelor active uniforme.

d) Experiențele integrale în geometrie complexă

Ca exemplu experimentul EPICURE permite determinarea distribuției ratelor de reacție în rețele de oxid de uraniu și în combustibil MOX, considerând prezența barelor de control și a golurilor de apă.

Astfel, informațiile furnizate ca urmare a acestor experimente servesc la ameliorarea predicțiilor asupra comportamentului reactorilor operaționali, chiar dacă identificarea datelor ce contribuie cel mai mult la imprecizii este foarte rar posibilă.

1.1.3 COMPILAREA DATELOR MASURATE

După măsurare, datele nucleare sunt compilate într-o bază de date sub formă informatică (fișiere standard în format EXFOR) de unul din cele patru centre majore de date nucleare și intră firește în indexul bibliografic CINDA care dă referințele pentru toate experimentele efectuate.

Compilarea datelor experimentale se face în cele patru centre majore de date nucleare și anume:

- Banca de Date Nucleare a Agenției de Energie Nucleară de la Paris (pentru țările Europei occidentale și Japonia)
- Centrul de date Nucleare de la Brookhaven (pentru America de Nord)
- Centrul de la Obninsk, Rusia (pentru țările CSI)
- Secția de Date Nucleare a Agenției Internaționale pentru Energie Atomică de la Viena (pentru restul de țări ale lumii)

Secția de Date Nucleare a IAEA dezvoltă de asemenea sistemul informatic de compilare EXFOR și coordonează activitățile ce compilare ale celor patru centre. De asemenea colaborează cu centrele specializate care tratează de exemplu datele de interacție de particule încărcate.

Nu sunt restricții asupra schimburilor de date compilate între centrele ce fac compilarea. Acestea distribuie datele la cerere peste tot în aria lor de activitate. Totuși datele rezultate din măsurări integrale n-au fost distribuite liber. Acestea sunt în mod obișnuit proprietatea țărilor care le-au produs. Pot fi însă schimbate între țări în cadrul raporturilor bilaterale. În anii '60, datele erau făcute accesibile și erau compilații publicate deschis (de exemplu "CSEWG Benchmark Book" provenită de la Brookhaven). Aceste compilații conțin multe date valabile. Trebuie să ne îndoim de avantajul comercial care poate fi furnizat de măsurările integrale făcute pe geometrii simple. Este motivul pentru care schimbul liber de date integrale va fi mai probabil în viitor (cu precădere prin Banca de Date a NEA-Paris) [1].

Un sistem informatic pentru stocarea datelor privitoare la reactorii rapizi s-a dezvoltat la Karlsruhe (sistemul SNEDAX); acesta folosește o bază de date disponibilă pe PC. Datele MASURCA de la Cadarache sunt în curs de a fi introduse în acest sistem împreună cu datele SNEACK de la Karlsruhe și câteva date ZEBRA provenind din Anglia. O bază de date de măsurări integrale pentru reactori termici este de asemenea în lucru la Cadarache.

Datele de secțiuni eficace diferențiale măsurate care au fost compilate sunt în mod obișnuit analizate de cei ce fac măsurările cu scopul de a corecta următoarele lacune [4]:

erorile datorate tehnicilor de măsură folosite, lipsa de rezoluție în energie și efectele datorate diemnsiunilor eșantionului. De exemplu, o interpretare eronată a rezultatelor măsurărilor furnizate de captori se află la originea incoerențelor observate la secțiunile de captură la fier. Toate măsurările efectuate înainte de 1985 (dată la care aceste incoerențe au fost puse în evidență) sunt afectate de acest tip de eroare. Analizele parametrilor de rezonanță sunt de regulă realizate de laboratoarele care fac măsurările [4]. Uneori, doar rezultatele analizei măsurărilor sunt compilate și nu valorile măsurate. În viitor va fi necesar să se reanalizeze măsurările cu scopul de a ține cont de efectele netratate în analizele anterioare. De altfel corecțiile sunt posibile numai dacă se dispune de toate datele necesare, ceea ce nu este posibil totdeauna.

1.1.4 EVALUAREA DATELOR COMPILATE

În lume există mai multe grupuri sau proiecte de evaluare a datelor nucleare. În Europa occidentală sunt două proiecte strâns legate: proiectul JEF care este orientat spre necesitățile reactorilor de fisiune și alte aplicații conexe și proiectul EFF dezvoltat pentru aplicațiile de fuziune.

Proiectul JEF ("Joint European File") este coordonat de Nuclear Energy Agency - Data Bank iar proiectul EFF ("European Fusion File"), care este un proiect al Uniunii Europene, este coordonat de ECN ("Energieonderzoek Centrum Nederland") de la Petten. Fișierele sunt schimbate liber între cele două proiecte.

În SUA același tip de proiect ENDF/B ("Evaluated Nuclear Data File") furnizează bazele de date, cel mai recent fiind ENDF/B-VI. Acesta este cu acces liber în timp ce fișierul precedent ENDF/B-V a fost accesibil numai pentru SUA și Canada. Această restricție a fost unul din motivele principale ale lansării proiectului european JEF.

Fișierul JEF2 a fost produs acum patru ani după o perioadă de testare. O versiune revizuită, JEF 2.2 s-a realizat în februarie 1992. După un an de testări aceasta a fost difuzată fără restricții (fișierul JEF1 a fost distribuit fără restricții după producerea lui JEF2).

Alte proiecte de evaluare sunt cel japonez JENDL (fișierul JENDL.3), cel rusesc BROND.2 și cel chinez CENDL.2. Toate aceste baze de date au fost difuzate.

Există de asemenea proiectul FENDL coordonat de Secția de date Nucleare a IAEA, acest proiect se bazează pe o selecție a evaluărilor rezultate din fișierele precedente în cadrul proiectului de reactori de fuziune.

Toate evaluările în curs sunt puse în formatul ENDF-6. Aceasta permite o cooperare internațională asupra metodelor de testare a coerenței fișierelor și permite compararea și procesarea lor. De altfel majoritatea codurilor de calcul de procesare sunt dezvoltate în SUA, ceea ce implică o dependență de SUA în ceea ce privește mentenanța și dezvoltările viitoare ale acestor coduri.

Evaluarea datelor nucleare pentru un nucleu implică în medie 12 luni per om chiar când analiza parametrilor de rezonanță este deja făcută (aceasta necesită în medie tot 12 luni per om). Evaluatorul pleacă de la măsurările adecvate furnizate de centrele de date nucleare pentru a produce datele evaluate esențial datorită metodelor de ajustare statistice, *ținând cont de modelele nucleare teoretice*.

Trei mari probleme apar la evaluare. În primul rând sunt dezacordurile între măsurările identice făcute cu tehnici diferite. În al doilea rând sunt problemele rezoluției în energie. În sfârșit normele și tehnicile de măsură implică câteva probleme de utilizare. Parametrii în modelele teoretice trebuie să fie aleși astfel încât să furnizeze cea mai bună ajustare a măsurărilor disponibile [1].

1.1.5 PROCESAREA DATELOR EVALUATE

Înainte ca datele nucleare să poată fi folosite în calcule de reactori și în alte aplicații ele trebuie prelucrate, deși unele metode de calcul Monte-Carlo sunt aplicate pentru utilizarea fișierelor numai cu o rată mică de simplificare (de exemplu codul Monte-Carlo "MCNP" de la Los Alamos). În același timp, deși codurile Monte-Carlo tratează corect transportul neutronilor, timpii de tratare informatică sunt exagerat de lungi pentru calculul unor parametri ca de pildă coeficienții de temperatură de reactivitate sau distribuțiile de putere. Aceste coduri sunt utile atunci când este suficientă o exactitate mică (de exemplu în calculele de protecție) sau când este necesar un parametru simplu (de exemplu criticitatea unei instalații de stocare sau concentrarea absorbanților în dizolvantul de retratare, acid nitric). În sfârșit aceste coduri pot fi de asemenea utilizate pentru validarea aproximațiilor adoptate în bibliotecile folosite de sistemele de coduri de reactori (de exemplu APOLLO). De altfel pentru coduri de calcul neutronic usuale ca APOLLO, datele trebuie să fie reprezentate prin reducere la 99 grupe energetice (sau la 172 grupe în noua structură grupală în curs de evaluare). O reprezentare mai detaliată este în studiu pentru APOLLO-3, introducând se pare 8000 grupe.

Structurile de rezonanță ale secțiunilor eficace sunt reprezentate dispunând de secțiunile eficace mediate pe grup parametrizate la valori ale "secțiunilor eficace de diluție" calculate pentru un mediu omogen. Sunt de fapt secțiunile eficace mediate ale altor materiale prezente în compoziție per atom de material rezonant ("secțiunea eficace de diluție" este o măsură a diluției materialului rezonant). S-au dezvoltat metode sofisticate pentru a găsi o echivalență între "secțiunea eficace de diluție" în mediu heterogen (pentru o bară de combustibil) și "secțiunea eficace de diluție" în mediu omogen. În plus există metode alternative de calcul de referință care reprezintă datele nucleare de o manieră detaliată în domenii particulare de energie; acestea sunt utilizate pentru a evalua metodele mai simple utilizate în codul APOLLO. Aceste coduri de referință cuprind codurile de zonă de rezonanță SECOL și TRAMP și codul Monte-Carlo TRIPOLI.

Totuși principalul cod de tratare a secțiunilor eficace este NJOY dezvoltat la Los Alamos și încorporat în codul francez THEMIS. Există și coduri de tratare care convertesc secțiunile eficace de grup date de NJOY în formate cerute de alte coduri (ca de exemplu APOLLO).

Calculele de protecție și de putere reziduală necesită tratarea datelor cu privire la producția γ și alte interacții γ . Este motivul pentru care se folosesc coduri specifice pentru calculele de evacuare a puterii reziduale. Acest lucru necesită tratarea datelor de dezintegrare radioactivă și de randamente ale produșilor de fisiune.

1.1.6 VALIDAREA SI AJUSTAREA DATELOR NUCLEARE

Prima etapă a validării constă în calculul neutronic al configurațiilor corespunzătoare măsurărilor integrale cele mai simple (adică toate măsurările integrale mai puțin cele în geometrie complexă). S-au dezvoltat proceduri de ajustare a secțiunilor eficace cu scopul de a da o mai bună coerență ansamblului de date nucleare diferențiale și de măsurări integrale. Ele necesită estimarea incertitudinilor în datele evaluate și în măsurătorile integrale ca și toate incertitudinile rezultate din aproximațiile metodelor de calcul. Trebuie în mod egal considerate erorile sistematice atât în datele evaluate cât și în măsurările integrale. Trebuie atunci să fie calculată sensibilitatea valorilor parametrilor integrali la schimbările în fiecare

detaliu al datelor nucleare. Modificările, care ar putea fi făcute în datele diferențiale cu scopul de a da o ajustare optimă prin metode statistice, pot fi apoi realizate. Deci ar putea fi produsă o nouă bibliotecă de date ajustate incorporând aceste schimbări.

Aceeași procedură furnizează de asemenea estimările incertitudinilor asupra secțiunilor ajustate. Aceste estimări pot fi utilizate pentru evaluarea incertitudinilor în estimarea proprietăților reactorilor, care rezultă deci din cele ale datelor nucleare ținând cont de rezultatele măsurărilor integrale. Trebuie ținut seama de asemenea de incertitudinile rezultate din aproximațiile metodelor de calcul.

A doua etapă de validare corespunde estimării exactității calculului tuturor parametrilor importanți ai reactorului utilizând grupe de date ajustate. În cadrul acestei etape sunt luate în considerare măsurările integrale cele mai reprezentative pentru reactori (în geometrie complexă), adică cele mai complexe. Comparările între calcul și măsurătoare sunt afectate de erori în metodele de calcul. În realitate această a doua etapă este o validare a ansamblului sistemului de calcul și a bibliotecii de date asociate. Factorul de eroare și incertitudinile pot fi atunci recomandate echipelor implicate în date nucleare (EDF, CEA, FRAMATOME etc.) pentru ca toate proprietățile reactorului să fie calculate cu același sistem de calcul [1].

1.1.7 TRATAREA INCERTITUDINILOR

Pentru estimarea incertitudinilor privitoare la calculul parametrilor reactorilor sau alte aplicații este necesar să se estimeze incertitudinile relative la secțiunile eficace diferențiale și la măsurările integrale. Datele privind incertitudinea pentru secțiunile diferențiale sunt complicate deoarece ele nu sunt simpli parametri ci funcții de energia neutronilor. Trebuie determinată eroarea relativă a secțiunilor la o energie anume și în corelație cu eroarea la o altă energie. Cu alte cuvinte, se dorește să se știe pe ce interval de energie eroarea este sistematică: forma rezonanței e cunoscută bine dar valorile absolute sunt nesigure. De exemplu, calibrarea defectuasă a captorilor introduce o eroare sistematică pe tot intervalul energetic. Aceasta înseamnă că nu este suficient să se cunoască dispersia (varianța) măsurii la fiecare energie ci mai degrabă maniera în care dispersiile sunt corelate între diferite energii, deci să se știe covarianța (corelația). Sunt de asemenea covarianțe și între diferite secțiuni eficace. Acest lucru se datorează faptului că măsurările de secțiuni sunt adesea efectuate în raport cu un standard așa cum este fisiunea ^{235}U care și ea la rândul ei comportă incertitudine.

Corelațiile între măsurările integrale sunt și ele importante. De exemplu măsurările de rate de fisiune pe diverse instalații critice utilizând aceeași tehnică de măsură, vor avea o componentă de eroare sistematică.

În prezent, în mod obișnuit se ajustează secțiunile eficace pentru a furniza simultan o mai bună ajustare a măsurărilor secțiunilor eficace diferențiale și a măsurărilor integrale (ținând cont de incertitudinile legate de cele două tipuri de date). Procedura furnizează o matrice de covarianță pentru secțiunile ajustate, care poate fi utilizată pentru estimarea incertitudinilor în predicțiile parametrilor reactorului. Aceasta dă atunci o mai bună estimare ținând seama de măsurările de date integrale și diferențiale. Procedura permite de asemenea identificarea datelor incoerente (incoerențe atât pentru măsurările diferențiale cât și pentru cele integrale).

Estimarea datelor de covarianță este destul de dificilă și evaluările actuale privind secțiuni diferențiale ca și rezultate de măsurări integrale adesea nu iau în considerare covarianțele. În această situație persoanele care fac studii de ajustare trebuie să facă propriile

lor estimări [1]; gradul de detaliere depinde de judecata fiecăruia. Se poate în același timp sublinia că erorile sistematice, care afectează la fel toate datele, sunt cele mai importante în evaluarea parametrilor de reactor. Ca exemplu se pot da erorile de interpretare a măsurărilor de captori (menționate la paragraful 1.1.3 privind compilarea datelor).

Tratarea datelor de covarianță pentru secțiunile eficace (când acestea sunt disponibile în fișierele de date, MF=30) utilizează același cod de tratare ca cel utilizat pentru tratarea secțiunilor, adică codul NJOY de la Los Alamos. Studiile asupra ajustării secțiunilor sunt în general efectuate pe un număr redus de grupe de energie, în medie 10 sau 15. Acest ansamblu redus e folosit de asemenea pentru estimarea preciziei predicțiilor asupra proprietăților reactorilor.

Pentru ajustarea secțiunilor eficace și estimarea incertitudinilor în evaluare cu privire mai ales la reactori (incertitudini rezultând din incertitudinile legate de datele nucleare), trebuie calculate **sensibilități**. Aceste sensibilități sunt în fapt variațiile valorilor calculate ale parametrilor de reactor, care rezultă din micile variații ale secțiunilor eficace mediate pe grup. Pentru calculul acestor sensibilități se folosesc coduri bazate pe teoria generalizată a perturbațiilor de ordinul întâi.

În plus față de incertitudinile datorate datelor nucleare, trebuie considerate și efectele de aproximare (difuzie multigrup, autoprotecție a rezonanțelor, aproximații asupra reprezentării geometrice etc.) care sunt inerente metodelor de calcul; efectele acestor aproximații trebuie estimate separat.

1.2 RECENSAMANT AL NECESITATILOR DE DATE NUCLEARE

1.2.1 Necesități rezultate din incertitudinile și lacunele în cunoașterea datelor nucleare

Impreciziile în cunoașterea datelor nucleare conduc la **incertitudini** în predicția diverselor proprietăți neutronice ale reactorilor. În vederea asigurării unei exploatare sigure și fiabile, aceste incertitudini obligă la adoptarea unor **marje de siguranță** asupra unor parametri care au însă efect asupra costului în exploatare. Toate acestea au consecințe economice și anume:

- concepții mai costisitoare
- ciclul de combustibil mai puțin eficient
- transport, retratare și stocare a deșeurilor mai costisitoare

Unul din obiectivele programelor de măsurări (diferențiale și integrale) vizează deci reducerea incertitudinilor și în consecință aprecierea mai bună a nivelului marjelor de siguranță ce trebuie atinse pentru reactorii operaționali și pentru ciclul lor de combustibil.

Noile concepții de reactori sau materialele noi care apar (transuraniene, otrăvuri noi) nu dispun de programe largi privind măsurarea și calculul datelor nucleare aferente așa cum au beneficiat reactorii aflați acum în exploatare. Pentru a evita un conservatorism prea nerealist sau prea costisitor, trebuie deci să fie abordate programe de lucru similare care acum pot fi însă mai puțin dezvoltate (având în vedere acumulările existente) dar care au ca principal scop acoperirea "lacunelor" de cunoaștere a datelor nucleare.

În plus cei ce se ocupă cu proiectarea ca și cei ce exploatează centralele nucleare și cei ce se ocupă de combustibil, de securitate și radioprotecție etc. trebuie să dispună de scheme de calcul care implică codurile de calcul și bibliotecile de date în prealabil tratate. Incertitudinile provin atât din date cât și din aproximațiile cuprinse în codurile de calcul.

Aplicațiile în diverse domenii se sprijină pe scheme de calcul care utilizează fiecare

tipuri diferite de biblioteci de date. Domeniile necesităților privesc deci: neutronistica zonei active, calculul protecțiilor, evaluarea defectelor cauzate materialelor de bombardamentul neutronic sau al altor particule și radiații, criticitatea instalațiilor de retratare, generarea și dezintegrarea produșilor de fisiune sau a celor rezultați din alte reacții neutronice.

Nevoia de date nucleare validate apare clar în contextul anticipării cerințelor atât în ceea ce privește ciclul de combustibil cât și pe planul cercetării și proiectării de noi reactori.

Se mai pune problema datelor și pentru experimente test (benchmark) necesare calificării și validării codurilor și sistemelor de calcul ca și a mentenanței lor, lucru care nu s-a îndeplinit în totalitate prin programele pe termen mediu.

Un recensământ rapid al cerințelor de date nucleare scoate la iveală mai multe domenii de activitate ca:

- reactorii actuali (aflați în exploatare sau pe cale de dezafectare)
- ciclul de combustibil
- reactorii de viitor
- cercetările privind reactorii de fuziune, radioactivitatea mediului ambiant, biologie, medicină etc.

1.2.2 Necesități pentru reactorii actuali

S-au putut identifica următoarele cerințe de date privind reactorii actuali:

*) **Coefficienții de reactivitate ai temperaturii** asociați cu agentul de răcire și cu combustibilul prezintă incertitudini care, prin efectul asupra cineticii reactorului, crează constrângeri asupra ciclului de combustibil. S-au efectuat măsurări diferențiale și integrale, precum și calcule de model dar dezacordurile obținute n-au fost încă rezolvate.

*) **Combustibilul MOX** introduce incertitudini în distribuțiile de putere și în coeficienții de vid ai moderatorului. Este nevoie să se studieze aceste incertitudini prin măsurări realizate în instalații critice

*) **Prelungirea ciclurilor de iradiere și utilizarea MOX** ridică de asemenea nevoia de date mai bune privitoare la izotopii superiori plutoniului și la produșii de fisiune

*) Există probleme în calculul **transmisiei de neutroni prin protecțiile de oțel**. Se impun deci măsurări de mare precizie a secțiunilor eficace la Fe, Cr, Ni pe un domeniu energetic între 100 KeV și mai mulți MeV. De asemenea studiile de protecție necesită utilizarea de date cu privire la **factorii de acumulare (build-up)**. Este indispensabil să se ia în considerație nevoia de date pentru predicția asupra defectelor cauzate în materialele de structură, aceste date se referă la calculul deplasărilor per atom și ratele de producere a heliului.

*) Utilizarea de **noi absorbanți** mai eficace (gadolinu, borură de hafniu) cere efectuarea de noi măsurări.

*) Ca urmare a noii bănci de date JEF2 și a noilor standarde americane și japoneze este necesar să se efectueze o nouă estimare a incertitudinilor în **predicția puterii reziduale**. În plus trebuie să se amelioreze datele privind timpii scurți de răcire; măsurările pot fi făcute direct pentru timpii lungi de răcire. O mare importanță se acordă calculului de estimare a

efectelor asupra predicției de putere reziduală, a transmutației produșilor de fisiune, a actinidelor și a activării materialelor de structură. Unele măsurări directe vor fi foarte utile pentru a valida aceste calcule. Astfel măsurările de randamente de produși de fisiune și de date de dezintegrare contribuie la reducerea incertitudinilor.

* **Existența dezacordurilor între băncile de date nucleare este o problemă majoră** care a făcut și face obiectul multor studii științifice. Aceste dezacorduri pot afecta considerabil exactitatea unor date din bibliotecile de aplicații. În particular este nevoie de noi măsurări și evaluări în privința secțiunii de împrăștiere inelastică la ^{238}U și la izotopii produșilor de fisiune [3].

1.2.3 Necesități pentru ciclul de combustibil

* **Reciclaajul combustibilului MOX în reactorii termici conduce la o acumulare de izotopi transplutonieni a cărei efect modifică coeficientul de vid spre valori pozitive pentru conținut ridicat de plutoniu și o proporție mare de izotopi transplutonieni.** Aici nevoia rezidă în ameliorarea datelor privind izotopii transplutonieni. Trebuie făcute studii și asupra efectului acestor izotopi asupra parametrilor reactorilor așa cum este coeficientul de vid.

* **Numeroase nevoi subzistă pentru ameliorarea predicțiilor făcute asupra combustibilului iradiat.** În afară de secțiunile eficace neutronice, interacțiunile γ pot constitui un mecanism semnificativ de producere a unor izotopi în mod deosebit importanți pentru stocarea pe termen lung a combustibilului ars ($^{237}\text{Np}(\gamma, n) \rightarrow ^{236}\text{Np} \rightarrow ^{236}\text{Pu}$).

* **Creditul de ardere (burn-up credit) reprezintă câștigul financiar care poate rezulta din cunoașterea mai precisă a criticității combustibilului ars.** Acest obiectiv implică nevoia de a stabili datele cu privire la produși de fisiune și actinide minore într-o gamă largă de spectre. Acestea ar oferi în consecință avantaje economice deloc neglijabile mai ales în materie de transport, stocare și retratare a combustibilului. De exemplu cantitatea de gadolinium din dizolvanții combustibililor arși ar putea fi micșorată. Măsurătorile trebuie deci să progreseze în scopul de a ameliora datele utilizate pentru estimarea reactivității combustibilului ars.

1.2.4 Necesități pentru reactorii de viitor

* **Conceperea de instalații pentru înclinerarea actinidelor și transmutația izotopilor de produși de fisiune în reactorii termici sau rapizi, are nevoie de date nucleare ameliorate.** Acestea se referă cu precădere la elementele: ^{237}Np , ^{241}Am , ^{243}Am , ^{99}Tc , ^{129}I .

* **Reactorii de concepție avansată necesită evaluarea coeficienților de reactivitate și calculul neutronic al zonei active.** Acestea pun în joc numeroase tipuri de absorbanți și de combustibili dar și alte cicluri de combustibil, ceea ce firește conduce la nevoia de alte date nucleare.

* **Pentru reactorii înclinatori de actinide există lacune în determinările de date de autoprotecție a rezonanțelor și în datele de împrăștiere inelastice.** O problemă importantă rezidă în evaluarea fracțiunii efective de neutroni întârziați care e importantă pentru cinetica reactorilor.

1.2.5 Acceleratori pentru transmutația deșeurilor

Multe studii propun utilizarea de acceleratori de protoni și de surse de neutroni de spalație. Cercetările în acest domeniu ar putea avea nevoie nu numai de date de interacție a neutronilor pentru noi materiale dar și de date de interacție a protonilor pe un domeniu larg de energie.

1.3. SINTEZA ASUPRA SITUATIEI DATELOR NUCLEARE

1.3.1 SITUATIA IN EUROPA

Activități

***) Măsurări de date nucleare de bază și de secțiuni eficace diferențiale**

În prezent singurul laborator din Europa occidentală care contribuie la satisfacerea nevoilor industriei nucleare în ceea ce privește măsurarea de secțiuni eficace diferențiale este laboratorul de la Geel finanțat de Uniunea Europeană. Instalațiile acestui laborator sunt întreținute în vederea asigurării unei funcționări continue. Programul de măsurări este decis de însuși laboratorul, firește ținând cont de exigentele formulate de Comitetul Științific Nuclear al NEA. Finanțarea proiectelor merge în sensul unei limitări a măsurărilor privind datele nucleare.

Câteva măsurări la energii de ordinul MeV-ilor cu privire la aplicații de dozimetrie și fuziune sunt în curs de realizare, astfel măsurări de randamente în energie în dezintegrarea produșilor de fisiune de viața scurtă se fac în Suedia.

***) Competențe și măsurări integrale**

Instalațiile exploatate în Franța de CEA la Cadarache sunt MASURCA (reactor rapid), EOLE și MINERVE (reactor cu apă sub presiune) și HARMONIE în colaborare cu laboratoare ce pot analiza compozițiile combustibilului iradiat și al eșantioanelor speciale. Măsurări legate de protecție s-au făcut la instalația NESTOR la Winfrith în Anglia și în prezent se fac la instalațiile VENUS, BR1 la Mol în Belgia. Instalația BR2 de la Mol este acum pilot de decomisionare. Este foarte posibil ca într-un viitor nu prea îndepărtat Minerve și Harmonie să fie închise. În prezent Harmonie e folosit doar pentru etalonări de echipamente, Minerve e utilizat pentru măsurători precise de reactivitate plecând de la probe mici, firește de combustibil iradiat și de produși de fisiune.

Situația în celelalte țări din Europa de vest nu este așa de satisfăcătoare ca în Franța deoarece în nici o altă țară nu este în exploatare vreo instalație critică rapidă. Singurele instalații critice rapide, înafară de cele franceze sunt FCA de la JAERI în Japonia și dispozitivele BFS și BN600 de la Obninsk în Rusia.

Câteva măsurări de spectre rapide pot fi efectuate în instalații în general folosite pentru măsurări referitoare la reactorii termici așa cum ar fi PROTEUS la Institutul "Paul Scherrer" în Elveția. Dar configurații mari de reactor rapid nu pot fi studiate aici (numai pe situri adecvate).

Instalațiile critice termice în celelalte țări occidentale se limitează la PROTEUS (Winfrith) și VENUS (Mol, Belgia).

***) Compilarea măsurărilor de secțiuni eficace diferențiale**

Compilarea rezultatelor măsurărilor prin sistemul informatic de bază de date EXFOR

este realizată în cele 4 centre majore de date nucleare. Pe lângă acestea mai sunt și alte centre specializate în compilarea de date nucleare ne neutronice, de exemplu date privind structura nucleară și interacțiile cu particule încărcate. Pentru măsurătorile efectuate în laboratoarele Europei occidentale compilarea este făcută de NEA-DB (menținând cu precădere măsurările făcute la Geel). Secțiunea de date nucleare a IAEA are rolul de coordonator și girează mentenanța sistemului EXFOR.

***) Compilarea măsurărilor de date nucleare integrale**

Există mai multe proiecte privind compilarea măsurărilor de date integrale efectuate pe ansamble critice simple. La KfK la Karlsruhe s-a făcut un sistem de baze de date provenind din ansamblurile critice de reactori rapizi, în prezent acest sistem este utilizat și pentru compilarea măsurărilor făcute la MASURCA la Cadarache și la ZEBRA la Winfrith. Gestiunea bazelor de date a acestui sistem este făcută pe PC.

Sunt de asemenea compilate datele integrale pentru reactori termici reunite la Cadarache. La nivel european există pericolul pierderii rezultatelor unor măsurări datorită reducerii bugetelor alocate, menționăm aici situația cercetărilor pe reactorii rapizi britanici și unele detalii de rezultate de la instalația critică ZEBRA care au fost doar parțial compilate în baza de date SNEDAX.

***) Evaluare și validare a datelor nucleare**

Evaluatorii de date nucleare obțin întreaga informație de la centrele majore de date nucleare (firește în formatul informatic EXFOR). Pentru evaluatorii ce lucrează în Europa occidentală (țările aparținând de NEA-DB), banca de date a NEA le furnizează o dată cu datele măsurate și toate celelalte evaluări care sunt deja disponibile și care pot fi folosite la aplicații (așa cum ar fi fișierele americane ENDF/B-V și VI și fișierele japoneze JENDL.2 și 3). Activitățile de evaluare pentru aplicații de reactori de fisiune în Europa de vest sunt realizate în cadrul proiectului JEF. Acesta e coordonat de Grupul de Coordonare Stiințifică (un comitet al NEA). Banca de date a NEA asigură administrarea și centralizează fișierele evaluate produse de fiecare țară participantă. Tot NEA-DB asigură verificarea coerenței și compararea (prin coduri specializate) cu datele măsurate și cu alte evaluări.

În ultimii ani efortul de evaluare s-a redus mult în Europa occidentală și în SUA. În Europa de vest, cu excepția Franței, acest efort este repartizat între proiectul JEF și proiectele pentru tehnologiile de fuziune EFF și FENDL [1]. Începând cu 1988 proiectul JEF se va numi JEFF și va conține în afară de câteva noi evaluări și o ameliorare a secțiunilor eficiente peste 6 MeV, fiind vorba de unificarea proiectelor JEF și EFF iar baza de date se va numi în viitor JEFF-3.

Comitetul Stiințific Nuclear al NEA organizează cooperarea între diversele activități de evaluare efectuate în Europa de vest, SUA și Japonia. În viitor colaborarea va fi mai strânsă și vor fi lărgite și grupurile de evaluatori care în prezent în țările Europei occidentale numără aproximativ una două persoane care lucrează în fiecare țară participantă la proiectul JEF (Franța, Germania, Italia, Țările de Jos, Suedia, Anglia).

Comisia Uniunii Europene ajută financiar proiectul JEF în timp ce IAEA asigură finanțarea pentru participanții la proiectul FENDL.

Proiectul JEF este acum în faza de validare a fișierului JEF2.2. Acest lucru este în sarcina Franței (la Saclay și Cadarache) unde se fac și studiile de sensibilitate și calculele de ajustare ale secțiunilor. Lucrările nu sunt încă complete. În Italia unele activități se canalizează pe materialele de structură (transmisii prin protecțiile de Fe și măsurarea reactivității materialelor de structură în spectrele de neutroni rapizi). În Anglia este în lucru

un program privind calculul sistemelor de reactori termici și rapizi ca și calculul protecțiilor și calcule de evacuare a căldurii. La Stuttgart este prevăzut să se facă calcule de reactori termici. Aceste eforturi se îndreaptă esențial pe studii de validare pentru schemele de calcul particulare utilizând datele din fișierul JEF2.2 și nu pe studii destinate să amelioreze JEF2.2.

Numai în Franța există obiectivul de validare și redefinire a bibliotecii de secțiuni a JEF2.2. Pe de altă parte studiile făcute în celelalte țări vor constitui un test independent al metodelor de calcul franceze și vor aduce astfel o completare a informației. De exemplu studiile realizate în Germania, Italia și Anglia vor da indicații asupra datelor cu privire la Fe.

O altă problemă ce trebuie rezolvată este ameliorarea coerenței între valorile calculate și măsurate pentru datele integrale.

Validarea datelor pentru predicțiile de căldură reziduală este făcută în Franța (Cadarache și Saclay) și în Anglia (Winfrith și Berkeley Nuclear Laboratory of Nuclear Electric) cu contribuții din Suedia (Studsvik) și Germania (Heidelberg).

Datele de neutroni întârziați sunt de interes mai ales datorită utilizării fracțiunilor efective de neutroni întârziați pentru definirea scărilor de reactivitate în măsurările integrale. Aceste date sunt de asemenea importante pentru nevoia de coerență între măsurările făcute cu compoziții diferite de combustibil și spectre diferite de neutroni. Validarea acestor date face obiectul unei cooperări internaționale (noi măsurări integrale ale fracțiunii efective de neutroni întârziați sunt în curs la instalațiile MASURCA și EOLE). La universitatea din Birmingham se face în prezent măsurătoarea randamentului de neutroni întârziați în fisiunea ^{238}U .

Biblioteca JEF2.2 este incompletă în multe fișiere MF. De exemplu sunt incomplete datele asupra randamentelor de fisiune; sunt puține informații asupra incertitudinilor datelor de secțiuni eficace (datele de covarianță). Sunt necesare estimări ale incertitudinilor în studiile de ajustări de date. Persoanele de la Cadarache care au această sarcină trebuie să-și facă propriile lor judecăți asupra acestui subiect. Ameliorarea fișierului JEF2.2 progresa în ceea ce privește completarea randamentelor în energie, spectrele γ și datele de covarianță dar nu se poate specifica un termen al terminării acestora.

*) Prelucrarea secțiunilor eficace

Calculul neutronic actual pentru energia nucleară necesită procesarea evaluărilor secțiunilor cu scopul de a produce secțiuni multigrup, necesare pentru codurile de reactori. În Franța este necesar să se producă date pe de o parte pentru codul Apollo (în formatele 99 și 172 grupe) de reactori termici și pentru codul ECCO destinat aplicațiilor de reactori rapizi. Munca de tratare a secțiunilor evaluate este destinată și structurii (175 grupe) formatului VITAMIN-J/ANISN pentru aplicațiile de protecție la fuziune. Structuri de grupe standard sunt de asemenea folosite pentru datele de interacție γ .

În Europa occidentală, Japonia și SUA codul NJOY (dezvoltat la Los Alamos) este folosit în prima etapă de tratament multigrup. În unele cazuri acest cod e completat de alte coduri pentru tratarea structurilor de rezonanță (în Franța e vorba de codul CALENDF). Fișierele furnizate de NJOY sunt apoi transformate în formatele cerute pentru utilizarea în coduri particulare de neutronică.

Codul ECCO a fost dezvoltat pentru a fi utilizat în Proiectul European de Reactor Rapid. Italia și Anglia au colaborat cu Franța în dezvoltarea modulelor de tratare a datelor rezultate din NJOY și CALENDF pentru a pune biblioteca în format compatibil cu ECCO. Această bibliotecă a fost realizată, bibliotecile pentru ECCO pot cuprinde 1968 grupe (pentru materialele cele mai importante), 172 grupe (schema XMAS) și structura în 175 grupe pentru VITAMIN-J. În sfârșit au fost incluse datele de evacuare de energie și randamentele în

radiație γ .

Bibliotecile pentru Apollo sunt realizate în Franța dar ele au făcut obiectul unei colaborări cu Anglia asupra unei noi structuri de 172 grupe (schema XMAS). Aceasta va permite o împărțire a sarcinilor în producerea unei biblioteci (deja unele date au fost produse în aceasta structură de grupe în Anglia și Italia pentru folosirea codului ECCO). Această structură a fost adoptată în Țările de Jos pentru sistemul PASC de la Petten și pentru sistemul Delft, ambele utilizând codul SCALE 4.

Structura de grupe VITAMIN-J este folosită mult iar realizarea bibliotecilor în acest format este în curs în mai multe laboratoare și la NEA-DB. Secția de Date Nucleare a IAEA tratează în acest format biblioteca FENDL.

NJOY este un cod cheie pentru care NEA-DB coordonează întâlnirile grupului de utilizatori cu scopul de a dezbată problemele ce apar și să propună soluții; efortul de mentenanță și de aducere la zi a codului NJOY este semnificativ.

NEA-DB a insistat pe lângă Los Alamos, responsabilul de proiect, pentru amplificarea lucrului de dezvoltare al codului NJOY și difuzarea lui în țările membre NEA (acestea au adus ajutor financiar pentru completarea documentării codului NJOY) cu scopul de a satisface exigențele AQ impuse de NEA-DB și de utilizatori.

Trebuie subliniată ideea că cu cât standardizarea bibliotecilor de aplicații va fi mai mare cu atât sarcinile vor putea fi împărțite.

Proiectul Secției de Date Nucleare a IAEA care viza punerea la punct a unei biblioteci destinată codului britanic WIMS (de reactori termici) a fost terminat recent. Acest proiect a reunit 18 țări dinafara Europei occidentale. Pentru biblioteca WIMS se folosesc fișierele bibliotecilor ENDF/B-IV și VI.

La nivel european este de dorit să se dispună de coduri alternative cu scopul de a furniza o validare independentă a codului NJOY.

Eforturi umane

Pentru măsurări legate de secțiuni este prevăzută modernizarea instalației LINAC de la Geel și a instalațiilor de la ORNL (în domeniul energetic sub 1 MeV). Se pot face măsurători între 300 KeV și 20 MeV la Bruyère Le Châtel iar măsurări la energii de ordinul KeV-ilor cu rezoluție slabă se fac la Karlsruhe.

Pentru măsurări de date integrale Franța dispune de instalații performante (EOLE, MINERVE, MASURCA și HARMONIE) dar există și aici limite, astfel o machetă de reactor rapid în mărime naturală nu poate fi construită pe MASURCA. Aceasta va putea fi realizată pe instalația ZPPR a ANL în SUA. Mai există instalații performante: NESTOR și reactorii SCK-CEN în Belgia, folosiți în special pentru măsurări de protecție. Configurații de protecție pot fi studiate și la instalația HARMONIE.

În ceea ce privește evaluarea, efortul european este limitat, numărul de experți este în continuă scădere, formarea unui specialist evaluator se face în zeci de ani de lucru și dobândire de experiență.

***) Teoria nucleară**

În prezent se constată o scădere a activității de dezvoltare a modelelor teoretice destinate calculului secțiunilor neutronice în domeniul energetic pentru aplicațiile legate de reactorii de fisiune [6].

Deși modelele sunt mult mai puțin costisitoare decât măsurările experimentale și pot furniza o interpolare judicioasă a datelor experimentale pe de o parte și pe de altă parte pot

conduce cu încredere la extrapolări pentru zonele de energie și pentru nucleele la care datele experimentale lipsesc sau sunt afectate de mari incertitudini, totuși se constată că această activitate este desfășurată numai în câteva universități și laboratoare din Europa occidentală și la Los Alamos. Un efort mai mare în acest domeniu promițator și mult mai puțin costisitor ca măsurările este făcut în țările Europei de est și firește în Rusia și celelalte țări CSI.

În ceea ce privește metodele teoretice pentru interacțiile neutronice de înaltă energie există preocupări notabile la Bruyères Le Châtel (Franța) și la ENEA-Bologna (Italia).

***) Coordonarea în activitatea de compilare și evaluare. Cooperări**

Centrele majore europene de date nucleare sunt cele care realizează activitatea de compilare a datelor nucleare și coordonează activitățile de evaluare.

Raționalizarea eforturilor privitoare la proiectul EFF (Comisia Europeană) și la proiectul FENDL (IAEA) este posibilă prin punerea la dispoziția IAEA a fișierului JEF2.2. În prezent Comitetul Științific Nuclear al NEA este cel ce joacă rolul de bază în încercarea de coordonare internațională a efortului de evaluare.

În afară de această cooperare internațională cu privire la evaluare există acorduri bilaterale pentru activitatea de tratament al datelor evaluate. Amintim cooperarea între Anglia (Winfrith) și Italia (ENEA-Bologna) și cea dintre Franța (CEA) și Italia (ENEA-Bologna) cu privire la testarea (benchmark) datelor pentru materiale de structură.

Altă colaborare de succes este între Cadarache și Winfrith (programul CERES) pe de o parte asupra fizicii reactorilor cu apă ușoară, în particular efecte de "burn-up" asupra reactivității și ratelor de fisiune și pe de altă parte asupra siguranței și criticității în materie de retratare a combustibilului iradiat.

O altă problemă este dezvoltarea sistemului de AQ. În Franța CEA lucrează pe această direcție și aceasta va conduce la validarea completă a informațiilor transmise la Electricité de France și la Framatome.

La institutul "Paul Scherrer" în Elveția sunt aplicate procedurile formale de AQ în construcția noii instalații cu sursă de spalație. Același demers este luat în considerație pentru programul experimental PROTEUS.

Adoptarea procedurilor AQ va aduce un număr de avantaje organismelor internaționale din domeniul nuclear, reducând riscurile de erori în diverse activități.

Deja în Comitetul Științific NEA există o echipă care se ocupă de problemele AQ ale codurilor de calcul (exemplul de studiu fiind codul NJOY).

În SUA procedurile AQ sunt mult mai dezvoltate ca în Europa dar reglementările severe cu privire la experiențele cu radiații cresc considerabil costul acestor proceduri.

1.3.2 SITUAȚIA DATELOR NUCLEARE ÎN STATELE UNITE

***) Măsurări de secțiuni eficace diferențiale**

În SUA principalele instalații sunt ORELA (accelerator liniar de electroni cu sursă de neutroni pulsată) la ORNL (Oak Ridge National Laboratory), finanțată de Divizia de Fizică Nucleară a DOE și instalațiile LAMPF/WNR și LAMPF/LANSCE (sursă de neutroni cu spalație de proton) la Los Alamos (finanțate de Divizia de Aplicații pentru Apărare a DOE). Există de asemenea și echipamente cu surse monoenergetice de neutroni acoperind domenii energetice ridicate (de la 300 KeV la 14 MeV). Acestea sunt plasate la universități și la Los Alamos (Van-de-Graaff 10MV). Din nefericire instalația FNG (Fast Neutron Generator) de la laboratorul National Argonne a fost declassată recent datorită întreruperii finanțării de către DOE. Ea a servit mult la acumularea datelor cu privire la secțiunile inelastice (la energii de

peste 1 MeV).

***) Compilarea măsurărilor și activitatea de evaluare**

Rezultatele tuturor măsurărilor efectuate în SUA sunt compilate la Centrul Național de Date Nucleare (NNDC) situat la Laboratorul National Brookhaven. Acesta este unul din cele 4 centre majore de date nucleare. Tot NNDC este responsabil de elaborarea testelor de coerență efectuate pe bibliotecile de date evaluate și asigură și distribuția acestora. De asemenea NNDC publică multe compilații de date nucleare (exemplu "Barn Book").

Activitățile de evaluare sunt coordonate de "Grupul de lucru asupra evaluării de secțiuni eficiente" (Cross Section Evaluation Working Group - CSEWG) iar biblioteca de date evaluate este ENDF/B-VI, cea mai completă la ora actuală.

În ceea ce privește producerea și validarea bibliotecilor de secțiuni multigrup, această activitate este în responsabilitatea comunității utilizatorilor. ORNL produce o bibliotecă multigrup plecând de la fișierele ENDF/B-VI.

***) Definirea necesităților și situația de ansamblu**

Comitetul Științific Nuclear Consultativ (desemnat de DOE) și Fundația Științifică Națională au pus în evidență prioritățile pentru deceniul 90: producerea de putere pe bază de energie nucleară, cercetarea reactorilor de viitor, tratarea deșeurilor.

Biblioteca ENDF/B-V este complet testată și cea mai mare parte a conținutului este corect. Mai trebuie însă tratate câteva secțiuni (MF-uri) la care răspunde ENDF/B-VI dar mai sunt și alte aspecte de completat înafara celor legate de datele necesare la fuziune pentru care s-a finanțat activitatea de evaluare.

Până acum aproximativ 10 ani programul de lucru al SUA privitor la furnizarea datelor nucleare pentru aplicații de fisiune și producția de electricitate era bine coordonat. Finanțările erau asigurate de Ministerul American al Energiei și Ministerul Apărării iar coordonarea științifică era asigurată de CSEWG. Rezultatul a fost realizarea și validarea bibliotecii ENDF/B-V. Dar după încheierea activității la ENDF/B-V programul "s-a mai relaxat" poate și datorită efortului mare ce-l implica. Pe de altă parte și finanțările s-au mai redus. Cu excepția unor fonduri provenind de la proiectul de fuziune, celelalte organisme nu și-au mai adus contribuții la ENDF/B-VI, care se dezvoltă pe baze mult mai autonome: Divizia de Fizică Nucleară a DOE nu mai precizează activitățile de măsurări și evaluări ce trebuie făcute de diversele laboratoare iar CSEWG se reunește destul de rar și fără reprezentanți ai industriei nucleare americane. Ca atare s-a oprit finanțarea tuturor activităților de măsurări cu excepția celor din laboratoarele naționale.

Numeroase incertitudini subzistă cu privire la programele viitoare (reactorul rapid integral "Integral Fast Reactor" de la ANL, transmutația deșeurilor) dar vor fi necesități de date nucleare privind combustibilii cu rată de ardere ridicată și randamentele ciclurilor de combustibil precum și cu privire la "burn-up credit", transportul și stocarea combustibilului și problemele legate de gestiunea deșeurilor (firește mai ales plutoniul care nu mai e necesar în scopuri militare).

Cu privire la ENDF/B-VI s-au efectuat lucrări la Oak Ridge (mai ales pentru aplicații în domeniul protecției) și la Los Alamos, dar nimic nu s-a mai făcut la ANL. Pe de altă parte ANL încearcă o cooperare cu Europa pentru elaborarea unei baze comune de date nucleare.

În viitor se prevede că lucrările de validare vor fi considerabile ca și demonstrarea fiabilității noilor modele de calcul și a datelor asociate lor pentru a satisface cerințele de exigență ale "Nuclear Regulatori Comission" a SUA.

1.3.3 SITUAȚIA DATELOR NUCLEARE ÎN JAPONIA

***) Descrierea activităților**

În Japonia la activitățile legate de datele nucleare participă mai multe organisme și întreprinderi, în special JAERI, "Power Reactor and Nuclear Fuel Development Corporation"(PNC), universități și companii private ca TOSHIBA. Activitățile de evaluare sunt coordonate de Centrul de Date Nucleare al JAERI.

Finanțarea este de la guvern, ca atare JAERI și PNC pot să asigure coordonarea activităților și să decidă nevoile cu privire la măsurările de date nucleare diferențiale.

În materie de evaluare Japonia a angajat un proiect specific numit JENDL. Fișierul de date corespunzător este în prezent la versiunea 3 și o reactualizare este pe cale de a fi făcută după o perioadă de teste benchmark și de reevaluare. Resursele alocate evaluărilor sunt mult mai mari ca în Europa occidentală. Pe lângă activitățile de evaluare la JAERI (energiile neutronice până la 20 MeV), cercetătorii japonezi participă și la evaluarea datelor atomice și moleculare și la datele legate de fuziune. Sunt în curs și evaluări ale datelor de energii înalte.

La validarea datelor pentru produși de fisiune participă nouă organizații printre care: JAERI, KAWASAKI, TOSHIBA, HITACHI, SUMITOMO, MITSUBISHI sub coordonare TOSHIBA. Acest mod de lucru duce la o bună coordonare între persoanele diferitelor organizații, având în sarcină un tip particular de date nucleare (putere reziduală, secțiuni eficiente, produși de fisiune etc.). În Japonia se relevă mai bine rolul jucat de industrie în privința validării datelor nucleare.

În ceea ce privește situația instalațiilor de măsură, există în Japonia mai multe situate la JAERI și în universități. Dar se pare că japonezii nu au instalații de înaltă rezoluție ca cele europene (GELINA la Geel) și americane (ORELA la Oak Ridge, LAMPF la Los Alamos). Au de asemenea instalații adecvate pentru cercetări legate de fuziune și dozimetrie.

Cu privire la măsurările integrale la JAERI sunt trei ansamble critice: FCA (reactor rapid), TCA (reactor termic) și VHTRC (reactor cu gaz la temperatură înaltă).

***) Obiective ale programelor japoneze, situație de ansamblu**

Japonezii doresc să reunească date nucleare pentru mai multe proiecte: reactorul răcit cu gaz la temperatură înaltă, reactorul rapid răcit cu sodiu, reactorul de fuziune, proiecte asupra incinerării actinidelor și transmutației produșilor de fisiune. Sunt de asemenea luate în considerație necesitățile de date nucleare pentru generațiile actuale de reactori (cel cu apă ușoară).

Deși japonezii manifestă un interes deosebit privind activitățile de măsură și evaluare a datelor nucleare din Europa și SUA, Japonia este "independentă" în ceea ce privește evaluarea și utilizarea teoriei la validare. Cercetătorii japonezi și-au dezvoltat propriile lor metode de procesare a secțiunilor eficiente, astfel încât ei sunt independenți de codul NJOY dar pe de altă parte sunt interesați de mentenanța acestuia pentru a putea avea o validare independentă a codurilor lor.

Japonezii au probleme legate de realizarea măsurărilor de secțiuni cu rezoluție înaltă și încearcă o susținere financiară a instalației americane ORELA.

Programul japonez de date nucleare are siguranța de a fi finanțat de guvern deși în plus are o susținere importantă din partea industriei.

Si nu în ultimul rând japonezii sunt interesați de posibilitățile de cooperare cu China și Rusia în ceea ce privește activitatea de date nucleare.

1.4 RISCURI PRIVIND NEACOPERIREA NECESITĂȚILOR DE DATE NUCLEARE

Recent "Electricité de France" a făcut o anchetă cu privire la acest subiect, anchetă care deși se referă cu precădere la situația Franței este valabilă și a fost adoptată ca importantă la nivel internațional având în vedere că Franța rămâne poate cea mai avansată țară în ceea ce privește energia nucleară.

Câteva din ideile de bază ale acestei anchete sunt prezentate în cele ce urmează [1].

1.4.1 Situația mijloacelor materiale și a echipelor de cercetare

Mijloacele experimentale și echipele de cercetare permit ajungerea la cunoștințe privind datele nucleare a căror utilizare reprezintă o miză semnificativă pentru exploatarea parcului actual de reactori și pentru ciclul de combustibil asociat acestuia. Situația precară poate fi de natură *tehnică*, de *siguranță* sau *economică*. Ori datele nucleare nu sunt în relație simplă nici cu utilizarea lor nici cu mijloacele prin care pot fi cunoscute.

Atunci când industria nucleară își exprimă necesitățile, trebuie ca aceste necesități să fie "descompuse" în probleme asociate direct cu datele nucleare. De asemenea miza atașată fiecărei necesități nu este accesibilă decât în urma unui studiu. În rezumat, pentru fiecare necesitate identificată, trebuie precizate:

- datele nucleare corespunzătoare respectivei probleme
- miza corespunzătoare acelei necesități

Un punct important al anchetei a fost identificarea riscurilor eventuale pentru perenitatea mijloacelor materiale și a echipelor de cercetare. Analiza datelor furnizate de fiecare mijloc permit punerea în evidența a scenariilor asupra lacunelor importante în disponibilitatea viitoare de date nucleare [1].

1.4.2 Mizele atașate incertitudinilor asupra datelor nucleare

O analiză exhaustivă a importanței legate de cunoașterea mai precisă de date nucleare nu poate fi cuprinsă aici dar se pot da exemple semnificative care au fost grupate în patru teme:

- gestiunea accidentelor
- prelungirea ciclurilor de iradiere și utilizare a combustibilului MOX
- partea finală a ciclului și transuranienle
- utilizarea bibliotecii JEF

i) Accidentele

a) incertitudini asupra coeficienților de temperatură

Mizele asociate acestor incertitudini sunt legate de accidente. Exemplul ales se referă la un accident de răcire prin spargerea sistemului de țevi de vapor, reactorul fiind oprit (cazul cel mai sever), o bară avariată (caz cel mai defavorabil), zona activă fiind la "sfârșitul vieții". Golirea provoacă o creștere a puterii prin efectul coeficientului de reactivitate de temperatură de intrare a apei în zona activă dar efectul Doppler sfârșește prin a contra această creștere de putere.

Bara avariată crează o puternică asimetrie a fluxului de neutroni conducând la factori de punct cald ridicai. În unele cazuri de îmbogățire a combustibilului, marjele privitoare la

fierberea locală ne mai fiind suficiente, unele moduri de gestionare a zonei active pot fi îndepărtate. Poate fi evaluată penalizarea corespunzătoare limitării ratei de ardere.

Pentru a ieși din dificultate sunt posibile mai multe căi:

- reducerea incertitudinii asupra efectului Doppler
- ameliorarea schemelor de calcul mai ales pentru reducerea incertitudinii de calcul și ca urmare conservarea factorilor de punct cald
- schimbarea planului de încărcare a reactorului

Iată deci un exemplu în care reducerea incertitudinii cu 10% asupra efectului Doppler conduce la un beneficiu asupra costului ciclului.

În alte exemple miza în loc să vizeze costul ciclului poate rezida în dificultatea efectuării unei demonstrații de siguranță. Astfel atunci când se evaluează cazul unui accident reprezentat de ejectarea a două bare vecine, puterile mari atinse local sunt afectate de valoarea coeficienților de temperatură și de efectele spațiale.

b) Incertitudinea asupra puterii reziduale

Incertitudinile asupra puterii reziduale care, în ciclul de combustibil este aplicația care necesită o cunoaștere detaliată a ansamblului tuturor datelor nucleare, au consecințe asupra răcirii de avarie a reactorului, evacuării puterii reziduale la oprire și menținerea combustibilului.

Incertitudini de ordinul 10% există asupra puterilor reziduale la timpi scurți după oprire, datorate în special:

- diferenței între diferitele măsurări
- diferenței între măsurări și suma contribuțiilor produșilor de fisiune individuali
- diferenței existente între rapoartele între U-235 și Pu-239

Reiese ca necesară o reevaluare a incertitudinilor ținând seama de standardele americane și japoneze care susțin revizuirea recomandărilor de calcul.

ii) Prolungirea ciclurilor de iradiere și utilizarea MOX

După iradiere cantitatea de plutoniu crește, fracțiunea de izotopi de plutoniu cei mai grei crește, coeficientul de vid devine atunci mai puțin negativ și în final pozitiv după mai multe etape de reciclare. Acest fenomen care afectează mult accidente grave de golire, limitează deci numărul de reciclări. Se pun întrebările: este posibilă ameliorarea schemelor de calcul sau precizia asupra datelor nucleare, cu scopul de a facilita reciclarea în fracții importante a zonei active a reactorilor cu apă ușoară sub presiune? Care este fezabilitatea multireciclajului plutoniului? Ce probleme concrete corespund la mlze economice și strategice importante în curs de evaluare?

iii) Sfârșitul ciclului și transuranienele

Această temă acoperă mai multe probleme:

- incinerarea actinidelor (incertitudini asupra ratelor de transmutație a elementelor ^{237}Np , ^{241}Am și ^{243}Am).
- transmutația produșilor de fisiune de viață lungă de exemplu ^{129}I și ^{99}Tc .

Conform cu evaluările actuale ale datelor nucleare se poate ajunge la diferențe de 30%, 40% la ratele de incinerare a transuranienelor. Ameliorarea adusă de JEF2 la aceste probleme nu a fost încă evaluată.

Slaba cunoaștere a datelor de bază (secțiuni eficace, structură de rezonanță, secțiuni

de împrăștiere inelastică) apasă deci greu asupra calculelor inițiale de proiect care sunt făcute în prezent pe diverse configurații de incinerare în reactori. Bineînțeles că experiențele integrale sau măsurările pe reactori de putere vor putea permite cunoașterea puțin câte puțin a ratelor de incinerare.

iv) Probleme diverse

a) Absorbanți

Prezența din ce în ce mai mare a transuraniilor în reciclarea combustibilului induce o pierdere de eficacitate a barelor de control. Pentru a o compensa trebuie cercetați absorbanți mai eficace decât borura de hafniu HfB_2 ale cărei caracteristici neutronice nu sunt prea bine cunoscute.

b) Materiale de structură

Fenomenele de apariție a defectelor în materialele de structură nu sunt bine cunoscute. Cei doi factori care determină deteriorarea materialelor de structură sunt: numărul de atomi deplasati din poziția lor în rețeaua cristalină și cantitatea de He produsă în reacțiile (n, α) . În același timp există incertitudini în datele nucleare care determină numărul de atomi deplasați și rata de formare a He. Acestea trebuie luate în considerație de o manieră în care deteriorarea materialelor de structură depinde de acești parametri și de temperatură. Pentru a trata acest gen de probleme, procedura adoptată constă în punerea în corelare a marimilor fizice (legate de deteriorarea materialelor de structură) observate și calculate. O schimbare în datele nucleare utilizate pentru calculul deplasării per atom și a ratelor de producere a He necesită o revizuire completă a tabelilor de corelare. Pe de altă parte, date și mai ales modele de calcul mai bune pentru determinarea deplasării în rețeaua cristalină plecând de la energiile de recul, vor conduce la predicții de deteriorare a materialelor structurale mult mai corecte. De exemplu va putea fi mai bine estimată mărimea incluziunilor de combustibil în aliajele de zirconiu (pentru combustibil cu rată mare de ardere).

Firește atunci când este vorba de reactori rapizi aceasta problemă devine critică chiar pentru posibilitatea însăși de a atinge combustia dorită pentru zona activă.

În ceea ce privesc băncile de date nucleare utilizate în prezent, problemele de coerență care se pun sunt:

- coerența între codurile de calcul și bibliotecile de date (cele două ansambluri trebuie validate simultan)
- coerența între băncile de date utilizate ca surse ale bibliotecilor pentru aplicații diverse

Ar fi de preferat ca, pentru toate aplicațiile, părțile implicate să plece de la date rezultate din aceeași bancă de date. Asta nu pune în discuție utilizarea de biblioteci diferite specifice diverselor aplicații. Probleme însă sunt datorită "calificării" metodelor și sistemelor de calcul.

1.4.3 Datele nucleare pentru care s-au identificat necesități

Necesitățile de date nucleare acoperă în principal trei domenii:

- reactorii actuali
- ciclul de combustibil
- reactorii de viitor

Reactorii actuali pot fi încă de pe acum obiectul unei analize precise deoarece:

- datele nucleare corespunzătoare au implicat un vast ansamblu de cercetări în ultimele trei decenii

- acest domeniu a făcut obiectul unei colaborări internaționale întinse și deschise

- necesitățile specifice rămase sunt bine delimitate

Ciclul de combustibili pune deja probleme mai puțin clare deoarece:

- se bazează pe o cunoaștere a compoziției combustibililor după iradiere (mai mulți ani), după mai multe cicluri de iradiere (zeci de ani), pentru care activitatea de validare este dificilă

- măsurările sunt dificile, costisitoare și rare (chimie după iradiere) și intră în cadrul secretului industrial

- nu există colaborare internațională

Acest domeniu comportă puternice implicații de ordin economic.

Reactorii de viitor acoperă proiecte variate pentru care exactitatea datelor trebuie ameliorată:

- suprageneratori

- incinerarea actinidelor

- celelalte concepții asupra combustibililor și reactorilor

Actinidele și perspectiva incinerării lor, dacă acest lucru va trebui concretizat, fac obiectul unui program integrat.

Dimensiunea domeniului acoperă atât obținerea de date cât și utilizarea lor, ceea ce pune mai multe probleme corelate:

- evoluția unui fișier de referință către unul mai modern

- validarea ansamblului de date și de mijloace de calcul o dată cu creșterea puterii informatice

- internaționalizarea bazei de date ce trebuie dezvoltată ținând cont de reducerea drastică a fondurilor și de strategia eliminării lor în unele țări.

i) Coeficientul de temperatură

Probleme:

- diferență între măsurări și calcule pentru măsurări realizate pe reactori în funcționare și instalații critice (KRITZ în Suedia și EOLE în Franța)

- studiul acestei situații în afara ameliorărilor propuse asupra schemei de calcul a condus la formularea de ipoteze asupra:

- schimbării formei secțiunii eficace de captură a U-238 la energii termice

- schimbării în coeficientul η al U-235 la energii termice

- efectul legăturilor cristaline asupra efectului Doppler

- realizarea de măsurători de secțiuni eficace diferențiale apasă asupra ultimelor două ipoteze

- incertitudine în valoarea efectului Doppler

Dimensiune internațională:

Problema descrisă aici a fost propusă în Franța, Suedia și Anglia. Problema de discordanță e mai puțin importantă pentru reactorii gaz-grafit ceea ce lasă să se presupună că e legată de apă sau de alte aspecte termice (lucru arătat de studiile britanice).

Consecințele problemelor nerezolvate:

Repercursiunile sunt în domeniul securității accidentelor grave și asupra dimensionării. Dificultăți mari apar la estimarea incertitudinilor pentru valorile extrapolate (la temperaturi înalte și la diverse nivele de iradiere).

ii) Puterea reziduală cu eliminarea dezacordurilor la ^{235}U și ^{239}Pu

Probleme: pentru timpi scurți după oprire sunt diferențe (mai mici de 10%) între diferitele măsurări de putere reziduală și dezacorduri există (în jur de 10%) între suma

calculată a contribuțiilor produșilor de fisiune individuali și cea mai bună estimare a tuturor măsurărilor de putere reziduală.

Sunt de asemenea incoerențe în rapoartele măsurărilor pentru U-235 în raport cu cele pentru Pu-239 (utilizând tehnici diferite) [5].

Dezintegrarea produșilor de fisiune nu este singura sursă de putere reziduală, există și alți factori de care trebuie să se țină seama: transmutația produșilor de fisiune, dezintegrarea actinidelor (U-239 și Np-239), activarea materialelor de structură și amplificarea numărului de neutroni întârziați (pe timpul unei scurte durate după oprirea reactorului).

Dimensiunea internațională: au fost propuse noi standarde japoneze și americane dar încă nu sunt intrate în vigoare.

Consecințe ale problemelor nerezolvate:

Trebuie respectate marjele de siguranță la nivelul răcirii necesare pentru zona activă atunci când reactorul este oprit. Același lucru e valabil pentru combustibilul ars scos din zona activă.

iii) Absorbantii

Gadoliniul și alte otrăvuri consumabile sunt principalii absorbanți luați în considerare. O bună evaluare a datelor nucleare ale absorbantilor determină controlului neutronic cel mai eficace și cel mai puțin costisitor pentru compensarea consumării combustibilului și în același timp și pentru oprirea reactorului.

Dimensiunea internațională:

Există două direcții: intersul recunoscut pentru retratarea combustibilului și consensul internațional privind utilitatea datelor nucleare referitoare la absorbanți în comportarea reactorilor de putere.

Consecințele problemelor nerezolvate: trebuie ținut cont de consecințele economice ale incertitudinilor în datele cu privire la:

- materialele absorbante
- marjele îmbogățirii combustibilului
- implicațiile asupra consumării combustibilului

iv) Secțiunile eficace ale materialelor de structură

Elementele de structură folosite în calculul reactorilor sunt Fe, Cr, Ni, Zr. Principala problemă privind aplicațiile la reactori termici este cea a ecranelor de protecție și trecerea neutronilor și a radiațiilor γ prin oțeluri [2]. Pentru reactorii rapizi oțelul este un constituent major al zonei active ocupând o bună parte din volumul acesteia, de aceea secțiunile de absorbție și de împrăștiere devin la fel de importante.

Trebuie subliniat că oțelul este folosit în toate structurile tuturor reactorilor existenți.

În privința consecințelor problemelor nerezolvate: marjele adoptate în concepția și protecția reactorilor nu pot fi reduse. Unele vase de reactori au fost găsite mult mai iradiate decât se prevăzuse deci deteriorarea materialelor de structură a fost mult mai mare decât ipotezele inițiale; incertitudinile sunt supărătoare în calculele de predicție a duratei de viață.

v) Prelungirea ciclurilor de iradiere și utilizarea MOX

Probleme:

- variația reactivității cu arderea combustibilului: pentru a o evalua este necesar studiul variației în compoziție a actinidelor și a produșilor de fisiune ca și variația valorilor de

reactivitate a acestor componente

- efectul asupra distribuției de putere în ansamblele combustibile, în particular în utilizarea combustibilului MOX (factori de punct cald, distribuția ratelor de fisiune în ansamble)
- efectele asupra puterilor relative în ansamblele UO_2 și MOX la cea mai înaltă ardere
- efectele utilizării combustibilului MOX și al epuizării combustibilului asupra eficacității absorbanților situați în ansamblele combustibile: este convenabil să se ia în considerare schimbările consecutive în spectrul neutronic și harta fluxului reactorului
- variația coeficientului de vid, compoziția izotopică a MOX și distribuția de putere a reactorului în funcție de consumarea combustibilului

În privința dimensiunii internaționale a problemelor: transportul combustibilului și retratarea lui sunt funcție de compoziția combustibilului și preocupările internaționale sunt în special pentru combustibili UO_2 cu rată ridicată de ardere.

Consecințele problemelor nerezolvate constau în: rată limitată de ardere și marje de siguranță reduse privind combustibilul MOX cu grad ridicat de ardere ca și limitele în multireciclare și în fiabilitatea în exploatare.

vi) Incinerarea actinidelor și transmutația deșeurilor de viață lungă

Probleme:

Pe de o parte un nou tip de reactor nu poate fi construit fără o validare aprofundată pe instalațiile critice. Pe de altă parte un nou tip de combustibil necesită o instalație de iradiere.

Incinerarea actinidelor și transmutația produșilor de fisiune de viață lungă necesită o cantitate mai mare de date nucleare: secțiunile lor eficace de captură, de fisiune (incluzând structura de rezonanță) și secțiunile de împrăștiere inelastică.

Se urmărește să fie folosită teoria pentru a completa măsurările cu scopul de a acoperi parțial necesitățile.

Este de dorit ca înaintea unui studiu experimental de iradiere într-un reactor de putere să se efectueze măsurări integrale.

Dimensiunea internațională a problemei:

În afară de Franța care este poate cea mai avansată, multe țări studiază problema printre care: SUA, Japonia, Germania, Anglia. Se urmărește utilizarea de acceleratori cu surse de neutroni de energie înaltă (GeV) alături de reactorii clasici deși tehnologia actuală este neperformantă la valori ale fluxului de neutroni corespunzătoare procesului de spalație.

Consecințe ale problemelor nerezolvate:

În această perspectivă pe termen lung și în situația defavorabilă a proastei cunoașteri a datelor nucleare și indisponibilității mijloacelor experimentale nu rămâne ca soluție decât recurgerea la experimente în reactorii existenți. Acest demers ar putea fi foarte delicat, costisitor și reclamă timp din ce în ce mai lung pentru activitatea de evaluare.

vii) Împrăștierea inelastică la actinidele majore, materiale de structură și produși de fisiune

Măsurările și calculele de secțiuni inelastice sunt importante pentru cel mai mare număr de aplicații și în același timp pun probleme particulare.

Sunt mari incertitudini la împrăștierea inelastică pe U-238 [3]. Incertitudinile la aceste secțiuni afectează exactitatea calculului de validare a ratelor de fisiune în U-238 și efectelor de scăpări în funcție de compoziție.

Efectele difuziei inelastice în materialele de structură trebuie considerate cu multă atenție; în particular asupra iradierii vasului reactorului.

Este mult utilizată *teoria nucleară* pentru calculul secțiunilor inelastice ale multor produși de fisiune datorită dificultăților legate de măsurări. Dar există lacune în teorie și sunt necesare măsurări directe atât pentru obținerea datelor cât mai ales pentru ameliorarea modelelor teoretice.

Situația internațională: după închiderea instalațiilor FNG și ANL apare necesitatea efectuării măsurărilor pe alte instalații; singur laboratorul de la Geel a efectuat măsurări de difuzie inelastică pentru câțiva izotopi ai produșilor de fisiune. Tot aici se studiază posibilitatea realizării de experimente pentru măsurarea secțiunilor neutronice inelastice pe U-238. Mai mult, secțiunile inelastice sunt importante nu numai pentru cercetarea, proiectarea și funcționarea reactorilor dar și pentru studiul criticității instalațiilor de transport, stocare și retratare a combustibilului.

Consecințele problemelor nerezolvate: incertitudinea în estimarea variației de reactivitate cu arderea combustibilului este o problemă acută la fel și incertitudinile în nivelul de iradiere al vasului reactorului.

viii) Supraregeneratori și incineratori de plutoniu

Sunt progrese notabile privind estimarea rolului pe care-l pot juca reactorii rapizi în reducerea stocurilor de plutoniu. Este vorba de o schimbare radicală de orientare în raport cu obiectivul precedent care era de creștere a resurselor de produse fisile. Sunt în vedere mai multe etape: prima corespunde eliminării păturilor în care se produce Pu plecând de la U-238; a doua etapă cuprinde reducția sau eliminarea uraniului din zona activă a reactorului pentru a evita total producția de plutoniu nou.

Eliminarea uraniului din zona activă a reactorului implică unele probleme legate de securitate; în particular efectul Doppler la U-238 (în reactorii clasici) trebuie să fie compensat de un alt coeficient de temperatură. Între altele fracțiunea de neutroni întârziați și marja de reactivitate (între starea critică și starea critică promptă) devin mai mici.

Problemele de protecție cer să se țină cont de absența anvelopelor.

Programul European de Reactori rapizi a fost de altfel înlocuit cu programul CAPRA care analizează diferitele etape de incinerare a plutoniului. Acest program coordonat de Franța implică participarea Angliei (BNFL) și Germaniei (KfK).

ix) Coerența bibliotecilor de date de aplicații și a băncilor de date nucleare

Băncile de date trebuie procesate pentru producerea bibliotecilor de aplicații înainte de a le utiliza în calcule de reactori, de protecții, dozimetrice etc.

De regulă procesarea datelor constă fie în medierea energetică în grupe multe fie în utilizarea unor metode și date pentru analizarea autoprotecției de rezonanță. Aceste procesări utilizează aproximații; efectele ce decurg de aici trebuie examinate prin studii de validare. În cazul codului APOLLO-1 valorile de secțiuni sunt mediate pe 99 de grupe, la codul APOLLO-2 formatul XMAX cere 172 grupe energetice. Codurile de procesare WIMS (Anglia) și SCALE (RSICC) utilizează același tip de format. În același timp metodele de tratare ale efectelor autoprotecției de rezonanță sunt diferite la fiecare din aceste coduri. Alte coduri au caracteristici încă mai diferite; astfel ECCO posedă 1968 grupe de energie și dispune de formalismul de subgrup pentru tratarea efectelor de rezonanță. O asemenea heterogenitate nu ușurează deloc cooperarea internațională în validarea JEF2; efectele

metodelor de aproximare fiind comparabile cu cele rezultate din incertitudinile asupra datelor nucleare.

Datele de bază utilizate de cei implicați în industria nucleară sunt foarte diverse; ideal ar fi ca toți să se bazeze pe o singură bibliotecă de date nucleare de referință și pe coduri și biblioteci de aplicații validate împreună.

Dar de care bancă de date nucleare de referință să fie vorba? Raspunsul este încă prematur.

Structura de grup adoptată ar fi o altă întrebare; trebuie: 99, 172 sau 1968 de grupe de energie? Dezbaterile sunt departe de a fi închise deși structurile de grup APOLLO actuale sunt global satisfăcute (99 de grupe deja folosite și 172 grupe în curs de validare).

Pe plan internațional elaborarea unei bănci de date larg recunoscute ar putea să ceară cel puțin 5 ani, cu luarea în considerație a ideilor stabilite de Comitetul Științific al NEA și de IAEA.

1.4.4 Scenarii ale evoluției mijloacelor și analiza consecințelor lor

Cu privire la secțiunile eficace diferențiale, în Europa de vest sunt doar trei laboratoare care măsoară: Geel, Studsvik (pentru randamentul produșilor de fisilune de viață scurtă și date de dezintegrare) și Universitatea din Birmingham (pentru date de neutroni întârziți). Unele experimente legate de dozimetrie se fac la Viena. Mai multe laboratoare efectuează măsurări de dezintegrare a izotopilor de viață mai lungă (în particular laboratoarele naționale de standarde), dar contribuțiile cele mai importante vin de la Geel. Ce s-a făcut și ce este preconizat să se facă în materie de măsurări poate fi sistematizat astfel:

a) Coeficienți de temperatură a moderatorului și efect Doppler

S-au făcut măsurări de η și α pentru U-235 și o primă evaluare a fost încheiată. S-au măsurat secțiuni de captură la U-238 la energii termice.

Sunt în curs de studiu măsurări ale dependenței în funcție de temperatură a formelor rezonanțelor la U-238 în diverse solide (în particular în bioxid de uraniu). Această activitate va necesita probabil mai mulți ani.

b) Izotopi de plutoniu

Dacă măsurările de η trebuie realizate, va trebui să se obțină un eșantion de 200g; necesitatea trebuie clar identificată. Pentru măsurări relative la izotopii mai grei este de asemenea problema disponibilității de eșantioane; evaluatorii trebuie neapărat să se decidă asupra necesităților.

c) Măsurări de difuzie inelastică pe U-238 și pe produși de fisilune selecționați

Acest tip de măsurări este în curs pentru câțiva produși de fisilune. S-a făcut un studiu de fezabilitate la U-238. Există însă o problemă: *separarea împrăștierei elastice și inelastice la nivelele joase de excitare*. În această problemă s-a făcut un studiu la Universitatea din Kioto în cadrul cooperării internaționale asupra evaluării coordonată de NEA. În același timp studiile de ajustare a datelor nucleare progresează și intercomparările evaluărilor existente ar putea furniza câteva indicații.

Măsurările la alte actinide ridică probleme similare, ca atare trebuie clarificate mai multe puncte: domeniile energetice, gradul de rezoluție al nivelelor de energie, anizotropia împrăștierei.

d) Materiale de structură

Ansamblul de măsurări de secțiuni eficace s-a realizat pentru Fe, Cr, Ni până aproximativ la 15 MeV dar calitatea datelor între 1 și 5 MeV este îndoielnică mai ales pentru împrăștierea inelastică. Măsurarea secțiunilor de captură pe Ni și Cr s-a făcut peste 200 KeV, analiza acestor date este în curs. Corecțiile datorate difuziei multiple sunt mari de aceea datele de bază măsurate nu mulțumesc pe specialiștii în fizica reactorilor. Determinarea secțiunilor eficace cere, între altele, o analiză detaliată fondată pe metode Monte-Carlo.

e) Date privitoare la puterea reziduală

Laboratorul de la Geel nu face măsurări de date de dezintegrare. Se realizează numai unele măsurări privind randamentele în produși de fisiune dar este vorba numai de măsurarea dependenței în raport cu energia neutronului incident a randamentelor masice în elemente produși de fisiune fără a fi posibil să se discearnă între izotopi. Există o cameră de ionizare asociată instalației dar ea nu permite determinarea distribuției de sarcină electrică, ca atare a izotopului specific. De asemenea nu e posibil să se măsoare proprietăți de dezintegrare ale produșilor de fisiune de viață scurtă [1].

Se preconizează măsurări de putere reziduală la ILL Grenoble.

Trebuie să existe colaborare strânsă între fizicienii specialiști în fizica reactorilor care formulează necesitățile, evaluatorii care estimează stadiul actual al datelor și în sfârșit fizicienii experimenterii care efectuează măsurările. După identificarea necesităților este nevoie de mai mulți ani până să se poată efectua măsurările.

Cu privire la plutoniu și alte actinide superioare este puțin probabil ca măsurările să fie făcute chiar dacă sunt formulate necesități urgente și clar definite [1].

În anii de început ai energiei nucleare precizia previziunilor asupra proprietăților reactorilor era esențialmente dictată de precizia măsurărilor integrale. În același timp erau absolut necesare cunoștințele asupra variației cu energia a secțiunilor eficace în ciuda slabei precizii a măsurărilor. Este și motivul pentru care s-au adoptat marje de siguranță mari cu scopul de a asigura securitatea reactorilor în toate regimurile de funcționare. În decursul anilor și chiar în prezent sunt necesare eforturi de mărire a preciziei datelor integrale și diferențiale pentru a putea micșora marjele de siguranță care sunt foarte costisitoare.

În cazul discordanței în datele privind coeficientul de temperatură al moderatorului sunt necesare măsurări integrale pentru explorarea diverselor aspecte ale problemei: efecte de scăpări, efecte ale temperaturii combustibilului etc. Dar poate cele mai importante sunt secțiunile eficace pentru că acestea permit explicarea acestei discordanțe: dependența de energie a coeficientului η la U-235, secțiunea de captură a U-238 la energii termice.

Măsurările realizate pe reactori de putere ar putea da informații utile deși acestea nu pot furniza ușor informația necesară extrapolării la toate condițiile de temperatură și de funcționare.

Pentru sistematizarea situației de perspectivă a datelor nucleare drumul logic "necesități-probleme-mijloace-pericole" trebuie urmat pas cu pas.

În privința mizelor, incertitudinile rămase asupra datelor nucleare conduc la o penalizare economică semnificativă. De asemenea aceleași incertitudini complică demonstrațiile de siguranță cu o incidență crescândă în funcție de îmbogățirea mai ridicată, de combustia mai importantă a combustibilului și de reciclarea plutoniului.

Există multe necunoscuturi în privința datelor pentru transuraniene și pentru produși de fisiune de viață lungă. Această situație împiedică sau perturbă studiile de fezabilitate și de concepție asupra multireciclajului, incinerării actinidelor și transmutației produșilor de fisiune.

Mare accent trebuie pus pe evoluția codurilor de calcul și bibliotecilor de date asociate, ceea ce va duce la rezolvarea unor probleme complexe.

Datele nucleare corespunzătoare necesităților identificate sunt multiple. Ele nu vor fi deloc ușor de obținut dată fiind restrângerea activităților experimentale și îmbătrânirii echipelor de cercetători.

Intr-adevăr determinarea datelor face apel la experimente integrale, la măsurări diferențiale și în special la analize: teoretice, de evaluare și de validare.

În privința "amenințărilor" pentru măsurările diferențiale acestea se pare că sunt mai mult decât virtuale în lumea întragă. Dispariția unor laboratoare, restrângerea activității altora fragilizază sistemul de producere a datelor. Calculele teoretice nu pot suplini experimentul în întregime și mai mult se constată la nivel global o lipsă de specialiști în domeniul fizicii structurii nucleare și mai ales în domeniul evaluării datelor nucleare.

1.5 ALTE DOMENII DE CERCETARE PENTRU CARE TREBUIE SATISFACUTE NECESITATI DE DATE NUCLEARE

Cea mai mare importanță o are utilizarea datelor nucleare în calculele neutronice. *Aproximațiile care stau la baza codurilor de calcul actuale introduc erori semnificative.*

Este vorba de:

- mecanismele și secțiunile eficace de deplasare atomică și deteriorarea proprietăților materialelor de structură

- fracțiunea de neutroni întârziați pentru actinidele superioare (incinerarea actinidelor)
- date nucleare privitoare la interacția γ
- date nucleare adecvate privind "vindecarea" materialelor
- randamentele de energie
- spectrele de particule secundare
- fisiuni spontane și reacții (α, n) în combustibilul iradiat

*) Evoluția reactorilor

a) efecte ale neutronilor asupra materialelor: sunt importante deoarece se urmăresc două obiective: prelungirea duratei de viață a reactorilor și decomisionarea unităților care nu mai sunt viabile economic.

În ceea ce privește îmbătrânirea reactorilor cele mai mari probleme sunt legate de reactorii filierelor rusești (aflați în țările Europei de est, Rusia și în țările CSI) și de o parte din reactorii de pe teritoriul Franței (EDF a început deja proiectul "Durée de vie" și CEA a definit programul C3MI - "Mécanique, Métallurgie des Matériaux Irradiés").

b) Noile filiere de reactori: pentru viitor se prevăd:

- reactori cu apă ușoară (diferenți de filiera clasică PWR, BWR, ceea ce justifică o cercetare de bază)

- suprageneratori

- reactori exotici

Problema reactorului "supraregenerator-incinerator" (Super Phénix) este destul de avansată ca urmare a lansării programului CAPRA coordonat de CEA.

*) Ciclul de combustibil: în acest domeniu planurile la nivel european se desfășoară pe 15 ani.

*) Gestionarea deșeurilor: aici problema de bază este destinația plutoniului: este el un

deșeu sau un material fisil ? Cum destinul actinidelor e îndisolubil legat de cel al plutoniului și aici există programe cu finanțare considerabilă.

*) Securitatea mediului ambiant: cele trei mari probleme pentru care sunt necesare date nucleare sunt:

a) accidentele grave în special cele de fuziune a zonei active (trebuie evitată dispersarea, întărirea celei de a treia bariere). Cercetările se canalizează pe interacția zonă activă - beton, explozia hidrogenului, datele fizico-chimice, depozitele de aerosoli.

b) biologia: e vorba de efectele radiațiilor ionizante asupra oamenilor, aici competențele științifice sunt solide dar trebuie îndreptate mai mult spre aplicații

c) migrarea radioizotopilor în biosferă

Bibliografie:

[1] Bioux P. "Les Données Nucléaires. Situation et perspectives", HT-10/95/002/A-Electricité de France

[2] Wagner M., Vonach H. Proc.on "Neutron activation cross sections for fission and fusion applications", NEANDC-259'U', 1989

[3] Sowerly M.G., "Summary of the work of NEANDC task force on U-238", NEANDC-313"U", 1994

[4] Fröhner F.H., Larson D.C. "Cross section fluctuation and self shielding effects in the unresolved resonance region", NEA/WPEC-15, 1996

[5] Fort E., Salvatores M. "Pu-239 fission cross sections between 1 and 100 keV", NEA/WPEC-5, 1996

[6] Schmidt J.J. "The role of nuclear reaction theory and data in nuclear energy and safety applications", Workshop ICTP Trieste (1992)

2. CLASIFICAREA DATELOR NUCLEARE

În afară de clasificarea globală (date diferențiale și integrale) se poate face o clasificare mai riguroasă care să elimine unele ambiguități de terminologie.

Unii termeni ca "date nucleare" și secțiuni" (nuclear data, cross sections) sunt folosiți pe tot fluxul procesării și pot apărea confuzii. De aceea este bine să avem definiții pentru toate tipurile de date și relațiile dintre ele.

Foare multe date integrale depind la rândul lor de geometrii, compoziții de materiale și de *datele nucleare neutronice* (exemplu: secțiuni, dependența lor cu energia neutronilor, spectrele energetice, distribuțiile unghiulare ale particulelor secundare etc.), precum și de *date de interacție a fotonilor* și date de interacție cuplate neutrono-fotonice.

Datele nucleare pentru izotopi individuali la energii particulare pot fi măsurate experimental; pot fi de asemenea precise pe baza calculelor de modele nucleare (pe o zonă de energii). În mod uzual un experiment dă o singură valoare a unei mărimi fizice (de exemplu o secțiune eficace la o energie particulară) sau cel mult comportarea acelei mărimi fizice (secțiune) pe un domeniu limitat de energie. Pentru fiecare reacție secțiunea e puternic dependentă de energie și deci dificil pentru model de a o prevedea analitic. Mai mult, în situații reale trebuie considerate amestecuri de materiale și nu un izotop. Ca atare necesarul de informații crește enorm. Așa cum s-a văzut și din capitolul 1, se pot desprinde următoarele idei:

*) Cu scopul de a obține date nucleare suficiente trebuie făcut un număr mare de experimente. Este absolut necesară cooperarea internațională și schimbul de date.

*) Cantitatea de date fiind enormă este nevoie ca ele să fie puse în formă accesibilă pe computere și riguros "standardizată internațional"; formatul actualmente unanim recunoscut și utilizat este ENDF-6 (noțiunile de bază cu privire la acest format fac obiectul unui capitol separat).

*) Acolo unde nu există date experimentale într-un anumit domeniu de energie, pentru anumiți nuclizi etc., trebuie să se folosească calculele teoretice de model și sistematici în comportarea secțiunilor (și a altor date nucleare) pentru nuclee cu proprietăți similare (exemplu paritate în Z, N etc.)

*) Dacă pentru o mărime fizică există mai multe rezultate ale măsurărilor, fiecare măsurătoare cu erorile sale, este absolut necesară evaluarea pentru a se obține valoarea "cea mai bine estimată".

*) Codurile de calcul folosite în aplicațiile de bază ale datelor nucleare (calcul de zonă activă, de protecție, de combustibil etc.) nu pot face față la dependența de energie a parametrilor: pe întreaga scală energetică, deci sunt necesare tehnici de reducere (colapsare) a datelor.

Legătura și drumul care există de la data nucleară produsă de experimentator sau calculată teoretic până la rezultatul aplicațiilor este prezentată în schemă bloc în figura 2.1.

2.1 DATELE NUCLEARE DE BAZA

În această categorie intră datele nucleare rezultate direct din măsurări experimentale sau din calculele de model. De exemplu în această categorie intră secțiuni diferențiale în energie și unghi pentru neutroni, pentru γ , parametri de rezonanță, secțiuni integrate măsurate în variate spectre etc.

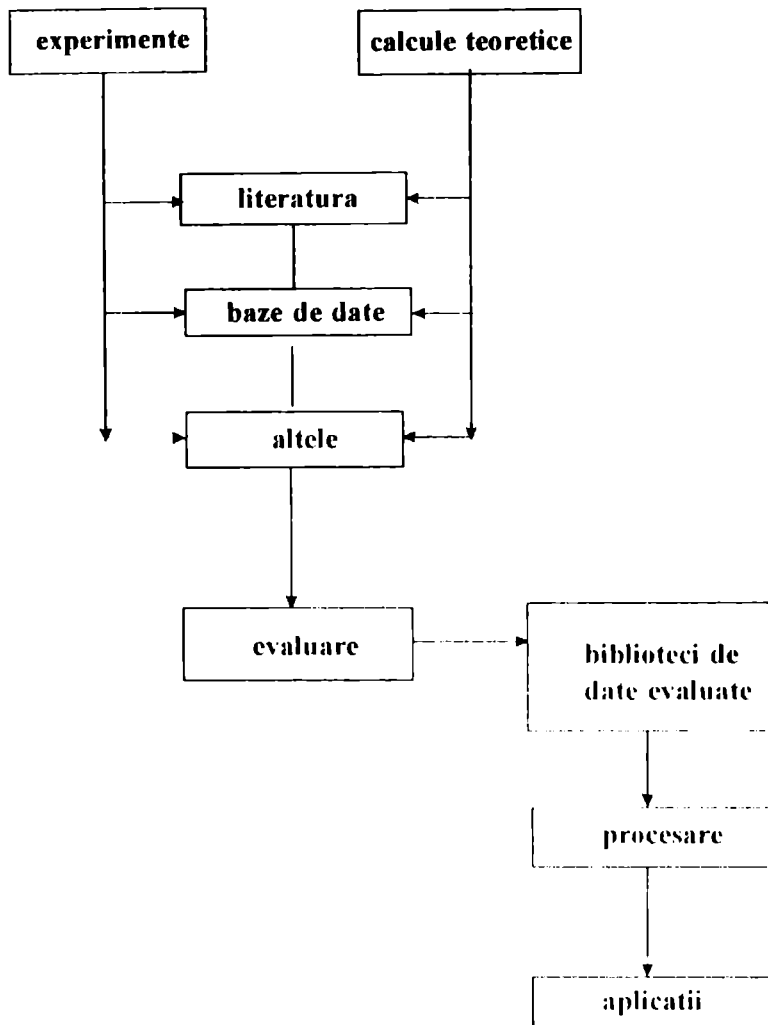


Figura 2.1

2.1.1 Producerea datelor nucleare de bază

Măsurări experimentale

Volumul de măsurări experimentale cerute fiind enorm nu se poate vorbi de efortul unui grup de experimenatori sau al unui laborator. Sarcinile de producere de date de bază experimentale trebuie coordonate și aceasta se face prin colaborare internațională (meetinguri științifice organizate regulat între producătorii de date și utilizatori la nivel de comitete naționale, regionale, internaționale). Necesitățile de noi date sau de o mai mare acuratețe a datelor existente sunt aduse la cunoștință de catre utilizatori.

De aceea IAEA publică periodic WRENDA (World Request List for Nuclear Data), în acest fel laboratoarele care fac măsurări au liniile de ghidare ca să-și poată planifica activitățile și să facă astfel încât rezultatele lor să fie direct folositoare utilizatorilor.

Calculule de modele nucleare

În ultimele trei decenii s-a dezvoltat mult capacitatea modelelor teoretice de a prezice secțiuni eficace și alte mărimi fizice. Totuși în continuare se preferă datele experimentale deoarece încă modelele nu sunt suficient de "precise". Din analiza publicațiilor recente rezultă că datorită numărului mare de parametri de model liberi se pot face futuri "perfecte" ale datelor experimentale existente. Dar în predicția de date necunoscute apar deviații semnificative, uneori peste factorul 2, între rezultatele obținute cu diferite modele și coduri de calcul [1].

Din nefericire sunt situații când nu se poate face experiment (de exemplu pentru izotopi care nu pot fi obținuți cu suficientă puritate, izotopi ce se dezintegrează foarte repede sau nevoia de date în domenii de energie unde experimentul e foarte dificil, costisitor și afectat de erori mari etc.)

În multe cazuri calculele de model sunt folosite pentru a *interpola* sau *extrapola* datele experimentale, pentru a *rezolva discrepanțele* între diverse date experimentale și chiar să furnizeze date (cu marja de încredere suficientă) pentru materiale și zone energetice unde experimentul e dificil sau imposibil.

2.1.2 Compilarea datelor de bază

O dată produse, datele de bază (experimentale sau teoretice) sunt "împrăștiate" în publicații, prin urmare cu un acces destul de incomod al utilizatorilor la ele. Este nevoie de o bază de date care să includă toate valorile experimentale obținute în toate laboratoarele din lume. Activitatea de compilare este realizată de cele patru centre majore de date nucleare, prezentate în capitolul 1, fiecare cu aria sa geografică de activitate.

Formatele datelor nucleare de bază

Cantitatea enormă de informații face ca acestea să fie gestionate într-o formă computerizată. Formatul de stocare este astfel definit încât să permită mentenanța și recuperarea fișierelor [2]. Cele două formate de compilare sunt:

CINDA: cuprinde compilarea referințelor cu privire la datele de bază neutronice, la această bază de date lucrează toate cele patru centre majore și este publicată anual de către IAEA.

EXFOR: conține rezultatele experimentelor actuale cu toate informațiile astfel încât să fie de utilitate imediată evaluatorilor. Toate cele patru centre majore de date nucleare au fișiere master EXFOR identice.

Fișierul CINDA servește ca index pentru fișierul EXFOR astfel încât cele două baze de date se completează una pe alta.

2.2 DATE NUCLEARE EVALUATE

Toate datele nucleare disponibile trebuie revizuite critic, pentru multe din măsurări acestea pot fi nesigure datorită unor cauze ca: metode experimentale depășite, existența erorilor sistematice etc.

Evaluarea se bazează pe date nucleare experimentale disponibile și pe evidența teoretică. Pot fi trecute în revistă câteva caracteristici valabile pentru toate datele experimentale [1]:

- fiecare dată experimentală are o incertitudine constând dintr-o componentă statistică și o componentă sistematică
- două sau mai multe valori experimentale diferă de regulă între ele și au incertitudini statistice și sistematice diferite
- dacă pentru o mărime fizică dată există multe rezultate diferite ale măsurărilor experimentale atunci numai o acuratețe cu un ordin de mărime mai bună a unei noi măsurări poate îmbunătăți acuratețea valorii medii a acestei mărimi fizice
- numai un număr infinit de măsurări (ceea ce firește este imposibil) ar putea conduce la valoarea medie "adevărată" cu condiția să nu fie erori sistematice.

Aceste deficiențe au ca bază natura umană și sunt inacceptabile pentru progresul științei. Este nevoie de "arbitri" care să reconcilieze conflictele științifice cu rezultat într-o valoare medie de compromis care este "cea mai bună posibilă aproximație" a valorii "adevărate".

Inercăm o definiție a evaluării ca fiind o disciplină științifică care dezvoltă și folosește proceduri și valori acceptate de comunitatea științifică pentru a obține "cele mai bune" valori și incertitudinile lor din "conflictul" uzual între evidența experimentală și teoretică.

Altă deliberare constă în faptul că rezultatele cantitative ale cercetării științifice sunt parametri de bază pentru multe industrii, tehnologii și fac posibile noi descoperiri științifice.

Cercetătorii din domeniile științelor aplicate și inginerii au nevoie de o unică "cea mai bună valoare" cu incertitudinile unor estimări realiste pentru marjele tehnologice și economice. Evaluatorul este cel care prepară și furnizează informația.

Munca evaluatorului este să strângă toate informațiile experimentale disponibile ale datelor de bază pentru un anumit nucleid, să facă o revizuire critică și să decidă asupra "cele mai bune valori estimate" a parametrilor. Aceasta se face cu proceduri statistice foarte sofisticate. În plus evaluatorul trebuie să ia în considerație și calculele de model. În special în ultimul timp un evaluator nu este o persoană singură ci un colectiv format din multe persoane, de regulă din diferite laboratoare și țări, fiecare membru al colectivului de evaluatori fiind un specialist recunoscut într-un anumit domeniu, tip de date nucleare și într-un anumit domeniu energetic. Evaluările parțiale astfel obținute sunt adunate, verificate pentru consistență și combinate pentru a forma un set complet [2].

Comparativ cu alte etape ale prelucrării datelor, munca de evaluare necesită vaste cunoștințe de specialitate și multă experiență atât în teorie cât în special în tehnicile experimentale. Mai concret, evaluarea datelor nucleare necesită oameni de știință interdisciplinari cu cunoștințe în următoarele domenii [1]:

- fizică nucleară experimentală și tehnici de măsură
- fizică nucleară teoretică, modele nucleare și coduri de calcul
- legi și tehnici de statistică matematică
- tehnici de programare pentru crearea, procesarea și testarea unor fișiere

computerizate enorme.

Biblioteci de date nucleare evaluate

Datele evaluate sunt organizate în fișiere foarte mari ordonate pe izotopi individuali, elemente și/sau compuși (MAT), seturi de date (MF), tipuri de date (MT). La energii termice se fac evaluări pentru proprietățile compușilor unde efectele de legătură ale atomilor, moleculelor, celulelor cristaline sunt semnificative.

Bibliotecile de date referitoare la datele nucleare de bază conțin puncte de energie particulare dar pot avea și "goluri" unde nu sunt puse date (nu există măsurări, nu sunt calcule de model), ca atare subiect de disponibilitate a calculelor pe bază de modele și a măsurărilor.

Din contră fișierul de date evaluate trebuie să conțină fiecare parametru la fiecare punct de energie cu o interpolare precizată (se specifică riguros legea de interpolare INT). Mai mult fișierul de date evaluate trebuie să acopere tot domeniul energetic (uzual acesta este 10^{-5} eV - 20 MeV). Fiecare parametru trebuie să fie verificat pentru consistență cu alți parametri și cu măsurările integrale.

Datele evaluate sunt puse într-un format strict definit (ENDF-6).

Acesta este formatul cu acceptarea aproape unanimă internațională. El a fost propus de SUA (seria formatelor ENDF), adoptat de biblioteca JEF a țărilor europene, de biblioteca chineză CENDL, cea japoneză JENDL, cea rusească BROND și firește de IAEA. Deficiențele versiunilor mai vechi ENDF au fost discutate internațional (INDC(NDS)-156, 1984) și ca urmare a hotărârii de la Viena a fost adoptat ENDF-6 ca format standard de date evaluate.

Există încă unele formate vechi ca UKNDL (britanic) și KEDAK (nemțesc) dar care vor fi eliminate în viitor dacă Anglia și Germania își vor uni eforturile cu NEA-DB pentru a produce biblioteci de date evaluate în formatul ENDF-6 deja adoptat de NEA-DB.

În tabelul 2.1 sunt prezentate cele mai recente biblioteci de date evaluate cu țara de origine, formatul și situația lor.

Tabelul 2.1

țara	fișierul	formatul	comentarii
RUSIA	BROND-2.2	ENDF-6	disponibil
CHINA	CENDL-2	ENDF-5	disponibil
U.S.A.	ENDF/B-IV ENDF/B-V ENDF/B-VI ENDL-84	ENDF-4 ENDF-5 ENDF-6 ENDF-5	disponibil, vechi, util ca referință restricțiile ridicate la disponibilitate disponibil, revizia 4 1997 disponibil, conține evaluarea lab.Livermore
OECD NEA	JEF-2.2 EFF-2.4 JEFF-3 JENDL-3.2	ENDF-6 ENDF-6 ENDF-6 ENDF-6	disponibil fișierul de fuziune european în lucru disponibil

2.3 DATE NUCLEARE PROCESATE

Informațiile detaliate conținute în fișierele de date evaluate sunt extrem de multe, ca atare fișierele de date evaluate depășesc capacitățile calculatoarelor folosite în aplicații. De exemplu dependența de energie a secțiunilor este complexă (unele reacții necesită 100000 puncte de energie pentru o reprezentare exactă), ceea ce face ca doar unele coduri statistice Monte-Carlo să folosească în principiu fișierele detaliate ale bazelor de date evaluate, firește reformate pentru compatibilitate și creșterea eficienței computaționale. Rularea unora din codurile de aplicații s-ar putea face cu fișierele de date evaluate dar este costisitor (timpuri foarte lungi de calcul). Formatul ENDF-6 al bibliotecilor evaluate este folosit doar pentru verificări de rezultate pentru geometrii foarte complicate și în activitățile de benchmark.

În majoritatea aplicațiilor (și cu precădere în calculele de reactori) fiecare parametru dependent de energie capătă o valoare medie pe grup de energie. Acuratețea calculului depinde de numărul de grupe ales și de metoda de mediere pe grup. De regulă se face un compromis între complexitatea geometriei și numărul de grupe.

Ca atare este nevoie de o tehnică de reducere a datelor evaluate (mediere pe grup) numită și procesare a datelor evaluate. În urma acestei prelucrări se obțin bibliotecile de date procesate folosite în aplicații. Și aici s-a încercat o clasificare și o terminologie corespunzătoare [2]:

Biblioteci de constante de grup independente de problemă

Aceste baze de date derivă din fișierele de date evaluate. Parametrii sunt mediați pe o structură fină de grup, tipic între 2000 și 200 grupe (de exemplu SAND II extinde decupajul energetic la 640 grupe între 10^{-4} eV și 20 MeV). Este suficientă o funcție de pondere netedă. Biblioteca astfel obținută este folosită ca sursă pentru condensarea constantelor de grup într-o structură grosieră de grup (constante multigrup) folosind aproximații brute ale problemei dependenței spectrului mediat de neutroni de funcția de pondere. La acest stadiu mesh-ul de energie e suficient de fin astfel încât variațiile locale în spectrul de neutroni să fie acceptate.

Biblioteci de constante multigrup

Acestea pot deriva din bibliotecile de constante de grup independente de problemă prin condensarea de grup sau pot fi calculate direct din biblioteca de date evaluate folosind o funcție de pondere adecvată.

Aceste biblioteci au o mare varietate în funcție de problemă (aplicație): reactori termici, reactori rapizi, probleme de protecție, fuziune etc.

Constante de grup dependente de problemă

Datele de această natură sunt rezultatul final al procesului de reducere plecând de la date multigrup și folosind metode de transport de neutroni și γ . Numărul de grupe variază de la 1 la 18 și este făcută și omogenizare spațială. Se pot deduce parametri de difuzie (Σ , D).

2.4 CODURI DE PROCESARE

La fiecare "nivel" al datelor nucleare (de bază, evaluate etc.) s-au creat o serie de coduri de calcul numite global coduri de procesare, care servesc pe de o parte la organizarea datelor în formatele standard ale bazelor de date aferente, la verificarea consistenței datelor și pe de altă parte la tratarea datelor. Nu vom insista aici cu detalii cu privire la aceste coduri

(fac obiectul unui alt capitol), ne vom limita doar la clasificare.

Coduri utilitare ENDF (ENDF Utility Codes)

Este un pachet de coduri care verifică corectitudinea regulilor formatului ENDF-6, verifică consistența datelor (reguli de conservare, sumare, legi fizice etc.) și prezintă rutine specializate de printare (formă tabelară) și de reprezentare grafică.

Coduri de preprocesare ENDF (ENDF Preprocessing Codes)

Este un pachet de coduri ce permit pas cu pas operații asupra datelor evaluate ca de exemplu: liniarizare, reconstrucția zonei de rezonanță, prepararea constantelor de grup, afișare grafică etc. Aceste coduri sunt foarte utile pentru verificarea datelor și reprezentarea lor grafică dar nu sunt desemnate pentru prepararea unei biblioteci generale multigrup deoarece le lipsește posibilitatea de procesare a unor tipuri de date (de exemplu matrici de împrăștiere) și interfața cu bibliotecile multigrup dorite.

Sistemul NJOY

Este sistemul de calcul ce a fost desemnat pentru scopuri generale de aplicații. Acest sistem a fost în permanență îmbunătățit în conformitate cu schimbările regulilor formatului ENDF. Are interfață cu numeroase biblioteci multigrupale și se pare că a devenit codul standard de procesare.

Posibile surse de erori

*) Erori în datele nucleare de bază: aceste erori pot fi gradat înlăturate făcând mai multe evaluări asupra unor date măsurate cu mai multă acuratețe, ce le înlocuiesc pe cele vechi și prin noi calcule cu modele teoretice îmbunătățite.

*) Erori în bibliotecile ajustate: ajustările pot să se dovedească nejustificate fizic (de exemplu pentru a avea concordanță cu măsurări integrale cel ce organizează biblioteca a ajustat alt parametru). A ridica o eroare fără a identifica adevărata sursă de inconsistență poate duce la rezultate false.

*) Erori de procesare: se pot elimina poate cel mai ușor cu condiția să se lărgescă aria de verificare cu codurile aferente (coduri utilitare și de procesare ENDF).

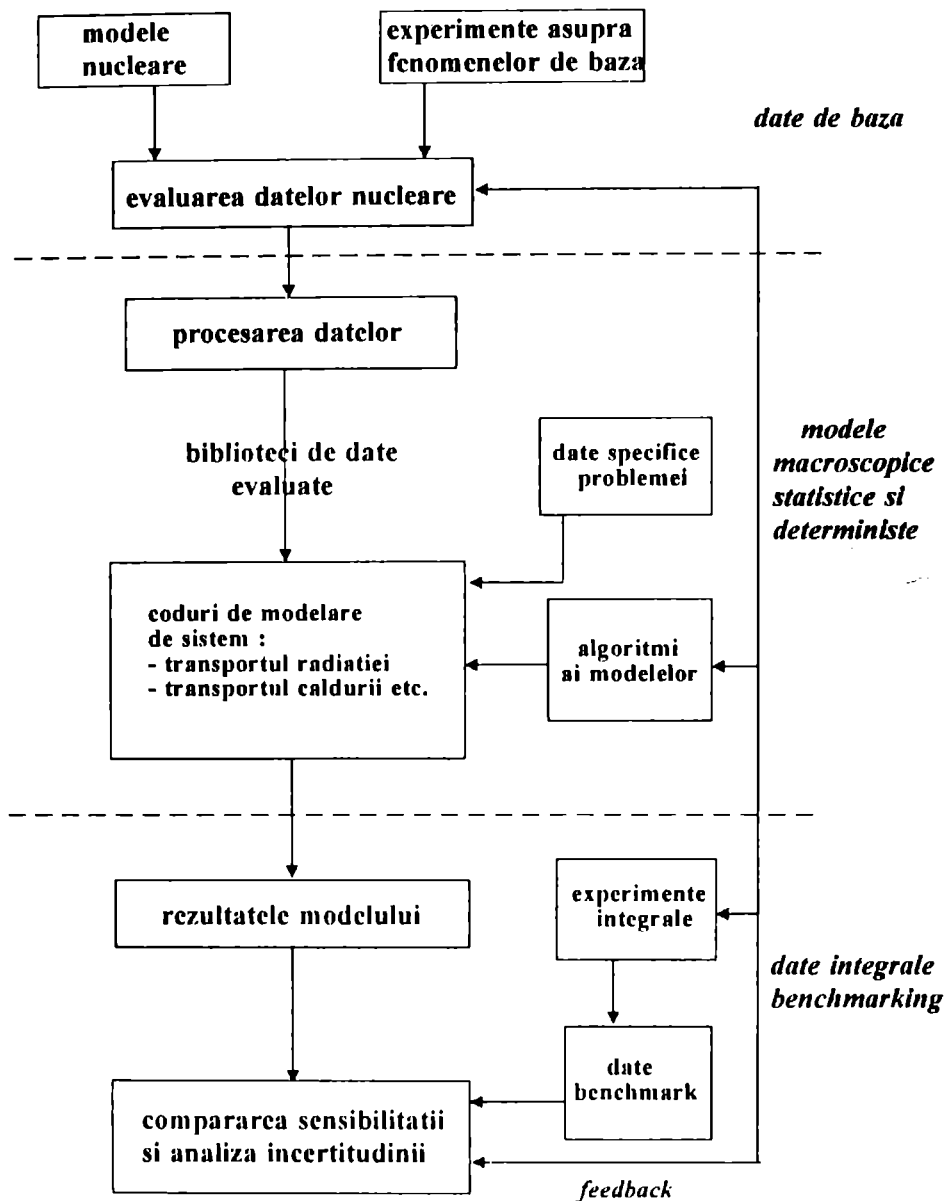
*) Inconsistența în definiții a unor parametri ai bibliotecii poate rezulta din documentarea inadecvată a bibliotecii sau din interpretarea greșită a descrierii bazei de date.

*) Rigiditatea formatului bibliotecii multigrup poate să nu permită reprezentarea exactă a datelor în toate cazurile

O sinteză a clasificării datelor nucleare reprezentând drumul de la fenomenele de bază la efectele macroscopice este ilustrată în figura 2.2 [3].

Bibliografie:

- [1] Schmidt J.J., International Symp. on "Nuclear Data Evaluation Methodology (ed. Ch.L.Dunford), 1992, 4-23
- [2] Trkov A., Workshop on "Nuclear Reaction Data and Nuclear Reactors: Design and Safety", ICTP Trieste, 1996
- [3] Sartori E., Workshop on "Nuclear Reaction Data and Nuclear Reactors: Design and Safety", ICTP Trieste, 1996



Drumul de la fenomenele de baza la efectele macroscopice

Figura 2.2

3. CENTRE DE DATE NUCLEARE

Diversitatea enormă și volumul uriaș a ceea ce numim poate astăzi generic date nucleare precum și numărul mare de specialiști implicați în producerea și utilizarea lor, a făcut absolut necesară nevoia de coordonare a activităților la nivel internațional, crearea, dezvoltarea și punerea la dispoziție a bazelor de date și a informațiilor legate de activitățile corelate cu datele nucleare. Astfel au luat ființă centrele de date nucleare. Ca schemă, în drumul de la producătorii de date nucleare (laboratoare cu activități de măsurări experimentale sau de calcule teoretice) până la utilizatori (aplicațiile cele mai diverse) se interpun centrele de date nucleare, a căror arie geografică de activitate se referă la grupuri de țări din același continent sau continente diferite și doar în puține cazuri se referă la o singură țară.

Trebuie să mai menționăm că ceea ce numim global biblioteci de date nucleare de fapt implică la nivel mondial trei feluri de biblioteci și anume:

- A. Biblioteci de parametri de intrare
- B. Biblioteci de date nucleare
- C. Biblioteci de coduri de calcul

Așa cum s-a menționat și în capitolul 1, centrele majore de date nucleare sunt:

1. Banca de date a Agenției de Energie Nucleară a Organizației de Cooperare și Dezvoltare Economică (La Banque de donnée de l'Agence de l'OCDE pour l'Energie Nucléaire, OECD Nuclear Energy Agency - Data Bank, abrevierea curentă **NEA-DB**), cu sediul la Paris.

Aria sa de activitate cuprinde țările Europei occidentale și Japonia.

2. Centrul Național de Date Nucleare al SUA (U.S. National Nuclear Data Center, abrevierea curentă **NNDC-Brookhaven**) cu sediul la Brookhaven, a cărui arie de activitate cuprinde SUA și Canada.

3. Centrul rusesc de date nucleare cu sediul la Obninsk care coordonează activitatea țărilor CSI.

4. Secția de date nucleare a Agenției Internaționale pentru Energie Atomică (International Atomic Energy Agency - Nuclear Data Section, abrevierea curentă **IAEA-NDS**) cu sediul la Viena și care coordonează activitatea pentru restul de țări necuprinse de celelalte trei centre majore.

În afară de aceste patru centre majore, alte centre de date nucleare sunt:

- 5. Radiation Safety Information Computational Center (RSICC-ORNL), Oak Ridge
- 6. Chinese Nuclear Data center, Beijing
- 7. Japanese Nuclear Data Center, Tokai-mura

Firește că există cooperare între toate aceste centre, modul în care se realizează acest lucru este ilustrat schematic în figura 3.1.

Aceste centre pe lângă activitatea de coordonare și de organizare, dezvoltare, mentenanță a enormelor baze de date, oferă servicii legate de activitatea în domeniul nuclear țărilor din aria lor de activitate sau după caz țărilor din întreaga lume.

Cu privire la cererea de date nucleare fiecare centru major oferă fișierele complete pe cale internet, sau pe diverse suporturi (dischete, bandă magnetică, CD-Rom, hârtie etc.) în funcție de cererile utilizatorilor.

Cu privire la documentație toate cele patru centre (dar în volumul cel mai mare IAEA-NDS) pun la dispoziție manuale, "handbooks", rapoarte ale întrunirilor, rapoarte de cercetare etc.

La ora actuală cele mai comode și mai complete sunt serviciile online disponibile 24 ore din 24 în tot timpul anului (servicii www, telnet, ftp, e-mail) oferite de IAEA, NEA-DB și NNDS-Brookhaven cu privire la date nucleare și documentații.

Serviciile legate de biblioteca (colecția) mondială de coduri de calcul sunt asigurate numai de NEA-DB (compartimentul "Computer Program Service") atât pentru țările membre NEA-DB cât și pentru țările membre IAEA.

Numai puține coduri legate de accesarea fișierelor de date și preprocesare sunt accesibile de la IAEA (via internet). O parte din codurile de calcul legate de reactori se află în bibliotecile centrelor RSICC și ESTSC dar accesul la acestea se face tot prin intermediul NEA-DB, cu excepția SUA și Canada.

Cu privire la parametrii de intrare există biblioteci în fiecare centru de date nucleare dar biblioteca de referință de date de input este în curs de realizare la IAEA.

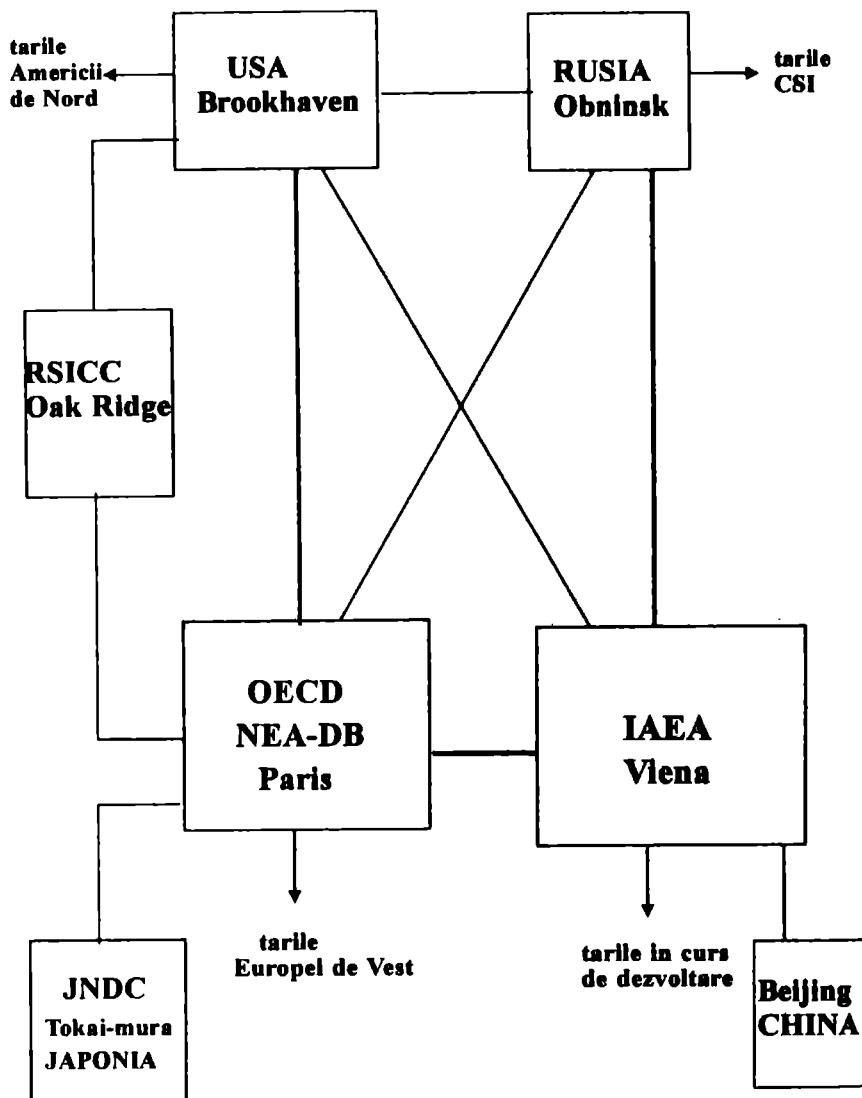


Figura 3.1

4. BIBLIOTECI DE PARAMETRI DE INTRARE

4.1 Motivația dezvoltării bibliotecilor de parametri de intrare

Calculul și evaluarea datelor nucleare de bază necesită biblioteci cât mai complete de parametri (date) de intrare (input) atât pentru conservarea "know-how" asupra evaluării datelor cât și pentru a oferi "instrumentele" necesare în calculul secțiunilor și a altor date de interes practic.

În primul rând se urmărește procesarea reacțiilor primare induse de neutroni (cu energia incidentă până la 30 MeV) dar se are în vedere și o posibilă extindere la reacții induse de alte particule incidente (în special particule încărcate ușoare și cuante γ) și la energii incidente mai mari (până la 100 MeV) [1].

Parametrii necesari în aceste biblioteci sunt: mase atomice, scheme de nivele și tranziții γ , potențiale de model optic, parametri de densități de nivele, funcții de forță etc.

La nivel mondial situația prezentă poate fi caracterizată prin faptul că nu există o bibliotecă de parametri de intrare completă disponibilă la ora actuală. Dezvoltarea se face prin efort național în China și Japonia (care au biblioteci complete) și prin efort internațional coordonat de Agenția Internațională de Energie Atomică (IAEA) de la Viena, care urmărește creerea unei biblioteci complete de referință.

4.2 Scurtă trecere în revistă a bibliotecilor de parametri de intrare

4.2.1 CHINA - CENPL (Chinese Evaluated Nuclear Parameter Library)

Este o bibliotecă națională completă, parte a efortului IAEA. Coordonatorul acestei biblioteci este Su Zongdi, Chinese Nuclear Data Center - Beijing

Trăsătura specifică a bibliotecii naționale chineze o constituie prezența seturilor de date numerice și a multor coduri de calcul ce se pot accesa. La ora actuală această bibliotecă este în dezvoltare.

Subbibliotecile CENPL sunt:

- mase atomice și constante de deformare
- scheme de nivele și factori de schemă și de ramificare
- densități de nivele: număr cumulativ de nivele de joasă energie și parametri de rezonanță precum și parametri actuali ai funcțiilor de densități de nivele
- parametri de rezonanțe gigant și funcții de forță
- parametri de bariere de fisiune
- parametri de model optic care cuprinde la rândul ei două subbiblioteci:
 - subbibliotecă de seturi globale și regionale
 - subbibliotecă de seturi specifice pe nuclee (această bază de date prezintă însă multe ambiguități)

4.2.2 JAPONIA - EVLDF (Evaluation Data File)

Biblioteca reprezintă efortul japonez de a conserva o evaluare unică de date nucleare prin acumularea cunoștințelor rezultate din dezvoltarea JENDL-3 (Japanese Evaluated Nuclear Data Library) pentru aproximativ 300 de materiale. EVLDF este parte a efortului IAEA. Coordonatorul acestei biblioteci este T. Fukahori, Nuclear data center - Tokai-mura

Trăsătura specifică a bibliotecii japoneze de parametri de intrare o constituie faptul că este parte a INDES (Integrated Nuclear Data Evaluation System) cuprinzând date de bază

folosite în evaluări (date experimentale ale altor grupuri de cercetare din lume), coduri de modele de reacție (o parte din cele aflate la OECD-NEA-Computer Programs Service) și date de bază ale parametrilor de input.

La ora actuală și această bibliotecă este în dezvoltare.

Biblioteca japoneză de parametri de input conține următoarele subbiblioteci:

- parametri de deformare (88 izotopi, 462 parametri)
- densități de nivele (462 izotopi)
- scheme de nivele (677 izotopi, 9949 nivele)
- informații nucleare de bază: mase, J^{π} , $T_{1/2}$ pentru 5696 izotopi
- potențiale de model optic (35 seturi de parametri de model optic)

4.2.3 EUROPA - NUBASE (Database of Nuclear and Decay Properties)

Este o bibliotecă parțială cuprinzând proprietăți nucleare principale și proprietăți de dezintegrare derivate din ENSDF (Evaluated Nuclear Structure Data File) și din AME (Atomic Mass Evaluation). Această bibliotecă nu este parte a efortului IAEA și coordonatorul ei este Georges Audi - L'Institut de Physique Nucléaire d'Orsay, France

Trăsătura specifică a bibliotecii o constituie faptul că poate fi utilizată cu codul NUCLEUS pentru a aduce pe ecranul terminalului, într-o formă prietenoasă, parametrii dorțiți (în formă grafică sau tabelară) precum și harta nuclizilor.

Această bibliotecă este în prezent în dezvoltare și este găzduită de centrul de date "Atomic Mass Data Center" cu acces online (servicii www, ftp) [7]. Biblioteca cuprinde:

- mase, energii de excitare ale izomerilor, $T_{1/2}$, spini, parități, moduri de dezintegrare și intensități, liniile principale de dezintegrare
- 3010 nuclizi cu 669 din ei în prima stare izomeră și 58 și în a doua stare izomeră

4.2.4 IAEA - Biblioteca de referință pentru parametri de intrare

Este cea mai completă bibliotecă la ora actuală. Coordonatorul ei este Pavel Oblozinsky, Nuclear Data Section IAEA - Vienna.

Această bibliotecă urmează să devină biblioteca internațională de referință, în prezent este în dezvoltare.

4.3 Bibliotecile de referință pentru parametri de intrare

Acestea se dezvoltă sub coordonarea IAEA pe perioada 1994-1999, grupurile de cercetare implicate și coordonate de IAEA fiind: LLNL-Livermore (cu coordonator M.B.Chadwick); JAERI-Tokai-mura (coordonator fiind T.Fukahori), FEI-Obninsk (coordonatorul este A.V.Ignatyuk), ECN-Petten (coordonator J.Kopecky), BARC-Bombay (cu coordonator A.Kumar), II-HAS-Budapest (coordonator G.Molnar), ENEA-Bologna (cu coordonator G.Reffo), CNDC-Beijing (cu coordonator Su Zongdi) și LANL-Los Alamos (coordonator este P.G.Young).

Cele două obiective ale acestei biblioteci pot fi sintetizate astfel:

Obiectivul A: constă în dezvoltarea unei biblioteci complete de parametri de intrare pentru calculele teoretice în domeniul reacțiilor nucleare, în primul rând pentru neutroni dar și pentru particule încărcate ușoare, cu energia incidentă până la 20 - 30 MeV, însă dacă este posibil și până la 100 MeV.

Obiectivul B: să ajute OECD-NEA la programul de validare a modelelor și codurilor de calcul (coordonatori: Enrico Sartori din partea NEA și Gianni Reffo din partea IAEA).

Pentru atingerea acestor obiective strategia cuprinde două faze:

- faza I (1994-1997): dezvoltarea fișierelor de start (fișiere de computer accesabile via INTERNET, telnet, www, plus documentație), fișierele vor fi în totalitate disponibile online în 1998

- faza II (1998-2000): validarea și îmbunătățirea fișierelor de start precum și dezvoltarea codurilor aferente și crearea modulelor de ieșire (în colaborare cu NEA-Data Bank)

Localizarea bibliotecilor de parametri de intrare de referință se află în computerul DEC-Alpha al IAEA. Accesul se face via INTERNET (organizarea este pe subdirectoare, de fiecare răspunzând câte unul din cele nouă grupuri de cercetare coordonate de Nuclear Data Section a IAEA). Transferul de fișiere via INTERNET de la computerul IAEA-DEC-Alpha (în faza de testare și soft pentru utilizatori) este prevăzut a se realiza în întregime în cursul celei de-a doua faze.

Segmentele bibliotecii IAEA de referință:

Biblioteca IAEA de referință pentru parametri de intrare este organizată în șapte segmente [1]:

I. Mase atomice, corecții de pături și deformări (G.Audi, A.H.Wapstra, P.Moller, J.R.Nix)

II. Scheme de nivele discrete (ENSDF, M.Lederer, G.Browne)

III. Parametri de rezonanță

IV. Parametri de model optic

V. Densități de nivele cu segmentele: densități totale de nivele, densități de nivele pentru fisiune (nivele de tranziție), densități parțiale particulă-gaură

VI. Funcții de forță γ

VII. Distribuții unghiulare în continuum

I. Subbiblioteca de mase atomice, corecții de pături, deformări

Este la ora actuală cel mai complet segment al bibliotecii de parametri de intrare și cu cea mai largă utilizare. Masele atomice sunt necesare în calculul energiilor de separare și a căldurilor de reacție, corecțiile de pături servesc densităților de nivele, deformările sunt necesare în parametrizarea potențialelor de canale cuplate, ca atare acest segment este strâns legat de celelalte segmente și dictează dezvoltarea lor.

La ora actuală segmentul I al bibliotecii de date de input cuprinde valorile experimentale cele mai recente de mase atomice (tabla Audi & Wapstra), corecții de pături și deformări (Moller & Nix). Sunt prezente 8979 nuclee de la ^{16}O la $A=239$, cu deformările la starea fundamentală, mase calculate pentru toate nucleele, masele experimentale și date de structură nucleară (corecții microscopice) [2], [3].

Acest segment este accesabil online (serviciul www).

II. Subbiblioteca de scheme de nivele discrete

Formarea acestui segment este motivată prin necesitatea informației complete asupra nivelelor discrete (ϵ , J^π) necesare pentru canalele de ieșire la calculele de reacții nucleare și asupra numărului cumulativ de nivele, energii de continuum necesare pentru parametrizările densităților de nivele. Informațiile necesare sunt pentru aproximativ 2000 de nuclee.

În prezent au fost colectate o serie de fișiere (de la centrele din Beijing, Bologna, Budapesta, Obninsk, Tokai-mura). Noi fișiere derivate, pe grupe de nuclee, sunt în lucru la Budapesta.

Acest segment este de asemenea important ca bază de date pentru activitatea de evaluare legată mai ales de biblioteca ENSDF (Evaluated Nuclear Structure Data File).

III. Subbiblioteca de parametri medii de rezonanță

Acest segment al bibliotecii de referință de parametri de intrare a fost creat pentru a putea furniza informații necesare calculelor de secțiuni eficace și pentru parametrizarea funcțiilor densității de nivele.

Principalii parametri conținuți sunt distanța medie între rezonanțe neutronice $\langle D_0 \rangle$, funcțiile de forță pentru unda s ($l=0$) și p ($l=1$) pentru neutroni, S_0 și S_1 , lărgimi medii radiative Γ_γ .

Ca exemplu D_0 servește la ajustarea parametrilor de densități de nivele (mai ales determinarea parametrului densității de nivele "a") la energia de separare a neutronului:

$$\frac{1}{\langle D_0 \rangle} = \rho \quad (4.1)$$

$$\frac{1}{\langle D_0 \rangle} = \frac{1}{2} \rho \left(B_n + \frac{\Delta E}{2}, I_0 + \frac{1}{2} \right) + \frac{1}{2} \rho \left(B_n + \frac{\Delta E}{2}, I_0 - \frac{1}{2} \right)$$

Funcția de forță pentru unda s poate servi la determinarea constantei de normare pentru tratarea tranzițiilor E1 :

$$S_0 = 2\pi \frac{\langle \Gamma_{\gamma 0} \rangle}{\langle D_0 \rangle} = \sum_{XL} \sum_{J\pi} \sum_{j=|J-L|}^{J+L} \int_0^{B_n-E_j} T_\gamma(x) \rho(B_n-x, j\pi) dx + \sum_k T_\gamma^{(k)}(\epsilon_\gamma) \quad (4.2)$$

S_0 , S_1 , Γ_γ sunt parametri necesari pentru calculul secțiunilor din zona rezonanță și pentru a face analiza completă a parametrilor de rezonanță. Si exemplele pot continua.

Parametrii acestui segment acoperă aproximativ 300 de nuclee (toți izotopii stabili).

În prezent au fost colectate o serie de fișiere (centrele de la Bologna, Beijing, Obninsk), s-au făcut o serie de intercomparări parțiale, s-au aplicat mai multe aproximări statistice și s-au observat discrepante.

Problemele majore sunt la analiza rezonanțelor neutronice: separarea rezonanțelor undelor s și p, estimarea rezonanțelor amestecate. Dacă rezonanțele nu sunt amestecate atunci $D_0 = \Delta E/(N-1)$ dar în general sunt necesare metode statistice mai rafinate. Este în regulă dacă numărul rezonanțelor s este relativ mare (mai mare ca 40, 50) dar numărul rezonanțelor este prea mic la mai mult de 50% din nuclee [1].

IV. Subbiblioteca de parametri de model optic

Motivația și scopurile realizării acestui segment de bibliotecă pot fi sintetizate astfel:

- acumularea de parametri de potențial optic necesari în calculele de modele de interacție directă pentru obținere de secțiuni totale, secțiuni integrate și diferențiale elastice, inelastice, secțiuni de reacție, secțiuni de formare a nucleului compus etc.

- acești parametri sunt folosiți în modelele ce tratează mecanismele de reacție: direct, de nucleu compus - model statistic (prin furnizarea coeficienților de transmisie), intermediar - modele de preechilibru

Scopul primei faze de lucru la acest segment al bibliotecii este de a colecta un set complet de parametri de model optic în formă de subrutine FORTRAN pentru:

- particule incidente: neutroni, protoni, deuteroni, tritoni, He-3, α
- un domeniu energetic până la 30 MeV (și dacă e posibil și până la 100 MeV)
- următoarele tipuri de potențiale:
 - sferic (seturi globale, regionale, locale)
 - canale cuplate/ deformat (seturi regionale, locale)
 - altele

În faza a doua de lucru se va face evaluarea parametrizărilor [1].

Situația actuală a segmentului de parametri de model optic poate fi sintetic exprimată astfel:

- se urmărește adoptarea unei parametrizări pragmatice
- se încearcă punerea parametrilor într-un format direct utilizabil la orice computer
- sunt în curs de acumulare parametrii de potențial optic în formatul standard propus de P.G.Young (ANL-Los Alamos)
- se colectează parametrii folosiți în actualele evaluări la JENDL-3.2, ENDF/B-V, JEF-2.2 etc.
- deși sunt multe parametrizări disponibile pentru protoni și neutroni totuși este absolut necesară o îmbunătățire a seturilor de parametri
- sunt mari deficiențe în ceea ce privește parametrii de model optic pentru particulele incidente: d, t, He-3, α și în special pentru energii peste 30 MeV
- este absolut necesară o analiză cuprinzătoare a potențialelor pentru neutroni și protoni la energii între 30 MeV și 50 MeV.

Spre deosebire de celelalte segmente ale bibliotecii de referință pentru parametri de intrare, la acest segment există deja stabilit formatul pe care îl dăm ca exemplificare a necesității de unificare a formatelor bazelor de date de input. Acest lucru este absolut necesar atât pentru producătorii de parametri (care trebuie să furnizeze datele direct ca fișiere standard) și pentru evaluatori (care tratează parametrii tot în formatul standard) cât și pentru utilizatori (care accesează aceste fișiere și trebuie să cunoască regulile de format pentru a putea utiliza respectivii parametri).

Specificările formatului bibliotecii de potențiale de model optic

Formatul bibliotecii de potențiale de model optic a fost propus și revizuit de grupul de cercetare condus de P.G.Young (LANL-Los Alamos) și a fost adoptat ca format standard al subbibliotecii IV de referință a IAEA. Structura acestui format este următoarea:

Definiții:

- iref: unique fixed point reference number for this potential
- iauthor: authors for this potential (up to 80 characters, 1 line)
- ireference: reference for this potential (up to 80 characters, 1 line)
- isummary: short description of the potential (160 characters, 2 lines)
- emin, emax: minimum and maximum energies for validity of this potential
- zmin, zmax: minimum and maximum Z values for this potential

amin, amax: minimum and maximum A values for this potential
 imodel: 0 for spherical potential, 1 for coupled-channel rotational model
 izproj, iaproj: Z and A for incident projectile
 index i: 1 real potential (Woods-Saxon), 2 surface imaginary potential, 3 volume imaginary potential (Woods-Saxon), 4 spin orbit potential
 irange: number of energy ranges over which the potential is specified, positive for potential strengths, negative for volume integrals
 epot(i,j): upper energy limit for j-th energy range for potential i

rco(i,j,k): coefficients for multiplying $A^{1/3}$ for specification of radius R in fm where:

if rco(2,j,1) > 0.0 Woods-Saxon derivative surface potential

if rco(2,j,1) < 0.0 Gaussian surface potential and

$$R(i,j) = [ABS(rco(i,j,1)) + rco(i,j,2)*E + rco(i,j,3)*eta + rco(i,j,4)/A + rco(i,j,5)/SQRT(A) + rco(i,j,6)*A^{2/3} + rco(i,j,7)*A + rco(i,j,8)*A^{**2} + rco(i,j,9)*A^{**3} + rco(i,j,10)*A^{**1/3} + rco(i,j,11)*A^{**(-1/3)}] * [A^{**1/3}]$$

aco(i,j,k): coefficients for specification of diffuseness a in fm

where:

$$a(i,j) = ABS(aco(i,j,1)) + aco(i,j,2)*E + aco(i,j,3)*eta + aco(i,j,4)/A + aco(i,j,5)/SQRT(A) + aco(i,j,6)*A^{**2/3} + aco(i,j,7)*A + aco(i,j,8)*A^{**2} + aco(i,j,9)*A^{**3} + aco(i,j,10)*A^{**1/3} + aco(i,j,11)*A^{**(-1/3)}$$

pot(i,j,k): strength parameters, as defined below:

if pot(i,j,9)=0, then

$$V(i,j) = pot(i,j,1) + pot(i,j,2)*E + pot(i,j,3)*E^{**2} + pot(i,j,4)*E^{**3} + pot(i,j,5)*ln(E) + pot(i,j,6)*SQRT(E) + pot(i,j,7)*eta + pot(i,j,8)*coul$$

where eta=(N-Z)/A and coul=0.4Z/A^{**1/3}

if pot(i,j,9).ne.0 then

$$V(i,j) = pot(i,j,9)*EXP(pot(i,j,2)*(E-Ef)/pot(i,j,9))$$

where Ef=-pot(2,1,1)/pot(2,1,2)

if a(i,j,1) < 0.0 then

$$V(i,j) = pot(i,j,1) + pot(i,j,2)*EXP[pot(i,j,3)*E + pot(i,j,4)*E^{**2}] + pot(i,j,5)*E*EXP[pot(i,j,6)*E^{**pot(i,j,7)}]$$

rcoul: coefficient to determine the coulomb radius $R = rcoul * A^{**1/3}$

beta: nonlocality range

Collective model definitions (IMODEL.=1)

ncoll: number of collective states in the coupled channel rotational model

nisotopes: number of isotopes for which deformations parameters are given

iz, ia: Z and A for the deformation parameters that follow

lmax: maximum l value for multipole expansion

idef: largest order of deformation

bandk: k for the rotational band

def: deformation parameters, l=2,4,5,... through lmax

Formatul de generare al fisierului este următorul:

```

iref
iauthor
ireference
isummary
emin,emax
zmin,zmax
amin,amax
imodel,izproj,iaproj
--->--->--->--->--->--->--->---> LOOP i=1,4
jrange(i)
--->--->--->--->--->--->--->---> LOOP j=1,jrange
epot(i,j)
(rco(i,j,k),k=1,11)
(aco(i,j,k),k=1,11)
(pot(i,j,k),k=1,9)
--->--->--->--->--->--->--->---> END j LOOP
--->--->--->--->--->--->--->---> END i LOOP
rcoul, beta
--->--->--->--->--->--->--->---> ISKIP REMAINING LINES IF IMODEL NO EQUAL O 1
ncoll, nisotopes
--->--->--->--->--->--->--->---> LOOP n=1,nisotopes
iz(n),ia(n),lmax(n),idef(n),bandk(n),[def(n,k),k=2,idef(n),2]
--->--->--->--->--->--->--->---> END n LOOP

```

Tot pentru exemplificare în figura 4.1 este prezentat fișierul în format standard al subbibliotecii IV ce cuprinde parametrii potențialului de canale cuplate propus în [4]. Este un set unic pe tot domeniul energetic cerut de ENDF (20 MeV), valabil pentru nucleele actinide. Sunt specificate deformările β_2 și β_4 pentru șapte nuclee actinide de interes și anume: Th-232, U-233, U-238, Pu-239, Pu-240, Pu-242 și Am-241. Pentru oricare nucleu din regiunea actinidelor potențialul de canale cuplate prezentat poate utiliza ca valori de start pentru deformările β_2 și β_4 , datele din segmentul I al bibliotecii IAEA de referință.

Figurile 4.2, 4.3, 4.4, [4], [5] ilustrează câteva secțiuni de interes ale unor nuclee actinide de importanță în proiectarea și calculul reactorilor nucleari. Calculul acestor secțiuni a fost făcut cu codul ECIS/1995 (varianta pentru PC sistem Lahey) utilizând setul de parametri prezentat în fig.4.1. Concordanța foarte bună cu datele experimentale ca și consistența fizică a parametrilor potențialului au făcut ca setul propus să intre în biblioteca de referință a IAEA.

V. Subbiblioteca de parametri de densități de nivele

Acest segment cuprinde trei părți și anume:

V.1 Parametri de input pentru densități totale de nivele

Este vorba de parametrii funcțiilor de densitate de nivele folosite curent în calculele de model statistic (Hauser-Feshbach, Hauser-Feshbach cu corecție Moldauer, HRTW, Weisskopf-Ewing etc.). Din numeroasele modele de densitate au fost selectate cele mai des folosite și anume: back-shifted Fermi gas, Gilbert-Cameron și superfluid generalizat (Ignatiuk).

Figure 4.2

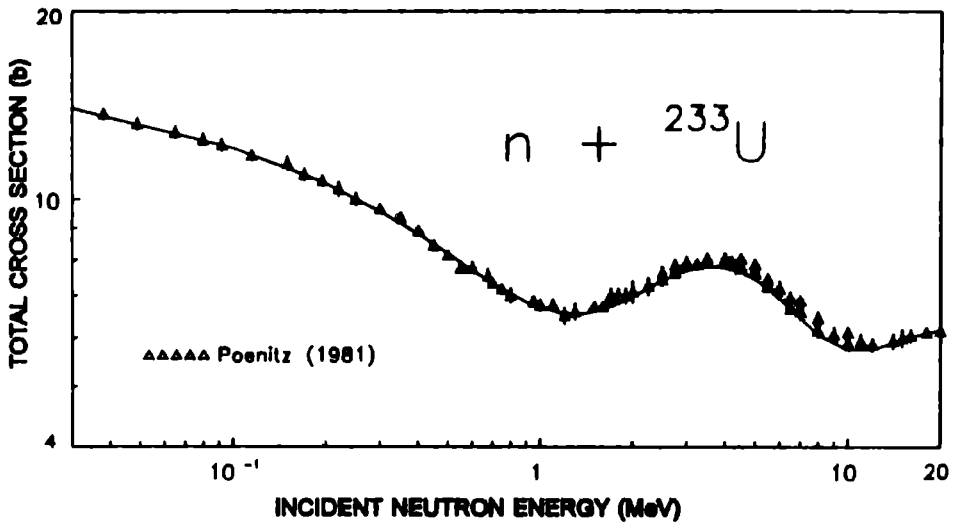
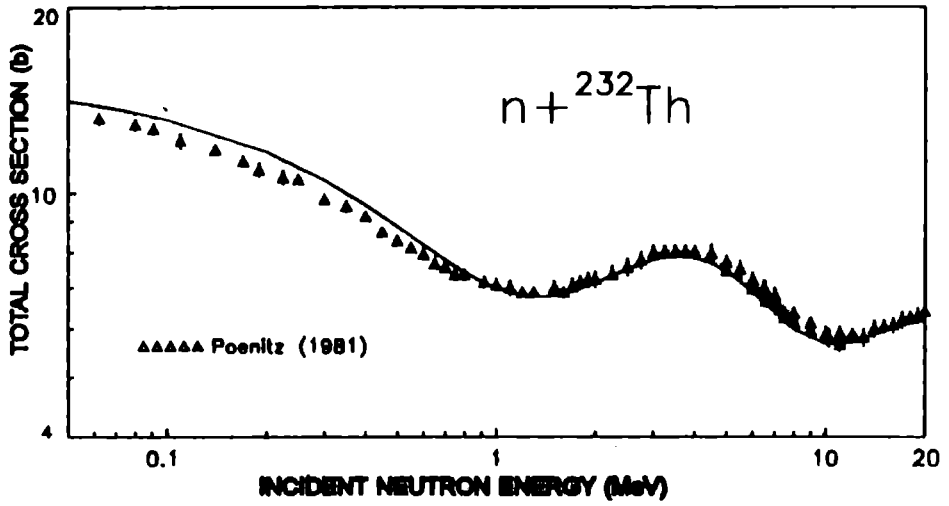
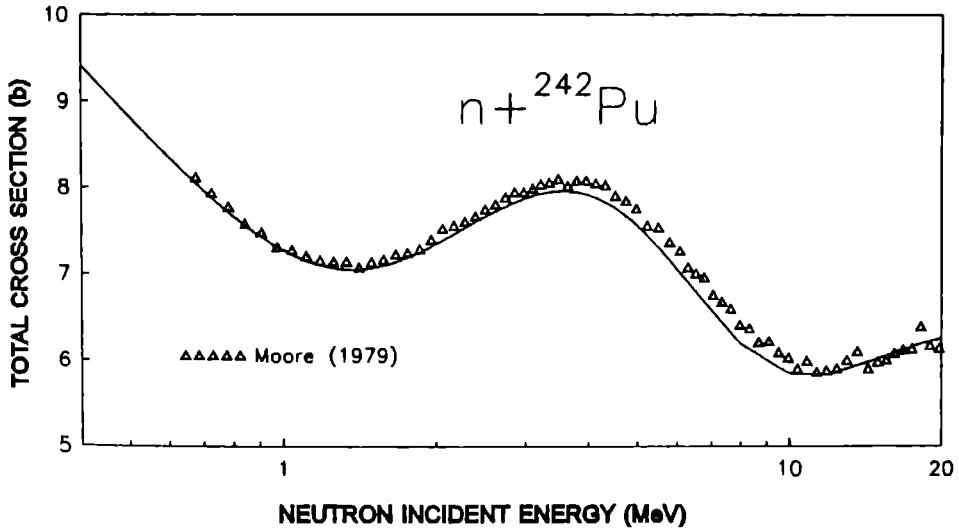
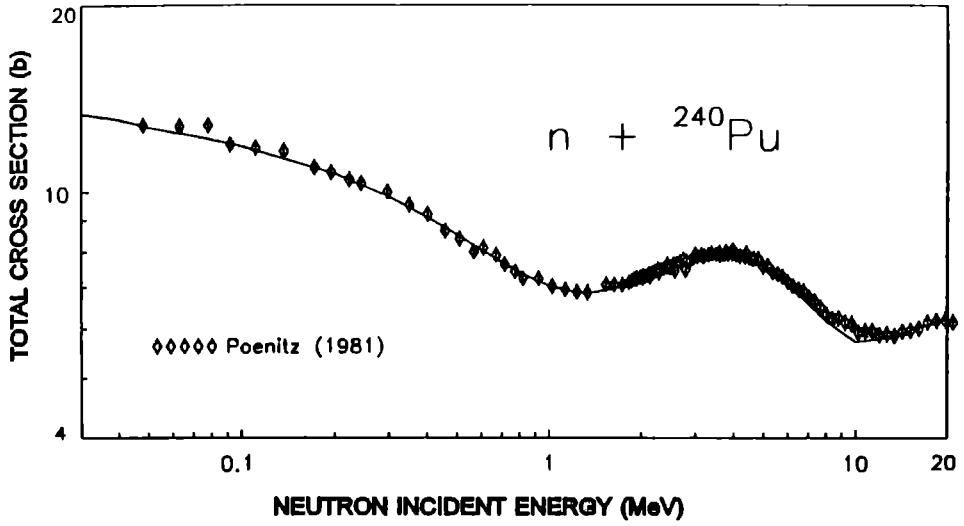


Figura 4.3



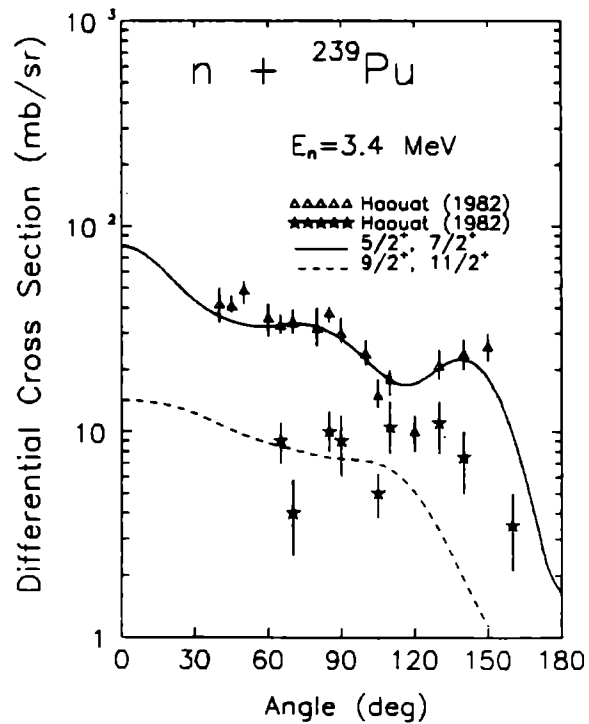
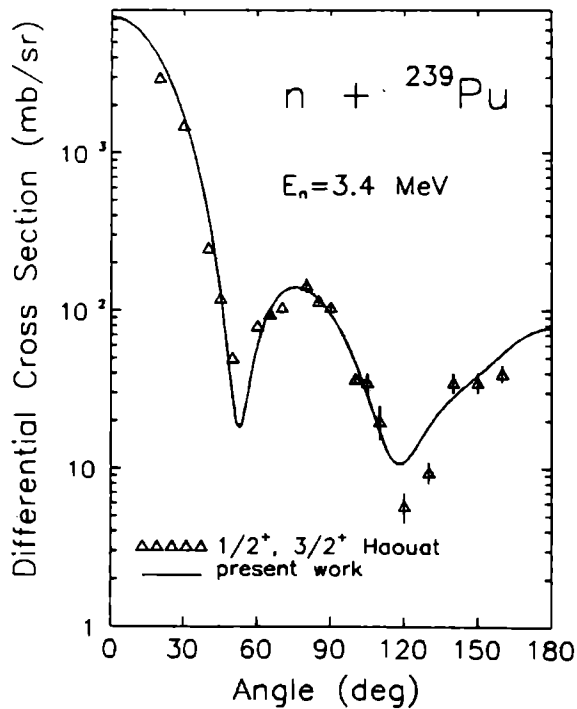


Figure 4.4

Până în prezent au fost colectate o serie de fișiere (centrele de la Beijing, Bombay, Obninsk, Tokai-mura) și s-au constatat diferențe mari între seturile de parametri, datorate în special numărului cumulativ de nivele discrete joase și datorită valorilor diferite ale lui $\langle D \rangle$ [1].

V.2 Parametri de intrare pentru densități de nivele de fisiune

Aceste densități de nivele sunt absolut necesare în tratarea canalelor de fisiune la reacții nucleare. Varietatea modelelor ce descriu densitățile de nivele la deformările nucleelor corespunzătoare punctelor de șa este extrem de mare și ambiguitățile la fel de mari. Ca atare nu se poate vorbi la ora actuală de o structurare a acestei părți a bibliotecii și nici de o încercare de stabilire a formatului. Mai mult, încercarea de parametrizare a densităților la deformările punctelor de șa este în corelație cu sistematicile asupra parametrilor barierelor de fisiune (înălțimi, curburi în modelul cel mai uzitat al dublei bariere de fisiune etc.) care s-ar putea să fie cuprinse în viitor într-un alt segment al bibliotecii de parametri.

Până în prezent s-au colectat puține fișiere (centrele Obninsk, Minsk).

V.3 Parametri de intrare pentru densități parțiale (particulă-gaură)

Aceste densități sunt utilizate în calculele de prechilibru. Scopul este colectarea de expresii ale $\rho(p,h,U,J)$ cu parametrizările lor (Williams, Kalbach, Fu, Reffo & Herman etc.). Sunt în curs de elaborare subrutine FORTRAN cu aceste parametrizări.

VI. Subbiblioteca de parametri de intrare pentru funcții de forță γ

Acest segment al bibliotecii de parametri de input servește în special la calcularea emisiei γ în reacții nucleare pe calea coeficienților de transmisie:

$$T_{XL}(\epsilon_\gamma) = 2\pi f_{XL}(\epsilon_\gamma) \epsilon_\gamma^{2L+1} \quad (4.3)$$

Ca atare biblioteca trebuie să furnizeze funcțiile de forță f_{XL} pentru tranzițiile de multipol E1, M1 și E2 [6]. Au fost adoptate trei modele:

Weisskopf:

$$f_{XL}(\epsilon_\gamma) = C_{XL} = \text{const.} \quad (4.4)$$

Brink-Axel:

$$f_{E1}(\epsilon_\gamma) = K_{E1} \frac{\sigma_0 \epsilon_\gamma \Gamma_A^2}{(\epsilon_\gamma^2 - E_A^2)^2 + (\epsilon_\gamma \Gamma_A)^2} \quad (4.5)$$

Kopecky-Uhl:

$$f_{E1}(\epsilon_\gamma, T) = k_{E1} \sigma_0 \Gamma_A \left[\frac{\epsilon_\gamma \Gamma(\epsilon_\gamma)}{(\epsilon_\gamma^2 - E_A^2)^2 + \epsilon_\gamma^2 \Gamma(\epsilon_\gamma)^2} + \frac{0.7 \Gamma_A 4\pi^2 T^2}{E_A^5} \right] \quad (4.6)$$

$$\Gamma(\epsilon_\gamma) = \frac{\Gamma_A (\epsilon_\gamma^2 + 4\pi^2 T^2)}{E_A^2}$$

Acest segment de bibliotecă urmărește crearea unor sistematice ale funcțiilor de forță f_{E1} , f_{E2} și rapoartelor f_{E1}/f_{M1} bazate pe date experimentale, precum și a unor subrutine de calcul al diverselor lorentziene pentru tranziții E1, M1 și E2 și a factorului de creștere pentru f_{E1} în regiunea nucleelor deformate.

VII Subbiblioteca de parametri de intrare pentru distribuții unghiulare în continuum

Acest segment de bibliotecă are ca scop să furnizeze subrutine și parametri pentru calculul distribuțiilor unghiulare în continuum (preechilibru). S-a adoptat parametrizarea Kalbach și aproximația densității de nivele cu moment liniar.

La ora actuală a fost deja colectată sistematica Kalbach și sunt în curs de elaborare subrutine FORTRAN pentru reacții fotonucleare

Bibliografie:

- [1] Oblozinsky P. Workshop on "Nuclear Reaction Data and Nuclear Reactors: Design and Safety", ICTP-Trieste, 1996
- [2] Audi G., Bersillon O., Blanchot J., Wapstra A.H., Nucl.Instr.and Methods in Physics Research A 369 (1996), 511-515
- [3] Möller P., Nix J.R., Meyers W.D., Swiatecki W.J. "nuclear Ground-State Masses and Deformations", Atomic Data and Nuclear Data table 59 (1995), 85
- [4] Vlăducă G., Tudora A., Sin M. Rom.J.Phys., 41, nos. 7-8, (1996), 515-526
- [5] Vlăducă G., Sin M., Tudora A., Ann.Nucl.Energy 24, no.14, (1997), 1127-1140
- [6] Kopecky J., Uhl H., Phys.Rev. C41, (1990), 1941
- [7] Audi G., Bersillon O., Blanchot J., Wapstra A.H.: Atomic Mass Data Center, Bulletin #05, september 1997 (<http://csnwww.in2p3.fr/amdc/>)

5 BIBLIOTECI DE DATE NUCLEARE

Prin "dată nucleară" se înțelege orice informație ce descrie proprietăți ale nucleului și relațiile fizice fundamentale ce guvernează interacția nucleelor. Tot datele nucleare descriu procesele fizice fundamentale care leagă toate tehnologiile nucleare. Toate aceste informații sunt hotărâtoare pentru a putea dezvolta și utiliza tehnologiile nucleare. Aplicațiile lor acoperă un spectru extrem de larg: aplicații energetice (fisiune, reactori de fisiune, tehnologii de reactori de fuziune etc.) și nonenergetice (management, mediu înconjurător, securitate nucleară, medicină, analiza materialelor, controlul materialelor, controlul proceselor, cercetare, învățământ etc.) [1].

Există mai multe clasificări posibile ale bibliotecilor de date nucleare, fiecare ajutând diversele categorii de utilizatori. Vom prezenta aici pe cele mai importante.

O primă clasificare este după felul datelor conținute în respectiva bază de date și aici intră: date nucleare bibliografice, date nucleare experimentale și date nucleare evaluate.

O altă clasificare globală ar fi după domeniul fizicii nucleare pe care îl acoperă: date de reacții nucleare, date de structură și dezintegrare etc..

Cea mai completă colecție din lume de date nucleare, cuprinzând cam o sută de biblioteci de date nucleare se află la IAEA. Referințele complete cu privire la acest imens volum de date împreună cu o clasificare pe domenii sunt conținute în [2] și firește accesabile online (cu actualizare permanentă). În prezent toate centrele majore de date nucleare, dată fiind interconectarea lor, asigură accesul online la cea mai mare parte a bazelor de date nucleare ale colecției.

Urmând clasificarea după felul datelor nucleare aici intră:

a) Date nucleare bibliografice:

În această categorie cele mai importante biblioteci sunt:

CINDA (Computerized Index of Neutron Data) care cuprinde referințele bibliografice cu privire la datele de reacții neutronice. Biblioteca CINDA acoperă întreaga perioadă din 1935 până în prezent, este publicată regulat sub formă de carte și este disponibilă online.

NSR (Nuclear Science References) este o bază de date bibliografice cu privire la fizica nucleară la energii joase și intermediare, acoperind perioada din 1910 până în prezent. Este publicată în *Nuclear Data Sheets* și disponibilă online.

INIS (International Nuclear Information System) reprezintă baza completă de date bibliografice a IAEA (nu este specializată numai pe date nucleare ci cuprinde și alte domenii). Datorită volumului mare este accesabilă online numai pentru bibliotecile majore ce le conține iar informația completă este pe CD-Rom.

b) Date nucleare experimentale

Cea mai importantă bibliotecă din această categorie este **EXFOR** (EXchange FOrmat) care reprezintă un sistem computerizat pentru stocarea, accesarea și schimbul internațional de date experimentale de reacții nucleare.

Trebuie menționat că la această bibliotecă ca și la majoritatea, pentru organizare și simplificare, *s-a adoptat același nume (aici EXFOR) pentru bibliotecă și pentru formatul acesteia.*

EXFOR conține toate datele experimentale cu privire la reacțiile neutronice precum și cea mai mare parte a datelor experimentale cu privire la reacțiile cu particule încărcate și

fotoni. Biblioteca EXFOR este în întregime accesibilă online.

CSISRS (Cross Sections Information Storage and Retrieval System) este varianta americană a bibliotecii EXFOR, având același format și conținând aceleași informații ca și EXFOR.

c) Date nucleare evaluate

În urma procesului de evaluare (analizarea datelor măsurate experimental, combinarea acestor analize cu calculele pe bază de modele teoretice și efortul de a extrage valoarea cea mai apropiată de cea adevărată) se crează și se dezvoltă bibliotecile de date evaluate ce constituie apoi punctul de plecare al aplicațiilor.

Există mai multe *biblioteci majore* de date evaluate pentru reacții neutronice: cele mai importante fiind în SUA ENDF/B - IV, V, VI (versiuni), în Europa occidentală JEF-2.2 (versiunea 2, revizia 2) și JEFF-3, în Rusia BROND, în Japonia JENDL-3.2, în China CENDL-2 etc.. Pentru acestea formatul (totalitatea regulilor de stocare computerizată a datelor) este ENDF (Evaluated Nuclear Data File), versiunea actuală fiind ENDF-6.

Pentru date nucleare de structură și dezintegrare există o singură bibliotecă majoră ENSDF (Evaluated Nuclear Structure Data File) cu formatul cu același nume.

Pentru scopuri specifice există multe alte baze de date, o parte din acestea fiind derivate din bibliotecile majore.

Conform clasificării după domeniul de fizică nucleară acoperit de respectiva bibliotecă amintim:

i) Date de reacții nucleare

Firește cea mai completă colecție o constituie bibliotecile de date de reacții neutronice: bibliografia (CINDA), date experimentale (EXFOR sau CSISRS), date evaluate pentru energii ale neutronilor incidenți între 10^{-5} eV și 20 MeV (ENDF/B-VI, JEF-2 etc.).

Există de asemenea biblioteci specifice pentru particule încărcate și fotoni.

ii) Date de structură și dezintegrare

Bibliotecile din această categorie conțin proprietăți ale nivelelor, scheme de nivele discrete, $T_{1/2}$, scheme de dezintegrare etc. Informațiile sunt fie sub formă de reviste: Nuclear Data Sheets (pentru nuclee medii și grele), Nuclear Physics A (pentru nuclee cu $A < 40$) fie sub formă de fișiere computerizate. Biblioteca majoră este ENSDF care conține datele evaluate pentru toți izotopii cunoscuți (peste 2300 izotopi).

Există de asemenea biblioteci derivate sub formă computerizată și de publicații. Printre acestea cele mai importante sunt NUDAT (NUclear DATa) cu varianta recentă PCNuDat, Table of Isotopes (recent ed. G. Browne și mai vechi M. Lederer et. al., Lawrence Berkeley, USA), Nuclear Wallet Cards (cu informații pentru starea fundamentală și stările izomere), etc.

O ordonare mai riguroasă a bibliotecilor de date nucleare a fost făcută în următoarele categorii [2]:

1. Date nucleare neutronice experimentale (acces online)
2. Formatul ENDF pentru fișierele de date evaluate
3. Coduri de procesare ENDF (acces ftp)
4. Biblioteci majore de date neutronice evaluate (acces online)
5. Biblioteci multigrup de date nucleare neutronice

Biblioteci de date neutronice pentru scopuri precizate:

6. Standarde de date nucleare pentru măsurători
7. Secțiuni eficace pentru zona rezonantă, parametri de rezonanță, integrale de rezonanță (acces online)
8. Legi de împrăștiere ale neutronilor termici
9. Actinide (acces online)
10. Randamente de fisiune (acces online)
11. Produși de fisiune - date neutronice evaluate de reacții și dezintegrare (acces online)
12. Radiații γ induse de neutroni
13. Date de activare cu neutroni, aplicații generale
14. Date de activare cu neutroni pentru dozimetrie (acces ftp)
15. Biblioteci neutronice specializate de date amestecate
16. Date fotonucleare (acces online)
17. Date de interacții foto-atomice (acces online)
18. Date de reacții nucleare cu particule încărcate (acces online)
19. Date nucleare pentru energii intermediare (acces online)
20. Date nucleare pentru fuziune termonucleară
21. Date nucleare selectate pentru programe de fuziune (acces ftp)
22. Date de structură și dezintegrare (acces online)
23. Date de analiză cu radiații γ
24. Constante nucleare, hârți de radionuclizi (acces ftp)
25. Date atomice
26. Fișiere bibliografice, WRENDA (acces online)
27. Servicii online de date nucleare (acces online)
28. Date de fizica particulelor elementare
29. Selecție de publicații

În continuare prezentăm pe scurt bibliotecile mai importante din fiecare categorie de mai sus:

5.1 Date neutronice experimentale

EXFOR și CSISRS conțin pe lângă datele experimentale de bază și mărimi derivate ca de exemplu parametri de rezonanță, date de randamente de produși de fisiune (care înainte erau compilate în biblioteci separate). Biblioteca este actualizată lunar, conține peste 3 milioane de linii și pe lângă accesul prin sesiune telnet este disponibilă la cerere pe alți suporți (dischete, bandă magnetică etc.)

CINDA este accesibilă online de un an dar poate fi cerută și pe alți suporți.

Compilarea datelor cu privire la integrale de rezonanță și secțiuni termale de activare este disponibilă pe bandă magnetică și sub formă de publicație [3], la fel și compilarea cu privire la date de lungimi de difuzie experimentale și recomandate [4].

Compilații mai vechi de secțiuni neutronice experimentale pot fi găsite în BNL-325 și biblioteca Musgrove pentru date de funcții de forță (CINDU).

5.2 Formatul ENDF pentru fișierele de date evaluate

Este vorba de manualele ce descriu filosofia formatului ENDF în versiunile IV, V (încă în folosință) și 6 (cel adoptat internațional). Noțiunile de bază privitoare la formatul ENDF-6 vor face obiectul unui capitol separat.

5.3 Coduri de procesare ENDF

Cuprinde codurile de procesare ce operează pe formatele ENDF-4, 5 și 6. Colecția completă a acestor coduri de procesare se află în biblioteca de coduri de calcul de la NEA-DB dar o parte sunt accesabile via ftp și de la IAEA-NDS. Este vorba de următoarele pachete de coduri:

- coduri utilitare ENDF (CHECKER, FIZCON, PSYCHE coduri de verificare, INTER pentru secțiuni termale, PLOTEF, GRALIB, INTLIB subrutine grafice de plotare, LISTEF, SETMDC, GETMAT, STANEF coduri de mentenanță), pachetul este destinat lucrului pe CDC, IBM, DEC și PC.
- coduri de preprocesare ENDF (PREPRO-94 incluzând CONVERT, MERGER, LINEAR, RECENT, SIGMA1, LEGEND, FIXUP, GROUPIE, DICTON, MIXER, VIRGIN, COMPLIT, EVALPLOT, RELABEL, SIXPAK), pachetul îmbunătățit PREPRO-95 este disponibil la NEA-DB.
- PLOT4 (plotează date experimentale cu sau fără ajutorul formatului ENDF)
- CONV5/CONV6 (cod de conversie de la formatul ENDF-4 la 5 și de la ENDF-5 la 6)
- INDXENDF (cod pentru PC ce indexează fișierele format ENDF-6 stocate pe hard disk)

Sistemele complexe de coduri ca NJOY și GRUKON sunt accesibile doar la NEA-DB și RSICC.

5.4 Biblioteci majore de date neutronice evaluate

ENDF/B-VI a fost pusă la dispoziție în 1990 în format ENDF-6 cu revizuire în 1991, 1993, 1995. Biblioteca este disponibilă ca fișier de bază cu parametri de rezonanță sau ca fișier de date punctuale (parametrii de rezonanță sunt convertiți la secțiuni).

Conține 320 de materiale (de la H la Es). Ramura 1 conține subfișiere de standarde, dozimetrie, activare cu neutroni, date pentru produși de fisiune, date pentru actinide. Ramura 2 conține și alte subbiblioteci ca: date de reacții cu particule încărcate ușoare, date de dezintegrare, interacții fotoatomice, date de împrăștiere de neutroni, randamente de produși de fisiune, date de reacții la energii înalte (> 1 GeV) pentru proiectil neutron și proton la materiale de structură și Pb. Subbibliotecile din ramura 2 sunt stocate separat și se accesează sau se cer separat.

JEF-2.2 este biblioteca de date nucleare evaluate a OCDE-NEA, pusă la dispoziție în 1993, în format ENDF-6. Datele de rezonanță sunt fie ca parametri fie ca secțiuni punctuale. Conține aceleași tipuri de date ca ENDF/B-VI.

BROND-2.2 reprezintă biblioteca de date evaluate a centrului de la Obninsk, în format ENDF-6, disponibilă din 1992, revizuită în 1993.

CENDL-2 este biblioteca chinezească, în format ENDF-6, pusă la dispoziție în 1991 și suplimentată în 1993.

JENDL-3.2 a fost pusă în circuitul internațional de către japonezi în 1989 și semnificativ îmbunătățită în 1994, în format ENDF-6.

FENDL/E este biblioteca de date evaluate pentru reacții neutronice cu producție de fotoni și interacții foto-atomice pentru calcule de transport cuplate neutron-foton în aplicații de fuziune. Este disponibilă în trei forme:

- a) în format original ENDF-6 cu parametri de rezonanță [5]
- b) procesată în date multigrup în format GENDF și MATXS (sub numele FENDL/MC) [6]
- c) procesată în format ACE necesar ca input în codul Monte-Carlo MCNP4A [7]

EFF-2 cuprinde date evaluate selectate pentru 80 de materiale în cadrul programului

"European Fusion File", multe evaluări sunt bazate pe JEF-2 și ENDF/B-V, VI.

Sunt și o serie de biblioteci de date evaluate de reacții neutronice care acum sunt doar de interes istoric și pentru scopuri de intercomparare. Aceste biblioteci mai vechi conțin însă și o serie de date evaluate încă valabile deoarece în bibliotecile actuale nu toate datele au fost reevaluate ci unele au fost preluate din bibliotecile mai vechi și sunt încă considerate valabile.

Dintre acestea amintim: ENDL-84 (LLNL), INDL/V-85, ENDF/B-5, ENDF/B-4, ENDL-82, JENDL-2, UKNDL-80 (Anglia), KEDAK-4 (Germania), SOKRATOR (URSS)

5.5 Biblioteci multigrup de date nucleare neutronice

In general bibliotecile de date multigrup pentru calcule de reactor se cer la NEA-DB. Există însă câteva biblioteci ce sunt accesabile de la IAEA-NDS și anume:

FENDL/MG care este o bibliotecă de secțiuni eficiente multigrup în format GENDF și MATXS ce servește la calcule de transport de neutroni-fotoni [6]

FENDL/MC conține aceleași date ca FENDL/MG numai că sunt în formatul cerut de codul Monte-Carlo MCNP4A [7].

WIMKAL-88 este versiunea din 1988 a bibliotecii WIMS-KAERI și conține secțiuni eficiente neutronice pe 69 de grupe pentru reactori termici, este destinată codului de procesare WIMS [8]. Această bază de date conține date evaluate pentru mai mult de 130 de materiale selectate din bibliotecile ENDF/B-V, ENDF/B-IV, JENDL-2 precum și din alte surse.

WIMSD Nb Bi conține date în formatul pentru sistemul WIMSD pentru Nb și Bi derivate din ENDF/B-6.1, JEF-2.2, fișierele sunt accesabile pentru PC, intercomparări sub formă tabelară și grafică se află în [9].

FENDL/A este o bibliotecă multigrup pentru secțiuni de activare cu neutroni.

Informații asupra colecțiilor mai vechi de date de secțiuni multigrup sunt prezentate în [10].

5.6 Standarde de date nucleare pentru măsurători

Cea mai importantă colecție de date de acest tip se află în subbiblioteca de standarde a ENDF/B-VI. Aceasta conține date evaluate, în format ENDF-6, pentru: $^1\text{H}(n,n)$ secțiuni integrale și diferențiale, $^3\text{He}(n,p)$, $^6\text{Li}(n,t)$, $^{10}\text{B}(n,\alpha)$, $\text{C}(n,n)$ secțiuni diferențiale și integrale, $^{197}\text{Au}(n,\gamma)$, $^{235}\text{U}(n,f)$. Un al doilea fișier al acestei baze de date conține incertitudini și valori recomandate pentru secțiuni eficiente neutronice (2200m/s) pentru U-233, U-235, Pu-239, Pu-241 și "nu-bar" pentru Cf-252. Comitetul Internațional de Date Nucleare recomandă biblioteca de standarde ENDF/B-VI ca standarde internaționale de referință [11].

Biblioteca "XG Standards" conține date standard de raze X și γ pentru calibrarea detectorilor. O parte din date se găsesc și în NEANDC-311 ("handbook").

Baza de date "1991 NEANDC/INDC Nuclear Standard File" cuprinde în principal standardele ENDF/B-VI și XG.

Biblioteca "Cf-252 neutron spectrum" conține date evaluate cu privire la spectrul neutronilor rezultați din fisiunea spontană a Cf-252 [11],[12],[13]. Datele din această bază sunt incluse și în biblioteca de date de dezintegrare ENDF/B-VI la MAT=9861.

Biblioteca de secțiuni neutronice standard pentru domeniul de energii peste 20 MeV este disponibilă la NEA-DB (în urma solicitării) [14].

Documentație cu privire la standardele mai vechi ENDF/B-V se poate găsi în [15], [16], [17].

5.7 Secțiuni neutronice termale, parametri de rezonanță, integrale de rezonanță

Bibliotecă în format ENDF: cele mai recente secțiuni și integrale de rezonanță se află în fișierele bibliotecilor: BROND-2, CENDL-2, ENDF/B-VI, JEF-2, JENDL-3; aceste fișiere trebuie tratate cu ajutorul codurilor de procesare LINEAR, RECENT, INTER. Pentru JENDL-3 aceste valori sunt tabelate în [18] iar datele bibliotecii JENDL-3 de produși de fisiune sunt în [19], noua versiune JENDL-3.2 conține date revizuite pentru mulți nuclizi.

Biblioteca **JEF-2.2 INTER** conține valori obținute cu codul INTER pornind de la fișierele JEF-2.2 de date punctuale pentru cele mai importante secțiuni eficace. Această bibliotecă include toate secțiunile la 0.0253 eV, spectrul de fisiune termic maxwellian - 14 MeV precum și integrale de rezonanță și factori g termici. Fișierele bibliotecii sunt disponibile pe bandă magnetică și dischete.

JEF Report 14: pornind de la datele în format ENDF din JEF-2.2, ENDF/B-VI, JENDL-3.2, BROND-2, CENDL-2, această bază de date cuprinde următoarele mărimi: secțiuni eficace la 0.0253eV, secțiuni mediate pe spectrul termic maxwellian, integrale de rezonanță, secțiuni mediate pe spectrul de fisiune, secțiuni eficace la 14MeV. Această bază de date este disponibilă la NEA-DB.

Belanova Handbook este o bază de date realizată la centrul de date nucleare de la Obninsk ce conține secțiuni de captură radiativă [20], mai cuprinde de asemenea tabla nuclizilor cu abundența și timpul de înjumătățire, secțiuni termale, factor g Westcott, integrale de rezonanță, parametri medii de rezonanță, secțiuni de grup 0 - 15 MeV pentru nuclizi selectați, în formă tabelară și grafică.

"**Thermal neutron cross-sections and resonance parameters**" [21] este o bază de date ce se accesează cu ajutorul sistemului computerizat NuDat ce va fi descris ulterior.

UENDL/NAA (Evaluated Nuclear Data Library for Neutron Activation Analysis) este o bibliotecă rusească ce conține secțiuni de activare cu neutroni termici din reacții de captură și absorbție precum și integrale de rezonanță și alte date.

Fișierul **Gryntakis 1986** conține secțiuni de activare cu neutroni termici, integrale de rezonanță, principalele radiații γ pentru toți nuclizii [22] și factori g în funcție de temperatură pentru nuclee ce nu prezintă legea $1/v$ [23].

Alte informații asupra datelor nucleare din această categorie se pot găsi în [24], [25], [26].

5.8 Legi de împrăștiere ale neutronilor termici

ENDF/B-VI TSL2 reprezintă o subbibliotecă a ENDF/B-VI ce conține date pentru 12 materiale moderatoare la 8 temperaturi.

JEF-2 TSL este un segment al bibliotecii JEF-2 și cuprinde date de împrăștiere pentru cinci materiale moderatoare.

Biblioteca ENDF/B-VI TSL1, cuprinzând date pentru 10 materiale moderatoare, este de fapt aceeași cu biblioteca ENDF/B-3 numai că a fost convertită la formatul ENDF-6; această bază de date cuprinde însă și materiale moderatoare care nu se regăsesc în revizia a 2-a a TSL.

5.9 Actinide

În prezent datele evaluate de reacții neutronice pe actinide au fost incluse în

Figura 4.1

1

G. Vladuca, Anabella Tudora, Mihaela Sin, Bucharest University, Romania

Rom.Journ.Phys., tome 41, no.7-8, (1996), 515-526

Good agreement with experim. total cross-sect.(Poenitz), elastic, inelastic and differential cross-sect. (Haouat), calculations performed with ECIS-95 code

0.001	20.000						
90	103						
227	260						
1	0	1					
1							
20.000							
1.25600	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00
	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00
0.62000	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00
	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00
51.32134	-0.5700E+00	0.2000E-01	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00
	-0.2400E+02	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00
1							
20.000							
1.26000	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00
	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00
0.58000	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00
	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00
5.04567	0.4000E+00	0.1000E-02	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00
	-0.1200E+02	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00
1							
20.000							
0.00000	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00
	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00
0.00000	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00
	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00
0.00000	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00
	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00
1							
20.000							
1.12000	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00
	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00
0.50000	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00
	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00
6.00000	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00
	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00
0.000	0.0000						
5	7						
90	232	4	4	0.0	.1950E+00	.8200E-01	
92	233	4	4	2.5	.2200E+00	.7000E-01	
92	238	4	4	0.0	.1980E+00	.5700E-01	
94	239	4	4	0.5	.2200E+00	.7000E-01	
94	240	4	4	0.0	.2000E+00	.7000E-01	
94	242	4	4	0.0	.2180E+00	.4600E-01	
95	241	4	4	-2.5	.2200E+00	.3600E-01	

bibliotecile majore cu format ENDF: BROND-2, CENDL-2, ENDF/B-VI, JEF-1, JENDL-3.

În plus există baza de date WIND a centrului de la Obninsk care conține date pentru U, Np și Pu până la 100 MeV cu un fișier de date de reacții cu protoni pentru U-238.

Amintim și câteva biblioteci mai vechi specializate pe date de reacții neutronice pe actinide: ENDF/B-V (rev.86), INDL/A-83 (IAEA Nuclear Data Library of Actinide Neutron Data Evaluations), INDL/A-86.

5.10 Randamente de produși de fisiune

Pentru datele experimentale de randamente de produși de fisiune baza de date cea mai completă este EXFOR care cuprinde în prezent și date experimentale compilate mai demult în fișiere separate.

În ceea ce privește datele evaluate din această categorie există trei fișiere majore ce cuprind un număr mare de sisteme fisionabile (fisiunea spontană a actinidelor și fisiunea actinidelor indusă de neutroni termici, de neutroni rapizi, de neutroni de 14MeV) și anume:

- subbiblioteca separată ENDF/B-VI care are la rândul ei două părți, una pentru randamente de produși de fisiune spontană și cealaltă pentru produși de fisiune indusă. Datele pentru actinide minore au fost preluate din biblioteca BRADY.

- JEF-2/FPY care reprezintă biblioteca de date de randamente de produși de fisiune a NEA-DB ce preia date evaluate din biblioteca UKFY2. Baza de date UKFY2 conține în plus lanțuri de randamente, randamente fracționare independente și referințe bibliografice.

- JENDL-3.2/FPY este subbibliotecă de date de randamente de produși de fisiune a JENDL, în format ENDF-6; datele evaluate au fost preluate din biblioteca JNDC-FP2 (în alt format).

Pentru unele sisteme fisionabile ce nu sunt incluse în cele trei baze de date de mai sus, se pot folosi fișierele ASIYAD care au fost obținute din calcule de modele termodinamice. Pentru scopuri de intercomparare sunt încă de interes baza de date: JNDC-FP2 și biblioteca chinezească de randamente de produși de fisiune Wang Dao et al.

5.11 Produși de fisiune - date neutronice evaluate de reacții și dezintegrare

Fișierul conținând secțiunile produșilor de fisiune este inclus în biblioteca ENDF/B-VI generală dar se poate accesa și separat. Datele sunt aproape identice cu cele din ENDF/B-V, doar puțin actualizate cu noi evaluări.

Datele cu privire la dezintegrarea produșilor de fisiune sunt incluse într-un fișier separat (date de dezintegrare) al bibliotecii ENDF/B-VI.

Biblioteca generală JEF-2 conține de asemenea fișier de secțiuni ale produșilor de fisiune care poate fi accesat separat.

JNDC-FP2 reprezintă baza japoneză de date cu privire la produșii de fisiune și conține date de dezintegrare și date de randamente de fisiune pentru 1078 de produși instabili și 149 de produși stabili de fisiune, precum și secțiuni eficiente pentru 166 de nuclizi. Datele de dezintegrare includ timpi de înjumătățire, factori de ramificare, energii totale β și γ eliberate per dezintegrare pentru fiecare nuclid instabil. Randamente de fisiune sunt date pentru 20 de sisteme fisionabile. Biblioteca este disponibilă în format liber și în format ENDF-6.

O serie de date importante privind factori absoluți de ramificare la produși de fisiune [27], spectre β și γ pentru produși de fisiune de viață scurtă [28] și rapoarte de ramificare

de neutroni întârziati ale precursorilor în regiunea produsilor de fisiune [29] nu sunt încă sub formă de fișiere computerizate.

Următoarele baze de date sunt considerate în prezent depășite și nu vor mai fi mult timp utilizate: ENDF/B-V FP, biblioteca Blanchot de date de dezintegrare pentru produși de fisiune, biblioteca australiană de produși de fisiune, biblioteca de la Bologna cu privire la produși de fisiune și secțiuni neutronice, UKFPDD-2, UKNDL-81, RCN-3 (format KEDAK depășit) etc.

5.12 Radiații γ induse de neutroni

Biblioteca **Lone** de radiații γ prompte din captura neutronilor termici furnizează pentru toate elementele energiile radiațiilor γ prompte în domeniul 0.023 MeV - 10.829 MeV sub forma de radiații γ emise per 100 de capturi radiative de neutroni. Fișierul 1 conține date ordonate după energiile γ , fișierul 2 are datele ordonate după elemente și apoi după energiile radiațiilor γ . Această bibliotecă este disponibilă și pe dischete pentru PC.

Baza de date **Tull** de radiații γ din captura neutronilor termici conține pentru izotopi cu $A > 44$, energiile radiațiilor γ prompte în domeniul 0.1 - 11447. KeV în formă de procente raportate la cea mai puternică radiație γ a izotopului respectiv. Datele sunt preluate din ENSDF.

Biblioteca **Orphan** cuprinde o compilație a Gulf General Atomic, San Diego, cu privire la randamente γ din captura neutronilor termici pentru 75 de elemente (nu este în formă de fișiere computerizate ci numai microfilme).

5.13 Date de activare cu neutroni, aplicații generale

FENDL/A-1.1 reprezintă biblioteca de secțiuni neutronice de activare pentru fuziune și alte aplicații. Cuprinde 11000 de reacții de activare pe 636 de nuclee țintă în domeniul energetic până la 20 MeV. Este organizată în patru forme:

- date punctuale în format ENDF-6 [30]
- MCNP: date procesate în formatul de input pentru sistemul de calcul MCNP Monte-Carlo [31]

- VITJ-E: date în format VITAMINJ pentru 175 grupe energetice [31]

- VITJ-FLAT: date în format VITAMINJ pentru 175 grupe energetice procesate cu un spectru de netezire [30]

EAF-2 (European Activation File) cuprinde date de secțiuni pentru mai multe mii de reacții, este accesibilă numai la NEA-DB.

ADL-3 reprezintă biblioteca rusească de date evaluate de activare cu neutroni, cuprinde 20049 funcții de excitație.

UENDL/NAA este tot o bibliotecă rusească conținând valori recomandate pentru secțiuni de activare cu neutroni de 14.5 MeV și neutroni rezultați din fisiunea U-235 și Cf-252. Tot această bază de date conține și valori recomandate pentru integrale de rezonanță, secțiuni de captură termică și absorbție, energiile și intensitățile absolute ale principalelor radiații γ din captura neutronică, abundențe și timpi de înjumătățire pentru toți nuclizii cunoscuți. Este disponibilă pe dischete pentru PC.

ACTIV87 este un fișier de secțiuni de activare cu neutroni rapizi. Conține secțiuni evaluate pentru 206 reacții de activare cu neutroni rapizi în domeniul energetic de la prag până la peste 20 MeV.

ENDF/B-V conține secțiuni de activare și date de dezintegrare pentru 127 de nuclizi de la tritiu până la Cm-242.

ACTL-82 cuprinde secțiuni de activare evaluate în format ENDL iar **ACTL-LLNL** cuprinde cam aceleași secțiuni de activare în format ENDF.

Biblioteca RCN-2.CP conține secțiuni evaluate de activare pentru materiale supuse coroziunii, nuclizi din componența circuitului primar de răcire la reactorii termici și pentru izotopi ai materialelor de structură de la reactori rapizi.

5.14 Date de activare cu neutroni pentru dozimetrie

IRDF-90 reprezintă fișierul internațional de date pentru dozimetrie la reactori. Acesta include valorile recomandate pentru secțiunile unui set de reacții de activare selecționate ca fiind de utilitate pentru dozimetrie neutronică (utilizând foițe activatoare). Aproape jumătate din aceste reacții au fost preluate din **ENDF/B-VI** iar restul reprezintă evaluări originale.

Fișierul de dozimetrie al **ENDF/B-VI** este cuprins în parte de **IRDF-90** și face parte din biblioteca generală **ENDF/B-VI**.

Fișierul de dozimetrie **JENDL** cuprinde date de dozimetrie preluate în bună parte din **JENDL-3** dar și din alte surse.

PRONDOS cuprinde o selecție de date cu privire la reacțiile de activare necesare pentru dozimetrie.

Alte fișiere de dozimetrie sunt incluse în bibliotecile generale de date evaluate.

5.15 Biblioteci neutronice specializate de date amestecate

INGDB-90 reprezintă baza internațională de date pentru aplicații geofizice. Această bibliotecă cuprinde secțiuni neutronice selectate, date cu privire la spectrele neutronilor obținuți din surse selectate (pentru aplicații în geofizică), precum și date deja tratate cu codurile de procesare **LINEAR** și **GRUPIE** [32].

JENDL-3, subbiblioteca pentru produși gazeși, conține secțiunile de producere de hidrogen și heliu pentru elemente de la Li-3 la Nb-41.

ENDF/B-V Gas Production File conține secțiuni de produși gazeși pentru 18 elemente sau izotopi de la B-11 la Cu.

DAMSIG84 cuprinde secțiuni de deteriorare ale unor materiale într-o structură de 640 grupe.

O serie de date folositoare cu privire la interacții nonelastice neutronice între 15 și 60 MeV pe C și O sunt în [33] dar nu sub formă computerizată iar pentru reacții de captură la 30 keV la peste 4000 de nuclizi în [34], acestea sunt date rezultate din calcule teoretice și care încă nu sunt într-o formă compatibilă cu cea a bibliotecilor curente.

5.16 Date fotonucleare

Fișierul **EXFOR** conține în particular date foto-neutronice (biblioteca Berman) și alte date fotonucleare selectate. La ora actuală compilarea datelor fotonucleare experimentale continuă în special la Centrul de Date Fotonucleare din Moscova.

Datele fotoneutronice și de fotofisiune sunt indexate în **CINDA**, indexul **EXFOR** este disponibil online și documentația în [35].

Biblioteca Berman de secțiuni eficiente fotoneutronice cu fotoni monoenergetici este

inclusă în EXFOR cu numerele de acces pornind de la L0001.

O parte din datele fotonucleare din EXFOR sunt cuprinse în [36] alături de secțiuni evaluate fotoneutronice și de fotofisiune.

Baza de date **GDR** conține parametri de rezonanțe gigant. Este disponibilă sub formă de fișiere pe dischete pentru PC, ("CENDL.GDR"), realizate de centrul chinez de date nucleare de la Beijing.

Biblioteca **BOFOD** cuprinde date evaluate foto-neutronice și este realizată de centrul rusesc de date nucleare, descrierea în detaliu a acestei baze de date cu reprezentări în formă tabelară și grafică este dată în [37].

5.17 Date de interacții foto-atomice

EADL este biblioteca de date atomice evaluate realizată la Lawrence Livermore National Laboratory (LLNL) USA [38]. Această bază de date cuprinde date evaluate privind subpăturile atomice și procesele de relaxare pentru atomi neutri izolați, incluzând randamente de fluorescență, parametri ai păturilor (de exemplu energii de legătură), probabilități de tranziții radiative și neradiative.

EEDL este biblioteca de date evaluate electronice realizată tot la LLNL-USA. Conține evaluări ale secțiunilor de interacție electronice cu dependența lor energetică pentru toate elementele de la H la Fm în formă tabelară și grafică [45].

EPDL cuprinde date fotonice evaluate, aparține tot LLNL-USA și cuprinde în formă tabelară și grafică secțiuni (de la 10 eV la 100 GeV), factori de formă, secțiuni fotoelectrice pentru fiecare pătură, factori de împrăștiere coerenți anormali în formă grafică etc. [46].

Segmentul **ENDF/B-VI Photo-atomic Interaction Data "EN6-PHOTO"** este în esență identic cu EPDL, principalele diferențe constau în faptul că această bibliotecă este în formatul ENDF în timp ce EPDL are propriul sau format, domeniul energetic este strict 10 eV - 100 GeV pe când EPDL are multe date și peste 100 GeV.

Acest segment al ENDF/B-VI este accesabil în cadrul sistemului computerizat NDIS sub numele de cod XRAY. O parte din datele acestei baze au fost introduse și în biblioteca FENDL (de date evaluate pentru aplicații de fuziune).

JEF-2/Photo este subbiblioteca JEF-2 de date de interacții foto-atomice. Cuprinde în principal secțiuni de generare de perechi, secțiuni fotoelectrice, secțiuni de împrăștiere coerentă pentru toate elementele de la $Z=1$ la $Z=100$. Se bazează pe datele din fișierele EPDL și ENDF/B-VI-Photo-Atomic dar a fost actualizată în 1990. Este disponibilă online și pe bandă magnetică.

XCOM este o bază de date cuprinzând secțiuni fotonice pentru împrăștiere, absorbție fotoelectrică și generare de perechi ca și coeficienți totali de atenuare în orice element, compuși și amestecuri, la energii de la 1 KeV la 100 GeV sub formă de fișiere ce pot fi stocate pe două dischete pentru PC [39].

Există și o serie de fișiere mai vechi care sunt încă utilizate ca de exemplu: biblioteca RSIC de date foto-atomice, subbiblioteca ENDF/B-IV de date foto-atomice, ENDL din 1977 etc.

5.18 Date de reacții nucleare cu particule încărcate

Cea mai completă compilație de date experimentale din această categorie este în EXFOR. Sunt cuprinse pe lângă date experimentale și date evaluate pentru reacții induse de

particule încărcate și ioni grei. Accentul este pus pe secțiuni integrale și randamente pentru jinte subțiri, reacții nucleare folosite ca surse de neutroni, date pentru aplicații medicale, date de fisiune indusă de particule încărcate etc. Toate fișierele sunt disponibile pe bandă magnetică.

Subbiblioteca **ENDF/B-VI de date de particule încărcate** (versiunea 1991) cuprinde evaluările complete ale secțiunilor dublu-diferențiale ale reacțiilor protonice pe H-1 și He-2, precum și secțiuni evaluate de reacții de fuziune. Fișierele sunt disponibile pe dischete și banda magnetică.

Subbiblioteca **ENDF/B-VI de date de energii înalte** cuprinde date cu privire la reacții ale neutronilor și protonilor peste 1 GeV pe C-12, Fe-56, Ph-208, Bi-209.

Biblioteca **NNDC Evaluated Charged Particles Reaction Data** are în componență date selectate pentru reacții induse de protoni, deuteroni și particule α pe jinte cu Z între 21 și 83, în format de tip ENDF.

Puteri de stopare (ale electronilor, protonilor și ionilor de He în diverse materiale) sunt cuprinse în pachetele de fișiere **ESTAR**, **PSTAR**, **ASTAR** pentru PC. Tot aici menționăm și codul **POTAUS** care calculează puteri de stopare ale diverselor particule în diverse materiale și care este disponibil pe dischete pentru PC.

5.19 Date nucleare pentru energii intermediare

Pentru reacțiile induse de neutroni menționăm bibliotecile:

- **MENDL-2** bază de date rusească ce cuprinde date de activare și transmutație pentru diverse materiale iradiate cu neutroni de peste 100 MeV, este disponibilă pe bandă magnetică la IAEA-NDS.

- **WIND** realizată la Obninsk, cuprinde date pentru izotopi de U, Np, Pu la energii neutronice de peste 100 MeV, cuprinde și un fișier cu date de reacții protonice pentru U-238.

Pentru reacții induse de neutroni și particule încărcate mai importante sunt următoarele baze de date:

- **ENDF/B-VI** fișierul de date de energii înalte, care cuprinde patru seturi de date de reacții neutronice și protonice peste 1 GeV pentru Fe-56, C-12, Ph-208, Bi-209.

- **EXFOR** include date experimentale pentru reacții induse de neutroni la energii intermediare și particule încărcate dar compilarea nu este încă completă. Aceste fișiere sunt în sistemul online NDIS.

Date ale reacțiilor induse de particule încărcate la energii intermediare sunt cuprinse tot în biblioteca **WIND** (un fișier de date de reacții protonice pe U-238).

5.20 Date pentru fuziune termonucleară

Subbiblioteca **ENDF/B-VI de particule încărcate** (versiunea 1991) include și reacții de fuziune între deuteriu, tritium și He-3; este disponibilă pe bandă magnetică și pe dischete.

Biblioteca **FENDL/C** conține date de particule încărcate pentru aplicații de fuziune: D(d,n), D(d,p), T(d,n), T(t,2n). A fost obținută prin extragerea și procesarea datelor din ENDF/B-VI [40].

Biblioteca **DROSG-87** cuprinde date evaluate ale dependențelor unghiulare ale secțiunilor induse de particule încărcate în reacții folosite ca surse de neutroni. Fișierele de date sunt însoțite și de coduri de accesare și procesare, întreg pachetul este disponibil pe dischete pentru PC.

Biblioteca **GRAZ-87** conține secțiuni evaluate și rate de reacții de particule încărcate pe izotopi ușori ($Z = 1 - 5$) împreună cu coduri de accesare și procesare a datelor.

Baza de date **CPX** de date experimentale de reacții cu particule încărcate a fost cuprinsă în **EXFOR**.

Biblioteca **ECPL-86** produsă de **LLNL-USA** conține date de reacții de particule încărcate pe 14 ținte (de la H-1 la O-16) în formatul **ENDL**.

5.21 Date nucleare selectate pentru programe de fuziune

În această categorie intră biblioteca **FENDL** procesată pentru a servi programului de fuziune **ITER** și biblioteca **EFF** care conține fișiere de date neutronice selectate pentru Programul European de Fuziune.

Mai există și baza de date de reacții neutronice evaluate **INDL/F-83** pentru calcule **INTOR** de fuziune, care cuprinde o selecție de date din **ENDF/B-IV**, **ENDF/B-V** și **ENDL-79**, în două formate: cu parametri de rezonanță și cu secțiuni tratate cu codul **RECENT**.

5.22 Date de structură și dezintegrare

FENDL/D este o bibliotecă de date de dezintegrare în special pentru aplicații de fuziune. Ea a fost realizată pentru a fi folosită împreună cu biblioteca **FENDL/A** de date de activare cu neutroni. **FENDL/D** cuprinde date de dezintegrare pentru 2900 de nuclizi și izomeri în format **ENDF-6** extrase din bibliotecile **ENDF/B-VI** și **ENSDF**.

Cea mai importantă bază de date de structură și dezintegrare este însă **ENSDF** (Evaluated Nuclear Structure Data File). Aceasta cuprinde date experimentale evaluate pentru toți izotopii cunoscuți (peste 2300). Conținutul acesteia este publicat în "Nuclear Data Sheets". Descrierea organizării acestei biblioteci este cuprinsă în **IAEA-NDS-104** iar modul de realizare al fișierelor de seturi de date a fost descris de **J.K. Tuli** în [41]. Accesarea acestei baze, pe grupuri de fișiere, se face online prin sistemul **NDIS**. Intreaga bibliotecă este disponibilă pe banda magnetică.

Având în vedere volumul imens al bibliotecii **ENSDF**, din ea au fost create o serie de biblioteci derivate (pentru scopuri și aplicații precizate), dintre care amintim:

NuDat este o bază de date extrase din **ENSDF** și puse sub o formă accesabilă online comodă și prietenoasă. Pentru fiecare nuclid se dau: schema de nivele discrete și energiile tranzițiilor γ , timpii de înjumătățire și alte proprietăți ale stărilor fundamentale și metastabile precum și tipurile de dezintegrare. În plus **NuDat** cuprinde și secțiuni neutronice termale și integrale de rezonanță.

Biblioteca **NuDat** este actualizată periodic o dată cu actualizarea bazei majore de date **ENSDF**.

PCNUDAT este un pachet de fișiere pentru **PC** care afișează conținutul accesabil online al bibliotecii **NuDat**.

RADLIST este un program ce calculează radiațiile de dezintegrare din **ENSDF**. Rezultatele furnizate de acest cod au fost incluse în **NuDat** [42].

NUCHART este un pachet de fișiere pentru **PC** care afișează date de dezintegrare din **ENSDF/NuDat** incluzând și o rutină de search pentru a asigura energiile radiațiilor γ la radionuclizi. Acest pachet este realizat în două forme: pentru sistem de operare **DOS** și pentru sistem **WINDOWS** (versiune 1.2, 3.1).

Subbiblioteca **ENDF/B-VI** de date de dezintegrare cuprinde toate datele de

dezintegrare pertinente pentru toți nucleizii din biblioteca neutronică ENDF/B-VI, în special are date pentru producții de fisiune, radionuclizii rezultați din activare cu neutroni și pentru actinide.

JEF-2/DD este biblioteca de date de dezintegrare a NEA-DB, în format ENDF-6, cuprinzând date de dezintegrare pentru 2345 radionuclizi. Datele au fost compilate de JEF Decay Data Working Group din fișierele ENSDF și fișierele englezești de date de dezintegrare.

Codul **PANDORA** este o versiune pentru PC a codului de verificare folosit de evaluatorii bibliotecii ENSDF, este disponibil pentru PC și poate fi folosit la bibliotecile derivate din ENSDF.

Biblioteca **UKPADD-2** conține date de dezintegrare pentru producții de activare. Este în format ENDF-6 și cuprinde schemele de dezintegrare a 236 de nucleizi produși de activare, timpi de înjumătățire, energii totale de dezintegrare (Q), rapoarte de ramificare, energii ale particulelor α și probabilitățile lor de emisie, energii β , probabilități de emisie și tipuri de tranziții β , energii ale radiațiilor γ emise, probabilitățile de emisie și coeficienți de conversie internă, date de fisiune spontană incluzând spectre γ prompte. Această bibliotecă este disponibilă pe dischete pentru PC.

ENSGAM este o bază de date pentru PC cuprinzând 1500 de radiații γ de la 2777 nuclee radioactive, derivată din ENSDF.

"**Strong-gammas**" este tot o bază de date pentru PC conținând radiațiile γ tari emise de radionuclizi, din această bibliotecă o selecție a tuturor radiațiilor γ cu intensitatea mai mare de 5% a fost făcută fișier separat tot pentru PC.

UKHEDD-1 și **UKHEDD-2** sunt biblioteci de date de dezintegrare pentru nuclee grele, în format ENDF și destinate calculului de reactori. Aceste baze cuprind date pentru 125 nucleizi de la Hg-206 până la Es-253.

Biblioteca **Blanchot** cuprinde date de dezintegrare pentru nuclee grele, produși de fisiune și produși de activare și este folosită împreună cu un pachet de programe (trei fișiere de date plus codurile EDIBIB, TRIGAL, ISOTAB).

Fișierul **Jülich** de dezintegrări gamma reprezintă o compilație de radiații X și γ pentru 2055 radionuclizi; a fost creat cu scopul de a servi la evaluarea spectrelor γ .

Bibliotecile **CDRL-82** și **ENSL-82** de date evaluate de structură sunt accesibile numai sub formă de microfilme și banda magnetică.

GAMCAT este o bază de date de dezintegrare α și γ pentru PC oferită de Fachinformationszentrum Karlsruhe și nu este disponibilă la centrele majore de date nucleare.

Pentru date de fisiune spontană, randamente și spectre de neutroni de fisiune și produși de fisiune ca și pentru temperaturi nucleare, parametri de densități de nivele, factori de tăiere după spin etc. se poate folosi EXFOR.

Există încă foarte multe date de structură și dezintegrare care nu sunt în formă computerizată. Dintre cele mai importante colecții amintim:

JEF-Rep.13 OECD-NEA (1994) conține tabele preluate din biblioteca JEF-2.2 de dezintegrare și de randamente de fisiune. Acest raport cuprinde și o intercomparare a celor mai importanți parametri de dezintegrare ($T_{1/2}$, Q, energii medii α , β și γ) din bibliotecile ENDF/B-VI, JEFF-2.2 și JNDC-2. Multe date sunt în concordanță fiindcă provin din aceeași sursă (ENSDF) dar sunt și discrepanțe semnificative între cele trei biblioteci la datele multor nucleizi.

"**X-ray and γ -ray standards for detector calibration**" (IAEA-TECDOC-619 1991) care reprezintă rezultatele activității participanților la un proiect coordonat de IAEA (1986-91) cu

privire la date de structură și dezintegrare. Valorile recomandate sunt și sub formă de fișiere pe dischete pentru PC sub numele "XG standards".

Comitetul japonez de date nucleare a publicat de asemenea în 1992 o hartă a nuclidilor sub formă tabelară, "Nuclear Wallet Cards" produsă de BNL (J.K.Tuli) este de asemenea răspândită și foarte utilă, la fel și tabla de izotopi produsă la Lawrence Berkeley Laboratory. Mai amintim compilația de valori experimentale pentru coeficienți de conversie internă realizată la laboratorul Geel, catalogul de particule α din dezintegrări produs de nemți [43] și colecția de date sub forma tabelară pentru dezintegrări β și antineutrini produsă în Rusia [44].

5.23 Date de analiză cu radiații γ

IDGAM reprezintă un sistem (cod plus baza de date) folosit pentru identificarea izotopilor din probe radioactive prin emisiile lor gamma. Este un sistem utilizabil pe PC și care folosește datele provenite din baza "Strong gammas".

GAMQUEST este un cod de calcul de identificare a radiațiilor γ produs la laboratorul Lawrence Berkeley SUA și este în special utilizat la analiza probelor provenite din materiale activate cu neutroni și din mediul înconjurător (poluanți radioactivi). Acest cod folosește o bază de date mare cuprinzând 60000 de linii gamma și este făcut pentru computer VAX/6610. Codul poate fi accesat prin cont individual pe internet (hepnet, www).

În aceasta categorie intră și sistemul NUChart prezentat la punctul anterior.

5.24 Constante nucleare, hărți de radionuclizi

Date de acest tip sub formă computerizată sunt conținute în bazele de date NuDat, NUChart etc. Cele mai importante baze sunt însă cele ce intră în bibliotecile de date de intrare și anume mase atomice (Audi și Wapstra), mase nucleare, deformări etc. (Möller și Nix).

5.25 Date atomice

Sub formă computerizată este numai EADL, biblioteca de date atomice evaluate a laboratorului național Lawrence Livermore USA, în formă grafică și tabelară în [45].

Pentru date atomice și moleculare se poate accesa online sistemul AMDIS al IAEA-NDS.

5.26 Fișiere bibliografice

Cele mai importante baze bibliografice sunt CINDA (index de date experimentale și evaluate de reacții neutronice), NSR (referințe de structură nucleară, necesare în special evaluatorilor ce produc fișierele ENSDF), Papyrus-NSR (versiunea pentru PC a bazei NSR) ce sunt accesabile online precum și WRENDA (lista necesităților mondiale de măsurători de date nucleare), seria IAEA-NDS și catalogul CINDU, acestea din urmă sub formă de publicații.

5.27 Servicii online de date nucleare

Dezvoltarea explozivă a rețelelor internet a condus la un acces extrem de comod la bazele de date nucleare. Centrele majore de date nucleare IAEA-NDS (Viena), OECD-NEA-DB (Paris) și NNDC-Brookhaven (SUA) asigură accesul electronic la cea mai mare parte a bazelor de date bibliografice și numerice pe care le dețin și le îmbogățesc permanent membrii acestor grupuri.

Accesul este disponibil prin cele mai importante servicii internet: **e-mail** (protocol SMTP), protocol TCP/IP: **anonymous ftp** și **ftp** cu cont specificat, la terminal sesiune **telnet** precum și **decnet**, set **host** și **modem** și bineînțeles **www** (World Wide Web).

Firește că toate bazele de date accesabile online ca și alte baze de date sunt disponibile pe suporti (CD-ROM, dischete, benzi magnetice etc.).

Conținutul acestor servicii online este în continuă schimbare și îmbogățire, la fel și metodele de acces, de aceea paginile de gardă web (**www home pages**) ale celor trei centre majore specifică toate aceste informații și modalitățile de acces, conectare, transfer de fișiere etc. Informații pe larg cu privire la serviciile online de date nucleare oferite de centrele majore se pot obține și prin e-mail la: **services@bnlnd2.dne.bnl.gov**, pentru NNDC-Brookhaven și la **services@iaeand.iaea.or.at** și **online@iaeand.iaea.or.at** pentru IAEA-NDS.

Principalele baze de date cu acces electronic la centrele majore de date nucleare sunt: CINDA (accesabilă la IAEA-NDS, NEA-DB și NNDC), codurile utilitare și de preprocesare ENDF ca și codurile de analiză și verificare pentru ENSDF (disponibile la IAEA-NDS și NNDC, pachetele complete sunt disponibile la NEA-DB dar nu online), CSISRS (disponibilă la toate cele trei centre majore), ENDF (disponibilă la toate cele trei centre majore, NEA-DB furnizează în plus JEF în ultima versiune și EVA), ENSDF (accesabilă pe segmente la IAEA-NDS, NEA-DB și NNDC, precum și la centre regionale de date nucleare ca de exemplu LUND-Nuclear Data Services, Suedia și IP-Isotopes Project), biblioteca Audi-Wapstra de mase atomice evaluate (disponibilă la toate cele trei centre majore). fișierul de date de dozimetrie pentru reactori, (International Reactor Dosimetry File, 1990, vers.2) este furnizat de IAEA-NDS și NNDC, biblioteca MIRD (furnizată de IAEA-NDS, NNDC și LUND), NSR este accesabilă la toate cele trei centre majore iar Papyrus NSR este disponibilă și la IP și LUND. Biblioteca derivată NUDAT este furnizată de toate cele trei centre majore iar baza de date PCNUDAT (sub sistem de operare DOS) este disponibilă NNDC și LUND, biblioteca XRAY se poate accesa la NNDC și IAEA-NDS.

Modul de acces este prezentat succint în continuare:

NNDC-Brookhaven SUA

- **anonymous ftp**: la **bnlnd2.dne.bnl.gov** cu username **anonymous** și parola adresa e-mail.
- **terminal**: sesiune **telnet** deschisă la **bnlnd2.dne.bnl.gov** (130.199.112.132) cu numele de user "**nndc**" și cod de autorizare "**guest**". **Decnet.set host**: **bnlnd2** (44436 sau 43.404), **modem**: 516-282-2002, protocol numai ASCII, viteză 1200 la 19200 bps, viteze mai mari ca 57.6 kbps pot fi posibile dacă sunt suportate de modemul local și de software.
- **www**: adresa URL este **http://www.dne.bnl.gov/nndc.html** pentru pagina web de gardă

OECD-NEA-DB, Paris

- **ftp** numai pentru utilizatori autorizați
- **terminal**: recent sesiune **telnet** deschisă la **nos.nea.fr** și de asemenea sesiune **telnet** la **db.nea.fr** (193.51.64.1) sub username "**neadb**" și cod de autorizare "**guest**".

- **www:** adresa URL: <http://www.nea.fr> pentru pagina de gardă a NEA (informații complete despre întreg centrul) iar pentru bibliotecile de date pagina de gardă este la <http://www.nea.fr/html/dbdata/dbdata.html>. Accesul la o parte din fișierele de date este posibil numai pentru utilizatori autorizați de NEA-DB. Informații cu privire la biblioteca mondială de coduri de calcul pot fi obținute la adresa URL pentru pagina de start: <http://www.nea.fr/dbprog/dbprog.html>

IAEA-NDS, Viena

Sistemul computerizat NDIS ce accesează bazele de date se realizează prin sesiune telnet deschisă la iaeand.iaea.or.at sub username "iaeands" și cod de autorizare "guest" la primul acces, apoi se poate cere cod propriu.

Ca proceduri de transfer se poate folosi ftp la iaeand.iaea.or.at cu user "ndsopen" și fără parolă, astfel se pot transfera fișiere de date, documente și surse FORTRAN. Ariile deschise ftp cuprind printre altele tabla de mase Audi-Wapstra, IRDF versiunea 2, pachete de coduri utilitare și de preprocesare ENDF etc.

În timpul sesiunii telnet fișierele selectate de utilizator pot fi salvate pe o arie specială a computerelor ce găzduiesc serverul iaeand.iaea.or.at (161.5.17.5 sau 161.5.2.2 ori 161.5.17.2 etc.), unde sunt păstrate 6 ore. Utilizatorul preia aceste fișiere în computerul local prin ftp cu numele de user "ndsonl".

Informații cu privire la IAEA se pot obține prin serviciul www la adresa URL pentru pagina de gardă: <http://www.iaea.or.at> iar pentru IAEA-NDS se poate accesa direct pagina web <http://www.iaea.or.at/programs/ri/nds/ndsstart.html>.

Pentru exemplificare descriem în continuare pe scurt unul din modurile de acces și transfer de fișiere de la centrul IAEA-NDS, și tot ca exemplu am ales cazul bibliotecii EXFOR. După deschiderea sesiunii telnet la iaeand.iaea.or.at (user "iaeands" cu codul de acces "guest") și setarea terminalului (ansy sau nonansy) se selectează (cu bară de meniu) baza de date dorită, în cazul acestui exemplu CSIRS.

La opțiunea "REACTION" se precizează parametrii reacției: ținta, proiectilul, tipul de reacție (EL pentru împrăștiere elastică, NON pentru nonelastic, SCT pentru împrăștiere totală, INL pentru împrăștiere inelastică, ABS pentru absorbții, F pentru fisiune, XN, XP pentru reacții de tip (n,xn) cu specificarea lui x, la fel și pentru protoni, X pentru nespecificarea particulei emergente, * pentru orice reacție generată de neutroni adică (n,*) etc.), domeniul energetic (dacă nu se specifică domeniul de energii incidente atunci sistemul va furniza toate datele disponibile la toate energiile) etc.

Apoi se selectează mărimea fizică pentru care se doresc date, de exemplu: CS (secțiune eficace, cross-section), CSP (partial cross section data), CST (temperature dependent CS), DA (differential data with respect to angle), DAP (partial differential data with respect to angle), POL (polarisation data), DE (differential data with respect to energy), DEP (partial differential data with respect to energy), DAE (differential data with respect angle and energy), SP (gamma spectre), RP (resonance parameters), RI (resonance integrals), L (scattering amplitudes), E (fission fragment energies), PY (product yields), FY (fission product yields), RR (reaction rates) etc.

Programul va afișa în continuare lista referințelor, utilizatorul urmând să selecționeze pe cele dorite. Pentru cele selectate se afișează conținutul fișierelor în format EXFOR. În funcție de opțiunea utilizatorului cele de interes pentru transfer se rețin sub opțiunea "new-file" și se transmit cu opțiunea "open", sub nume dat de utilizator, pe aria deschisă pentru

asigurarea transferului. Firește, după închiderea sesiunii telnet, prin ftp (sub numele de user "ndsonl") utilizatorul își transferă fișierele din aria deschisă (în computerul distant IAEA) în computerul local.

Bibliografie:

- [1] Oblozinsky P., Workshop on Nuclear Reaction Data and Nuclear Reactors; Physics, Design and Safety, ICTP Trieste, Italy, 1996
- [2] Lemmel H.D. Index of Nuclear Data Libraries IAEA-NDS-7 (1995)
- [3] Gryntakis E.M., IAEA-NDS-64
- [4] Koester L., Rauch H., Seymann E. Atomic Data and Nuclear Data Tables 49, (1991), 65-120
- [5] Ganesan S., McLaughlin P.K. IAEA-NDS-128 (1995)
- [6] MacFarlane R.E. IAEA-NDS-129 (1995)
- [7] MacFarlane R.E. IAEA-NDS-169 (1995)
- [8] Jung-Do Kim, Korea Atomic Energy Research Institut., IAEA-NDS-92
- [9] Jung Do Kim, Choong Sup Gil IAEA-NDS-152
- [10] IAEA-NDS-32 Rev.2 (1981)
- [11] IAEA-NDS-88 Rev.3
- [12] Mannhart W., PTB Braunschweig, FRG, 1986/87
- [13] Report Series No.273, Vienna 1987, 163-186
- [14] Proc.of meeting in Uppsala, NEANDC-305, Paris 1991
- [15] IAEA-NDS-15, Rev.2
- [16] "Standard reference and other important nuclear data by CSEWG", BNL-NCS-51123 (ENDF-300)
- [17] Carlson A.D., Bhat M.R.: ENDF/B-V cross section measurement standards, BNL-NCS-51619 (ENDF-301)
- [18] JAERI-M-90-099, pag.461-486
- [19] JAERI-M-92-077, pag.453-488
- [20] Belanova T.S., Ignatiuk A.V., Pashchenko A.B., Plajaskin V.I. Handbook on neutron radiative capture cross sections, Energoatomizdat Moskva, 1986
- [21] "Neutron Cross Sections" (Acad.Press) vol.1 part A: Z=1-60 (1981), part B: Z=61-105 (1984)
- [22] IAEA-NDS-64 și Handbook on Nuclear Activation Data, IAEA Technical Report Series No.273, 199-260
- [23] Gryntakis E.M., Kim J.I. Radiochimica Acta 22 (1975),128
- [24] Kort 1981 - INDC(CCP)-185
- [25] Kort 1988 - INDC(CCP)-327
- [26] Koester L. et al. Jour.Atomic Data and Nuclear Data Tables 49 (1991), 65-120
- [27] Rudstam G., Studsvik, Sweden INDC(SWD)-24, 1993
- [28] Rudstam G., Johansson P.I., Tengblad O., Angaard P., Eriksen J., Jour.Atomic Data and Nuclear Data Tables, 53 (1990), 239-320
- [29] Rudstam G., Aleklett K., Shiver L. Jour.Atomic Data and Nuclear Data Tables, 53 (1993), 1-22
- [30] IAEA-NDS-148 (rev.2), 1995
- [31] IAEA-NDS-168 (rev.1), 1994

- [32] Kocherov N.P., McLaughlin P.K. IAEA-NDS-127 și IAEA Technical Report 357 (1993)
- [33] Brenner D.J., Prael R.E. Atomic Data and Nuclear Data Tables 41, no.1 (1989), 71-130
- [34] Cowan J.J. et al. Phys.Rep. 208 (1991), 267-394
- [35] IAEA-NDS-66
- [36] Blokhin A.I., Nasyrova S.M. INDC(CCP)-337, Obninsk, 1991
- [37] Yadernye Konstanty 1992 (3-4), 3-54
- [38] Perkins S.T., Cullen D.E., Chen M.H., Hubbell J.H., Rathkopf J., Scofield J. UCRL-50400, vol.30 (1991)
- [39] Berger M.J., Hubbell J.H. NIST rep.-NBSIR 87-3597 (1987)
- [40] Pashchenko A.B. IAEA-NDS-166
- [41] Tuli J.K. "The evaluated nuclear structure data file ENSDF", BNL-NCS-51655 rev.87 (1987), Procedures Manual for ENSDF BNL-NCS-40503 (1987)
- [42] Burrows T.W. BNL-NCS-52142 (1988)
- [43] Westmeier W., Merklin A. Physikdaten No.29-1 (1985)
- [44] Aleksankin V.G. et al. Energoatomizdat, Moscow, 1989
- [45] Cullen D.E., Chen M.H., Hubbell J.H., Perkins S.T., Plechaty E.F., Rathkopf J.A., Scofield J.H. "Tables and graphs of photon-interaction cross-sections from 10 eV to 100 GeV derived from LLNL Evaluated Photon Data Library (EPDL)", UCRL-50400, vol.6, rev.4, LLNL (1989)
- [46] Perkins S.T., Cullen D.E., Seltzer S.M. "Tables and graphs of electron-interaction cross-sections from 10 eV to 100 GeV derived from the LLNL Evaluated Electron Data Library (EEDL), Z=1-100", vol.31, LLNL (1991)

6. NOTIUNI DE BAZA PRIVIND FORMATUL ENDF

Sistemul ENDF s-a dezvoltat din necesitatea de stocare și accesare a datelor nucleare evaluate ce se folosesc în tehnologia nucleară. Aceasta impune mai multe lucruri cu privire la sistemul respectiv cum ar fi alegerea materialelor ce se includ, datele folosite, formatele folosite și testările cerute înainte ca baza de date să fie pusă la dispoziția utilizatorilor.

Scopul principal este ca fiecare evaluare să fie completă pentru aplicație. Dacă o dată cerută nu este disponibilă pentru o reacție particulară atunci evaluatorul va înlocui această dată folosind sistematici sau modele nucleare.

Sistemul ENDF este divizat logic în *formate și proceduri*.

Formatele descriu modul cum sunt așezate și organizate datele din bibliotecă. Se furnizează de asemenea formulele analitice (algoritmii) pentru reconstrucția unor mărimi fizice (necesare în aplicații, cum ar fi de exemplu secțiuni eficiente din zona rezonantă, distribuții unghiulare etc.) din parametrii ce sunt cuprinși în bibliotecă.

La ora actuală formatul adoptat de comunitatea internațională a fizicienilor este ENDF-6 [1].

Procedurile reprezintă reguli mai restrictive care specifică ce tipuri de date trebuie incluse într-un segment precizat al bibliotecii, ce format poate fi folosit în cazuri particulare etc. Procedurile sunt în general impuse de o anumită organizație a fizicienilor nucleariști; de exemplu CSEWG (Cross Sections Evaluation Working Group, vezi capitolul 1) "patronează" biblioteca ENDF/B-VI. Firește alte organizații pot folosi proceduri diferite dar în acest caz există riscul ca bibliotecile respectivelor organizații să nu poată fi prelucrate cu codurile de procesare existente. Este și motivul pentru care centrele majore de date nucleare au adoptat toate aceleași proceduri (cele CSEWG).

Filosofia formatului ENDF se referă la date nucleare evaluate. Parametrizarea și "reducția" datelor în formă tabelară produce un set de date evaluate. Dacă există și o descriere scrisă a modului de preparare al setului *unic* de date evaluate din sursele existente (date de bază), atunci setul respectiv de date se referă la ceea ce se numește o *evaluare documentată*.

Biblioteca ENDF se prezintă sub două forme (variante) ce sunt codificate A și B.

Baza de date ENDF/A cuprinde seturi de date ce pot fi atât complete cât și parțiale (de exemplu secțiunea de fisieune a izotopului Pu-242 este dată pentru energii ale neutronilor incidenți între 0.01 MeV și 6 MeV în loc să fie dată pentru tot domeniul energetic cerut de ENDF adică 10^{-5} eV - 20 MeV). Mai mult, această bibliotecă poate conține mai multe evaluări ale aceleiași mărimi fizice pentru un anumit nucleu (de exemplu secțiunea de fisieune totală a Pu-242 se prezintă sub forma a două seturi de date: un set reprezintă rezultatul evaluării pe baza datelor experimentale existente în EXFOR iar celălalt set reprezintă rezultatul calculului pe bază de modele teoretice).

Biblioteca ENDF/B conține numai un singur set de date evaluate recomandat pentru un material și datele cu privire la un material trebuie să fie cât mai complete.

De fapt variantele ENDF/A și ENDF/B sunt la fel, numai că procedurile pentru varianta B sunt mult mai restrictive. În biblioteca A se pot adăuga informații în orice moment (documentarea și testarea fiind slabe), pe când în biblioteca B seturile de date sunt introduse sau înlocuite numai după o testare și o revizuire temeinică. Acest lucru permite ca acele date să fie folosite ca *date standard de referință* pe tot parcursul vieții versiunii respective a

bibliotecii. Mai mult în biblioteca A unele categorii de date pot să nu fie în format standard și atunci acestea trebuie procesate cu coduri speciale modificate.

Alegerea datelor evaluate ce intră în biblioteci majore ca ENDF/B sau JEF se face de către organizațiile centrelor majore de date nucleare dintre seturile de date evaluate supuse revizuirii. Alegerea este făcută ținând cont de prioritățile cerințelor pentru aplicații (a se vedea WRENDA) urmărind conformitatea evaluării cu formatele, procedurile și performanțele în urma testărilor. Astfel, un set de date evaluate pentru un material dat poate fi schimbat dacă:

- au devenit disponibile mai multe rezultate experimentale semnificative
- testele integrale arată că respectivele date dau rezultate eronate
- cerințele utilizatorilor arată că este nevoie de mai multă acuratețe și o mai bună reprezentare a setului de date pentru un material dat.

Introducerea noilor seturi de date evaluate generează o altă versiunea a respectivei baze de date.

Bibliotecile de date evaluate de tip ENDF (ENDF/B, JEF, JENDL etc.) sunt realizate de către colective de evaluatori coordonați de organizațiile centrelor majore de date nucleare. Evaluatorii pornesc de la datele experimentale din EXFOR/CSISRS pentru un material dat, precum și de la o serie de date suplimentare ca spini, parități, scheme de nivele (din ENSDF sau din baze derivate ca NUDAT etc.). Aceste date sunt analizate (proceduri matematice, statistice recunoscute de comunitatea mondială a cercetătorilor) iar rezultatele analizelor sunt combinate și corelate cu predicțiile calculelor pe bază de modele. Seturile de date recomandate de evaluatori sunt apoi codificate de aceștia în formatul ENDF și încorporate în biblioteci. Există și sisteme computerizate ce automatizează partea de rutină, mare consumatoare de timp, din munca evaluatorilor (mai ales grafice [2], [3]). După ce datele au fost procesate în formatul ENDF, acestea sunt convertite (folosind pachetul de coduri de procesare) în forme potrivite pentru a putea fi testate în aplicații.

Testarea evaluărilor, înainte ca seturile de date să fie furnizate ca părți ale bibliotecilor, cuprinde două faze.

Faza 1: se utilizează pachetul de coduri utilitare ENDF pentru verificarea corectitudinii formatului și procedurilor (se verifică legile de conservare, închiderea sumelor la secțiunile eficiente, concordanța unor date prezente în diversele segmente ale bazei de date etc.)

Faza 2: constă din intercomparări și "benchmark" pentru a verifica dacă evaluarea respectivă este aplicabilă; această parte este cea mai importantă și "critică" pentru sistemul ENDF.

Documentarea cu privire la filosofia formatului și procedurilor ENDF este cuprinsă într-un set de rapoarte publicate ce centrul de date nucleare NNDC-Brookhaven [4] - [11].

6.1 DESCRIEREA GENERALA A SISTEMULUI ENDF

Fișierele biblioteciiilor evaluate sunt puse într-o formă accesabilă pe computer ca fișiere de intrare (input) pentru codurile de procesare a datelor evaluate în vederea utilizării lor în toate aplicațiile. Se prezintă în formă ASCII sau binară. Datele sunt pe 80 câmpuri și se respectă principiile FORTRAN (toți întregii încep cu I,J,K,L,M,N iar parametrii ce sunt notați cu celelalte litere reprezintă numere reale). În anexa A din [1] este lista completă a parametrilor definiți în formatul ENDF-6.

6.1.1 Organizarea bibliotecii

Fiecare evaluare este identificată printr-un set de parametrii "chei" organizați în următoarea ierarhie:

-biblioteca: numele colecției de date (ENDF/B, JEF etc.) cu simbolul NLIB

-versiunea: număr roman care arată actualizarea periodică (exemplu ENDF/B-VI) cu simbolul NVER

-formatul: este specificat de parametrul NFOR (citibil de codul de procesare)

-revizia: număr arab după versiune, fără simbol (exemplu ENDF/B-V.2 arată că este vorba de revizia 2, JEF-2.2 revizia 2 la versiunea 2 a JEF)

-subbiblioteca: toate datele evaluate cu privire la o anumită particulă incidentă formează o subbibliotecă. Proiectilul se identifică prin Z și A, cu masa atomică dată în unități de masă a neutronului. Dacă proiectilul e foton (reacții foto-atomice, foto-nucleare) atunci $Z=A=0$. Subbiblioteca este identificată cu parametrul NSUB.

-materialul: este ținta în subbibliotecile de reacții și nuclidul părinte în subbibliotecile de dezintegrare. Materialele se identifică prin Z, A (masa atomică în unități de masă a neutronului), stare excitată sau izomeră. Fiecare material este asignat cu un număr unic (de la 1 la 9999, format I4) cu simbolul MAT. Incepând cu versiunea VI numerele MAT nu mai sunt în corelare cu Z, A sau cu versiunile anterioare dar MAT este asociat în mod unic cu un anumit material.

-NMOD: fiecare material are un parametru NMOD care indică dacă s-a operat o schimbare a numărului lui MAT la trecerea de la o versiune la alta.

-file: fiecare MAT este divizat în mai multe "file" (fișiere), simbolizate MF, care conțin datele unei clase de informații. De exemplu MF=3 cuprinde secțiuni, MF=4 cuprinde distribuții unghiulare, MF=33 cuprinde covarianțele secțiunilor etc. MF este cuprins între 1 și 99 (format I2).

-secțiune: fiecare MF este divizat în "secțiuni" simbolizate MT. Fiecare MT descrie o reacție particulară sau un tip particular de date auxiliare. De exemplu MT=1 înseamnă secțiune totală, MT=102 înseamnă captură radiativă etc. MT este cuprins între 1 și 999 (format I3). Fiecare secțiune are un număr "mod".

Cu privire la parametrul MAT, la materialele naturale notația este ZZ00 cu Z maxim 98. Pentru izotopi ai unui element, MAT este asignat prin creșterea în pași de 3, permițând astfel asignarea stării fundamentale și a două stări izomere. Pentru Z mai mare sau egal cu 99 (Es, Lw) MAT este 99XX.

În ceea ce privește identificatorul MOD, semnificația lui se poate înțelege din următorul exemplu: evaluatorul X evaluează un set de date pentru U-235 și asignează pentru acesta MAT=278. După verificare și testare, setul de date fiind satisfăcător și adoptat, centrul de date nucleare (de exemplu NNDC, NEA-DB) pune grupul de fișiere sub MAT=9228 în biblioteca disponibilă la utilizatori, ca atare acum MOD=1. Utilizatorul Y primește subbiblioteca cu MAT=9228 de la centrul de date nucleare. Dacă ulterior, la revizia bibliotecii, datele din MAT=9228 au fost revizuite atunci vor primi MOD=2 iar dacă la revizie nu s-au făcut schimbări la datele din MAT=9228 atunci MOD rămâne același chiar dacă biblioteca va primi alt număr de revizie.

Pentru un MAT dat, semnificația fișierelor MF este în funcție de particula incidentă. În continuare prezentăm succint cerințele pentru cele mai importante subbiblioteci. Descrierea completă se află în [1].

Astfel pentru datele referitoare la neutron (ca particulă incidentă) fișierele MF

cuprind:

- MF=1 informații generale
 - MF=2 parametri de rezonanță
 - MF=3 secțiuni eficace (integrate) ale reacțiilor neutronice
 - MF=4 distribuții unghiulare ale particulelor emise
 - MF=5 distribuții energetice ale particulelor emise
 - MF=6 distribuții energetice și unghiulare ale particulelor emise
 - MF=7 date cu privire la împrăștierea neutronilor termici
 - MF=8 date privind randamentele produșilor de fisiune
 - MF=9 multiplicități ale producției de nuclizi radioactivi
 - MF=10 secțiuni de producere a nuclizilor radioactivi
 - MF=12 multiplicități (sau probabilități de tranziție) pentru producția de fotoni
 - MF=13 secțiuni de producere a fotonilor
 - MF=14 distribuții unghiulare ale fotonilor produși
 - MF=15 distribuții energetice ale fotonilor produși
 - MF=23 secțiuni de interacție foto-atomică
 - MF=27 factori de formă atomici sau funcții de împrăștiere pentru interacții foto-atomice
 - MF=30 date de covarianță obținute din covarianța parametrilor și sensibilități
 - MF=31 date de covarianță pentru "nu-bar"
 - MF=32 date de covarianță pentru parametrii de rezonanță (MF=2)
 - MF=33 date de covarianță pentru secțiuni (MF=3)
 - MF=34 date de covarianță pentru distribuții unghiulare (MF=4)
 - MF=35 date de covarianță pentru distribuții energetice (MF=5)
 - MF=39 date de covarianță pentru randamentele radionuclizilor
 - MF=40 date de covarianță pentru secțiunile de producere de radionuclizi
- Au fost retrase din format MF = 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 24, 25, 26

Fiecare subbibliotecă (pentru un MAT) începe obligatoriu cu o secțiune de comentarii și descriere pe scurt a evaluării, această secțiune este scrisă de evaluatori (MF=1, MT=451). Pentru materialele fisionabile tot în MF=1 sunt cuprinse și date cu privire la numărul de neutroni (prompti, întârziati etc.) emiși la fisiune și energii eliberate la fisiune (MT=452, 455, 456 și respectiv 458).

Fișierul MF=2 este de asemenea obligatoriu dat, în unele cazuri el conține doar raza efectivă de împrăștiere pe când în alte cazuri conține setul complet de parametri de rezonanțe rezolvate și/sau nerezolvate.

Fișierul MF=3 este și el prezent întotdeauna în baza de date evaluate. Domeniul energetic cerut pentru acesta este 10^{-5} eV - 20 MeV dar sunt permise și energii peste 20 MeV. Aici sunt prezente secțiuni pentru fiecare reacție neutronică importantă sau sume de secțiuni. Secțiunile fiecărei reacții sunt date sub un MT bine stabilit. Firește pentru materialele ce prezintă rezonanțe în secțiuni, în zona rezonanțelor rezolvate secțiunile elastică, de fisiune și captură sunt suma dintre valorile date în MF=3 și contribuția rezonanță calculată pe baza parametrilor din MF=2.

Distribuțiile pentru neutroni și alte particule emergente sunt date în MF=4, 5 și 6. MF=4 e folosit pentru reacții binare (elastică, inelastice pe nivele discrete), MF=4 și 5 sunt folosite pentru reacții simple în continuum, ce pot fi approximate ca izotropice, cu componentă minimă de preechilibru și în care există numai o singură particulă emisă. MF=6 este destinat

reacțiilor complexe ce necesită corelații energie-unghi. Dacă unul din produșii reacției e radioactiv este necesară prezența fișierului MF=8. Acest fișier indică cum poate fi determinată secțiunea de producere (din MF=3, 6, 9 sau 10) și dă informații minimale asupra dezintegrării ulterioare a produsului. Randamentele pentru produși radioactivi trebuie date explicit în MF=9 sau secțiunile de producere în MF=10. În acest din urmă caz este posibil să se determine randamentul prin împărțirea secțiunilor corespunzătoare din MF=10 la cele din MF=3.

Pentru compatibilitate cu versiunile mai vechi de format ENDF, producția de fotoni și distribuțiile de fotoni emiși sunt cuprinse în MF=12, 13, 14 și 15. Se preferă MF=12 dacă sunt prezente rezonanțe puternice (captură, fisiune). Ori de câte ori este posibil se recomandă ca datele despre fotoni să fie date pentru reacții individuale (MF=12) dacă nu e posibil se acceptă și sume de MT în MF=12 sau 13.

Datele cu privire la produșii de fisiune sunt cuprinse în diferite subbiblioteci în acord cu mecanismul de inducere al fisiunii. De regulă împărțirea se face în fisiune spontană și fisiune indusă de neutroni. Fiecare MAT începe cu descrierea evaluării (MF=1, MT=451), fișierul MF=8 conține două secțiuni MT=454 pentru randamente independente și MT=459 pentru randamente cumulative.

Datele de dezintegrare radioactivă sunt de asemenea grupate într-o subbibliotecă. Fiecare MAT conține două, trei sau patru fișiere. Se începe cu MF=1, MT=451, pentru materiale ce au fisiune spontană trebuie incluse secțiunile ce dau randamentele de producere a neutronilor total, prompti, întârziați (MT=452, 455 și 456) și neapărat spectrele neutronilor întârziați și prompti în MF=5 la MT=455 și 456. Formatul pentru MF=5 este același ca la fisiunea indusă și distribuțiile se consideră izotrope în SL. Următorul fișier dat este MF=8 care conține timpi de înjumătățire, moduri de dezintegrare, energii de dezintegrare și spectre ale radiațiilor. În final trebuie dat MF=35 pentru covarianțele legate de MF=5, covarianțele pentru datele din MF=8 sunt conținute implicit în respectivul fișier.

Subbibliotecile de date foto-nucleare și de particule încărcate sunt grupate împreună în subbiblioteci pe proiectul. Fiecare evaluare începe cu MF=1, MT=451, în cazul particulei care induce fisiune sau foto-fisiune firește MF=1 trebuie să conțină MT=452, 455, 456 și 458. Fișierul MF=2 poate fi omis în întregime. Fișierul MF=3 trebuie să existe iar MF=6 trebuie să conțină explicit randamentele pentru toți produșii inclusiv fotoni. În plus MT=500 trebuie să cuprindă puterea de stopare pentru particule încărcate (în eV x barni). Dacă unii produși descriși în MF=6 sunt radioactivi, atunci subbiblioteca trebuie să includă și MF=8. În final trebuie date MF=30 și 40 pentru descrierea covarianțelor referitoare la reacțiile cu particule încărcate și foto-nucleare.

Nomenclatura reacțiilor MT

Secțiunea totală a unui proces este dată la MT=1. În cazul împrăstierii elastice la reacțiile binare secțiunea elastică este asignată cu MT=2 (cu excepția datelor foto-atomice), pentru proiectil neutron ca secțiune integrată în MF=3 și distribuție unghiulară în MF=4. Pentru particule încărcate, împrăstierea coulombiană face imposibilă definirea unei secțiuni integrate de aceea MF=3, MT=2 conține valoarea "manechin" 1 sau o secțiune "nuclear + interferență" definită de un unghi particular de tăiere. Restul de secțiune diferențială pentru particula împrăștiată este calculată din parametrii dați în MF=6, MT=2.

Cele mai multe reacții sunt binare (o singură particulă emergentă și un nucleu rezidual, eventual fotoni în starea finală). Aceste reacții sunt asociate cu nivele discrete cunoscute și/sau continuum al nucleului rezidual. Numerele MT ce trebuie folosite sunt:

Nivele discrete	Continuum	Discr. + cont.	Particula emisă
50-90	91	4	n
600-648	649	103	p
650-698	699	104	d
700-748	749	105	t
750-798	799	106	He-3
800-848	849	107	α

Firește având pentru împrăștierea elastică asignat $MT=2$ nu trebuie folosit $MT=50$ pentru proiectilul neutron, $MT=600$ pentru proiectilul proton etc. In unele cazuri este dificil de asignat toți fotonii asociați cu o anumită particulă reacțiilor folosite pentru descrierea particulei. In asemenea cazuri, acești fotoni pot fi descriși folosind "sume de MT " în $MF=12, 13$ pentru neutroni sau în $MF=6$ pentru alte proiectile.

Dăm în continuare câteva exemple de asignare a MT -urilor:

$^{242}\text{Pu}(n, n_0)^{242}\text{Pu}$	$MT=2$
$^{238}\text{U}(n, n_1)^{238}\text{U}$	$MT=51$
$^9\text{Be}(\alpha, n_0)^{12}\text{C}$	$MT=50$
$^{240}\text{Pu}(n, n_{\text{cont}})^{240}\text{Pu}$	$MT=91$
$^2\text{H}(d, p_0)^3\text{He}$	$MT=600$
$^6\text{Li}(t, d_0)^7\text{Li}$	$MT=650$
$^6\text{Li}(t, d_1)^7\text{Li}$	$MT=651$

Dacă o reacție are în starea finală numai două până la patru particule, un nucleu rezidual și fotoni iar nucleul rezidual nu se "sparge" ea se numește "reacție multi-particulă simplă" iar nomenclatura MT este de felul: $MT=16$ (particule emise $2n$), $MT=17$ (particule emise $3n$), $MT=22$ (particule emise $n\alpha$) etc. (pentru nomenclatura completă a se consulta [1]). Dacă și nucleul se sparge atunci se introduce un identificator LR sau particula se identifică cu ajutorul informațiilor din $MF=6$.

Reacția de captură radiativă este identificată cu $MT=102$. Nomenclatura MT pentru fisiune este următoarea:

$MT=18$	fisiune totală
$MT=19$	prima șansă (f)
$MT=20$	a doua șansă (nf)
$MT=21$	a treia șansă ($2nf$)
$MT=38$	a patra șansă ($3nf$)
$MT=452$	număr mediu total de neutroni emiși per act de fisiune ($\bar{\nu}_T$)
$MT=455$	număr mediu de neutroni întârziați emiși per act de fisiune ($\bar{\nu}_d$)
$MT=456$	număr mediu de neutroni prompți emiși per act de fisiune ($\bar{\nu}_p$)
$MT=458$	componentele energiei eliberate per act de fisiune

În file 3 se poate da numai secțiunea totală de fisiune sub $MT=18$ sau secțiunile de fisiune pe componente, firește $MT=18$ reprezentând suma secțiunilor de la $MT=19, 20, 21, 38$.

Ori de câte ori este posibil același MT trebuie să descrie particula emisă și fotonii. Acest lucru e posibil pentru fotoni emiși de pe nivelele discrete, fotonii din captura radiativă sau fotoni generați prin calcule de modele. Dacă fotonii nu pot fi asigurați unui anumit nivel se utilizează $MT=4, 103, 104, 105, 106, 107$ (reacții sumate) în $MF=12$ și 13 .

Dacă se dau date pentru secțiuni speciale de producție a anumitor particule atunci se

folosește $MT=201$ (producție de neutroni), $MT=202$ (producție de fotoni) etc., fiecare fiind definit ca sumă a secțiunilor tuturor reacțiilor, cu excepția împrăștierei elastice, care au respectiva particulă în starea finală.

O parte din MT -uri sunt folosite pentru a reprezenta alte date nucleare în afară de secțiuni. De exemplu $MT=251$ reprezintă μ_L (cosinusul mediu al unghiului pentru împrăștiere elastică în SL), $MT=252$ este ξ (decrementul logaritmic mediu pentru împrăștiere elastică) etc.

O serie de secțiuni se pot calcula ca sumă de mai multe secțiuni parțiale. Astfel $MT=1$ reprezintă secțiunea totală a unui proces cu proiectil neutron. Deci $MT=1$ reprezintă suma secțiunilor din $MT=2, 4, 5, 16, 17, 18, 22-37, 41-42, 102, 103-116$. $MT=4$ reprezintă secțiunea totală inelastică deci suma secțiunilor MT între 51 și 91 sau între 50 și 91 dacă particula incidentă nu este neutron. De asemeni $MT=18$ este secțiunea totală de fisiune (sumă a $MT=19, 20, 21, 38$), $MT=3$ reprezintă secțiunea nonelastică și este folosit în conexiune cu producția de fotoni, reprezintă suma următoarelor $MT: 4, 5, 16-18, 22-37, 41-42, 102-116$. $MT=3$ pentru neutroni se poate de asemenea calcula, pentru verificare, ca diferența dintre $MT=1$ (secțiunea totală) și $MT=2$ (secțiunea elastică). Si exemplele pot continua.

Lista completă a tuturor MT -urilor se află în anexa B din [1] sau ca fișier computerizat asociat cu pachetele de coduri de utilizare și procesare ENDF.

Datele furnizate în toate secțiunile MT trebuie să fie în același set de unități astfel: energiile în eV, unghiurile în cosinus, secțiunile eficace în barni, temperaturile în Kelvin, masele în unități ale masei neutronului, distribuțiile unghiulare în probabilitate per unitate de cosinus, distribuțiile energetice în probabilitate per eV, distribuțiile în energie-unghi în probabilitate per cos și eV, timpii de înjumătățire în secunde.

Prima dată nucleară pentru fiecare secțiune este numărul ZA ce se definește ca:

$$ZA = 1000.0 * Z + A$$

unde Z este numărul atomic și A este numărul de masă. Dacă materialul conține mai mulți izotopi cu concentrații semnificative se pune $A=0.0$. Pentru amestecuri, compuși, aliaje, molecule, ZA ia valori speciale (format I2) cuprinse în anexa C din [1].

Un material, proiectil sau un produs de reacție este de asemenea caracterizat printr-o mărime proporțională cu masa sa relativă la cea a neutronului. Aceste mărimi sunt AWR , AWP sau AWI pentru respectiv un material, proiectil sau produs.

De exemplu AWR se definește ca raportul dintre masa materialului (ținta în cele mai multe cazuri) și masa neutronului. Masa neutronului acceptată internațional pentru datele evaluate este: 1.008665 AMU. Cu alte cuvinte toate masele sunt exprimate în "unități neutronice". Pentru materiale ce sunt amestecuri de izotopi se folosește masa mediată pe abundențele izotopice.

Legi de interpolare

Majoritatea datelor de tip ENDF sunt puse sub formă de tabele cu un anume grid și cu precizarea legii (regulii) de interpolare, pentru a putea determina valorile între punctele grilei (aceast lucru fiind firește necesar pentru aplicații). În cadrul procedurilor ENDF sunt permise următoarele legi de interpolare: scheme simple unidimensionale, interpolare Gamow pentru secțiunile de particule încărcate, regulă de interpolare carteziană simplă pentru funcțiile bidimensionale și două scheme necarteziene pentru distribuții bidimensionale.

O funcție $y(x)$ (de exemplu o secțiune eficace $\sigma(E)$ din $MF=3$) este prezentată sub formă tabelară $\{x, y(x)\}$ plus regula de interpolare, firește perechile $\{x, y(x)\}$ fiind date în

ordinea crescătoare a lui x . Domeniul lui x poate fi divizat în NR subdomenii de interpolare; un asemenea subdomeniu de interpolare este definit ca un domeniu al variabilei independente x în care se folosește o lege de interpolare specificată prin valoarea de cod INT. Schemele de interpolare sunt următoarele:

INT=1	y este constant cu x (histogramă)
INT=2	y este liniar în x (lin-lin)
INT=3	y este liniar în $\ln(x)$ (lin-log)
INT=4	$\ln(y)$ este liniar în x (log-lin)
INT=5	$\ln(y)$ este liniar în $\ln(x)$ (log-log)

Codul de interpolare INT=1 implică faptul că funcția e constantă și egală cu valoarea dată la limita inferioară a intervalului.

Dacă funcția prezintă discontinuități (de exemplu în cazul parametrilor de rezonanță) atunci valoarea lui x este repetată în sensul că se dau câte o pereche $\{x,y\}$ pentru fiecare parte a discontinuității.

Regula INT=6, definită pentru secțiunile eficace ale particulelor încărcate, se bazează pe formele limită ale penetrabilităților coulombiene pentru reacții exoterme la energii joase și pentru reacții endoterme lângă prag. Dependența energetică așteptată este de forma:

$$\sigma = \frac{A}{B} \exp[-B(E-E_p)^{-1/2}] \quad (6.1)$$

în care $E_p=0$ pentru reacții exoterme ($Q > 0$) și este egală cu energia cinetică de prag pentru reacții endoterme ($Q < 0$). Această formulă dă o formă concavă a dependenței energetice lângă prag care diferă de comportarea reală a secțiunii. Această expresie poate fi convertită în următoarea schemă de interpolare:

$$B = \frac{\ln \frac{\sigma_2 E_2}{\sigma_1 E_1}}{(E_1 - E_p)^{-1/2} - (E_2 - E_p)^{-1/2}} \quad (6.2)$$

$$A = \exp[B(E_1 - E_p)^{-1/2}] \sigma_1 E_1$$

unde $\{E_1, \sigma_1\}$ și $\{E_2, \sigma_2\}$ sunt două puncte consecutive din tabelul dat în respectivul fișier. Această regulă de interpolare trebuie folosită pentru valori E aproape de E_p .

Structura unei biblioteci ENDF se prezintă în felul următor: fișierul mare conține la început doar o singură linie ce permite identificarea bibliotecii după care urmează subdiviziunea majoră pe materiale (MAT). Fiecare fișier MAT este împărțit în fișiere MF (în ordinea crescătoare a numărului MF) iar fiecare fișier MF este divizat în secțiuni MT (în ordine crescătoare a numărului MT).

6.1.2 Nomenclatura formatului ENDF

S-a încercat utilizarea unor notații consistente bazate pe următoarele reguli:

a) simbolurile ce încep cu I, J, K, L, M, N sunt numere întregi restul se referă la

numere reale

- b) litera I sau un simbol începând cu I se referă la interpolare
- c) literele J, K, L, M, N se folosesc ca indici
- d) un simbol începând cu M este un "număr de control" (exemplu MAT, MF, MT)
- e) un simbol ce începe cu L reprezintă un "număr de test"
- f) un simbol începând cu N se referă la numărătoarea unor mărimi fizice

Toate numerele sunt date pe 11 câmpuri. În modul caracter un număr zecimal este introdus în una din cele două forme:

$$\pm 1.234567 \pm n \qquad \pm 1.23456 \pm nn$$

depinzând de mărimea exponentului. Ambele forme se citesc în FORTRAN cu formatul E11.0. Există o rutină produsă la NNDC care permite output-ul datelor în acest format. Evaluatorii folosesc însă și coduri proprii pentru a pune datele în acest format. Ca observație, dacă evaluările sunt produse folosind numere scrise cu formatul IPE11.5 (adică $\pm 1.2345E \pm nn$), acele numere vor fi standardizate pe 6, 7 digiți dar precizia reală rămâne la nivelul a 5 digiți.

Tipuri de linii în formatul ENDF

Există numai cinci feluri de linii în formatul bibliotecilor ENDF notate: TEXT, CONT, LIST, TAB1, TAB2 [1]. Liniile de tip CONT prezintă șase cazuri: DIR, HEAD, SEND, FEND, MEND, TEND. Liniile de tip TEXT prezintă cazul special TPID. Fiecare linie conține la capăt numerele de control MAT, MF, MT (format: I4, I2, I3) și NS, numerotarea liniei (format I5).

Liniile de tip TEXT apar ca primă linie a bibliotecii sau pentru text (comentarii) în MF=1, MT=451. Informația de text este pe 66 câmpuri (vector Hollerith). Se pot citi de exemplu cu instrucțiunile:

```
READ(lib,10)HL,MAT,MF,MT,NS
10 FORMAT(A66,I4,I2,I3,I5)
```

Liniile de tip CONT sunt de forma:

```
READ(lib,10)C1,C2,L1,L2,N1,N2,MAT,MF,MT,NS
10 FORMAT(2E11.0,4I11,I4,I2,I3,I5)
```

în care parametrii C1, C2, L1, L2, N1, N2 vor depinde de aplicația liniei CONT la fiecare MF. Linia HEAD e prima la o secțiune MT și C1, C2 reprezintă ZA și AWR. Celelalte feluri de linii CONT sunt de forma:

```
0.0 0.0 0 0 0 0/MAT, MF, 0 SEND (sfârșit de MT)
0.0 0.0 0 0 0 0/MAT, 0, 0 FEND (sfârșit de MF)
0.0 0.0 0 0 0 0/ 0, 0, 0 MEND (sfârșit de MAT)
0.0 0.0 0 0 0 0/ -1, 0 0 TEND (sfârșit de bibliotecă)
```

Linia de tip DIR se referă la opis-ul din MF=1, MT=451 și este la fel cu CONT numai că primele două câmpuri sunt libere în modul caracter (22 câmpuri).

Liniile de tip LIST servesc pentru afișarea unei serii de numere B_1, B_2, \dots ; aceste valori sunt date în vectorul $B(N)$ cu NPL elemente:

```

READ(lib,10) C1,C2,L1,L2,NPL,N2,MAT,MF,MT,NS
10 FORMAT(2E11.0,4I11,I4,I2,I3,I5)
READ(lib,20) (B(N),N=1,NPL)
20 FORMAT(6E11.0)

```

Liniile de tip TAB1 folosesc pentru tabelarea funcțiilor unidimensionale în perechi $\{x, y(x)\}$ cu specificarea regulli de interpolare $INT(N)$ pentru fiecare domeniu NR iar NP reprezintă numărul de perechi $X(N), Y(N)$:

```

READ(lib,10) C1,C2,L1,L2,NR,NP,MAT,MF,MT,NS
READ(lib,20) (NBT(N),INT(N),N=1,NR)
READ(lib,30) (X(N),Y(N),N=1,NP)
10 FORMAT(2E11.0,4I11,I4,I2,I3,I5)
20 FORMAT(6I11)
30 FORMAT(6E11.0)

```

Liniile de tip TAB2 servesc pentru a tabela funcțiile bidimensionale $y(x,z)$, se specifică câte valori z se dau și cum se interpolatează între valorile succesive ale lui z . Valorile tabelate ale lui $y_i(x)$ pentru fiecare z_i se dau în linii de tip TAB1 sau LIST urmate de linii de tip TAB2 cu o valoare potrivită a lui z în câmpul lui C2:

```

READ(lib,10) C1,C2,L1,L2,NR,NZ,MAT,MF,MT,NS
READ(lib,20) (NBT(N),INT(N),N=1,NR)
10 FORMAT(2E11.0,4I11,I4,I2,I3,I5)
20 FORMAT(6I11.0)

```

De exemplu liniile de tip TAB2 se folosesc pentru reprezentarea distribuțiilor unghiulare în $MF=4$, aici NZ specifică numărul de energii incidente la care se dau distribuțiile unghiulare iar fiecare distribuție unghiulară este reprezentată ca o LIST de linii de tip TAB1.

6.2 PREZENTAREA SUCCINTA A CATORVA FISIERE MF

Pentru a crea utilizatorilor o imagine asupra conținutului celor mai importante fișiere ale unei biblioteci evaluate de date punctuale, vom prezenta în continuare pe scurt câteva fișiere MF.

6.2.1 Fișierul MF=1

Este prima parte a oricărui set de date evaluate cu privire la un material (MAT). Fișierul MF=1 trebuie să fie dat întotdeauna în subbiblioteca respectivă pentru a putea asigura identificarea subbibliotecii și pentru a putea funcționa codurile utilitare și de procesare ENDF. Acest fișier are obligatoriu secțiunea $MT=451$ care este compusă din două părți. O primă parte ce constituie o documentare pe scurt asupra datelor conținute în respectiva subbibliotecă și un opis al tuturor MF-urilor și MT-urilor conținute în subbiblioteca respectivă (cu precizarea la fiecare a numărului de linii).

Prima parte (text) este o descriere a setului de date evaluate. Aici evaluatorii scriu

informații cu privire la rezultatele experimentale semnificative folosite în procesul de evaluare și descriu pe scurt modelele teoretice utilizate. Evaluatorii precizează procedurile de evaluare, dau un scurt istoric al activității de evaluare, limitele importante ale setului de date evaluate, incertitudinile estimate și covarianțele, tot ce este de folos utilizatorilor ca să înțeleagă cum să folosească datele în aplicații. Tot aici sunt explicate MT-urile pentru ca utilizatorii să poată identifica ușor reacția și sunt trecute referințe bibliografice.

Primele trei linii Hollerith ale secțiunii MT=451 trebuie să conțină o prezentare standardizată a informațiilor despre material, proiectil, evaluatori și statutul modificării. De exemplu: ZA și AWR; dacă se dă sau nu MF=2 (LRP=0 înseamnă că se dă numai raza efectivă iar LRP=1 arată că MF=2 conține parametri de rezonanță). Se precizează dacă materialul este fisionabil (LFI=1) sau nu (LFI=0). Urmează identificatorii legați de bibliotecă, versiune, format etc. Se dau informații despre nucleul țintă, dacă este în stare fundamentală sau excitată (parametrul ELIS), dacă este stabil sau nu (STA=0 sau 1), dacă este stare izomeră etc. Se mai precizează temperatura țintei (TEMP=0 pentru evaluări primare și diferită de zero pentru efect Doppler).

Pentru subbiblioteci identificatorii sunt prezentați în lista următoare [1]:

NSUB	IPART	ITYPE	Numele subbibliotecii
0	0	0	date fotonucleare
1	0	1	produși de fisiune foto-indusă
3	0	3	date de interacție fotoatomică
4	0	4	date de dezintegrare radioactivă
5	0	5	produși de fisiune indusă
10	1	0	date de reacții neutronice
11	1	1	produși de fisiune indusă de neutroni
12	1	2	date de împrăștiere de neutroni termici
10010	1001	0	date de reacții protonice
10011	1001	1	produsi de fisiune indusă de protoni
10020	1002	0	date de reacții deuteronice
...			
20040	2004	0	date de reacții cu proiectil α

Dacă setul de date evaluate se referă la un material fisionabil atunci obligatoriu MF=1 trebuie să conțină și următoarele secțiuni MT:

MT=452 $\bar{\nu}$ numărul mediu total de neutroni emiși per act de fisiune (atât spontană cât și indusă, fiecare în subbiblioteca desemnată). $\bar{\nu}$ poate fi tabelat în două feluri, fie ca perechi {E, $\bar{\nu}(E)$ } fie ca dezvoltare:

$$\bar{\nu}(E) = \sum_{n=1}^{N_c} C_n E^{n-1} \quad (6.3)$$

acest din urmă caz numai dacă nu este dat MT=455 și MT=456 în MF=1.

MT=455 $\bar{\nu}_d$ numărul mediu de neutroni întârziți per act de fisiune (indusă sau spontană). Valorile din această secțiune trebuie corelate cu datele de neutroni întârziți din fișierul MF=5. $\bar{\nu}_d$ se dă ca sumă a numărului de neutroni emiși de fiecare din familiile precursorare (NNF reprezintă numărul de familii precursorare):

$$\bar{\nu}_d(E) = \sum_{i=1}^{NNF} \bar{\nu}_i(E) \quad (6.4)$$

Fracțiunea din total a familiei precursorare este dată în MF=5 și este definită ca:

$$p_i(E) = \frac{\bar{\nu}_i(E)}{\bar{\nu}_d(E)} \quad (6.5)$$

MT=456 $\bar{\nu}_p$, numărul de neutroni prompti emiși per act de fisiune. Pentru fisiune spontană se dă fără dependență de energie. Pentru fisiune indusă se dă în funcție de energie la fel ca și numărul total de neutroni din MT=452.

MT=458 componentele energiei eliberate în fisiune. Energia eliberată în fisiune este transportată de fragmentele de fisiune, de neutroni, de radiațiile γ , β și antineutrini. Termenul de fragmente folosit în nomenclatura ENDF [1] include toate particulele încărcate ce sunt emise prompt, toate acestea au viață scurtă și se consideră că pierd energia local. Neutronii și radiațiile γ transportă energia și de aceea este nevoie să fie considerate separat. În plus există neutronii și radiațiile γ întârziate care la rândul lor transportă energie și aceasta este nevoie să fie cunoscută ca și rata la care e eliberată de nuclee metastabile sau precursori.

Energia antineutrinilor este pierdută complet în majoritatea aplicațiilor dar este parte din Q. În ceea ce privește radiațiile β , acestea depozitează energia local ca și fragmentele și energia lor e inclusă cu energia fragmentelor.

În MT=458 se dau următoarele componente ale energiei:

ET = suma tuturor energiilor parțiale care urmează. Această energie este cea totală eliberată la fisiune și este egală cu Q.

EFR = energia cinetică a fragmentelor

ENP = energia cinetică a neutronilor prompti de fisiune

END = energia cinetică a neutronilor întârziați de fisiune

EGP = energia radiațiilor γ prompte

EGD = energia radiațiilor γ întârziate

EB = energia totală eliberată de radiațiile β întârziate

ENU = energia transportată de antineutrini

Energia ER = ET - ENU este pseudo-Q dată în MF=3 la MT=18.

Toate aceste energii sunt date sub forma:

$$E_i(0) = E_i(\text{EINC}) + \delta E_i$$

în care E_i este una din componentele energiei eliberate, $E_i(0)$ este valoarea lui E_i la EINC=0, $E_i(\text{EINC})$ este valoarea lui E_i la energia incidentă EINC. EINC=0 reprezintă un artificiu prin care este posibil să se acopere valorile la orice EINC. δE_i sunt definiți astfel:

$$\delta E_T = -(1.057 * \text{EINC} - 8.07 * (\nu(\text{EINC}) - \nu(0)))$$

$$\delta E_B = 0.075 * \text{EINC}$$

$$\delta E_{GD} = 0.075 * \text{EINC}$$

$$\delta E_{NU} = 0.100 * \text{EINC}$$

$$\delta EFR = 0$$

$$\delta ENP = -(1.307 * EINC - 8.07 * (\nu(EINC) - \nu(0)))$$

$$\delta EGP = 0$$

În ceea ce privește formatul pentru MT=458, acesta nu conține subsecțiuni ci doar LIST:

```

ZA,   AWR,   0,   0,   0,   0/MAT 1 458           (HEAD)
0.0,  0.0,  0   0   18,  9/MAT 1 458
EFR,  ΔEFR,  ENP,  ΔENP,  END,  ΔEND/MAT 1 458
EGP,  ΔEGP,  EGD,  ΔEGD,  EB,   ΔEB /MAT 1 458 (LIST)
ENU,  ΔENU,  ER,   ΔER,   ET,   ΔET /MAT 1 458
0.0,  0.0,  0   0   0,   0/MAT 1 0           (SEND)

```

Ca observații, trebuie urmărită consistența datelor cu privire la energia din MT=458 cu cele din MF=3 (ER = pseudo-Q pentru fisiune în MT=18) și din MF=5 și 15. De asemenea în MF=5 spectrul dat la MT=18 este cel al neutronilor prompti iar la MT=455 din MF=5 este spectrul neutronilor întârziați, aceste date trebuie să fie în acord cu cele din MF=1. Energia eliberată din (n,γ) trebuie să fie egală cu valoarea Q din MF=3, MT=102. Radiațiile γ de captură pot fi prompte sau întârziate dacă e implicat și un factor de ramificare de stare izomeră. În calculele de căldură ceea ce contează este ER și energia eliberată în toate celelalte reacții.

În figura 6.1 este prezentat începutul bibliotecii ENDF/B-VI, subbiblioteca 10 pentru MAT=9446 (Pu-242).

6.2.2 Fișierul MF=3

Este totdeauna dat în orice set de date evaluate. Conține secțiunile integrate date tabelar sub formă de perechi {E, σ(E)} cu regula de interpolare INT și în ordinea crescătoare a energiei și a secțiunii MT.

Aici se dau, pe lângă ZA și AWR, următoarele mărimi fizice:

- QM definită în eV ca diferență de mase astfel:

pentru o reacție: a + A --> b + c + ... + B cu nucleul rezidual B în stare fundamentală:

$$QM = [(m_a + m_A) - (m_b + m_c + \dots + m_B)] \cdot 9.315016 \cdot 10^8$$

cu masele în amu.

- QI este căldura de reacție pentru cea mai joasă stare definită de MT-ul respectiv într-o reacție binară. Pentru reacții fără stări intermediare QI=QM, pentru reacții cu prag QI este pragul. La secțiunile reacțiilor fără prag se începe de la valoarea energiei de 10^5 eV iar pentru cele cu prag se începe de la valoarea energiei de prag.

Ca proceduri, secțiunile trebuie date pe întreg domeniul energetic cerut de ENDF și anume 10^5 eV - 20 MeV, pentru reacțiile fără prag este obligatoriu să se dea valoarea secțiunii eficace la energia termică standard 0.0253 eV. Evaluatorul nu trebuie să dea mai multe puncte decât necesar, cu stabilirea regulei adecvate de interpolare. Numărul maxim de puncte de energie admis este 10000.

Alegerea datelor ce se includ în MF=3 precum și corelarea fișierului MF=3 cu alte MF-uri depinde de scopul aplicațiilor, existând două tipuri de evaluări: de transport și de reacție.

Evaluarea de reacție va conține obligatoriu MF=1,2 și 3, uneori și MF=32 și/sau 33. Fișierul MF=2 trebuie să conțină parametrii de rezonanță.

Evaluarea de transport la energii joase va conține obligatoriu MF=1, 2, 3, 4 și 5. Domeniul de energii acoperit (în special pentru MF=3 și 4) este 6 - 10 MeV. Ca fișiere mai poate conține și MF=8, 9, 10, 12, 13, 14, 15.

Evaluarea de transport la energii mari trebuie să conțină obligatoriu date până la 20 MeV și producția de fotoni, adică fișierele MF=1, 2, 3, 4, 5, 6, 12, 13, 14, 15. Evaluările de transport de acest fel sunt în prezent cele mai solicitate (pentru aplicații de reactori rapizi, fuziune, protecție, medicale etc.)

La MT=1 este dată secțiunea totală a procesului, este importantă pentru calcule de protecție. Regulile de verificare constau în închiderea lui MT=1 ca sumă de MT=2 (elastic) și MT=3 (nonelastic).

La MT=2 se dă secțiunea elastică. Dacă aceasta nu este cunoscută, evaluatorii o pot da din diferența dintre MT=1 și MT=3 dar procedura nu este recomandată deoarece datele experimentale ce se obțin din integrarea distribuțiilor unghiulare măsurate pot include în elastic și contribuții inelastice de la nivelele joase.

MT=3 se dă numai dacă există corelație cu multiplicitățile producției de fotoni din MF=12, 13, altfel această secțiune poate lipsi.

În ceea ce privește MT=4 și MT=51-91, se recomandă să se dea cât mai multe secțiuni de împrăștiere pe stări discrete, atâtea câte nivele sunt cunoscute în schema de nivele (vezi ENSDF), abia apoi se apelează la continuum de nivele. La nucleele permanent deformate (cu starea fundamentală 0^+) contribuția mecanismului interacției directe trebuie extinsă și peste 20 MeV.

Datele din MT=4, 51-91 trebuie corelate cu producția de fotoni din MF=12, 13 și cu distribuțiile unghiulare din MF=4 ori 6.

Secțiunile de fisiune se dau sub MT=18 și MT=19, 20, 21 și 38 cu verificarea regulii de sumă, MT=18 reprezentând suma celorlalte. Valoarea lui Q pentru aceste secțiuni MT trebuie să fie în concordanță cu valorile din MF=1, MT=458.

Emisia de particule încărcate din nivele discrete și continuum se dă la MT=600-849.

Datele din MF=3 trebuie corelate și cu datele din MF=2. Astfel parametrii de rezonanță ca și secțiunile și factorii de autoprotecție calculați din acești parametri pentru MT=2, MT=18 și MT=102 trebuie să fie combinați cu valorile respectivelor secțiuni din MF=3. Contribuția rezonanțelor trebuie de asemenea inclusă într-o serie de MT-uri sumă de secțiuni ca MT=1,3 ori 5.

În figura 6.2 este prezentată o parte din fișierul MF=3 pentru secțiunea totală (MT=1) a U-235 (MAT=9228) din biblioteca ENDF/B-VI.

6.2.3 Fișierul MF=4

Conține de regulă distribuțiile unghiulare ale neutronilor emiși în împrăștierea elastică și în împrăștierea inelastice pe nivelele discrete. Pentru neutronii din $(n,n'$ cont.), $(n,2n)$ etc. distribuția unghiulară se dă sumată pe toate energiile. Acest fișier mai poate conține și distribuțiile unghiulare ale particulelor încărcate emise în reacții binare.

Prezența fișierului MF=4 este recomandată dar nu obligatorie într-un set de date evaluate, în sensul că o parte din codurile de utilitare și procesare ENDF pot funcționa și fără acest fișier.

Distribuțiile unghiulare ale particulelor emise, pentru fiecare MT, se dau în ordinea crescătoare a energiei incidente și obligatoriu trebuie să fie prezente aceleași MT ca și în

fișierul MF=3.

Distribuția unghiulară se consideră în ENDF ca:

$$\sigma(\mu, E) = \frac{\sigma_s(E)}{2\pi} f(\mu, E) \quad (6.6)$$

$$\int_{-1}^1 f(\mu, E) d\mu = 1$$

unde $\mu = \cos\Theta$ și $\sigma_s(E)$ este secțiunea integrată din MF=3.

În general se consideră că distribuția unghiulară a particulelor împrăștiate are simetrie azimutală și atunci se poate folosi dezvoltarea în polinoame Legendre:

$$f(\mu, E) = \sum_{l=0}^{NL} \frac{2l+1}{2} a_l(E) P_l(\mu) \quad (6.7)$$

unde a_l reprezintă coeficienții dezvoltării și $a_0 = 1$.

Distribuția unghiulară poate fi dată în doua reprezentări, în SCM sau SL. În prima metodă se dă tabelată $f(\mu, E)$ în funcție de E . În a doua variantă se reprezintă coeficienții dezvoltării în polinoame Legendre în funcție de E .

Este evident că secțiunea diferențială absolută se poate calcula rapid combinând datele din MF=3 ($\sigma_s(E)$) și MF=4 ($a_l(E)$ sau $f(\mu, E)$).

În fișierul MF=4 se poate da și matricea de transformare pentru a trece coeficienții Legendre din SCM în SL și invers, pentru împrăștierea elastică:

$$a_l^{SL}(E) = \sum_{m=0}^{NM} U_{lm} a_m^{CM}(E) \quad (6.8)$$

$$a_l^{CM}(E) = \sum_{m=0}^{NM} U_{lm}^{-1} a_m^{SL}(E)$$

Matricile de transformare pentru reacții nonelastice nu sunt independente de energie și nu se dau în MF=4.

De regulă distribuțiile unghiulare se dau în SCM dar dacă sunt prezente și alte reacții ca fisiune, continuum inelastic atunci se recomandă SL.

În MF=4 se dau distribuțiile unghiulare pentru un număr minim de energii incidente care să asigure descrierea cu acuratețe a variației cu energia a distribuțiilor. Trebuie dați de asemenea suficienți coeficienți Legendre pentru a reprezenta distribuția unghiulară la o energie particulară și să se verifice că distribuția interpolată este peste tot pozitivă. Deci NL crește cu E dar nu trebuie să depășească 20.

Revenim cu observația că trebuie să existe consistență între distribuțiile unghiulare date pentru canalele elastic și inelastice. Dacă distribuția unghiulară elastică a fost evaluată din date experimentale, aceasta poate conține contribuțiile inelastice ale nivelelor joase și pe de altă parte din punct de vedere al mecanismului conține contribuție a interacției directe. Aceste efecte trebuie consistent extrase atât din secțiunea diferențială din MF=4 cât și din

cea integrată din MF=3. Efectul e cu atât mai important cu cât avem contribuție mai mare a interacției directe, ceea ce face ca distribuția să nu mai fie simetrică față de 90° ci să fie favorizată împrăștierea înainte.

În cazul distribuțiilor unghiulare neutronice trebuie să se respecte inegalitatea Wick (limita teoremei optice) care constituie altă regulă de verificare a consistenței datelor din MF=4 corelate cu MF=3:

$$\sigma(0^\circ) \geq 3.0560 \cdot 10^{-8} E_0 \frac{AWR^2}{(1 + AWR)^2} \sigma_T^2 \quad (6.9)$$

cu E_0 în eV și σ_T în barni.

Distribuțiile unghiulare pentru toate reacțiile ce produc neutroni cum ar fi $(n, n'\alpha)$, fisiune, $(n, 2n)$ etc. se dau în MF=4 ori MF=6. Fișierul MF=4 se folosește numai dacă distribuțiile sunt izotrope și fără componente de preechilibru, în acest caz se recomandă SL. Distribuții unghiulare ale particulelor încărcate rezultate din reacții binare se dau tot în MF=4 la seria de MT cu 600, pentru continuum se recomandă SL. În cazul reacțiilor complexe în loc de fișierul MF=4 se utilizează MF=6.

În figura 6.3 este dat ca exemplu un fragment din fișierul MF=4 al bibliotecii JEF-2.2 pentru Pu-242 (MAT=9446) și anume coeficienții a_i ai dezvoltării în polinoame Legendre pentru împrăștiere elastică.

6.2.4 Fișierul MF=5

Acest fișier conține distribuții energetice ale particulelor secundare exprimate ca distribuții normalizate. Acest fișier este folosit pentru particulă incidentă neutron și pentru fisiune spontană.

Datele din MF=5 se referă la MT=91 (neutronii din inelastic continuu), MT=18 (neutroni prompți din fisiune totală), MT=16 (neutroni din $(n, 2n)$), MT=17 (neutroni din $(n, 3n)$) și MT=455 (neutroni întârziați din fisiune). Poate conține și distribuții energetice ale particulelor secundare încărcate din reacții din continuum dacă la ieșire este o singură particulă încărcată (MT=649, 699 etc.).

Ca procedură distribuția energetică $p(E \rightarrow E')$, cu E' energia particulei secundare în SL, este normalizată:

$$\int_0^{E'_{max}} p(E \rightarrow E') dE' = 1 \quad (6.10)$$

Diferitele secțiuni se obțin din expresia [1]:

$$\frac{d\sigma(E \rightarrow E')}{dE'} = m \sigma(E) p(E \rightarrow E') \quad (6.11)$$

în care $\sigma(E)$ este cea din MF=3 iar m este multiplicitatea neutronului (de exemplu $m=2$ pentru $(n, 2n)$).

Distribuția $p(E \rightarrow E')$ poate fi împărțită în distribuții parțiale $f_k(E \rightarrow E')$ ce pot fi descrise prin diferite reprezentări analitice:

$$p(E \rightarrow E') = \sum_{k=1}^{NK} p_k(E) f_k(E \rightarrow E') \quad (6.12)$$

$$\sum_{k=1}^{NK} p_k(E) = 1$$

Distribuțiile parțiale pot avea diferite forme analitice numite legi de distribuție ale particulelor secundare și care sunt identificate cu numărul LF. În formatul ENDF sunt permise următoarele legi de distribuție:

- LF=1 funcție arbitrară tabelată
- LF=5 spectru general de evaporare
- LF=7 spectru Maxwell:

$$f(E \rightarrow E') = \frac{2}{\sqrt{\pi} \theta^{3/2}} \sqrt{E'} e^{-\frac{E'}{\theta(E)}} \quad (6.13)$$

LF=9 spectru de evaporare:

$$f(E, E') = \frac{E'}{\theta^2} e^{-\frac{E'}{\theta(E)}} \quad (6.14)$$

LF=11 spectru Watt:

$$f(E, E') = \frac{e^{\frac{E'}{T_c}}}{\sqrt{\pi} (E_f T_w)^{1/2}} e^{-\frac{E'}{T_c}} \operatorname{sh} \frac{2\sqrt{E_f E}}{T_w} \quad (6.15)$$

cu E_f : energia medie per nucleon la un fragment de fisiune.

LF=12 spectru de tip Madland-Nix:

$$E_f^{\text{tot}} = E_L + E_H \quad \frac{E_L}{E_H} = \frac{A_H}{A_L} \quad (6.16)$$

E_L și E_H sunt energiile cinetice ale fragmentului ușor și respectiv greu iar A_L și A_H reprezintă masele fragmentului ușor și respectiv greu.

Energia cinetică medie per nucleon pentru fragmentul ușor și greu este:

$$E_f^L = \frac{E_L}{\langle A_L \rangle} = \frac{\langle A_H \rangle}{\langle A_L \rangle} \frac{\langle E_f^{tot} \rangle}{A} \quad (6.17)$$

$$E_f^H = \frac{E_H}{\langle A_H \rangle} = \frac{\langle A_L \rangle}{\langle A_H \rangle} \frac{\langle E_f^{tot} \rangle}{A}$$

unde notația $\langle \dots \rangle$ se referă la valorile medii.

Temperatura Terrel ($E^* = aT^2$) de definește ca:

$$T_m = \sqrt{\frac{\langle E_r \rangle + B_n + E - \langle E_f^{tot} \rangle}{a}} \quad (6.18)$$

unde $\langle E_r \rangle$ este valoarea energiei eliberate la fisiune (a se vedea MF=1, MT=458), B_n este energia de separare a neutronului, E energia incidentă, a parametrul densității de nivele.

Spectrul corespunzător pentru un fragment:

$$N(E', E_f) = \frac{1}{3\sqrt{E_f T_m}} [u_2^{3/2} E_1(u_2) - u_1^{3/2} E_1(u_1) + \gamma(\frac{3}{2}, u_2) - \gamma(\frac{3}{2}, u_1)]$$

$$u_{1,2} = \frac{(\sqrt{E'} \mp \sqrt{E_f})^2}{T_m} \quad (6.19)$$

$$E_1(u) = \int_u^\infty \frac{e^{-x}}{x} dx$$

$$\gamma(a, x) = \int_0^x z^{a-1} e^{-z} dz$$

Spectrul de fisiune:

$$N(E^*) = \frac{1}{2} [N(E', E_f^L) + N(E', E_f^H)] \quad (6.20)$$

În cazul MF= 5 se dau parametrii ce caracterizează spectrul (de exemplu temperatura Maxwell pentru LF=7, iar pentru LF=12 se dau energiile cinetice ale fragmentului ușor și greu precum și temperatura T_m în funcție de energia incidentă).

Cu ajutorul acestor parametri coduriile de procesare construiesc respectivele spectre

energetice.

În figura 6.4 este dat ca exemplu fișierul MF=5 al bibliotecii JEF 2.2 pentru Pu-242.

6.2.5 Fișierul MF=12

Este destinat datelor cu privire la producția de fotoni. Fie că se dau în acest fișier multiplicități, fie că se dau probabilități de tranziție, este nevoie de coduri de procesare care folosesc și secțiunile din MF=2 și 3 pentru a genera secțiunile absolute de producție de fotoni.

Există deci două opțiuni pentru datele din acest fișier și anume:

Opțiunea L0=1 Multiplicități: acestea pot fi folosite pentru a obține o secțiune eficace pentru fotoni din spectrul discret sau pentru secțiuni integrate ale spectrului fonic continuu. Numerele MT în acest caz au semnificația unei secțiuni (din MF=2 ori 3) la care se referă respectiva multiplicitate.

Dependența de energia neutronilor incidenți este reprezentată printr-un tabel de perechi $\{E, y_k(E)\}$, unde y este multiplicitatea (yield) pentru un foton particular k discret sau continuu și pot exista NK de asemenea seturi de date. Ca atare structura unei secțiuni MT în opțiunea L0=1 este de forma:

```

ZA, AWR, L0=1, 0, NK, 0/MAT 12 MT      HEAD
0.0, 0.0, 0, 0, NR, NP/Eint/Y(E)      TAB1
  < subsecțiune k=1 >
  < subsecțiune k=2 >
      ...
  < subsecțiune k=NK >
0.0, 0.0, 0, 0, 0, 0/MAT 12 0        SEND

```

iar pentru fiecare subsecțiune structura este de forma:

$$EG_k, ES_k, LP, LF, NR, NP/Eint/y_k(E)$$

în care ES_k reprezintă energia nivelului din care ia naștere fotonul (dacă nu se cunoaște sau e vorba de foton din continuum se pune 0.0). EG_k reprezintă energia fotonului k pentru $LP=0$ sau 1 și energia de legătură pentru $LP=2$. LF este un indicator care specifică dacă este vorba de un foton discret sau de reprezentare sub formă de funcție normalizată tabelată. NR și NP au aceeași semnificație ca în toate celelalte MF (număr domenii de interpolare și respectiv număr de puncte).

Reprezentarea în opțiunea multiplicități este recomandată pentru fotonii din (n,γ) firește dacă $MT=102$ este dat în $MF=2$ și/sau $MF=3$.

Opțiunea L0=2 Probabilități de tranziție γ : pentru scheme de dezintegrare cunoscute, folosirea opțiunii de probabilități de tranziție este o metodă concisă pentru fotonii ce rezultă din procesele $(n, x\gamma)$. În $MF=12$ la această opțiune se dă schema de dezintegrare a nucleului rezidual pentru o reacție particulară (definită de MT) și această informație împreună cu secțiunile de populare (excitare) ale nivelelor discrete date în $MF=3$ este folosită de codurile de procesare ENDF pentru a calcula secțiunile eficace de producție a fotonilor discreți.

Singurele date în această opțiune sunt energia nivelelor discrete, probabilitatea de tranziție și dacă este cazul probabilitatea de emisie condiționată.

Structura fișierului se prezintă în felul următor:

```
ZA, AWR, L0=2, LG, NS, 0/MAT 12 MT      HEAD
ESNS, 0.0, LP, 0, (LG+1)*NS, NT/Bi      LIST
0.0, 0.0, 0, 0, 0, 0, 0?/ MAT 12 0      SEND
```

LG=1 specifică faptul că există numai tranziții γ iar LG=2 faptul că există competiție cu conversia internă. NS reprezintă numărul de nivele sub cel prezent, incluzând starea fundamentală (prezentul nivel este astfel unic determinat prin MT și energia lui). NT este numărul de tranziții γ pentru care se dau probabilitățile de tranziție (firește $NT \leq NS$). ES_i reprezintă energia nivelului i ($i=0, 1, 2, \dots, NS$). B_i reprezintă după caz (specificat de LG) dublete $\{ES_i, T_i\}$ sau triplete $\{ES_i, T_i, GP_i\}$ unde T_i este probabilitatea de tranziție γ iar GP_i este probabilitatea de emisie condiționată (competiția cu conversia internă).

Fiecare nivel poate fi identificat de numărul său NS. Astfel energia fotonului rezultat din tranziția $NS \rightarrow i$ este $E_\gamma = ES_{NS} - ES_i$ și multiplicitatea lui e dată simplu de expresia $y(E_\gamma \rightarrow E) = (T_i)(GP_i)$. Deci probabilitățile de tranziție sunt independente de energia neutronului incident.

În figura 6.5 este dat ca exemplu o parte din fișierul MF=12 pentru MAT=9446 (Pu-242) în reprezentarea probabilităților de tranziție γ (L0=2).

6.2.6 Fișierul MF=13

Datele din acest fișier se referă tot la producția de fotoni și anume se dă aici dependența secțiunilor eficace de producere de fotoni în funcție de energia neutronului incident și de cea a fotonului. Faptul că în MF=13 este tabelată secțiunea absolută de producție de fotoni face să nu mai fie nevoie de utilizarea datelor din fișierele de neutroni (MF=2 și/sau MF=3).

Reprezentarea dependenței de energia incidentă este făcută prin tabelarea unui set de perechi $\{E, \sigma_k(E)\}$ pentru fiecare foton discret k și pentru continuum, totalul de asemenea seturi este NK.

Structura unei secțiuni din MF=13 se prezintă în felul următor:

```
ZA, AWR, 0, 0, NK, 0/MAT 13 MT      HEAD
0.0, 0.0, 0, 0, NR, NP/Einc/σT(E)
  < subsecțiunea k=1 >
  < subsecțiunea k=2 >
  ...
  < subsecțiunea k=NK >
0.0, 0.0, 0, 0, 0, 0/MAT 13 0      SEND
```

și structura fiecărei subsecțiuni este:

$$EG_k, ES_k, LP, LF, NR, NP/E_{inc}/\sigma_k(E)$$

unde ES_k reprezintă energia nivelului de pe care este emis fotonul (specificată și cu ajutorul lui LP pentru fotoni non-primari etc.), EG_k este energia fotonului k , LF, NR și NP au aceleași semnificații ca în MF=12.

Subsecțiunile se dau în ordinea descrescătoare a energiei fotonului cu convenția ca subsecțiunea pentru continuum să fie dată ultima.

Dacă în $MF=2$ sunt dați parametrii de rezonanță pentru reacțiile de captură și fisiune atunci producția corespunzătoare de fotoni se dă sub formă de multiplicități în $MT=12$.

Secțiunea totală de producție de fotoni $\sigma_\gamma(E)$ trebuie să baleieze exact același domeniu de energie ca și domeniile energetice combinate pentru toate $\sigma_x(E)$ pentru a se putea închide suma peste k (cu k de la 1 la NK).

Pentru reacții de tipul $(n,n'\gamma)$ se preferă $MF=13$ folosind $MF=4$, toate radiațiile γ discrete și continuum fiind date în serii de subsecțiuni. Utilizarea lui $MT=4$ elimină confuzia dacă datele reprezintă secțiuni de excitare sau de dezexcitare. Dacă totuși se folosesc $MT=51, 52$ etc. atunci aceste date reprezintă secțiuni de dezexcitare.

Prin procesarea bibliotecilor de tip ENDF cu codul utilitar LISTEF se obțin datele sub formă de tabele ca de exemplu în figura 6.6 care reprezintă secțiunea neutronică inelastică pe al treilea nivel excitat al Pu-242 (ENDF/B-VI, subbiblioteca 10, MAT=9446, MF=3, MT=53) [12].

O parte din codurile utilitare și de preprocesare ENDF dau reprezentări grafice ale datelor, de exemplu în figura 6.7 este distribuția unghiulară a neutronilor împrăștiați inelastic pe nivelul 2^+ al nucleului Pu-242 la energia incidentă 6 MeV, obținută prin procesarea subbibliotecii 10 pentru MAT=9446 cu codul utilitar PLOTEF [12].

În figurile 6.8, 6.9, 6.10 și 6.11 sunt reprezentate graficele secțiunilor neutronice din $MF=3$ (subbiblioteca 10 pentru Pu-242) obținute cu ajutorul codului de preprocesare EVALPLOT [12].

Bibliografie:

- [1] Rose P.F., Dunford C.L., ENDF-6 Formats Manual, IAEA-NDS-76, rev.1992
- [2] Dunford C.L. et al. "SCORE II an Interactive Neutron Evaluation System", USAEC Rep. AI-AEC-12757 (ENDF-126), 1969
- [3] Kinsey R.R., Rindfleish C., Garber D., "TIGER the Interactive Graphics Evaluation Routine", NNDC 1973
- [4] Honeck H.C., BNL 8381 "ENDF Description and Specifications", 1965
- [5] Honeck H.C., Pearlstein S., BNL 50066 "Specifications from ENDF for Reactor Applications", 1966
- [6] Druke M.K., BNL 50274 vol.3 "Data formats and procedures for ENDF", 1970
- [7] Dudziak D.J. LA4549, ENDF-102 vol.II, 1970
- [8] Garber D., Dunford C., Pearlstein S., BNL-NCS-50496, 1975
- [9] Perey F., ORNL/TM 5938, ENDF-249 "The Data Covariance File for ENDF/B-V", 1977
- [10] Kinsey R., Magurno B.A., BNL-NCS-50496 (ENDF-102), 1983
- [11] Pearlstein S., BNL-NCS-28949, 1980
- [12] Vlăducă G., Sin M., Tudora A., "Evaluation of ^{242}Pu data for the incident neutron energy range 0.01 - 6 MeV" NEA/SEN/NCS/WPPR(96)5, JEF/DOC-658

Figura 6.7

(n,n') nivelul 2^+ - Distribuția unghiulară a neutronilor emiși
Reconstrucție din 15 coeficienți Legendre în SCM la $E = 6$. MeV

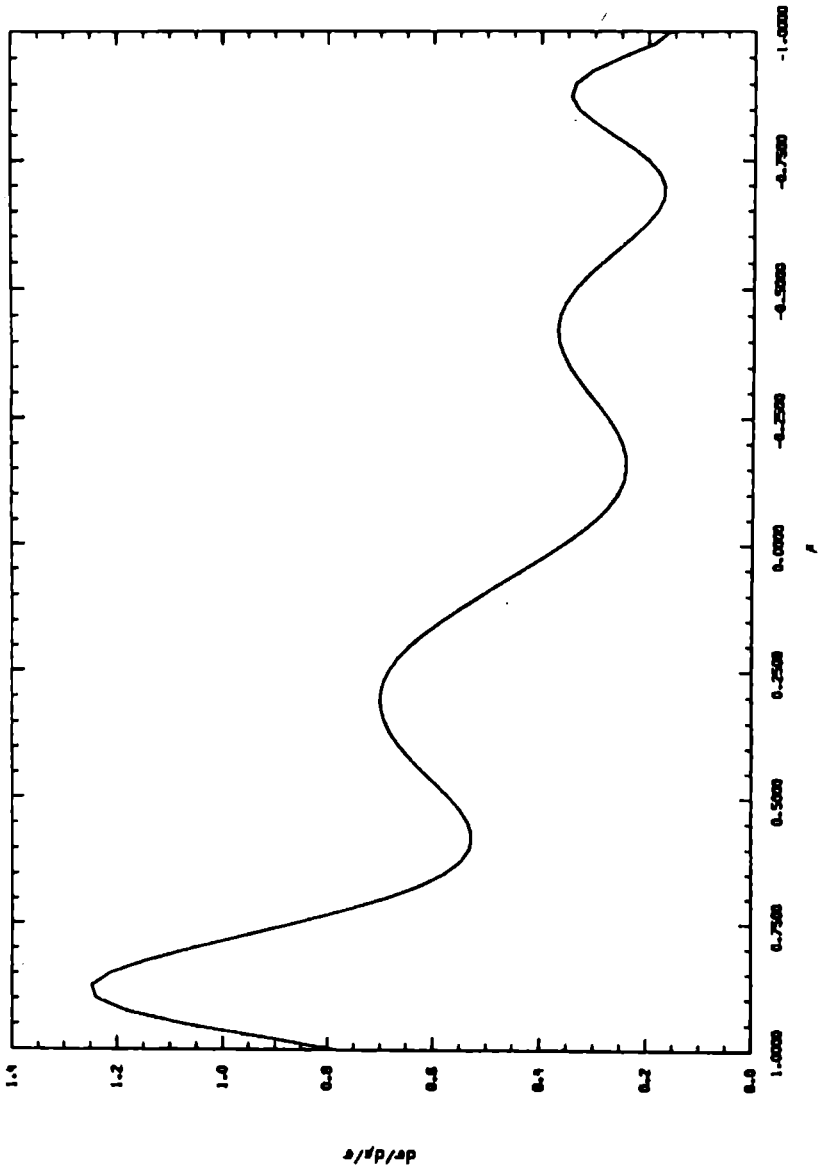
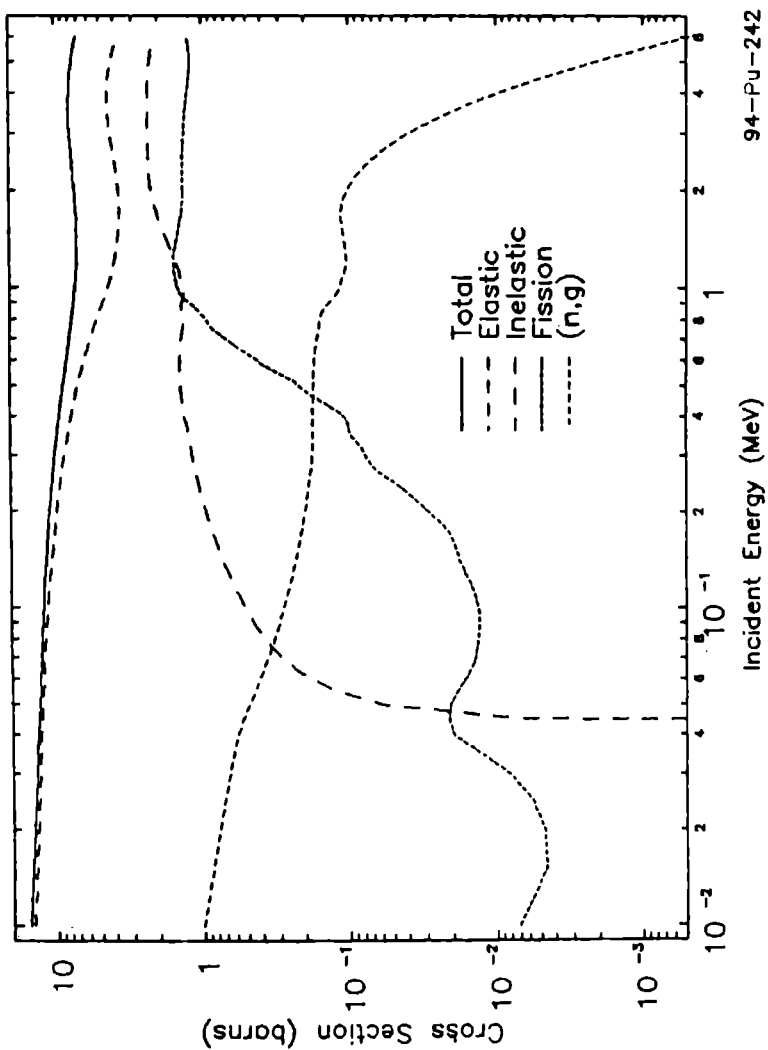


Figura 6.8

Secțiuni neutronice majore - 0 Kelvin



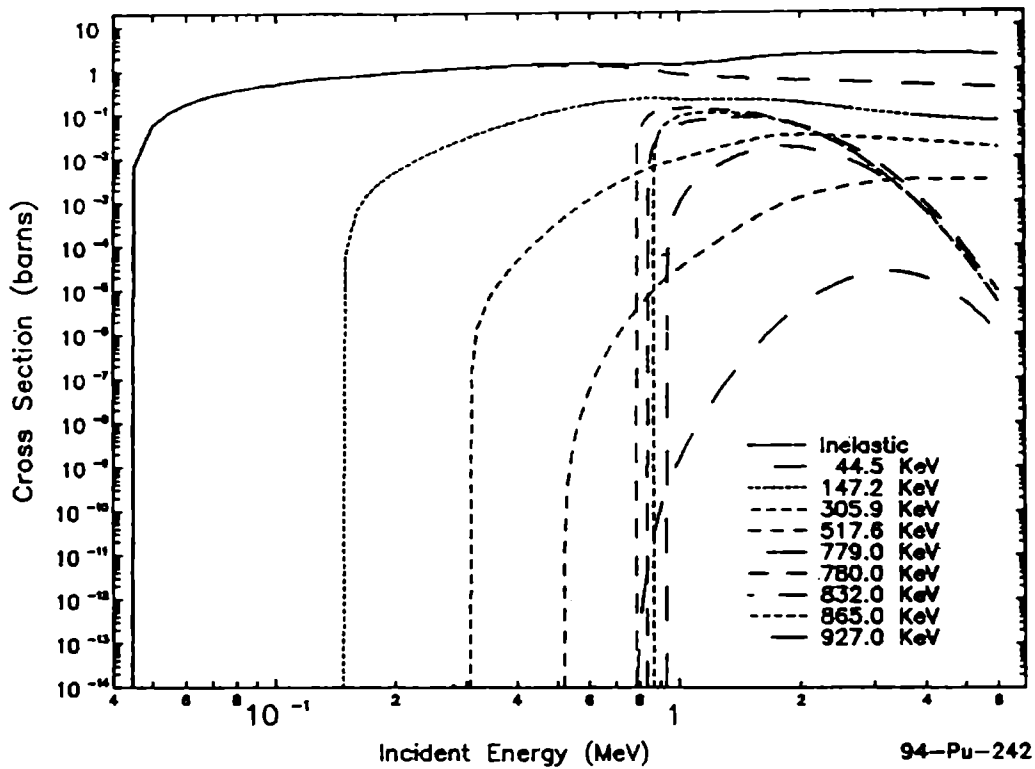


Figura 6.9
Secțiuni neutronice inelastice - 0 Kelvin

Figura 6.1

ENDFB6	LIBRARY, DUMMY TAPE HEADER								1
9.424200+4	2.399790+2	0	1	0		19446	1451		2
0.000000+0	1.000000+0	0	0	0		69446	1451		3
1.000000+0	0.000000+0	0	0	10		69446	1451		4
0.000000+0	0.000000+0	0	0	116		319446	1451		5
94-PU-242	HEDL, SRL, +	EVAL-OCT78	MANN, BENJAMIN, MADLAND, HOWERTON, +			9446	1451		6
		DIST-FEB90		900206		9446	1451		7
----	ENDF/B-VI	MATERIAL	9446			9446	1451		8
-----	INCIDENT NEUTRON DATA					9446	1451		9
-----	ENDF-6 FORMAT					9446	1451		10
ENDF/B-V	MATERIAL CONVERTED TO ENDF-6 FORMAT BY NNDC					9446	1451		11
*	*	*	*	*	*	*9446	1451		12
	HEDL	EVAL-APR78	MANN AND SCHENTER (UNRESOLVED)			9446	1451		13
	LASL	EVAL-MAY78	MADLAND AND YOUNG (0.01-20 MEV)			9446	1451		14
	SRL	EVAL-OCT75	BENJAMIN (THERMAL)			9446	1451		15
	LLNL	EVAL-APR78	HOWERTON (GAMMA PRODUCTION)			9446	1451		16
						9446	1451		17
MF=1	GENERAL INFORMATION					9446	1451		18
MT=452	NUBAR TOTAL. SUM OF MT=456 AND A DELAYED NUBAR OF 0.015					9446	1451		19
	FROM THE MEASUREMENT OF KR70 AS COMPILED BY MA72.					9446	1451		20
MT=456	NUBAR PROMPT. BASED ON A FIT TO PU-240 EXP. DATA BY FR74,					9446	1451		21
	USING SYSTEMATICS TO INFER DELTA NUBAR TO PU-242, AND RENOR-					9446	1451		22
	MALIZED TO CF-252 THERMAL NUBAR OF 3.757.					9446	1451		23
MT=455	DEL. NUBAR, M.C. BRADY AND T.R. ENGLAND, NSE 103,129(1989)					9446	1451		24
MT=458	ENERGY OF FISSION. BASED ON WORK OF SH83.					9446	1451		25
MF=2	RESONANCE PARAMETERS (0 TO 10 KEV)					9446	1451		26
MT=151	RESOLVED RESONANCES 67 RESOLVED RESONANCES AND ONE					9446	1451		27
	BOUND LEVEL DESCRIBE THE CROSS SECTION DATA FROM ZERO TO					9446	1451		28
	986 EV. EXCEPT FOR THE BOUND AND 2.68 EV LEVELS, PARA-					9446	1451		29
	METERS ARE FROM BNL-325 (MU76). PARAMETERS FOR THE BOUND					9446	1451		30
	AND 2.68 EV LEVELS HAVE BEEN MODIFIED TO PRESERVE					9446	1451		31
	THE CROSS SECTION VALUES AND SHAPES IN THE THERMAL REGION					9446	1451		32
	AS DESCRIBED BY YO70 AND YO71, ALONG WITH THE HIGHER RESO-					9446	1451		33
	NANCE CAPTURE INTEGRAL SUGGESTED BY INTEGRAL AND PRODUCTION					9446	1451		34
	EXPERIMENTS (BU57, HA64, BE75). RESOLVED REGION 0 TO 986 EV.					9446	1451		35
	UNRESOLVED RESONANCES. AVERAGE RESONANCE PARAMETERS					9446	1451		36
	FOR L=0 RESONANCES FROM RESOLVED RESONANCES. THE REST ARE					9446	1451		37
	FROM MAT 1161. UNRESOLVED REGION - 986 EV TO 10 KEV.					9446	1451		38
MF=3	SMOOTH CROSS SECTIONS					9446	1451		39
GENERAL.	EVALUATION FROM 0.01 - 20 MEV DESCRIBED IN MA78.					9446	1451		40
	STATISTICAL COMPOUND NUCLEUS AND DIRECT REACTION					9446	1451		41
	THEORY CALCULATIONS PERFORMED WITH LASL VERSIONS OF					9446	1451		42
	COMNUC (DU70, 3/29/78 VERSION) AND JUKARL (RE71). ALL					9446	1451		43
	CALCULATIONS USED LASL PRELIMINARY GLOBAL ACTINIDE OP-					9446	1451		44
	TICAL POTENTIAL (MA77). COMPLETE SET OF CALCULATIONS					9446	1451		45
	PERFORMED BUT ELASTIC AND FISSION CROSS SECTION EVALUA-					9446	1451		46
	TIONS DIFFER SLIGHTLY (LESS THAN 5PC) FROM CALCULATIONS					9446	1451		47
	BECAUSE OF INFLUENCE OF FISSION MEASUREMENTS. (N, F),					9446	1451		48
	(N,NF), AND (N,2NF) X/S CALCULATED SUBJECT TO CONSTRAINT					9446	1451		49
	THAT THEIR SUM EQUALS MEASURED (BE78) TOTAL FISSION X/S					9446	1451		50
	WITHIN 5PC. DISCRETE FISSION CHANNELS (UP TO 12) AND					9446	1451		51
	DEFORMED LEVEL DENSITY CONTINUUM FISSION CHANNELS USED.					9446	1451		52
MT=1	TOTAL. SPHERICAL OPTICAL MODEL CALCULATION WITH NUCLEAR					9446	1451		53
	DEFORMATION EFFECTS ACCOUNTED FOR BY COUPLED-CHANNEL CALCU-					9446	1451		54
	LATIONS OF UP TO 5 STATES OF GROUND STATE BAND.					9446	1451		55
MT=2	ELASTIC. DIFFERENCE BETWEEN MT=1 AND MT=4+16+17+18+102.					9446	1451		56
	AGREES WITH MODEL CALCULATION TO WITHIN FEW PERCENT.					9446	1451		57
MT=4	INELASTIC SCATTERING. SUM OF MT=51-69 AND MT=91.					9446	1451		58
MT=16,17	(N,2N) AND (N,3N). BASED ON COMPOUND NUCLEUS STATIS-					9446	1451		59
	TICAL MODEL CALCULATIONS.					9446	1451		60
MT=18	FISSION. BELOW 100 KEV BASED ON EXP. DATA OF AU71. FROM					9446	1451		61
	0.1 TO 20 MEV, BASED ON EXP. DATA OF BE78.					9446	1451		62
MT=51-54	DISCRETE INELASTIC. BASED ON HAUSER-FESHBACH COMPOUND					9446	1451		63
	NUCLEUS CALCULATION AND COUPLED-CHANNEL CALCULATION OF					9446	1451		64

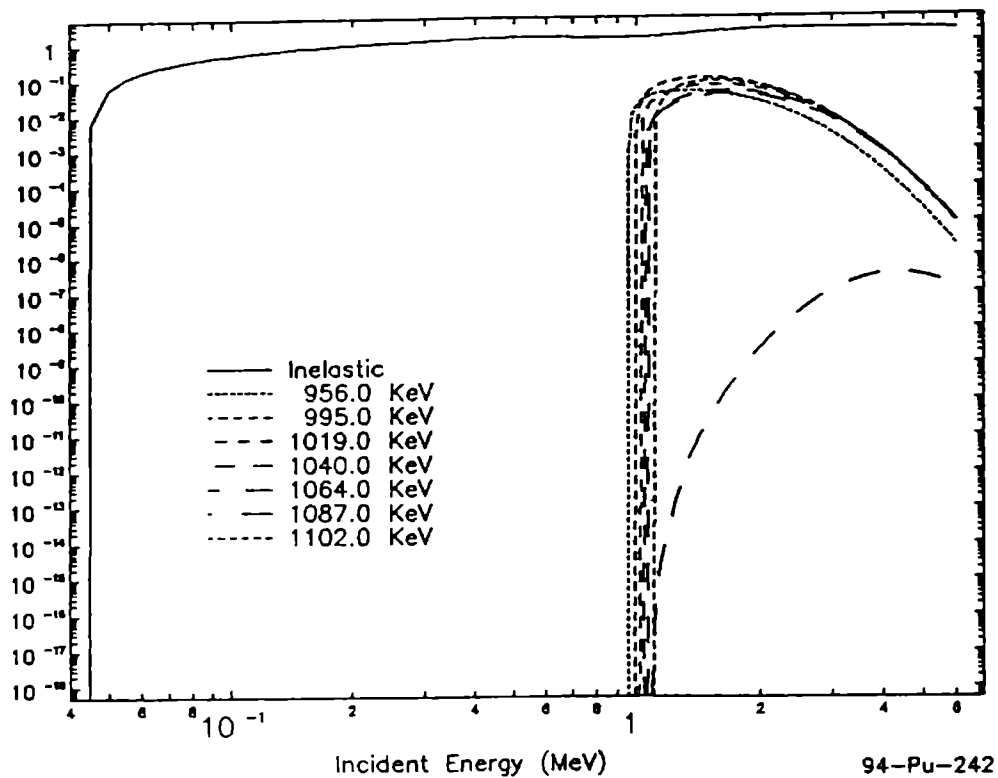


Figura 6.10
Sectiuni neutronice inelastice - 0 Kelvin

Figura 6.11

Secțiuni neutronice inelastice - 0 Kelvin

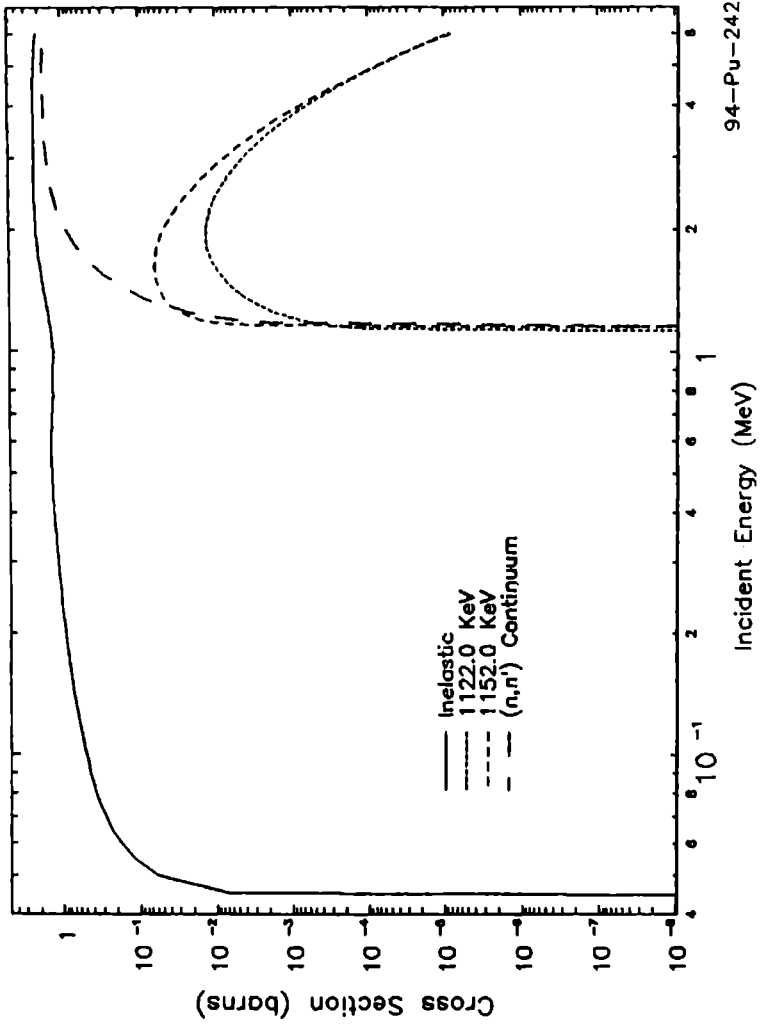


Figura 6.2

9.22350+ 4	2.330250+2	0	0	0	09228 3	1	579
0.000000+0	0.000000+0	0	0	1	3339228 3	1	580
333	2				9228 3	1	581
1.000000-5	0.000000+0	7.712960+1	0.000000+0	2.250000+3	0.000000+09228 3	1	582
2.250000+3	1.835410+1	2.300000+3	1.933220+1	2.500000+3	1.982130+19228 3	1	583
2.650000+3	1.839860+1	2.900000+3	1.828910+1	3.000000+3	1.813040+19228 3	1	584
3.150000+3	1.831170+1	3.250000+3	1.869260+1	3.500000+3	1.820540+19228 3	1	585
3.700000+3	1.766020+1	3.800000+3	1.882590+1	3.900000+3	1.775430+19228 3	1	586
4.000000+3	1.815900+1	4.150000+3	1.733860+1	4.250000+3	1.850440+19228 3	1	587
4.350000+3	1.774520+1	4.500000+3	1.772910+1	4.800000+3	1.713650+19228 3	1	588
5.000000+3	1.692760+1	5.150000+3	1.692660+1	5.350000+3	1.701940+19228 3	1	589
5.600000+3	1.741090+1	5.650000+3	1.699960+1	5.800000+3	1.794830+19228 3	1	590
6.000000+3	1.743430+1	6.150000+3	1.646260+1	6.400000+3	1.679610+19228 3	1	591
6.600000+3	1.653750+1	6.750000+3	1.631080+1	7.000000+3	1.658520+19228 3	1	592
7.250000+3	1.598420+1	7.350000+3	1.668630+1	7.700000+3	1.623990+19228 3	1	593
8.000000+3	1.604330+1	8.200000+3	1.610730+1	8.400000+3	1.651170+19228 3	1	594
8.700000+3	1.644970+1	9.000000+3	1.555390+1	9.150000+3	1.644660+19228 3	1	595
9.600000+3	1.606620+1	1.000000+4	1.552800+1	1.040000+4	1.572690+19228 3	1	596
1.065000+4	1.589900+1	1.085000+4	1.578440+1	1.120000+4	1.594920+19228 3	1	597
1.165000+4	1.546920+1	1.200000+4	1.555870+1	1.240000+4	1.524230+19228 3	1	598
1.280000+4	1.535750+1	1.309600+4	1.557090+1	1.325000+4	1.568200+19228 3	1	599
1.370000+4	1.528630+1	1.430000+4	1.523380+1	1.480000+4	1.517600+19228 3	1	600
1.530000+4	1.480260+1	1.600000+4	1.495940+1	1.720000+4	1.480300+19228 3	1	601
1.790000+4	1.489240+1	1.840000+4	1.476550+1	1.890000+4	1.467650+19228 3	1	602
1.940000+4	1.453790+1	1.980000+4	1.4452610+1	2.000000+4	1.467750+19228 3	1	603
2.050000+4	1.473770+1	2.100000+4	1.445250+1	2.210000+4	1.474200+19228 3	1	604
2.320000+4	1.438170+1	2.370000+4	1.450160+1	2.420000+4	1.447840+19228 3	1	605
2.460000+4	1.426140+1	2.500000+4	1.417650+1	2.500000+4	1.417650+19228 3	1	606
2.570000+4	1.413540+1	2.620000+4	1.411180+1	2.720000+4	1.406180+19228 3	1	607
2.750000+4	1.405350+1	2.830000+4	1.401590+1	2.880000+4	1.399060+19228 3	1	608
2.930000+4	1.396750+1	3.000000+4	1.393090+1	3.110000+4	1.388690+19228 3	1	609
3.180000+4	1.385220+1	3.210000+4	1.384380+1	3.280000+4	1.380550+19228 3	1	610
3.420000+4	1.374030+1	3.500000+4	1.370800+1	3.620000+4	1.365580+19228 3	1	611
3.700000+4	1.362490+1	3.790000+4	1.359140+1	3.910000+4	1.354230+19228 3	1	612
4.000000+4	1.350420+1	4.100000+4	1.347260+1	4.200000+4	1.342770+19228 3	1	613
4.300000+4	1.339590+1	4.380000+4	1.337150+1	4.430000+4	1.334400+19228 3	1	614
4.520000+4	1.331380+1	4.600000+4	1.326920+1	4.639800+4	1.325900+19228 3	1	615
4.680000+4	1.324870+1	4.730000+4	1.323910+1	4.760000+4	1.322640+19228 3	1	616
4.820000+4	1.321030+1	4.900000+4	1.319280+1	5.000000+4	1.309780+19228 3	1	617
5.090000+4	1.308320+1	5.120000+4	1.306550+1	5.150000+4	1.305590+19228 3	1	618
5.192200+4	1.304150+1	5.220000+4	1.303210+1	5.250000+4	1.302450+19228 3	1	619
5.350000+4	1.299730+1	5.420000+4	1.297460+1	5.500000+4	1.295660+19228 3	1	620
5.570000+4	1.293190+1	5.610000+4	1.291260+1	5.670000+4	1.288820+19228 3	1	621
5.710000+4	1.288240+1	5.790000+4	1.285750+1	5.830000+4	1.285430+19228 3	1	622
5.910000+4	1.282580+1	6.000000+4	1.279780+1	6.030000+4	1.278760+19228 3	1	623
6.120000+4	1.276250+1	6.200000+4	1.274150+1	6.320000+4	1.269820+19228 3	1	624
6.420000+4	1.267530+1	6.500000+4	1.265180+1	6.610000+4	1.261620+19228 3	1	625
6.700000+4	1.259160+1	6.800000+4	1.256180+1	6.890000+4	1.254240+19228 3	1	626
6.940000+4	1.252070+1	7.000000+4	1.250230+1	7.200000+4	1.245510+19228 3	1	627
7.250000+4	1.244720+1	7.310000+4	1.242180+1	7.370000+4	1.239770+19228 3	1	628
7.410000+4	1.239320+1	7.500000+4	1.236840+1	7.580000+4	1.234810+19228 3	1	629
7.650000+4	1.234070+1	7.700000+4	1.231450+1	7.760000+4	1.230860+19228 3	1	630
7.840000+4	1.228130+1	7.890000+4	1.226930+1	7.940000+4	1.226470+19228 3	1	631
8.000000+4	1.223920+1	8.070000+4	1.222310+1	8.200000+4	1.218870+19228 3	1	632
8.205100+4	1.218740+1	8.270000+4	1.217190+1	8.330000+4	1.215900+19228 3	1	633
8.400000+4	1.214290+1	8.500000+4	1.211400+1	8.530000+4	1.209410+19228 3	1	634
8.610000+4	1.208080+1	8.680000+4	1.205870+1	8.750000+4	1.204520+19228 3	1	635
8.830000+4	1.201340+1	8.900000+4	1.199230+1	9.000000+4	1.196140+19228 3	1	636
9.030000+4	1.195290+1	9.120000+4	1.192510+1	9.280000+4	1.188590+19228 3	1	637
9.360000+4	1.186320+1	9.440000+4	1.184150+1	9.500000+4	1.182590+19228 3	1	638
9.600000+4	1.179110+1	9.680000+4	1.177700+1	9.770000+4	1.175430+19228 3	1	639
9.850000+4	1.173370+1	9.930000+4	1.171300+1	1.000000+5	1.172054+19228 3	1	640
1.034400+5	1.173950+1	1.100000+5	1.165740+1	1.000000+5	1.162112+19228 3	1	641

7. NOTIUNI SUCCINTE PRIVIND FORMATUL EXFOR

Comparativ cu formatul ENDF, formatul EXFOR (al bibliotecilor EXFOR și CSISRS) este mult mai accesibil utilizatorilor. Fișierele în format EXFOR pot fi "citite la prima vedere" dacă utilizatorul are la dispoziție dicționarele tuturor abrevierilor folosite. Aceste dicționare sunt disponibile online, serviciul www, la cele trei centre majore de date nucleare: IAEA-NDS, NNDC-Brookhaven, OECD-NEA-DB.

Organizarea majoră este pe materiale ca și la ENDF, pentru fiecare material existând împărțirea în "work" (experiență) și "sub-work".

Cuvintele cheie (Keyword) sunt în primele 11 câmpuri, pe următoarele 55 câmpuri se află informația (oricâte linii de text). Tabelele de date încep din primul câmp. Din coloana 67 până în coloana 74 se află trecute numerele de acces (pentru sub-work) din care primele 5 câmpuri reprezintă numărul de acces pentru work. În coloanele 75-80 se află numerotarea liniilor pentru fiecare sub-work.

Ca regulă generală toate specificațiile codificate conform dicționarelor sunt puse între paranteze.

Prezentăm în continuare câteva cuvinte cheie:

ENTRY: prima linie a fiecărei experiențe (Work) cu N1 numărul de acces (5 câmpuri) și N2 data intrării în bibliotecă a respectivului fișier (sub forma YYMMDD - an, lună zi pe câte 2 câmpuri). **ENDENTRY** este ultima linie pentru respectivul "work".

SUBENT: prima linie a fiecărui "sub-work" cu N1 numărul de acces și N2 data intrării în bibliotecă. **ENDSUBENT** este ultima linie pentru sub-work.

BIB: prima linie a fiecărei secțiuni BIB conținând informații bibliografice, fizice, administrative etc. Aici N1 reprezintă numărul de cuvinte cheie în această secțiune și N2 numărul de linii al secțiunii respective. **ENDBIB** este ultima linie a secțiunii BIB cu N1 numărul de linii al secțiunii.

COMMON: prima linie pentru fiecare secțiune de date comune, cu N1 numărul de intrări de date comune și N2 numărul de linii din fiecare secțiune comună. **ENDCOMMON** este ultima linie a secțiunii de date comune cu N1 numărul de linii în respectiva secțiune.

DATA: este prima linie pentru fiecare secțiune conținând date, cu N1 numărul de coloane de date și N2 numărul de linii cu date în tabel excluzând capul de tabel și unitățile de măsură.

TITLE: conține doar text liber cu titlul lucrării experimentale. Poate lipsi.

AUTHOR: cuprinde numele tuturor autorilor trecute obligatoriu în paranteză.

EXP-YEAR: se trece anul efectuării experienței în 2 câmpuri între paranteze, nu este o informație obligatorie.

REFERENCE: conține informații codificate în paranteze conform dicționarelor nr.4

(pentru tipul de referință), nr.5 (pentru reviste), nr.6 (pentru rapoarte), nr.7 (pentru conferințe și cărți).

ISO-QUANT: reprezintă mărimea fizică la care se referă experimentul, este un cuvânt cheie depășit care se înlocuiește în prezent cu **CMPD-QUANT** sau **NUC-QUANT**. Izotopul este dat sub forma (Z-S-A) dacă este vorba de starea fundamentală și sub formele (Z-S-A-M1), (Z-S-A-M2) etc. pentru prima, a doua etc. stare metastabilă. Pentru simbolurile elementelor se utilizează dicționarul nr.8, pentru proces/parametru dicționarul 10, pentru funcție dicționarul 11, pentru particule dicționarul 13, pentru mărimea fizică dicționar 14.

CMPD-QUANT înlocuiește **ISO-QUANT** dacă mărimea fizică se referă la un compus chimic.

NUC-QUANT înlocuiește **ISO-QUANT** pentru cazurile în care mărimea fizică nu se referă la nucleul țintă.

REACTION: codificarea se dă cu următoarea sintaxă:

(SF1(SF2,SF3)SF4,SF5,SF6,SF7,SF8,SF9)

unde:

SF1 reprezintă ținta cu codificarea Z-S-A-MX

SF2 se referă la proiectil, codul particulelor se ia din dicționarul nr.28 iar dacă este vorba de o particulă mai grea decât α se folosește Z-S-A.

SF3 numește procesul respectiv (a se vedea dicționarul 30) iar pentru particule emergente se folosește dicționarul 29.

SF4 se referă la nuclidul rezidual simbolizat Z-S-A-MX

SF5 înseamnă ramificare (dicționar 31)

SF6 semnifică parametru (conform dicționar 32)

SF7 reprezintă particula la care se referă parametrul (dicționar 33), dacă acest lucru nu este evident

SF8 cuprinde modificări conform dicționarelor 34 și 36

SF9 se referă la tipul de dată (dicționar 35).

Pentru cuvinte cheie ca **METHOD**, **FACILITY**, **DETECTOR** informațiile de cod (trecurte între paranteze) sunt conform dicționarelor 18 și 21 și este permis și chiar recomandat și text liber, pentru a furniza mai multe amănunte asupra experimentului.

N-SOURCE: cuprinde informații despre sursa de neutroni sau de γ , codificarea conform dicționarului 19 plus text liber

Cuvintele cheie **INC-SOURCE** și **INC-SPECT** se referă la informații despre sursa de particule incidente și respectiv spectrul particulelor incidente, codificarea este conform dicționarului 19 și se poate și text liber.

RESID-NUC: cuprinde informații cu privire la nucleul rezidual

PART-DET, **RAD-DET** conțin specificații asupra particulelor și respectiv radiațiilor detectate, codificarea este cuprinsă în dicționarul 13.

DECAY-DATA cuprinde informații de dezintegrare în conformitate cu dicționarele 27 și 13, sintaxa este de tipul: (SF1.SF2,SF3,SF4,SF5) unde SF1 înseamnă nuclidul Z-S-A-

Figura 6.3

9.424200+4	2.399793+2	0	1	0	09446	4	2
0.000000+0	2.399793+2	0	2	0	09446	4	2
0.000000+0	0.000000+0	0	0	1	149446	4	2
14	2	0	0	0	09446	4	2
0.000000+0	1.000000+4	0	0	1	09446	4	2
0.145590-1	0.000000+0	0.000000+0	0.000000+0	0.000000+0	0.000000+09446	4	2
0.000000+0	5.000000+4	0	0	4	09446	4	2
0.653202-1	0.176873-1	0.807695-4	0.625952-5	0.000000+0	0.000000+09446	4	2
0.000000+0	1.000000+5	0	0	4	09446	4	2
0.123134+0	0.289565-1	0.542060-3	0.550247-4	0.000000+0	0.000000+09446	4	2
0.000000+0	2.000000+5	0	0	4	09446	4	2
0.214117+0	0.567840-1	0.364254-2	0.510399-3	0.000000+0	0.000000+09446	4	2
0.000000+0	3.000000+5	0	0	6	09446	4	2
0.279067+0	0.882356-1	0.107056-1	0.170289-2	0.232503-4	0.107788-49446	4	2
0.000000+0	4.000000+5	0	0	6	09446	4	2
0.325564+0	0.120229+0	0.222585-1	0.403945-2	0.918338-4	0.383177-49446	4	2
0.000000+0	6.000000+5	0	0	6	09446	4	2
0.393166+0	0.179721+0	0.593389-1	0.141016-1	0.685665-3	0.252669-39446	4	2
0.000000+0	7.500000+5	0	0	8	09446	4	2
0.436074+0	0.220929+0	0.988077-1	0.284260-1	0.212396-2	0.696213-39446	4	2
0.253750-4	0.623128-5	0.000000+0	0.000000+0	0.000000+0	0.000000+09446	4	2
0.000000+0	1.000000+6	0	0	8	09446	4	2
0.507328+0	0.289763+0	0.181711+0	0.693148-1	0.901508-2	0.245995-29446	4	2
0.174770-3	0.272721-4	0.000000+0	0.000000+0	0.000000+0	0.000000+09446	4	2
0.000000+0	1.500000+6	0	0	8	09446	4	2
0.591842+0	0.411213+0	0.319219+0	0.186976+0	0.503438-1	0.145568-19446	4	2
0.209264-2	0.340841-3	0.000000+0	0.000000+0	0.000000+0	0.000000+09446	4	2
0.000000+0	2.000000+6	0	0	10	09446	4	2
0.676203+0	0.513227+0	0.397260+0	0.287511+0	0.119729+0	0.412351-19446	4	2
0.896216-2	0.181568-2	0.260960-3	0.449984-4	0.000000+0	0.000000+09446	4	2
0.000000+0	3.000000+6	0	0	12	09446	4	2
0.797545+0	0.637688+0	0.492419+0	0.384777+0	0.234087+0	0.111581+09446	4	2
0.409655-1	0.129093-1	0.305889-2	0.549023-3	0.964591-4	0.306960-49446	4	2
0.000000+0	4.000000+6	0	0	12	09446	4	2
0.848989+0	0.706677+0	0.566551+0	0.442659+0	0.304498+0	0.173055+09446	4	2
0.856388-1	0.382207-1	0.131873-1	0.330212-2	0.694119-3	0.138863-39446	4	2
0.000000+0	6.000000+6	0	0	14	09446	4	2
0.868601+0	0.749516+0	0.640927+0	0.522688+0	0.398618+0	0.272148+09446	4	2
0.171610+0	0.113431+0	0.669300-1	0.294822-1	0.102000-1	0.280531-29446	4	2
0.614741-3	0.165731-3	0.000000+0	0.000000+0	0.000000+0	0.000000+09446	4	2
					9446	4	0

MX, SF2 timpul de înjumătățire (unitățile de măsură în dicționarul 25), SF3 semnifică tipul de radiație (dicționar 13), SF4 este energia radiației în keV și SF5 reprezintă abundența radiațiilor observate per act de dezintegrare. O asemenea secvență (paranteză) poate fi repetată de câte ori este nevoie.

Cu privire la reacții amintim cele mai importante cuvinte cheie și anume:

EN: energia incidentă în SL

EN-NM și EN-DN reprezintă energia incidentă la numărător și respectiv la numitor pentru un raport de reacție

EN-CM semnifică energia incidentă în SCM.

EN-MIN și EN-MAX înseamnă energia limită minimă și respectiv maximă a domeniului energetic cuprins în respectiva experiență

EN-MEAN se referă la energia medie a spectrului particulelor incidente

KT semnifică temperatura spectrului incident

EN-RSL specifică rezoluția energetică la particulele incidente

Eroarea în energia particulelor incidente poate fi de forma: EN-RSL dacă este vorba de particule monoenergetice, dacă se dă mai mult de o eroare atunci se folosește EN-ERR1, EN-ERR2 etc. Dacă rezoluția energetică este nesimetrică atunci acest lucru se specifică cu +EN-RSL și respectiv -EN-RSL.

Pentru unghiuri se folosește ANG pentru unghiul în SL, ANG-CM pentru unghiul în SCM și COS pentru cosinusul unghiului.

La tabelele de date simbolul DATA semnifică capul coloanei ce dă ISO-QUANT, CMPD-QUANT, NUC-QUANT sau REACTION. DATA-CM specifică că valorile sunt în SCM.

Tot la tabele, DATA-ERR este coloana ce cuprinde erorile în măsurarea datelor respective, dacă sunt mai multe coloane de erori atunci acestea se simbolizează DATA-ERR1, DATA-ERR2 etc. Toate acestea se referă la erori sistematice (un sigma). Dacă este vorba de erori statistice (un sigma), coloana acestora este simbolizată cu ERR-S iar dacă eroarea statistică este nesimetrică atunci coloanele vor fi +ERR-S și respectiv -ERR-S. Coloana cuprinzând erorile totale este codificată ERR-T (un sigma) și dacă este vorba de eroare totală asimetrică atunci se codifică +ERR-T și -ERR-T respectiv.

În figura 7.1 este dat un exemplu de fișier în format EXFOR. Acesta se referă la work 21019, sub-work 21019001 și 21019006. Informațiile se referă la secțiunea elastică neutronică a ^{232}Th , rezultatele experimentale au fost compilate în biblioteca CSISRS la 18 februarie 1980. Experiența a fost efectuată la AWRE Aldermaston Anglia de către R. Batchelor, W.B. Gilboy și J.H. Towle. Se specifică apoi instalația (Van der Graaff 6 MeV de la AWRE), sursa de neutroni, proba, metoda de detecție (timp de zbor), detectorul folosit etc.

La sub-work 21019006 este dat tabelul cu datele experimentale, este vorba de patru valori ale secțiunii elastice (coloana a treia) la 2, 3, 4 și 7 MeV energie a neutronilor incidenți (în SL). În coloana a doua sunt date rezoluțiile în energia particulelor incidente iar în ultima coloană eroarea în măsurarea secțiunii (este eroare statistică, 1σ).

8. BIBLIOTECI DE CODURI DE CALCUL

Spre deosebire de bibliotecile de parametri de intrare și mai ales de bibliotecile de date nucleare, care sunt găzduite de toate cele patru centre majore de date nucleare și în parte și de centre regionale, colecția mondială de coduri de calcul pentru aplicații de fizică nucleară și energetică nucleară este cuprinsă într-un singur centru și anume OECD-NEA-DB. Biblioteca de coduri de calcul precum și toate activitățile legate de achiziția, testarea, validarea, distribuirea codurilor etc. fac obiectul organismului "Computer Program Service" (CPS) din cadrul NEA-Data Bank.

Comitetul științific al NEA este organismul care supervizează activitatea Data Bank; acesta coordonează și organizează o serie de teste internaționale (benchmark) privind codurile de calcul cu scopul de a verifica corectitudinea acestor coduri, creșterea încrederii în modelele teoretice folosite pentru prezicerea comportării microscopice și macroscopice a sistemelor nucleare, pentru progresul științific în rafinarea modelelor teoretice și a codurilor de calcul în direcțiile și domeniile unde se semnalează necesități.

NEA-Data Bank organizează și conduce o serie de comparații internaționale (intercomparații) și exerciții privind prezicerea de secțiuni eficiente, probleme legate de zona activă, elemente și celule de combustibil pentru diverse tipuri de reactori, reciclarea plutoniului, protecția reactorilor, dozimetria aferentă, probleme legate de transportul și stocarea combustibilului ars (uzat), depozitarea deșeurilor precum și alte probleme conexe cu partea finală a ciclului de combustibil. NEA care operează ca o agenție specială a OECD (organism interguvernamental cu sediul la Paris) are ca scop principal promovarea cooperării între țările membre, ca și cu alte țări (din sfera de activitate a celorlalte centre majore de date nucleare), a cooperării în ceea ce privește dezvoltarea aplicațiilor pașnice ale energiei nucleare. NEA-DB a fost creată în 1978 prin fuziunea organismelor Neutron Data Compilation Centre și Computer Program Library, este și motivul pentru care colecția mondială de coduri de calcul s-a dezvoltat aici și în prezent acoperă ca tematică aplicațiile energetice și non-energetice ale fizicii nucleare. Serviciile NEA-DB (atât cele legate de date nucleare cât și cele legate de coduri de calcul) sunt finanțate de contribuția celor 19 țări membre OECD (țările Europei Occidentale și Japonia).

Atât în ceea ce privește partea de date cât și în privința bibliotecii de coduri de calcul NEA-DB are colaborări cu centrele de date nucleare "Energy Science and Technology Software Centre (ESTSC - OSTI), Radiation Shielding Information Centre (RSIC - ORNL), National Nuclear Data Center BNL. În ceea ce privește cooperarea cu IAEA, prin "Computer Program Service" NEA-DB asigură codurile de calcul pentru toate țările membre IAEA.

Menționăm că tot în colecția de coduri de calcul sunt cuprinse și cele mai multe biblioteci de date nucleare procesate care nu sunt distribuite de celelalte centre majore de date nucleare.

Pe lângă serviciile cu privire la date nucleare (asigurate pentru țările din aria sa de activitate) și de coduri de calcul (asigurate practic pentru toate țările), NEA-DB desfășoară activități în domeniul siguranței nucleare și al managementului de deșeuri radioactive. Lucrul în domeniul siguranței nucleare se desfășoară în colaborare cu *divizia de securitate nucleară* a NEA. Ca activități în acest domeniu, banca de date selectează datele de calitate privitoare la experiențele de simulare la reactori, date ce sunt folosite pentru validarea codurilor de calcul și a sistemelor mari de coduri de calcul. În ceea ce privește managementul deșeurilor, banca de date colaborează cu *divizia "Radiation Protection and Waste Management"* a NEA. Prezicerea impactului radiologic al deșeurilor radioactive necesită pe lângă datele nucleare,

chimice, termodinamice și coduri de calcul și simulare a transportului radionuclizilor din depozite în mediul înconjurător, coduri ce intră în sfera de activitate a Computer Program Service.

În cadrul Computer Program Service, biblioteca software colectează programele de calcul, după recepționarea lor le verifică pe cele mai potrivite computere, asigurându-se că pachetul codului respectiv este complet și documentat adecvat. Procedurile de verificare a softului standard sunt folosite în conformitate cu standardul ANSI/ANS. Colecția de coduri testate conține în prezent peste 1500 pachete (packages) de coduri.

Categoriile cele mai bine reprezentate în colecția curentă de coduri sunt clasificate de la A la Z (informații în detaliu asupra fiecărei clase de programe se pot obține online, serviciul www, la adresa URL: <http://www.nea.fr/html/dbprog/dbprog.html>) astfel:

A. Calcule de secțiuni eficace și integrale de rezonanță: aici intră coduri de modele nucleare de reacție (optic, DWBA, canale cuplate, statistic, secțiuni de rezonanță Breit-Wigner, teorie multinivel etc.), determinări de secțiuni diferențiale, evaluare de secțiuni, compilare de programe etc.

B. Calcule de spectre, generare de constante de grup, probleme de celulă și rețea: aici sunt cuprinse coduri cu privire la spectrul termic, medieri de secțiuni, mărimi fizice legate de producerea constantelor de grup, evaluarea parametrilor de proiectare prin calcule de celulă și rețea etc.

C. Studii statice de proiectare: cuprinde coduri referitoare la calcule de reactivitate și distribuție de flux în reactor, ajustarea parametrilor de proiectare etc.

D. Managementul combustibilului. analize de costuri și economia centralelor de putere: include coduri de "burn-up", ardere de isotopi și produși de fisiune, calcule de bilanț integral și studii de optimizare

E. Cinetici spațio-independente: cuprinde coduri ce tratează comportarea în timp a reactorilor incluzând efectele datorate neutronilor întârziți și mecanisme de feedback, evaluări ale funcțiilor de transfer etc.

F. Cinetică spațio-temporară, simulări cuplate neutronice-hidrodinamice-termodinamice: aici intră programe ce consideră caracteristici de proiectare spațială și efectele legate de acestea în studiul comportării în timp a reactorilor

G. Securitate radiologică, analize de accidente: cuprinde codurile ce calculează ratele dozelor interne și externe, determinarea proprietăților termodinamice și hidrodinamice ale reactorilor ca urmare a accidentelor, eliberarea de materiale radioactive, distrugerea sistemului de răcire, distrugerea generatorului de abur etc.

H. Transfer de căldură și scurgeri de fluid: cuprinde coduri ce calculează transfer de căldură din stări stabile și tranziente, studii de curgeri de fluid și calcul de proprietăți termodinamice

I. Distribuții de deformări și tensiuni, analize structurale și studii ingineresti de proiectare: include coduri ce tratează evaluarea proiectării elementelor combustibile, studii

de configurație de zona activă, analize de structuri compozite etc.

J. Gamma și proiectări de protecție: aici intră coduri ce calculează transport de γ , rate de pătrundere, calcule de scurgere pentru protecție

K. Analize de sisteme de reactori: cuprinde combinații de programe ce rezolvă probleme corelate din categoriile A - I.

L. Prepararea datelor: cuprinde coduri ce aranjează datele în formate potrivite pentru fișiere de input, le stochează, le editează etc.

M. Managementul datelor: cuprinde sisteme de coduri ce asigură construcția, mentenanța, accesarea fișierelor de date (biblioteci de secțiuni, proprietăți ale sistemelor de echipamente etc.)

N. Calcule ajutătoare: aici intră rutine de plotare, editare, afișare pe display precum și rutine ce procesează fișierele de output pentru a fi potrivite altor programe

O. Procesarea datelor experimentale: aici intră o serie de programe care produc date primare din experiențe sau programe care asistă experimentatorul în timpul experienței etc.

P. Rutine de matematică generală și de sistem: cuprinde rutine și coduri de funcții matematice, analize statistice, rutine speciale ale limbajelor de programare, sisteme software

Q. Materiale: aici intră programe ce tratează proprietăți fizice și chimice ale materialelor, simularea proceselor produse de radiații în materiale, studii de coroziune, funcții cristalografice etc.

R. Stiințe ale mediului: cuprinde sisteme de coduri ce tratează impactul asupra mediului al radiațiilor, corelate cu probleme de geologie, seismologie, calcule geofizice, hidrologie, studii de ape freatică, analize de sisteme biologice, calcule meteorologice, climatologice etc.

T. Electronică, echipament ingineresc: în această categorie intră coduri de proiectare ajutătoare de tip CAD, de manufactură CAM, programe ce controlează procese în industrie etc.

U. Chimie: cuprinde coduri de analize chimice, spectroscopie de masă, chimia radiațiilor, radioliză etc.

V. Acceleratori: aici intră coduri privitoare la proiectarea și operarea acceleratoarelor (Van der Graaff, liniar, ciclotron, sincrotron etc.)

W. Fizică: cuprinde o gamă largă de coduri de calcul din domeniile teoriei structurii atomice și moleculare, ciocniri de particule încărcate, schimb de sarcină, excitație, ionizare, disociere, teorie de particule elementare, teorii de împrăștiere, electrodinamică cuantică, relativitate generalizată etc.

Figura 6.4

9.424200+4	2.399793+2	0	0	1	09446	5	18
0.000000+0	0.000000+0	0	12	1	29446	5	18
2	2	0	0	0	09446	5	18
1.000000+4	1.000000+0	6.000000+6	1.000000+0	0.000000+0	0.000000+09446	5	18
9.738304+5	5.271106+5	0	0	1	139446	5	18
13	2	0	0	0	09446	5	18
1.000000+4	1.033273+6	5.000000+5	1.042985+6	1.000000+6	1.052803+69446	5	18
1.500000+6	1.062531+6	2.000000+6	1.072169+6	2.500000+6	1.081722+69446	5	18
3.000000+6	1.091192+6	3.500000+6	1.100580+6	4.000000+6	1.109888+69446	5	18
4.500000+6	1.119119+6	5.000000+6	1.128275+6	5.500000+6	1.137357+69446	5	18
6.000000+6	1.146366+6				9446	5	18
					9446	5	0
9.424200+4	2.399793+2	0	0	1	09446	5	19
0.000000+0	0.000000+0	0	12	1	29446	5	19
2	2	0	0	0	09446	5	19
1.000000+4	1.000000+0	6.000000+6	1.000000+0	0.000000+0	0.000000+09446	5	19
9.738304+5	5.271106+5	0	0	1	139446	5	19
13	2	0	0	0	09446	5	19
1.000000+4	1.033273+6	5.000000+5	1.042985+6	1.000000+6	1.052803+69446	5	19
1.500000+6	1.062531+6	2.000000+6	1.072169+6	2.500000+6	1.081722+69446	5	19
3.000000+6	1.091192+6	3.500000+6	1.100580+6	4.000000+6	1.109888+69446	5	19
4.500000+6	1.119119+6	5.000000+6	1.128275+6	5.500000+6	1.137357+69446	5	19
6.000000+6	1.146366+6				9446	5	19
					9446	5	0
9.424200+4	2.399793+2	0	0	1	09446	5	91
1.156800+6	0.000000+0	0	9	1	29446	5	91
2	2	0	0	0	09446	5	91
1.156800+6	1.000000+0	6.000000+6	1.000000+0	0.000000+0	0.000000+09446	5	91
0.000000+0	0.000000+0	0	0	1	129446	5	91
12	2	0	0	0	09446	5	91
1.156800+6	4.011228+5	2.000000+6	4.011228+5	4.229684+6	4.011228+59446	5	91
4.400000+6	4.089276+5	4.600000+6	4.189040+5	4.800000+6	4.286204+59446	5	91
5.000000+6	4.380957+5	5.200000+6	4.473467+5	5.400000+6	4.563883+59446	5	91
5.600000+6	4.652339+5	5.800000+6	4.738956+5	6.000000+6	4.823843+59446	5	91
					9446	5	0
					9446	0	0

Figura 6.5

9.424200+4	2.399793+2	2	1	1	0944612	51
0.445000+5	0.000000+0	0	0	2	1944612	51
0.000000+0	0.100000+1				944612	51
0.000000+0	0.000000+0	0	0	0	0944612	0
9.424200+4	2.399793+2	2	1	2	0944612	52
0.147200+6	0.000000+0	0	0	2	1944612	52
0.445000+5	0.100000+1				944612	52
0.000000+0	0.000000+0	0	0	0	0944612	0
9.424200+4	2.399793+2	2	1	3	0944612	53
0.305900+6	0.000000+0	0	0	2	1944612	53
0.147200+6	0.100000+1				944612	53
0.000000+0	0.000000+0	0	0	0	0944612	0
9.424200+4	2.399793+2	2	1	4	0944612	54
0.517600+6	0.000000+0	0	0	2	1944612	54
0.305900+6	0.100000+1				944612	54
0.000000+0	0.000000+0	0	0	0	0944612	0
9.424200+4	2.399793+2	2	1	5	0944612	55
0.779000+6	0.000000+0	0	0	2	1944612	55
0.517600+6	0.100000+1				944612	55
0.000000+0	0.000000+0	0	0	0	0944612	0
9.424200+4	2.399793+2	2	1	6	0944612	56
0.780000+6	0.000000+0	0	0	4	2944612	56
0.445000+5	0.454682+0	0.000000+0	0.545318+0		944612	56
0.000000+0	0.000000+0	0	0	0	0944612	0
9.424200+4	2.399793+2	2	1	7	0944612	57
0.832000+6	0.000000+0	0	0	6	3944612	57
0.780000+6	0.137228-8	0.147200+6	0.393679+0	0.445000+5	0.606321+0	0944612 57
0.000000+0	0.000000+0	0	0	0	0944612	0
9.424200+4	2.399793+2	2	1	8	0944612	58
0.865000+6	0.000000+0	0	0	8	4944612	58
0.832000+6	0.94145-10	0.780000+6	0.596422-4	0.445000+5	0.459008+0	0944612 58
0.000000+0	0.540933+0				944612	58
0.000000+0	0.000000+0	0	0	0	0944612	0
9.424200+4	2.399793+2	2	1	9	0944612	59
0.927000+6	0.000000+0	0	0	6	3944612	59
0.832000+6	0.317492-7	0.305900+6	0.331393+0	0.147200+6	0.668607+0	0944612 59
0.000000+0	0.000000+0	0	0	0	0944612	0
9.424200+4	2.399793+2	2	1	10	0944612	60
0.956000+6	0.000000+0	0	0	6	3944612	60
0.865000+6	0.915540-1	0.780000+6	0.668251+0	0.445000+5	0.240195+0	0944612 60
0.000000+0	0.000000+0	0	0	0	0944612	0
9.424200+4	2.399793+2	2	1	11	0944612	61
0.995000+6	0.000000+0	0	0	14	7944612	61
0.956000+6	0.180874-8	0.865000+6	0.140741-1	0.832000+6	0.278385-1	0944612 61
0.780000+6	0.642333-1	0.147200+6	0.878049-2	0.445000+5	0.865523+0	0944612 61
0.000000+0	0.195509-1				944612	61
0.000000+0	0.000000+0	0	0	0	0944612	0
9.424200+4	2.399793+2	2	1	12	0944612	62
0.101900+7	0.000000+0	0	0	14	7944612	62
0.995000+6	0.784362-5	0.927000+6	0.118327-7	0.865000+6	0.155506-6	0944612 62
0.832000+6	0.484702-3	0.780000+6	0.140001-5	0.147200+6	0.413661+0	0944612 62
0.445000+5	0.585845+0				944612	62
0.000000+0	0.000000+0	0	0	0	0944612	0
9.424200+4	2.399793+2	2	1	13	0944612	63
0.104000+7	0.000000+0	0	0	14	7944612	63
0.101900+7	0.736833-4	0.995000+6	0.464703-8	0.927000+6	0.115909-1	0944612 63
0.832000+6	0.730094-1	0.305900+6	0.536897-2	0.147200+6	0.885335+0	0944612 63
0.445000+5	0.246219-1				944612	63
0.000000+0	0.000000+0	0	0	0	0944612	0
9.424200+4	2.399793+2	2	1	14	0944612	64
0.106400+7	0.000000+0	0	0	10	5944612	64
0.104000+7	0.161686-4	0.101900+7	0.134963-4	0.927000+6	0.388571-3	0944612 64
0.832000+6	0.192720-2	0.147200+6	0.997655+0		944612	64
0.000000+0	0.000000+0	0	0	0	0944612	0

Figura 6.6

94-Plutonium-242

Material No. 9446

Sub-library No.

10

ENDF/B-VI

(n,n') 3-rd level
Reaction Cross Section

Intermediate State Q-value -3.0590E+05 eV

Interpolation Law between Energies

Range Description
1 TO 110 Y LINEAR IN X

CROSS SECTIONS

Index	Energy eV	Sigma Barns	Energy eV	Sigma Barns	Energy eV	Sigma Barns	Energy eV	Sigma Barns	Energy eV	Sigma Barns
1	3.0717E+05	0.0000E+00	3.1000E+05	1.5327E-07	3.2000E+05	1.4302E-06	3.4000E+05	6.1690E-06	3.5000E+05	9.6232E-06
6	3.6000E+05	1.3949E-05	3.8000E+05	2.6923E-05	3.9000E+05	3.5959E-05	4.0000E+05	4.7127E-05	4.1000E+05	6.0583E-05
11	4.2000E+05	7.6791E-05	4.3000E+05	9.6085E-05	4.4000E+05	1.1868E-04	4.5000E+05	1.4488E-04	4.6000E+05	1.7494E-04
16	4.7000E+05	2.0915E-04	4.8000E+05	2.4785E-04	4.9000E+05	2.9143E-04	5.0000E+05	3.4031E-04	5.1000E+05	3.9505E-04
21	5.2000E+05	4.5620E-04	5.3000E+05	5.2367E-04	5.4000E+05	5.9781E-04	5.5000E+05	6.7846E-04	5.6000E+05	7.6523E-04
26	5.7000E+05	8.5784E-04	5.8000E+05	9.5612E-04	5.9000E+05	1.0603E-03	6.0000E+05	1.1709E-03	6.1000E+05	1.2885E-03
31	6.2000E+05	1.4138E-03	6.3000E+05	1.5469E-03	6.4000E+05	1.6875E-03	6.5000E+05	1.8354E-03	6.6000E+05	1.9901E-03
36	6.7000E+05	2.1514E-03	6.8000E+05	2.3187E-03	6.9000E+05	2.4916E-03	7.0000E+05	2.6689E-03	7.1000E+05	2.8500E-03
41	7.2000E+05	3.0348E-03	7.3000E+05	3.2240E-03	7.4000E+05	3.4190E-03	7.5000E+05	3.6231E-03	7.6000E+05	3.8384E-03
46	7.7000E+05	4.0664E-03	7.8000E+05	4.3066E-03	7.9000E+05	4.5585E-03	8.0000E+05	4.8193E-03	8.1000E+05	5.0894E-03
51	8.2000E+05	5.3693E-03	8.3000E+05	5.6591E-03	8.4000E+05	5.9174E-03	8.5000E+05	6.1859E-03	8.6000E+05	6.4623E-03
56	8.7000E+05	6.7359E-03	8.8000E+05	7.0006E-03	8.9000E+05	7.2539E-03	9.0000E+05	7.4947E-03	9.2000E+05	7.9367E-03
61	9.4000E+05	8.3279E-03	9.6000E+05	8.7115E-03	9.8000E+05	9.1339E-03	1.0000E+06	9.6136E-03	1.0200E+06	1.0132E-02
66	1.0400E+06	1.0640E-02	1.0600E+06	1.1155E-02	1.0800E+06	1.1601E-02	1.1000E+06	1.2109E-02	1.1200E+06	1.2653E-02
71	1.1400E+06	1.3254E-02	1.1600E+06	1.3670E-02	1.1800E+06	1.4194E-02	1.2000E+06	1.4807E-02	1.2500E+06	1.6502E-02
76	1.3000E+06	1.8360E-02	1.3500E+06	2.0167E-02	1.4000E+06	2.2062E-02	1.4500E+06	2.3797E-02	1.5000E+06	2.5525E-02
81	1.5500E+06	2.7139E-02	1.6000E+06	2.8705E-02	1.6500E+06	2.9940E-02	1.7000E+06	3.1091E-02	1.7500E+06	3.1912E-02
86	1.8000E+06	3.2663E-02	1.8500E+06	3.3101E-02	1.9000E+06	3.3500E-02	1.9500E+06	3.3625E-02	2.0000E+06	3.3864E-02
91	2.2000E+06	3.3097E-02	2.4000E+06	3.1658E-02	2.6000E+06	3.0156E-02	2.8000E+06	2.8831E-02	3.0000E+06	2.7714E-02
96	3.2000E+06	2.6752E-02	3.4000E+06	2.5884E-02	3.6000E+06	2.5064E-02	3.8000E+06	2.4268E-02	4.0000E+06	2.3484E-02
101	4.2000E+06	2.2714E-02	4.4000E+06	2.1963E-02	4.6000E+06	2.1240E-02	4.8000E+06	2.0552E-02	5.0000E+06	1.9909E-02
106	5.2000E+06	1.9312E-02	5.4000E+06	1.8762E-02	5.6000E+06	1.8255E-02	5.8000E+06	1.7782E-02	6.0000E+06	1.7336E-02

X. Cercetări de fuziune magnetică: cuprinde coduri pe probleme de fizica plasmei, studii magnetice, electrodinamice, hidrodinamice etc.

Z. Date: aici intră bibliotecile de date procesate, fisiere de date în formate specifice, coduri de testare și evaluare, studii de benchmark, coduri de utilizare a bibliotecilor etc.

În afară de accesul online, informația completă asupra tuturor codurilor din fiecare categorie este disponibilă pe dischete și CD-ROM.

Astăzi software este considerat un produs ingineresc. Programele specializate sunt mai frecvent concepute nu de programatori profesioniști ci de cercetători și ingineri, deoarece aceștia sunt specialiști în domeniile și modelele teoretice respective și numai ei pot scrie practic programe specializate.

Software în general și cu precădere codurile specializate, diferă mult de alte produse ingineresti deoarece dacă alte produse tehnologice, ingineresti, conțin multe trăsături repetitive care fac ușoară testarea lor și întreținerea ocazională, software "ocolește" elementele de lucru repetitive, are adesea multe componente diferite, interfuncționarea lor făcând produsul foarte complex, testarea în mod particular dificilă și întreținerea constituie un efort cotinuu.

Soft-ul științific reprezintă împreună cu datele evaluate partea direct "reușită" a rezultatului cercetării. Codurile științifice de calcul și datele nucleare evaluate furnizează cunoștințele acumulate peste timp, într-o formă concentrată și algoritmică, în felul acesta economisind timpul cercetătorilor și inginerilor care nu mai analizează un număr enorm de studii; de fapt soft-ul devine instrumentul practic de lucru. Publicațiile științifice joacă numai un rol complementar în sensul că facilitează înțelegerea codurilor în vederea utilizării lor și măresc încrederea în performanțele modelelor fizice folosite.

Una din categoriile cele mai importante de programe o constituie codurile din domeniul calculelor pe bază de modele și codurile care procesează rezultatele lor în seturi de date folosite în aplicații.

Codurile de model sunt importante deoarece prin dezvoltarea și validarea lor (intercomparări, benchmark-uri) ajută la acoperirea "golurilor" de date experimentale. În biblioteca de coduri există la această categorie peste 50 de coduri clasificate după funcția lor și după modelele teoretice pe baza cărora funcționează.

Cele mai multe coduri se referă la calcule de model optic și model statistic. Unele coduri de model optic pot obține parametrii de model din date experimentale de intrare, altele calculează secțiunea totală, secțiunea elastică directă, secțiunea de reacție și coeficienții de transmisie pentru diferite canale de particule. Sunt și coduri care tratează interacția directă pe baza metodelor DWBA și canale cuplate pentru nuclee permanent deformate.

În ceea ce privește codurile de model statistic, acestea folosesc în esență formalismul Hauser-Feshbach (HF) cu sau fără considerarea fluctuațiilor largimilor de nivele în varianta Moldauer sau HRTW. Formalismul Weisskopf-Ewing este implementat numai în câteva coduri.

Un număr crescând de coduri conțin acum modelul de preechilibru în diverse formulări, ca de exemplu HF cu opțiune de precompound, modelul excitonic, modelul hibrid dependent de geometrie.

Câteva coduri au implementat modele mai recente ca de exemplu multistep direct și multistep compound sau formalismul Feshbach-Kerman-Koonin.

Multe coduri calculează de asemenea distanța medie dintre nivele și funcții de forță. În ceea ce privește aportul diverselor țări, contribuție mai mare de 10% au în ordine:

SUA, China, Italia și Franța. Contribuții de 3% - 4% au țări ca Japonia, România, Germania, Polonia, Țările de Jos. Țări ca Anglia, Austria, Spania, Cehia au un aport de până la 2% iar alte țări nu au nici un fel de participare. Multe din codurile produse în Rusia și alte țări din CSI nu fac parte din biblioteca de coduri a NEA-DB, ele se află eventual în posesia centrului de date nucleare de la Obninsk.

În viitor se pune problema reducerii incertitudinii în datele nucleare necesare pentru reactori avansați și pentru fuziune. Este nevoie de modele mai rafinate pentru actinide și produși de fisiune, pentru a putea permite o ardere mai bună a combustibilului. A crescut interesul în studiul fezabilității noilor tipuri de reactori și în arderea actinidelor minore, scopul este să se investigheze posibilitatea reducerii radiotoxicității și volumului deșeurilor puternic radioactive, pentru aceasta este nevoie de modele perfecționate privind fisiunea actinidelor minore, modele ce se implementează în codurile aferente.

Radionuclizii de viață lungă produși în reactori pot fi transmutați la radionuclizi de viață scurtă prin spalație. Datorită sărăciei de date experimentale în acest domeniu, este nevoie ca multe din date să fie produse pe bază de modele de cascadă intranucleonică.

Necesitatea de date pentru instalațiile de fuziune impune dezvoltarea modelelor de preechilibru, statistice și de interacție directă.

În afară de codurile de model este mare nevoie de coduri de evaluare și compilare (coduri de pre și post procesare). Orice fel de date produse de coduri de model, pentru a putea fi utilizate, trebuie puse în formatul standard ENDF. Există coduri de model care au subrutine ce realizează procesarea datelor în format de bibliotecă ENDF dar cele mai multe coduri de model nu au această facilități și rezultatele lor necesită post-procesare.

Deși activitatea de realizare a codurilor de pre/post procesare este considerată în lumea cercetătorilor mai puțin interesantă și intelectuală, aceasta este de maximă importanță pentru a putea transforma o evaluare bună într-o formă utilizabilă.

Multe coduri de pre/post-procesare au ca scop și verificarea formatului și a consistenței fizice pentru o evaluare completă. Fiecare evaluare trebuie să treacă și prin această procedură strictă înainte de a fi pusă la dispoziție pentru validare în cadrul experimentelor integrale.

O mare parte din datele evaluate pe baza modelelor trebuie procesate în secțiuni de grup necesare în fizica reactorilor, în calculele de protecție la radiații, în calculele de ciclu de combustibil.

Codurile de procesare sunt "uneltele esențiale" care selecționează dintr-o evaluare, datele corecte și informațiile de valoare cerute de o aplicație specifică.

Cu alte cuvinte, atunci când datele nucleare sunt calculate cu modele teoretice, ele sunt capabile "să treacă puntea" spre aplicații numai dacă n-au ca unic scop verificarea de noi teorii.

Pentru a îmbunătăți marjele de siguranță în domeniul reactorilor, este important ca încă din stadiul de proiectare să se poată ști implicațiile incertitudinilor în date. Evaluatorii trebuie să aibă în permanență în vedere că o evaluare completă înseamnă să fie determinată atât incertitudinea cât și corelația acesteia cu alte date generate de acea evaluare. Este și motivul pentru care colecția mondială de coduri conține și programe pentru analiza de incertitudine.

Activitățile desfășurate de NEA-DB "Computer Programe Service" pot fi sintetizate astfel:

- achiziția codurilor de la autori, bazată pe interesul arătat de comunitatea utilizatorilor cu privire la subiectul respectiv (ce face obiectul codului)
- standardizarea codului (într-o formă agreeată de utilizatori)

- implementarea pe alte computere (sisteme de operare)
- documentația procedurii de implementare și istoricul schimbărilor
- verificarea completitudinii
- validarea codurilor împreună cu problemele de test, includerea raportului de validare
- benchmark cu experimente sau soluții exacte/cunoscute
- asigurarea calității, controlul versiunii
- mentenanța codurilor, feedback de la utilizatori, interacția cu autorii
- distribuția către utilizatori (în urma cererilor acestora) într-o formă standard de pachet de programe
- organizarea de seminarii-workshop și cursuri unde se întâlnesc autorii și utilizatorii, se face schimb de experiență și se învață despre cele mai performante modele teoretice
- organizarea de intercomparări în vederea validării codurilor, stabilirii performanțelor modelelor și metodelor de programare, eliminării codurilor necorespunzătoare etc.

8.1 Achiziția codurilor de calcul

Activitatea de achiziționare a codurilor este controlată pe două căi și anume:

- cererile adresate la NEA-DB de către utilizatori pentru coduri care încă nu fac parte din colecție
- anticiparea de către Comitetul Științific al NEA și de către "Computer Program Service" a cererii în domenii ce acoperă noi tendințe în activitățile nucleare (domeniile ce vor deveni "la modă"). Se încearcă acoperirea unor domenii pentru care interesul este inițial limitat la un număr mic de utilizatori specializați, dar care în viitor pot deveni domenii de interes larg.

Asemenea domenii și modelele/codurile aferente sunt identificate în cursul conferințelor, a întâlnirilor de specialiști și din literatura recentă de specialitate.

Se achiziționează anual în medie 150 de noi coduri și versiuni. În ultimii ani s-au achiziționat cu precădere versiuni perfecționate ale codurilor de procesare în vederea punerii la dispoziția utilizatorilor a noilor biblioteci de date evaluate (JEF-2.2, ENDF/B-VI etc.). Categoria de coduri de modele a fost extinsă pentru interacții la energii mai mari (de fuziune și mai sus). S-au mărit și colecțiile de coduri privind gestionarea deșeurilor și impactul activităților nucleare asupra mediului, siguranța reactorilor și analize de accidente nucleare.

Concomitent cu achiziția de noi coduri se urmărește și modernizarea celor existente, se caută ca sistemele mari de coduri să funcționeze în procesare paralelă.

Un pachet privitor la un cod conține următoarele două componente:

a) rapoartele de referință, aici intră:

- descrierea modelului teoretic ce stă la baza codului respectiv
- descrierea modulului în care funcționează codul
- modul de utilizare (descriere a fișierelor de intrare, a fișierelor de ieșire, a opțiunilor etc.) și mentenanța
- raportul de validare
- feedback-ul de la utilizatori

b) materialul procesabil pe computer, care conține:

- programul sau programele sursă
- programul executabil (sub sistemul de operare solicitat)
- fișierele de intrare pentru problemele de test (sample problem(s) input)

- fișierele de rezultate ale problemelor de test (sample problem(s) output)
- informațiile de control al job-ului (modul cum se instalează codul, modul cum se rulează etc.)
- fișiere conținând proprietăți de material, biblioteci de date etc., necesare în funcționarea codului
- programe auxiliare (coduri pre-procesoare, post-procesoare, rutine de afișare grafică etc.)

8.2 Testarea codurilor

Codurile ce sosesc la NEA-DB sunt mai întâi verificate din punct de vedere al conținutului pachetului (să nu lipsească componente, ca de exemplu părți din sursă, fișierele input sau output de test etc.).

Un aspect important ce se urmărește este "portabilitatea" codului, adică posibilitatea ca acesta să ruleze pe cât mai multe tipuri de computere fără nevoia de a fi adaptat (adică fără modificări majore). Este și motivul pentru care "Computer Program Service" încurajează și recomandă autorilor programelor să folosească numai "trăsăturile" standard ale limbajelor de programare.

Ori ce câte ori este posibil fără participarea autorului, CPS mărește portabilitatea codurilor, instrucțiunile originale fiind comentate în sursă și niciodată șterse. Schimbările aplicate codurilor de către NEA-DB-CPS sunt identificabile, documentate și însoțite de linii de comentariu.

Toate problemele și experiența acumulată pe parcursul procesării codului sunt stocate în fișierul de informații ("Information File") care este distribuit o dată cu pachetul codului (formă ASCII standard, necomprimat, spre deosebire de pachet care se livrează comprimat). Informațiile din acest fișier scutesc utilizatorii să mai reia și să mai rezolve o serie de probleme și dificultăți. În figura 8.1 este prezentat un exemplu de "Information File" pentru codul LISTEF (ce face parte din pachetul de coduri utilitate ENDF).

În prima fază a testării sunt identificate componentele lipsă și erorile evidente. În cazul lipsei unor fișiere este contactat autorul pentru a le furniza.

La următorul pas de testare se compilează programele sursă identificându-se incompatibilități și erori de sintaxă, erori de virgulă mobilă și variabile neinițializate etc. Aceste erori sunt corectate și sintaxa este standardizată și adaptată la compilatorul folosit la această pas de verificare. Sunt cazuri când este solicitat și autorul pentru rezolvarea unora din aceste probleme.

Urmează firesc legarea (link) modulelor obiect (*.OBJ) și realizarea executabilului.

Dacă este necesar sunt asignate fișiere periferice pentru accesarea bibliotecilor de date.

Sunt executate apoi problemele de test (de regula cele furnizate de autor), verificându-se dacă rezultatele obținute la NEA-DB-CSP sunt în conformitate cu cele din fișierele de output furnizate de autor. Se verifică de asemenea dacă descrierea "input-ului" dată în manualul de utilizare e în conformitate cu versiunea actuală a codului.

Se verifică apoi dacă formulele modelelor fizice folosite sunt programate corect.

Rularea fără succes, în sensul că nu se reproduc problemele test, implică mai multe iterații la care participă autorul și CPS. Dacă codurile au probleme grave care nu pot fi soluționate în aceste iterații atunci respectivele coduri sunt respinse (nefiind incluse în colecție).

Fișierele output rezultate din rularea codului la CPS devin fișierele output ce vor fi

incluse în pachetul ce se distribuie utilizatorilor.

Dacă se reproduc problemele test dar apar diferențe între rezultatele obținute la verificare și cele furnizate de autor, atunci se face documentare; aceste diferențe putând fi, de exemplu, consecințe ale rulării codului pe alte tipuri de computere decât cele folosite de autor, putând fi datorate efectelor statistice etc.

8.3 Computerele utilizate

NEA-DB a adoptat o anumită strategie a procesului de distribuție a codurilor și anume o parte din muncă este făcută pe computerele de la NEA (DEC-VAX, VMS, UNIX Work Stations) cum ar fi: manevrarea fișierelor, editare, compilare, linkeditare, afișare grafică etc., restul putând fi executat pe alte computere (decât ale NEA) accesate via network. În figura 8.2 este dată schema computerelor de la NEA-DB.

În ultimii ani cea mai mare cerere din partea utilizatorilor a fost de versiuni pentru PC ale codurilor conținute în colecție. S-au achiziționat destule versiuni PC (inițial sub sistem de operare DOS și apoi sub sistem LAHEY-FORTRAN). Compatibilitatea în cazul PC-urilor (în special la compilare) este încă o problemă, de aceea verificarea codurilor în acest caz a necesitat eforturi mari.

8.4 Distribuția codurilor

Din punct de vedere statistic, de la înființarea bibliotecii de coduri au fost distribuite utilizatorilor peste 30000 de pachete de coduri, din care aproximativ 5000 la utilizatori din țările care nu sunt membre ale OECD. În ultimii ani s-au distribuit peste 2000 de coduri.

În ceea ce privește tematica, mai întâi cererea a fost pentru coduri de reactori (proiectare statică, calcule de celulă etc.), de aceea acest domeniu este reprezentat bine în colecția de coduri și toate organizațiile și instituțiile cu activități în acest domeniu dețin asemenea coduri. În ultimii ani interesul a fost pentru coduri în domeniul securității reactorilor, analizei de accidente nucleare. În prezent sunt solicitate codurile cu privire la deșeurile nucleare și radioactivitatea mediului, subiecte ce au devenit "populare". Din nou sunt solicitate codurile de calcul de celulă, o dată cu dezvoltarea domeniului reactorilor avansați.

Codurile de model și de pre/post procesare au o cerere mare și constantă.

Ca regulă pachetele de coduri se distribuie pe medii procesabile pe computer (CD-Rom, dischete, bandă magnetică, eventual network), cu excepția raportului de referință.

"Computer Program Service" ține o evidență strictă a tuturor codurilor distribuite și a locului unde au fost date, deoarece este probabil ca utilizatorii și/sau autorii să constate după un timp erori la unele versiuni ale codurilor sau se pot realiza versiuni noi, extinse ca problemă, perfecționate din punct de vedere al programării etc. și atunci utilizatorii ce dețin variante mai vechi (depășite, incomplete, cu greșeli etc.) pot fi informați asupra acestor lucruri și își pot face corecturile sau pot cere la NEA-DB variantele la zi.

8.5 Feedback la codurile de calcul

NEA-DB-Computer Program Service colectează de la utilizatori următoarele informații:

- erorile și deficiențele detectate de utilizatori la folosirea codului în diverse aplicații proprii utilizatorilor și care e posibil să nu fi fost incluse în problemele de test date de autor

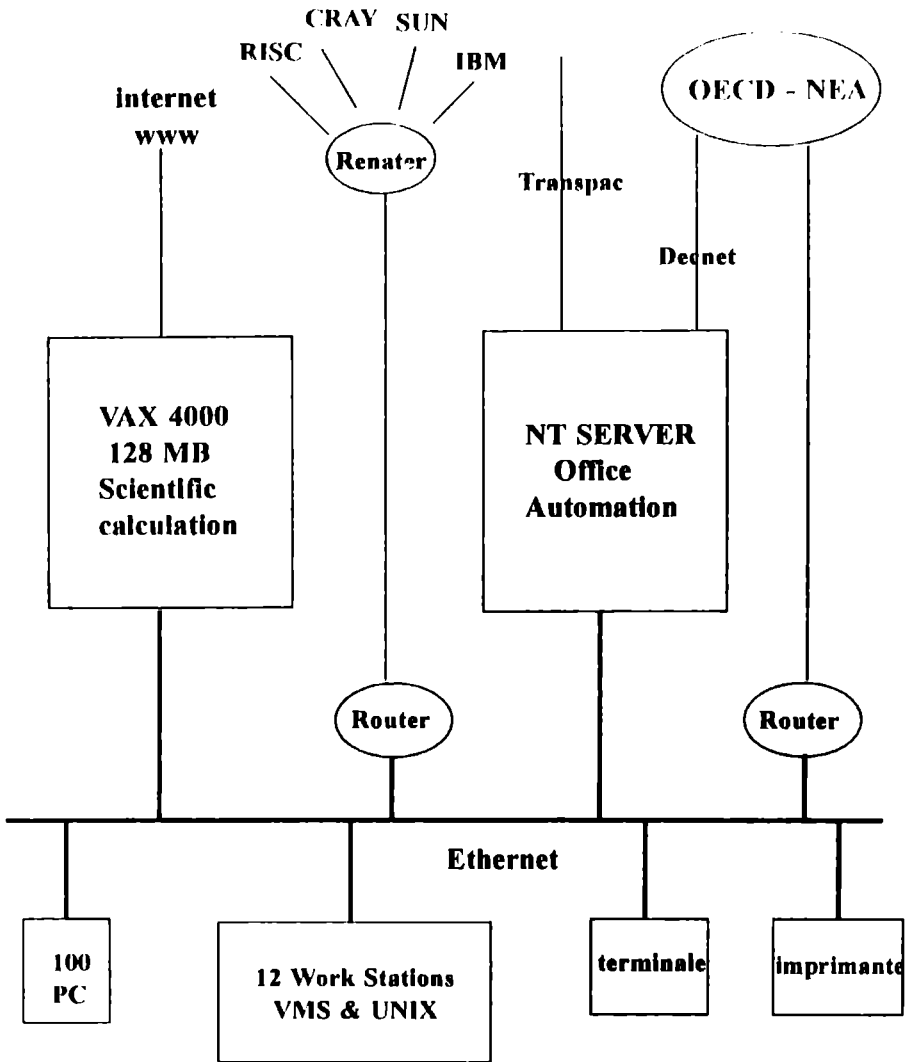


Figura 8.2

- inconsistențe între program și documentația sa
- limitări descoperite în aplicarea codului și care nu au fost raportate în documentație
- programe auxiliare (subrutine, rutine) dezvoltate de utilizatori
- informații asupra validărilor făcute

Toate aceste informații sunt distribuite apoi de către CPS atât autorilor codurilor cât și altor utilizatori și sunt folosite pentru îmbunătățirea codului, dacă acest lucru este solicitat. Activitatea aceasta este schematic ilustrată în figura 8.3.

8.6 Organizarea de cursuri de instruire

Este știut faptul că cel mai performant cod de calcul poate produce rezultate greșite dacă este folosit de utilizatori neexperimentați. Numai în cazul codurilor mici și folosite de experți se poate spune că nu este necesară instruirea. Mai mult, în cazul sistemelor complexe de coduri, chiar utilizatori experimentați în tratarea respectivei probleme pot întâmpina dificultăți mari în folosirea acestora. De aceea NEA-DB organizează cursuri cu privire la cele mai complexe coduri și sisteme de coduri, unde sunt invitați autorii, alți experți din domeniu și utilizatori consacrați ai respectivelor coduri. Ca exemple în ultimii ani au fost organizate cursuri cu privire la sistemele de coduri: MCNP, WIMS, EGS4, DORT, SCALE etc.

8.7 Distribuția de coduri în țările membre IAEA

NEA-DB achiziționează și distribuie coduri de calcul nu numai în țările OECD (peste 500 de instituții acreditate din cele 19 țări membre) dar și în 65 de țări membre IAEA (Europa de Est, Rusia, India, America Latină). Instituțiile sunt autorizate să folosească serviciile legate de biblioteca de coduri de calcul a NEA, după ce au aprobat din partea autorităților lor naționale. Țările IAEA au ca contact, prin intermediul autorității naționale, Misiunea Permanentă a țării lor la IAEA-Viena, pe care trebuie să o informeze cu privire la participarea la serviciile oferite de NEA-DB cu privire la codurile de calcul (aceste reglementări sunt cuprinse în scrisoarea circulară STI-330-9 a Directorului General al IAEA). Misiunea permanentă contactează directorul general al IAEA informându-l asupra participării dorite de o instituție și nominalizează persoana de contact între respectiva instituție și NEA-DB-CPS.

Distribuția codurilor în țările IAEA se referă numai la codurile care sunt originare din țările OECD. În ceea ce privește codurile produse în America de Nord, acestea vor fi cerute de către țările IAEA la centrele de date nucleare din SUA (ESTSC, RSICC).

Pentru țările OECD, NEA-DB distribuie și codurile originare din SUA iar centrele de date nucleare din SUA distribuie la rândul lor coduri ce provin din țările Europei de Vest.

8.7.1 Restricții la distribuția și folosirea codurilor

Programele sunt furnizate pentru cercetări non profit și sunt distribuite fără nici un fel de plată. Codurile distribuite sunt folosite numai de către utilizatori (grupuri de cercetare, laboratoare etc.) din respectiva instituție abilitată și este interzisă darea de copii ale codului în alte instituții.

Proprietatea asupra muncii intelectuale trebuie protejată, schimbul liber de informații nu trebuie să ignore acest principiu; un cod de calcul reprezintă munca intelectuală a unui om sau grup de oameni și acesta rămâne proprietatea lor chiar dacă codul este distribuit fără cost (sau chiar cu plată). De aceea utilizatorii codurilor aflate în biblioteca NEA-DB trebuie să respecte niște reguli de bază:

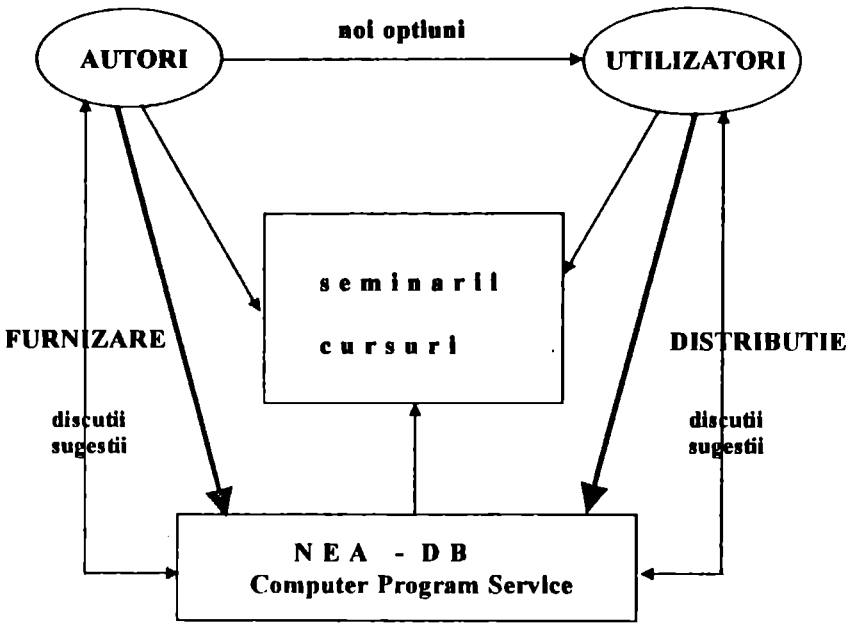


Figura 8.3

Figura 7.1

ENTRY	21019	800228		21019000	1	
SUBENT	21019001	800228		21019001	1	
BIB	14	30		21019001	2	
INSTITUTE	(2UK ALD)			21019001	3	
REFERENCE	(J,NP,65,236,6503) TABLES.			21019001	4	
AUTHOR	(R.BATCHELOR,W.B.GILBOY,J.H.TOWLE)			21019001	5	
TITLE	-NEUTRON INTERACTIONS WITH U-238 AND TH-232 IN THE			21019001	6	
	ENERGY REGION 1.6 MEV TO 7. MEV -.			21019001	7	
FACILITY	(VDG) AWRE 6 MV VAN DER GRAAFF.			21019001	8	
INC-SOURCE	(P-T) TRITIUM GAS TARGET, 4 MEV PULSED PROTON BEAM			21019001	9	
	FOR NEUTRONS UP TO 4 MEV.			21019001	10	
	(D-D) DEUTERIUM GAS TARGET AND PULSED BEAM.			21019001	11	
SAMPLE	.CYLINDERS, 5 CM LONG, 2.50 CM DIAMETER, WITH AN			21019001	12	
	AXIAL HOLE, DIAMETER 1.79 CM FOR U, AND 1.00 CM			21019001	13	
	FOR TH.			21019001	14	
METHOD	(TOF) TIME OF FLIGHT, 1.72 METER FLIGHT PATH,			21019001	15	
DETECTOR	(SCIN) WELL SHIELDED ORGANIC SCINTILLATOR WITH			21019001	16	
	PULSE SHAPE DISCRIMINATION.			21019001	17	
	.AT LOW ENERGIES A GLASS SCINTILLATOR LOADED WITH			21019001	18	
	LI-6 WAS USED BUT GAVE LOW QUALITY DATA.			21019001	19	
MONITOR	(1-H-1 (N,EL) 1-H-1,,SIG) DATA TAKEN FROM BNL325,1958.			21019001	20	
CORRECTION	.CORRECTED FOR BACKGROUND, CONTMINATION NEUTRONS			21019001	21	
	FROM TARGET CELL, SCATTERING OF PRIMARY NEUTRONS			21019001	22	
	FROM MATERIAL OF GAS CELL, VARIATION IN DETECTOR			21019001	23	
	EFFICIENCY AND FISSION COMPONENT IN SPECTRUM.			21019001	24	
	.ALSO FLUX ATTENUATION, MULTIPLE SCATTERING AND			21019001	25	
	SAMPLE GEOMETRY BY MONTE-CARLO CALCULATION USING			21019001	26	
	CODE MAGGIE IN CLUDING TEMPERATURE EFFECTS.			21019001	27	
ERR-ANALYS	.STANDARD DEVIATION, STATISTICAL ERRORS.			21019001	28	
	ERRORS GIVEN IN FIGURE ONLY.			21019001	29	
STATUS	.DATA FROM TABLES IN NP,65,236.			21019001	30	
HISTORY	(790814C)			21019001	31	
	(790831E)			21019001	32	
ENDBIB	30			21019001	33	
NOCOMMON	0	0		21019001	34	
ENDSUBENT	0			21019001	99999	
SUBENT	21019006	800228		21019006	1	
BIB	3	3		21019006	2	
REACTION	(90-TH-232 (N,EL) 90-TH-232,,SIG)			21019006	3	
ANALYSIS	(INTAD) INTEGRATED ANGULAR DISTRIBUTION.			21019006	4	
STATUS	(DEP,21019002)			21019006	5	
ENDBIB	3			21019006	6	
NOCOMMON	0	0		21019006	7	
DATA	4	4		21019006	8	
EN	EN-RSL	DATA	DATA-ERR	21019006	9	
MEV	MEV	B	B	21019006	10	
	2.0000E+00	8.0000E-02	4.5000E+00	2.0000E-01	21019006	11
	3.0000E+00	7.0000E-02	4.6900E+00	2.1000E-01	21019006	12
	4.0000E+00	6.0000E-02	5.2500E+00	2.5000E-01	21019006	13
	7.0000E+00	1.2000E-01	3.0800E+00	1.5000E-01	21019006	14
ENDDATA	6			21019006	15	
ENDSUBENT	4			21019006	99999	
ENDENTRY	2			2101999999999		

- este interzis plagiatul și copierea neautorizată a pachetului codului respectiv. Este interzis "amestecul" persoanelor neautorizate în respectivele coduri.
- copierea neautorizată de coduri poate da naștere la dispute legale iar în unele cazuri poate duce la infectarea cu virusi. Copiile autorizate (furnizate de NEA-DB) protejează utilizatorii de asemenea situații nedorite.

8.8 ACTIVITATEA DE INTERCOMPARARE A CODURILOR DE CALCUL

NEA-DB a organizat și coordonat o serie de activități internaționale de comparare a codurilor de calcul cu scopul de a verifica corectitudinea codurilor, de a mări încrederea în modelele folosite pentru predicția datelor acolo unde nu există date experimentale și de a determina liniile de cercetare ce trebuie abordate pentru rafinarea modelelor, când acest lucru este necesar.

Compararea rezultatelor obținute cu două sau mai multe coduri ce rezolvă aceeași problemă dar sunt făcute și dezvoltate independent, reprezintă o cale eficientă de verificare a corectitudinii acestor coduri. De fapt aceasta este procedura utilizată curent pentru a valida un software complex.

Baza organizării unor exerciții de intercomparare o constituie următoarele scopuri:

- verificarea corectitudinii codurilor de model distribuite de NEA-DB. Biblioteca de coduri va fi astfel îmbunătățită prin corecțiile aduse codurilor existente și prin achiziția de noi coduri; în același timp se elimină codurile învechite și depășite.
- creșterea încrederii în metodele și codurile de calcul al datelor nucleare (în special secțiuni eficiente) acolo unde nu există date experimentale
- schimbul de idei și de experiență în metodele de calcul al secțiunilor eficiente și cunoașterea nivelului la care s-a ajuns cu modelele teoretice; acest lucru fiind hotărâtor pentru activitatea de evaluare
- scop educațional, în sensul că cei noi în domeniu învață cum să se verifice și cum să modeleze problemele, verificându-se cu rezultatele publicate ale exercițiilor de intercomparare. Ei învață de asemenea că corectitudinea rezultatelor finale depinde mai mult de competența utilizatorului decât de unele limitări și deficiențe ale codului sau modelului.

Începând cu 1980 NEA-DB a lansat o serie de exerciții de intercomparare, unele sunt deja încheiate, cu toate concluziile trase, altele sunt încă în desfășurare. Aceste intercomparări sunt următoarele:

- 1) canale cuplate [1]
- 2) model optic sferic și model statistic [2]
- 3) model optic sferic pentru particule încărcate și neutroni [3]
- 4) modele nucleare pentru preechilibru [4]
- 5) intercomparare "oarbă" pentru $n + {}^{184}\text{W}$ la 25.7 MeV [5]
- 6) studii de calcule HF [6]
- 7) calcule de secțiuni de activare [7]
- 8) secțiuni de fisiune [8]
- 9) modele nucleare la energii intermediare [9], [10]

8.8.1 Metode de comparare

Compararea poate implica un singur fizician sau grupuri de fizicieni. O singură persoană poate efectua o comparare în detaliu a mai multor coduri ce rezolvă aceeași problemă. Ceea ce este necesar este familiarizarea cu acea problemă și în special cu

cunoașterea modului cum este translatată respectiva problemă în parametri de intrare.

Pentru a înțelege discrepanțele este necesară o analiză în amănunt a programării pentru fiecare cod. Din cauza volumul mare de muncă și a calificării ridicate, numai câteva coduri pot fi studiate în cazul intercomparării realizate de o singură persoană.

O comparare care implică un grup de fizicieni cere un efort mai mic deoarece fiecare participant (persoană sau grup) utilizează doar unul sau două coduri cu care este deja familiarizat (constituind parte a preocupărilor sale). Toți participanții beneficiază de activitatea de comparare fiindcă își pun în comun rezultatele, poartă discuții, câștigă experiență și încredere în utilizarea diferitelor modele și coduri de calcul. În cazul intercomparărilor realizate de grupuri de specialiști este necesară o coordonare a intercomparării deoarece este vorba de mai multe faze ce se desfășoară pe perioade lungi de timp.

8.8.2 Clasificarea intercomparărilor

Intercomparările pot fi clasificate în diferite categorii, aici sunt trecute în revistă în ordinea acordului între rezultate care este de așteptat:

I. Intercomparări "oarbe" benchmark

În cazul acestor exerciții de intercomparare se dă un set minim necesar de parametri care să descrie problema fizică ce trebuie rezolvată, de exemplu: proiectil, țintă, gridul (grila) de energie și mărimile fizice ce trebuie comparate.

Este lăsată la latitudinea participanților alegerea modelului și a altor parametri.

În cazul intercomparărilor "oarbe" în general nu există date experimentale pentru mărimile fizice ce se cer calculate și chiar dacă există date experimentale, acestea se aduc la cunoștiința participanților la sfârșitul exercițiului de intercomparare.

Scopul acestui tip de comparări este de a testa puterea de prezicere a modelelor folosite în evaluare. Firește se așteaptă ca deviația standard a rezultatelor să fie mare.

II Intercomparări de model

La acest tip de intercomparări se specifică numărul maxim de parametri comuni pentru toate codurile și modelele, cu scopul de a restrânge motivele de discrepanțe; din nefericire unii parametri pot să nu aibă echivalent în diferitele modele.

De data aceasta se furnizează valori experimentale pentru a permite participanților să obțină parametri specifici ai modelului pe baza fitului datelor experimentale cu respectivul model.

Rezultatele diferitelor clase de modele sunt comparate cu date experimentale ce n-au fost puse la dispoziția participanților pentru obținerea prin fit a parametrilor.

Analiza rezultatelor acestui tip de exerciții de comparare permite validarea și stabilirea performanțelor diverselor modele și coduri de calcul.

III Intercomparări de coduri de calcul

La aceste intercomparări se dau în principiu toți parametrii. Din nefericire nu toate codurile de calcul includ exact aceleași posibilități de modelare și de aceea se formulează astfel problema încât fiecare cod să fie folosit pe acea cale care este cea mai conformă posibil

cu specificațiile problemei.

Comparările de acest fel sunt în special de natură matematică, prin ele se verifică corectitudinea programării ecuațiilor modelului și alegerea adecvată a mărimilor interne (parametrilor interni) ale programului ca de exemplu pasul de integrare, raza de racord etc.

IV Intercomparări ale preciziei

În acest caz nu există parametri liberi. Mai mult, parametri interni ai codului trebuie să fie în acord cu specificațiile problemei iar "lungimea de cuvânt" folosită în toate calculele trebuie să fie aceeași la toți participanții.

Acordul de mare precizie între rezultatele obținute cu diverse coduri dezvoltate independent devine benchmark sau referință la compararea altor coduri.

8.8.3 Specificațiile problemei

O dată ce a fost identificată aria de interes pentru intercomparare, coordonatorii exercițiului de comparare supun potențialilor participanți mai multe propuneri pentru comentarii și sugestii.

Calitatea specificațiilor este un aspect crucial al exercitiului și este nevoie de o procedură iterativă cu participanții în scopul de a înlătura posibilele ambiguități în interpretarea problemei fizice și pentru a avea consens asupra celei mai bune probleme care se dă în calcul participanților la respectiva intercomparare [9].

O cale eficientă de a se asigura că participanții sunt de acord cu specificațiile problemei este ca cei ce coordonează intercompararea să furnizeze un chestionar detaliat cu întrebări structurate la care să se poată răspunde clar, fără ambiguități. Firește chestionarul trebuie să permită și precizarea altor specificații înafară de cele originale precum și detalii și aspecte unice pentru unele din codurile folosite de participanți. Acest lucru simplifică mult analiza rezultatelor, face posibilă o concluzie mai omogenă și mai obiectivă și ajută de asemenea la înțelegerea motivului discrepanțelor.

8.8.4 Problema iterațiilor. Aprecierea rezultatelor

La fel ca și specificațiile problemei și aprecierea rezultatelor necesită iterații. O primă comparare este normal să dea mai degrabă rezultate discrepante, aceste discrepanțe pot fi atribuite mai multor cauze ca:

- erori în "translatarea" parametrilor problemei în fișiere de input ale codurilor de calcul
- erori în programarea formulelor matematice ale modelului nuclear
- diferențe în alegerea parametrilor interni ai programului de calcul
- diferențe între modelele folosite de diferiții participanți

În prima iterație coordonatorii intercomparării elaborează un raport preliminar conținând tablele și grafice în extenso arătând discrepanțele, raport care este dat participanților pentru comentarii și discuții.

În runda următoare se corectează erorile de input și posibilele erori de programare și firește se obține un acord mai bun între rezultatele furnizate de participanți.

Eventual se mai face o iterație pentru înlăturarea discrepanțelor rămase. În această etapă participanții pot fi puși să folosească parametri interni de program furnizați de către coordonatori.

După parcurgerea și a acestei etape este de așteptat o convergență rezonabilă și o

consistență a rezultatelor. Se trag apoi concluziile cu privire la calitatea și deficiențele codurilor ca și asupra limitărilor modelelor ce descriu procesul fizic studiat. Se prepară un raport final incluzând comentariile și reluările furnizate de chestionare. Publicarea rezultatelor finale ale exercițiului de intercomparare poate servi ca referință pentru utilizatorii codurilor implicate în respectiva intercomparare și pentru cei ce dezvoltă noi coduri de calcul.

8.8.5 Descrierea succintă a principalelor intercomparări

(1) Canale Cuplate

Problema supusă intercomparării a fost calculul secțiunilor integrate de interacție directă (firește prin metoda canalelor cuplate) pentru procesul $n + {}^{238}\text{U}$ și anume: secțiunea totală, secțiunea de reacție, secțiunea de împrăștiere elastică și secțiunile de împrăștiere inelastică pe primele trei nivele rotaționale (2^+ , 4^+ , 6^+) ale U-238, precum și distribuțiile unghiulare aferente. Domeniul energetic studiat a fost 1 keV - 2.5 MeV [1].

Mulți dintre participanți au efectuat calculele de canale cuplate utilizând diferite versiuni ale codului JUPITOR; diferențele majore între rezultatele obținute de unii din aceștia și alți participanți, ce au folosit alte coduri, s-au datorat razei de record care a afectat rezultatele în domeniul 1 - 10 keV.

Distribuțiile unghiulare au fost în acord bun dar secțiunile integrate au prezentat discrepanțe ce s-au datorat algoritmului de integrare introdus în diversele versiuni. Nici una din versiunile lui JUPITOR n-a calculat valori integrate analitic din elementele de matrice. Discrepanțele majore au fost înlăturate prin integrarea tuturor distribuțiilor unghiulare cu aceeași metodă. S-a obținut astfel un acord de 0.5% între versiunile JUPITOR și un acord mediu de 0.2% cu rezultatele date de alte coduri de canale cuplate.

Pentru a putea realiza compararea cu JUPITOR, codul ECIS-79 a fost modificat în ceea ce privește valoarea maximă a momentului unghiular la intrare. În raportul final este prezentată și compararea altor coduri ca CCROT/VIB și ADAPE cu JUPITOR (model adiabatic).

Ca timp de calcul codul ECIS este mult mai rapid ca JUPITOR.

După parcurgerea iterațiilor de intercomparare, concluzia majoră a fost că cele mai bune coduri de canale cuplate sunt în ordine ECIS și CHUCK-3, ca atare NEA-DB-CPS a retras din bibliotecă codul JUPITOR și recomandă pentru calculele de canale cuplate codul ECIS (pentru reacții de împrăștiere și de transfer) și codul CHUCK (pentru reacții de transfer).

(2) Model optic si statistic

Problema supusă intercomparării a fost calculul secțiunilor reacțiilor induse de neutroni pe Co-59 în domeniul energetic 0.5 - 20 MeV. La acest exercițiu de comparare a fost mai greu să se izoleze diferitele surse de discrepanțe pentru că au fost lăsate participanților prea multe opțiuni libere. Coordonatorii exercițiului au propus două seturi diferite de parametri de potențial optic iar modelul statistic a fost abordat cu și fără corecția de fluctuații ale lărgimilor de nivele. La această intercomparare au participat 12 grupuri de cercetători, unele din aceste grupuri calculând doar partea de ID.

Codurile folosite au fost: SCAT-2, ABACUS-2, OPTICAL-ABACUS-NEARREX, NGROGI, EMPIRE, ELIESE-3, HAUSER-5, CERBERO-3, SASSI-ECN, IDA și ABAREX. Calculele de model optic sferic au dat un acord general bun pentru secțiuni [2].

În ceea ce privește calculele de nucleu compus, s-au folosit diverse modele pentru corecțiile fluctuațiilor lărgimilor de nivele, ceea ce a condus la o împrăștiere a rezultatelor; în domeniul energetic în care această corecție este relevantă, deviația medie a secțiunilor elastice (suma între contribuția ID și NC) a variat între 0.3% și 2%. Cam între aceleași limite s-a plasat deviația și în cazul calculelor fără fluctuații ale lărgimii nivelelor.

Deviația medie a rezultatelor pentru procesul (n, γ) a fost de 25%. Motivul a fost folosirea diferitelor normalizări în lărgimea totală radiativă și distribuțiile diferite de spini în continuumul de nivele.

În ceea ce privește secțiunea inelastică totală, deviația medie a fost sub 5% în regiunea în care aceasta prezintă platou. Discrepanțele s-au datorat corecțiilor diferite asupra fluctuații lărgimilor de nivele și formulelor diferite pentru funcția desităților de nivele.

Pentru procesul $(n, 2n)$ pe domeniul energetic unde acesta e dominant s-a obținut un acord mai bun (de 3%).

În cazul reacțiilor în care se emit particule încărcate discrepanțele între rezultate au fost mari; secțiunile acestor reacții sunt mici comparativ cu secțiunile celorlaltor canale de reacție. Nu s-a verificat cât se extind aceste discrepanțe datorită erorilor în partea de model optic ce implică potențial de particule încărcate, deoarece n-au fost furnizați coeficienți de transmisie.

Acest exercițiu de intercomparare a lăsat chestiuni fără răspuns și a fost propusă îngustarea câmpului de intercomparare.

(3) Model optic sferic pentru neutroni și particule încărcate

Inițial acest exercițiu de intercomparare a fost organizat pentru a identifica unele surse posibile de discrepanțe în secțiunile care implicau potențial optic de particule încărcate în exercițiul precedent de intercomparare. Alt scop al acestei intercomparări a fost să se furnizeze benchmark pentru model optic sferic.

La prima etapă problema supusă intercomparării a fost împrăștierea protonilor și particulelor α pe nucleele ^{12}C , ^{59}Co și ^{208}Pb la energiile de 5, 10, 15 și 20 MeV. Codurile de calcul participante au fost: SCAT, ABACUS-2, ELIESE-3, SMOG, JIB și SCAT-2.

Intercompararea aceasta a avut trei iterații. La a doua iterație secțiunile eficace au fost în concordanță în medie cu 0.3% și s-a constatat că funcțiile coulombiene folosite în diversele coduri au fost în esență corecte.

Iterația a treia a fost concentrată pe reacțiile $p + ^{12}\text{C}$ și $n + ^{12}\text{C}$ și li s-a cerut participanților să folosească aceiași parametri matematici care controlează integrarea ecuației radiale și să utilizeze aceeași valoare pentru numărul de undă K și pentru parametrul coulombian η . Secțiunile integrate obținute au fost în acord de 0.1%, cele diferențiale de sub 1% iar polarizarea de 2% - 3%.

S-a făcut și compararea rezultatelor date de același cod rulat pe calculatoare diferite dar cu aceeași precizie echivalentă la 7 digiți, s-a obținut un acord de 0.1% pentru secțiunile diferențiale și de 0.7% pentru polarizare.

(4) Efecte de preechilibru

Această intercomparare este o extindere firească a intercomparării privitoare la codurile de model statistic, efectul de preechilibru putând fi semnificativ la secțiunile neutronice în regiunea zecilor de MeV. În acord cu clasificarea prezentată, această exercițiu este o intercomparare de model.

Codurile participante s-au bazat pe modele diferite și au fost împărțite în trei clase și anume [4]:

A. formalism Hauser-Feshbach cu opțiune de precompound: STAPRIE, GNASH, EMPIRE, PERINNI, HAUSER-5, TNG. Aceste coduri asigură conservarea momentului unghiular și permit calculul secțiunilor reacțiilor pe stări finale discrete. De asemenea codurile de acest tip sunt aplicabile pe un domeniu larg de energie dar necesită timpi lungi de calcul.

B. model excitonic: PRANG, PREQGM, PREM, PREANG1, PRECO-D, AMAPRE. Codurile din aceasta categorie nu includ conservarea explicită a momentului unghiular. Pe de altă parte au avantajul că nu ocupă multă memorie, sunt simple și rapide. Se folosește model Weisskopf-Ewing cu includere de preechilibru. Din punct de vedere al domeniului energetic aceste coduri sunt operabile la energii peste 5 MeV și nu dau secțiuni pe stări finale discrete.

C. Model hibrid dependent de geometrie (Geometry-Dependent Hybrid Model G.D.H): ALICE, SECDIST, EMPIRE. Modelul hibrid este bazat pe combinația între modelul excitonic și modelul Harp-Miller-Berne. Tratarea diferită a dependentei de energia la ieșire cauzează diferențe în forma spectrelor de emisie. În versiunea dependentă de geometrie se face o descompunere în acord cu momentul unghiular la intrare cu scopul de a ține cont de efectele distribuției de densitate nucleară conducând la emisie de particule de energie mai mare.

Problema supusă spre rezolvare a fost calculul secțiunilor eficace ale reacțiilor induse de neutroni pe Nb-93 la energiile de 10, 14.6, 20 și 25.7 MeV.

Pentru parametrii necesari la emisia de precompound s-a cerut participanților să fiteze spectrul total al neutronilor emiși la 14.6 MeV între 6 MeV și 9 MeV pe datele experimentale furnizate.

A putut fi comparată emisia totală neutronică la 25.7 MeV cu datele experimentale disponibile la acel moment.

Calculul de bază de model optic au dat rezultate similare pentru secțiunea totală, secțiunea de reacție și secțiunea elastică integrată (deviația medie a fost sub 1%). Emisia primului neutron a dat rezultate bune (la 25.7 MeV deviația medie a fost sub 5%). În schimb emisia de particule încărcate a dus la rezultate discordante (deviația s-a plasat între 30% și 60%), parțial acest lucru s-a datorat și valorilor mici ale secțiunilor.

S-au obținut rezultate acceptabile pentru reacțiile (n,n') , $(n,2n)$, $(n,3n)$ în cazul utilizării unor expresii realiste pentru funcția densității de nivele la energii joase [4].

Codurile din categoriile B și C necesită îmbunătățiri la tratarea competiției cu canalele de γ . În final secțiunea totală de producție de neutroni a fost bine prezisă considerând contribuția destul de mică a preechilibrului (mai mică de un sfert din mărimea secțiunii la 25.7 MeV).

Unele din codurile utilizate la această intercomparare au fost capabile să dea spectrul fotonilor produși. Cu aceste coduri s-a obținut un acord bun la energii de emisie în jur de 2.5 MeV. La energii sub 1.34 MeV rezultatele au împrăștiere datorată neglijării contribuției γ din nivelele inelastice discrete.

În concluzie rezultatele calculului au fost consistente pentru împrăștierea inelastică și emisia de neutroni. S-au găsit deviații mari în cazul emisiei de particule încărcate. În general nu s-au obținut diferențe drastice între rezultatele furnizate de codurile din clasa A și cele date de codurile din clasele B și C. De asemenea extrapolarea de la 14.6 MeV la 25.7 MeV dă rezultate acceptabile fără a fi nevoie de schimbarea parametrilor interni.

(5) Intercomparare "oarbă" pentru $n + {}^{184}\text{W}$ la 25.7 MeV

Acest exercițiu reprezintă tot o intercomparare destinată să verifice puterea de prezicere a modelelor existente de precompound pentru nuclee la care nu sunt date experimentale pentru emisia de neutroni.

În acest scop participanților li s-a cerut să calculeze spectrul integrat al neutronilor secundari pentru interacția $n + {}^{184}\text{W}$ la 25.7 MeV și distribuția unghiulară pentru neutronii secundari cu energiile selectate la 13.6 MeV, 15.5 MeV, 18.5 MeV și 21.5 MeV, folosind cea mai bună alegere apriori a tuturor parametrilor de către participanți, cu excepția parametrilor de model optic [5]. Pentru calculele de interacție directă organizatorii intercomparării au recomandat utilizarea unui potențial optic deformat pentru nucleul studiat, cu parametrii acestuia obținuți prin fit pe datele experimentale ale sumei secțiunilor inelastice pe nivelele 2^+ și 4^+ .

La această intercomparare au participat 7 grupuri de cercetători, mulți dintre aceștia au folosit potențial optic global construit în codurile lor, în schimbul potențialului recomandat de coordonatori.

S-au studiat două cazuri:

i) compararea rezultatelor date de autori. Această comparare arată puterea de predicție a diverselor coduri nefolosind informații specificate despre nucleul studiat.

ii) compararea secțiunilor eficace calculate renormalizate pentru folosirea potențialului furnizat. Aceasta comparare arată ce îmbunătățire se obține, dacă se obține și dacă se obține un potențial optic ca urmare a acestui studiu.

Codurile au fost clasificate la fel ca în intercompararea anterioară și în acest exercițiu au participat următoarele coduri:

- A. GNASH, STAPRE, TNG
- B. PRECO-D3, PEQGM, EXIM
- C. ALICE, GDH + model de evaporare

Spectrul total al neutronilor emiși (incluzând neutronii din procesele succesive de evaporare) a fost calculat cu codurile GNASH, STAPRE, TNG, ALICE și PEQGM; codurile PRECO-D3 și EXIM dau numai prima emisie de neutroni.

Distribuțiile unghiulare au fost calculate cu codurile GNASH, TNG, PRECO-D3, EXIM și ALICE. Secțiunea totală a neutronilor emiși a fost calculată din secțiunea totală a reacției și multiplicata medie a neutronilor.

În ceea ce privește secțiunea eficace totală și de reacție, rezultate din folosirea de către participanți a potențialelor optice globale ca Wilmore-Hodgson sau regionale (pe regiuni de masă a nucleelor țintă), s-au constatat diferențe de peste 20%; ca atare s-a recomandat utilizarea unui potențial optic specificat [5]. Tot din cauza utilizării potențialelor optice diferite s-a constatat o împrăștiere considerabilă (20%) în ceea ce privește secțiunea integrată după unghi a primului neutron emis și secțiunea eficace totală.

În cazul utilizării aceleiași secțiuni eficace totale ca dată de intrare se obține un acord bun al secțiunilor totale ale neutronilor emiși.

Faptul că nu s-au obținut diferențe mari între rezultatele date de codurile bazate pe formalism Hauser-Feshbach și codurile ce nu includ conservarea explicită a momentului cinetic, înseamnă că emisia totală de neutroni nu este mult influențată de efectele competiției γ și de momentele cinetice.

Din compararea spectrului total integrat al particulelor emise au fost trase următoarele concluzii [5]:

- i) toate codurile bazate pe model excitonic au dat o predicție rezonabilă a secțiunii

absolute de emisie de neutroni (devieri nu mai mari de 25%) în domeniul energetic neutronic 12 - 18 MeV dar nu descriu bine partea de energii înalte a spectrului măsurat. Se pare că o descriere completă a spectrului este posibilă prin adăugarea contribuției considerabile a excitării prin mecanism direct a nivelelor colective peste o energie de excitație de aproximativ 7 MeV.

ii) nu au apărut mari diferențe în calitatea fitului cu datele experimentale între calculele originale și cele normalizate. Aceasta înseamnă că incertitudinea în calculele de precompound este prea largă, așa încât erorile adiționale aduse de folosirea parametrilor de model optic global nu au o contribuție semnificativă.

iii) rezultatele calculelor cu model hibrid dependent de energie dau un acord mai bun cu spectrul măsurat dar și cu acest model este nevoie de contribuția reacțiilor directe la energii mari ale neutronilor. Toate calculele cu model GDH subestimează datele experimentale în medie cu un factor de 1.8.

În concluzie, această intercomparare "oarbă" a arătat că modelele prezente de emisie de precompound și codurile bazate pe aceste modele sunt capabile să prevadă secțiuni eficace absolute dublu diferențiale de emisie de neutroni cu o acuratețe rezonabilă cu excepția cozii de la energii mari a spectrului.

Domeniul de energii de excitație de peste 5 MeV în nucleul rezidual este populat mult mai puternic decât previziunile modelelor de prechilibr. Acest lucru a fost observat de asemenea la spectrele neutronilor emiși de diverse nuclee la 14 MeV și este de presupus că trebuie introdusă contribuția excitării directe a nivelelor colective pentru a avea o descriere completă.

Codurile de model excitonic dau rezultate cu o acuratețe acceptabilă; codurile de model GDH dau un fit mai bun al formei spectrului dar subestimează considerabil valorile absolute experimentale.

(6) Calcule de model Hauser-Feshbach

Acest exercițiu de intercomparare este la rândul său o continuare a intercomparării de coduri de interacție directă. O parte din chestiunile la care nu s-a putut răspunde la acea intercomparare, a fost preluată în aceasta.

Scopul principal al acestei intercomparări a fost să se stabilească valori corecte pentru calculele de model statistic, necesare pentru validarea noilor coduri de model statistic.

Problema dată participanților a constat în calcularea secțiunilor de împrăștiere inelastică a neutronilor pe un nucleu fictiv de ^{60}Co pe următoarele nivele: 0^+ starea fundamentală, 2^+ cu energia de excitație 0.1 MeV, 4^+ cu energia de excitație 0.3 MeV și 0^+ cu energia de excitație 1 MeV. S-a cerut efectuarea calculelor de model statistic la următoarele energii incidente (în SL): 0.2, 0.5, 1 și 2 MeV. Participanților li s-a solicitat să calculeze și secțiunile diferențiale de nucleu compus elastice și inelastice în SCM din 10° în 10° .

Coordonatorii intercomparării au furnizat pentru toate canalele coeficienții de transmisie calculați cu potențiale optice fenomenologice.

Calculele de model Hauser-Feshbach au diferit în particular datorită modului în care s-a considerat favorizarea canalului elastic: corecție Moldauer sau HRTW.

La această intercomparare au fost date 25 de rezultate (contribuții) cu diferite coduri: CINDY, COMNUC, HAUSER5, HELENE, HELGA, JACQUI, MAURINA, NANCY, OPSTAT, POLIFEMO, STAPRE, WILMORE6.

Marea parte a rezultatelor au arătat consistență între fiecare din cele două clase de

 INFORMATION FILE

 PROGRAM-NAME: LISTEF-6.9
 PACKAGE-ID: USCD1197/07

STATUS: TESTED

TESTED ON

- COMPUTER : VAXstation 3100 M38
 Brett pentium 75, 16 Mb, 75 MHz
- OPERATING SYSTEM : VAX/VMS version 6.1
 MS - DOS 6.2
- COMPILER : VAX FORTRAN 6.2
 Lahey FORTRAN version 5.20

ORIGINAL COMPUTER : Many

 NEW VERSION DIFFERS FROM PREVIOUS VERSION IN THE FOLLOWING FEATURES

- VERSION 6.0 JULY 1985 C.L. DUNFORD
 1. LSTFCV CONVERTED TO FORTRAN-77
 2. NEW ENDF-6 FORMATS FILES 1-27 ADDED
 3. FILE 33 LB=6 FORMAT ADDED
 4. ADLER-ADLER PROCESSING ADDED
 5. SUMRIZ PROGRAM MERGED
- VERSION 6.1 DECEMBER 1985 C.L. DUNFORD
 1. CORRECTIONS TO VERSION 6.0
- VERSION 6.2 DECEMBER 1986 C.L. DUNFORD
 1. CORRECTIONS TO VERSION 6.1
 2. FILE 6, LAW=7 ADDED
 3. READ MT=457 SPECTRA COVARIANCES
- VERSION 6.3 AUGUST 1987 C.L. DUNFORD
 1. CORRECTIONS TO VERSION 6.2
 2. RESTORE REICH-MOORE TO ENDF-5 FORMAT
 3. PROCESS MORE THAN ONE INPUT FILE
 4. IMPROVE TITLING
 5. FORMAT CHANGES OF MAY 1987 EXCEPT
 GENERALIZED R-MATRIX
- VERSION 6.4 MAY 1988 C.L. DUNFORD
 1. CORRECTIONS TO VERSION 6.3
 2. HYBRID R-FUNCTION FOR RESONANCE REGION
- VERSION 6.5 APRIL 1989 C.L. DUNFORD
 1. NEW FORMATS FOR FILES 32, 34, 35, AND 40
- VERSION 6.6 JUNE 1990 C.L. DUNFORD
 1. CORRECTIONS TO VERSION 6.5
 2. PHOTON INTERACTION FORMAT EXTENSIONS
 3. LOG STORAGE OF S (ALPHA, BETA)
- VERSION 6.7 JUNE 1991 C.L. DUNFORD
 1. CORRECTIONS TO VERSION 6.6
 2. ADDITION OF PION PRODUCTION MTS
- VERSION 6.8 JULY 1992 C.L. DUNFORD
 1. CORRECTIONS TO VERSION 6.7
 2. VAX INPUT ON COMMAND LINE
- VERSION 6.9 NOVEMBER 1992 C.L. DUNFORD
 1. CORRECTIONS TO VERSION 6.8

Figura 8.1 - continuare

1. CORRECTED BROND NLIB NUMBER TO BE 41

RESULTS OF STATIC ANALYSIS (with verification and validation system RXVP)

Three errors were detected in module DIROUT, where variables NEXT, FSTRNG, DSTRNG were initialized only at the first time the subroutine was called. We included statement SAVE NEXT, FSTRNG, DSTRNG to avoid this problem.

MODIFICATIONS NEEDED TO RUN THE TEST CASE(S)

We used program SETMDC to obtain the interactive VAX version and the PC version from the ANSI version. Only these two versions are supported; to have a different version the user will have to verify the ANSI version and, if necessary, adapt it to his host computer.

Compile and link steps were done without problems.

We tested this program with library JEF 2.2 in ENDF/B-VI format and library HUGO in ENDF/B-V format. During the test we only could check some of the program features. The library included in the package for testing purposes is a sub-set of JEF library. To run the test cases:

- on the VAX -> @LISTEF
- on the PC -> LISTEF<LISTEF.PCI

COMPUTER DEPENDENT FEATURES (IN TESTED MODIFIED VERSION)

LANGUAGE : FORTRAN 77

NON-STANDARD ANSI FEATURES USED : Some extensions of VAX FORTRAN are used in the VAX version.

OPERATING SYSTEM UTILITIES: None

BINARY LIBRARIES: None

OTHERS:

PROGRAM SIZE

FILE STORAGE : see "DETAILED FILE DESCRIPTIONS".

EXECUTION TIMES

VAX -> 17 seconds for the test case included in the package.
PC -> 5 seconds for the test case included in the package.

DETAILED FILE DESCRIPTIONS

FILE CONTENTS

1	This information file	LISTEF.INF	
2	LISTEF source file	LISTEF.ANS	189462
3	LISTEF source file for VAX	LISTEF.VAX	
4	Sample input data for VAX	LISTEF.COM	
5	Sample output data from VAX	LISTEF.OUT	
6	Full output from VAX	LISTEF.FUL	
7	Library for testing purposes	JEF.LIB	346042
8	LISTEF source file for PC	LISTEF.FOR	189462
9	LISTEF executable file for PC	LISTEF.EXE	378592
10	Sample input data for PC	LISTEF.PCI	38
11	Sample output data from PC	LISTEF.PCO	18748
12	Full output from PC	LISTEF.PCF	380780
13	Lahey error messages	F77L3.EER	40584

<https://biblioteca-digitala.ro> / <https://unibuc.ro>

rezultate: fără fluctuații, cu fluctuații în forma Moldauer sau HRTW. Soluțiile recomandate au fost publicate în [6]. Rezultatele care au avut diferențe mari față de [6] au fost excluse din raportul final.

Toate calculele au dat secțiuni totale (de nucleu compus) care n-au diferit una de alta cu mai mult de 1%, ceea ce a arătat consistența calculelor.

(7) Calcule de secțiuni de activare

Pentru reactorii de fuziune este nevoie de materiale cu secțiuni de activare mici pentru ca efectele iradierii să poată fi micșorate. În scopul de a identifica asemenea materiale și pentru a determina gradul de puritate necesar trebuie cunoscut un număr foarte mare de reacții (în jur de 10^4); pentru o bună parte din acestea nu există date experimentale și este nevoie de modele nucleare pentru estimarea secțiunilor.

Având în vedere numărul mare de date cerute, nu este recomandat să se utilizeze, pentru obținerea acestor date, coduri de calcul prea sofisticate și care necesită timp lung de calcul [7].

Deoarece acest exercițiu de intercomparare are ca scop prezicerea de secțiuni pentru care nu există date experimentale, reacțiile alese (și pentru care n-au fost făcute măsurări de secțiuni) au fost: $^{60}\text{Co}(n,p)^{60}\text{Fe}$ și $^{60}\text{Co}(n,\alpha)^{57}\text{Mn}$, pe domeniul energetic 1 - 20 MeV.

În prima etapă li s-a cerut participanților să calculeze secțiunile proceselor (n,p) și (n, α) folosind "cei mai buni parametri fizici" bazați pe judecata lor de experți. Cu alte cuvinte nu au fost specificați parametrii de model, adică a fost vorba de o intercomparare "oarbă" de model.

După această primă etapă s-a obținut un acord destul de bun, dacă avem în vedere că modelele de calcul folosite n-au diferit prea mult; mulți participanți au folosit codul GNASH iar diferențele în rezultate s-au datorat parametrilor de model lăsați la latitudinea participanților.

În această intercomparare s-au folosit codurile: ALICE, EXIFOR, GNASH, MAURINA, STAPRE, PCCROSS, PRIMA-2, TNG și UNIFY-2.

La a doua iterație coordonatorii intercomparării au furnizat o serie de parametri ca: parametrii de potențial optic și distanța medie dintre nivele. S-a așteptat o creștere a acordului între rezultatele participanților dar rezultatele preliminare n-au arătat îmbunătățirile așteptate.

Este planificat să se extindă această intercomparare la alte canale de reacție ca: (n, $x\gamma$), (n,xd), (n,xt) în care caz pe lângă mecanism de nucleu compus și preechilibru trebuie considerat mecanismul ID de pick-up.

(8) Calcule de secțiuni de fisiune

Această intercomparare, conform clasificării prezentate, este considerată mai mult o intercomparare de model decât de coduri de calcul. Spre deosebire de celelalte exerciții de intercomparare organizate de NEA-DB, la acesta o parte din susținerea financiară a fost asigurată de programul japonez OMEGA (Options for Making Extra Gains from Actinides and Fission Products Generated in the Nuclear Fuel Cycle).

Modelele de fisiune diferă unele de altele (de exemplu considerarea barierei duble sau triple de fisiune, diferitele feluri de densitate de nivele la deformările din punctele de șa, groapa izomeră etc.), ceea ce face dificilă conceperea și organizarea unui exercițiu de intercomparare.

La prima iterație participanților li s-a dat doar un set de parametri de bază, aceștia

trebuind sa-și folosească propria competență în alegerea parametrilor specifici modelului

Scopul intercomparării a fost să se stabilească cât de bine se poate prezice secțiunea de fisiune pentru unele actinide minore pentru care datele experimentale sunt incomplete. Cunoașterea secțiunii de fisiune pentru acestea este crucială în aprecierea performanțelor sistemelor de transmutație a actinidelor.

Acuratețea ar putea fi verificată mai întâi prin calcularea secțiunii de fisiune care e cunoscută cu o incertitudine sub 5%. În practică evaluatorii încep cu cea mai bună presupunere a parametrilor și îi ajustează ca să fiteze datele experimentale. Această procedură nu conduce în mod necesar la găsirea unor "parametri realiști".

Când se utilizează o bază consistentă de parametri de rezonanță și de densitate de nivele la barierele de fisiune, luată din sistematici, se așteaptă incertitudini de peste 25%.

Prin urmare scopul principal al exercițiului de intercomparare a fost identificarea modelelor și codurilor de calcul ce conduc la rezultate consistente.

Parametrii de input furnizați de coordonatorii intercomparării au fost:

- mase nucleare, Q și alți parametri legați de aceștia
- scheme de nivele
- coeficienți de transmisie calculați cu metoda canalelor cuplate (au fost dați și parametrii potențialului optic deformat utilizat în calculele de canale cuplate)
- parametri de densitate de nivele pentru nucleele țintă/rezidual și pentru nucleele compuse
- specificații cu privire la bariera de fisiune și la densitatea de nivele în punctele de șa
- parametri legați de competiția γ

Nucleele ce au făcut obiectul intercomparării au fost Pu-239 și Am-241, domeniul energetic neutronic fiind 0.05 MeV - 3 MeV.

S-a considerat corecția de fluctuații, s-a recomandat bariera dublă de fisiune (cu presupunerea dampingului complet în groapa a doua) și s-a cerut calcularea secțiunilor pentru reacțiile: (n,f) , (n,γ) , (n,n) și (n,n') .

În ciuda faptului că la această intercomparare numărul participanților a fost mic (opt grupuri de cercetare la prima etapă și numai două la cea de-a doua), s-au putut trage concluzii privind acuratețea așteptată la secțiunea de fisiune calculată și asupra faptului că este nevoie în continuare de un efort susținut pentru a putea furniza parametrii de bază necesari în calculele secțiunilor de fisiune [8].

O bună parte din participanți au folosit coduri de calcul consacrate (GNASH, COMNUC, STAPRE și IIAUSER); ceilalți au utilizat coduri proprii (INEMINSK, GIGFG, MAURINA, NRLY) pentru care nu au fost cunoscute de către coordonatorii intercomparării toate specificațiile (autorii furnizând numai o parte din ele).

Pentru funcția densității de nivele la deformarea de echilibru (necesară în calcularea secțiunilor proceselor de împrăștiere și captură radiativă) participanții au folosit model Fermi-gaz asociat cu formula Gilbert-Cameron cu temperatură constantă, cu parametrii din specificațiile problemei. Rezultatele au fost comparabile deși distanța între nivele dată în specificații ($D_{n,n}$, la energia de legătură a neutronului B_n) a fost folosită atât la energii mai înalte cât și la energii joase.

Interpretarea densității de nivele pentru canalele de fisiune (la deformările nucleului la punctele de șa) a fost mai complicată și au fost luate în considerare două seturi de rezultate:

- i) secțiuni de fisiune calculate fără factori de creștere
 - ii) secțiuni de fisiune calculate cu factori de creștere recomandați în specificațiile problemei
- Totuși nu a fost totdeauna clar ce fel de factori de creștere au folosit participanții datorită lipsei de informații cu privire la unele dintre codurile de calcul folosite [8].

În linii mari concluziile trase din analiza rezultatelor primei faze (calcul pentru Pu-239 și Am-241) și celei de-a doua faze (calcul numai pentru Am-241, pe baza altui set de specificații) sunt:

i) Toți participanții au calculat practic aceleași valori pentru secțiunea de nucleu compus prin folosirea coeficienților de transmisie (de canale cuplate) dați în specificații; acuratețea secțiunii de nucleu compus depinde numai de acuratețea parametrilor de potențial optic deformat folosit în calculele de canale cuplate (în urma cărora se obțin și coeficienții de transmisie pentru canalele neutronice).

ii) În ceea ce privește densitatea de nivele la deformarea de echilibru s-au utilizat atât formule clasice (temperatură constantă la energii joase racordată cu Fermi-gaz la energii mai înalte) cât și modele mai sofisticate ce țin cont de deformările nucleului. Se pare însă că rezultatele nu diferă prea mult; forma variației densității de nivele cu energia de excitație este diferită în cele două cazuri dar aceasta nu duce la diferențe mari în secțiunile calculate [8].

iii) Deformarea considerabilă și diferită din punctele de șa, necunoașterea schemei de nivele [8], face dificil calculul densității de nivele pentru canalele de fisiune. Firește că se recomandă folosirea factorilor de creștere rotaționali și vibraționali (pentru a compara modelul brut Fermi-gaz de la nuclee sferice cu modelele ce țin cont de deformarea nucleului, în plus factorii de creștere pentru deformările din punctele de șa pot fi mult mai mari decât cei de la deformarea de echilibru). În general factorii de creștere sunt ajustați în scopul reproducerii valorilor experimentale ale secțiunii de fisiune.

În prezentul exercițiu s-a constatat că Jacă se utilizează aceiași parametri ai densității de nivele și aceiași factori de creștere se obțin valori foarte apropiate pentru secțiunea de fisiune ceea ce arată faptul că codurile de calcul utilizate sunt consistente.

iv) Consistența între rezultatele obținute cu diverse coduri folosind parametri similari de intrare nu înseamnă că secțiunea de fisiune ar putea fi calculată cu acuratețe rezonabilă. Se propune încercarea de a construi o sistematică referitoare la factorii de creștere.

(9) Modele nucleare la energii intermediare

Studiile privind transmutația radionuclizilor de viață lungă produși în reactor au primit o atenție deosebită în ultimul timp. Una din opțiunile investigate este transmutația cu surse de spalație. Pentru optimizarea proiectării la asemenea instalații este cerută o mare cantitate de date nucleare acoperind un domeniu energetic peste 1.5 GeV. Și în acest caz există goluri mari în privința datelor experimentale și pentru acoperirea lor trebuie să se apeleze la modele nucleare și codurile de calcul aferente lor [9].

Un prim exercițiu privind verificarea codurilor de model pentru energii intermediare (condus de M. Blann de la LLNL) a urmărit să identifice domeniul energetic în care pot fi extinse aproximațiile ce dau fișierele clasice de date evaluate și unde datele de secțiuni eficiente pot fi produse direct în subrutine de transport de particule din codurile de simulare [9]. În conformitate cu clasificarea intercomparărilor acest exercițiu este o intercomparare "oarbă" în care participanților li s-a cerut să calculeze secțiunile proceselor (p,xn) pentru nucleele ^{208}Pb și ^{90}Zr în domeniul energetic 25 - 800 MeV. În privința secțiunilor cerute în acest exercițiu, nu au existat date experimentale publicate iar cele existente au fost aduse la cunoștința participanților după ce aceștia au predat rezultatele.

Pașul următor al acestei intercomparări a fost inițiat ca parte a programului NEA în domeniul transmutației deșeurilor nucleare, având scopul de a determina puterea de predicție a modelelor curente de reacții nucleare în calculul secțiunilor de activare în domeniul energiilor intermediare, acest lucru fiind necesar și la proiectarea acceleratoarelor folosiri

pentru transmutația deșeurilor radioactive [10].

Atenția coordonatorilor intercomparării a fost focalizată pe aprecierea calitatii calculului de secțiuni de activare pe o gamă largă de ținte (O, Al, Fe, Co, Zr, Au), prin compararea acestora cu date experimentale de bună calitate.

Cele 29 de rezultate, furnizate de 18 grupuri participante, au fost comparate cu un număr de aproximativ 6000 de secțiuni experimentale pentru 202 combinații țintă/produs. Au fost folosite 22 de modele și coduri aferente, dând o imagine a capacității actuale de modelare. Raportul [10] arată că există diferențe semnificative între rezultatele diferitelor coduri care calculează secțiuni de producere a nucleelor reziduale, de la prag până la peste 5000 MeV.

Acordul dintre datele experimentale și cele calculate este exprimat în [10] prin factorii de deviație, din analiza cărora s-a putut trage concluzia că incertitudinile în prezicerile modelelor pot ajunge până la un factor de 2. S-a constatat de asemenea o împrăștiere mare a datelor calculate; pentru o anumită reacție rezultatele calculului cu diferite coduri pot diferi între ele cu mai mult de 3 ordine de mărime. Aceste probleme se datorează însă și valorilor diferite folosite pentru mase, energii de legătură, călduri de reacție Q, efectelor de păături ca și diverselor formule folosite pentru densitatea de nivele și neglijării competiției între γ și dezexcitarea pe canalele de particule a nucleelor excitate intermediare etc. [10].

Cauzele fiind multiple -pentru un model și cod- acestea pot fi evaluate prin exerciții de parametrizare de model pentru un domeniu larg de reacții.

Bibliografie:

[1] Sartori E. "Report on the Nuclear Model Codes Intercomparison. Coupled Channel Model Study", NEANDC-182A, INDC(NEA), 1984

[2] Prince A., Reffo G., Sartori E. "Report on the International Nuclear Model Code Intercomparison, Spherical Optical and Statistical Model Study", NEANDC/INDC(NEA)4, 1983

[3] Hodgson P.E., Sartori E. "International Nuclear Model Code Comparison Study of the Spherical Optical Model for Charged Particles", NEANDC-198U, INDC(NEA)5, 1985

[4] Grupelaar H., Nagel P. "International Nuclear Model Code Comparison on Pre-Equilibrium Effects", NEANDC-204"U"/INDC(NEA)6, 1985

[5] Vonach H.K., Nagel P. "Blind Intercomparison for $n + W^{184}$ at 25.7 MeV", Specialists' Meeting, 1988 (NEA-DB Newsletter no.34, 1989)

[6] Hodgson P.E., Sartori E., Shibata K. "International Nuclear Model Code Comparison Study of Hauser-Feshbach Calculation", NEANDC-298U, INDC(NEA)8, 1991

[7] Cierjacks S., Shibata K. "Blind Intercomparison of Nuclear Model Cross Section Calculations", private communication 1991

[8] Derrien H. "Results of an International Code Intercomparison for Fission Cross Section Calculations", NEA/P&T Report no.8, NEA/NSC/DOC(94)6, 1994

[9] Sartori E. "Review of Nuclear Model Codes Comparison Exercises" in "Computation and Analysis of Nuclear Data relevant to Nuclear Energy and Safety", Trieste 1992, 901-919

[10] Michel R., Nagel P. "International Codes and Model Intercomparison for Intermediate Energy Activation Yields" NEA/NSC/DOC(97)1, 1997

9. SITUAȚIA BIBLIOTECILOR DE DATE NUCLEARE EVALUATE

Dezvoltarea reactorilor termici și rapizi și mai nou cercetările privitoare la tehnologia reactorilor de fuziune ca și problemele legate de radioactivitatea mediului ambiant, au constituit motorul ce a impulsionat domeniul datelor nucleare incluzând firește activitatea de evaluare a datelor nucleare și realizarea bibliotecilor de date nucleare evaluate.

Pentru reactorii termici convenționali și pentru reactorii reproducători cu neutroni rapizi a fost nevoie de o mare cantitate de secțiuni eficiente pentru o gamă largă de elemente și izotopi (aproximativ 1000), cuprinzând întregul sistem periodic al elementelor și acoperind ca domeniu energetic al neutronilor 12 decade (10^{-5} eV - 10^7 eV). Pentru cercetările legate de fuziune ca și pentru celelalte domenii prioritare acum, a fost și este nevoie de secțiuni de activare, de transmutație și de secțiuni dublu diferențiale.

Cerințele voluminoase de date nucleare au stimulat dezvoltarea bibliotecilor de date nucleare evaluate globale și specializate prin munca cercetătorilor din multe părți ale lumii, de cele mai multe ori în cooperări (bilaterale, regionale, internaționale).

9.1 REALIZARI SI DEFICIENȚE ALE FIȘIERELOR ACTUALE DE DATE NUCLEARE EVALUATE

a) Principalele realizări privitoare la bibliotecile de date evaluate pot fi sintetizate astfel:

- Creșterea în dimensiuni a fișierelor care cuprind în prezent detaliile ale reacțiilor ce acoperă versiunile mai vechi.
- S-au făcut eforturi mari pentru testarea noilor versiuni ale acestor biblioteci.
- S-a depus o activitate serioasă pentru realizarea de noi evaluări ale secțiunilor eficiente standard.
- Concepțiile de evaluare simultană a secțiunilor de fuziune și captură radiativă pentru actinidele majore au dus la creșterea consistenței datelor nucleare evaluate.
- A crescut numărul de rezonanțe rezolvate analizate mai corect cu formalism Reich-Moore pentru principalele materiale de structură și pentru principalele actinide, permițând calculul coeficientului Doppler cu acuratețea cerută la reactorii rapizi și ca atare îmbunătățirea parametrilor mediați de rezonanță necesari pentru optimizarea potențialelor optice.
- S-au rafinat modelele nucleare și codurile de calcul aferente, care s-au aplicat mult în analiza și predicția secțiunilor eficiente în domeniul energetic al MeV-ilor.
- Pentru nucleele importante s-au realizat multe fișiere de incertitudini utilizând covarianțe.
- Au putut fi soluționate unele probleme de evaluare de lungă durată privind secțiunile de captură ale materialelor de structură și U-238 precum și secțiunile din domeniul termic la actinide.

b) Bibliotecile globale de date evaluate au unele deficiențe care au putut fi evidențiate prin activitățile recente de intercomparare a acestora [1] și din lucrările diverselor conferințe și reuniuni științifice.

Heterogenitățile din cadrul fișierelor de date evaluate și între diversele fișierele de date evaluate pot fi sintetizate astfel:

- evaluările secțiunilor eficiente ale elementelor naturale nu sunt totdeauna consistente cu suma secțiunilor evaluate pentru izotopi individuali [2]

- utilizarea de formate diferite pentru bibliotecile de date evaluate împiedică compararea datelor din MF = 6 (secțiuni dublu diferențiale)
- sunt diferențe între biblioteci privind datele de completare și în ceea ce privește completitudinea MF-urilor la acoperirea unui MAT.
- fișierele de date evaluate au goluri semnificative privind secțiunile dublu diferențiale (MF = 6), datele de producție γ (MF = 12, 13, 14, 15) și datele de incertitudine/covarianță, de altfel acestea din urmă nu sunt realizate pentru MF = 6 și pentru parametrii de rezonanță din MF = 2.
- sunt încă menținute aproximații fizice grosiere și anume:
 - spectrele γ de captură sunt considerate la fel la toate energiile neutronilor peste 20 MeV
 - distribuțiile unghiulare gamma sunt presupuse izotrope la toate energiile

Discrepanțe majore între datele *bibliotecilor globale* apar la următoarele grupe de materiale:

i) materiale de structură: evaluările datelor pentru Cr, Fe, Ni au fost recent actualizate în bibliotecile ENDF/B-VI, JEF-2.2 și JENDL-3 dar există discrepanțe semnificative la izotopii individuali în ceea ce privește secțiunile σ_{tot} , $\sigma_{nn'}$, σ_{n2n} și $\sigma_{n\gamma}$; în ceea ce privește secțiunile procesului $^{58}\text{Ni}(n,\alpha)$ și la secțiunile de producție γ (MF = 13, 15) [2]

ii) actinide majore: există discrepanțe serioase între toate fișierele globale la secțiunile din MF = 3 și anume secțiunile inelastice, secțiunile de fisiune și secțiunile (n,γ) [1]

iii) actinide minore: și aici sunt discrepanțe între bibliotecile globale în ceea ce privește secțiunile σ_{nf} , $\sigma_{n\gamma}$, $\sigma_{nn'}$, σ_{n2n} și mai ales la secțiunile de fisiune și captură la izotopii Cm-242 și Cm-243

iv) nucleii ciclului de combustibil ^{232}Th - ^{233}U : cele mai mari discrepanțe apar între fișierele JENDL-2 și JEF-2.2 la MF = 3 în ceea ce privește secțiunile de captură, fisiune, împrăștiere inelastică și $(n,2n)$.

Au fost remarcate diferențe în calitatea evaluării care se datorează atât limitărilor financiare cât și procedurilor diferite de evaluare, regulilor și standardelor dar mai ales competenței și experienței evaluatorilor.

În ceea ce privește *bibliotecile specializate* de date nucleare evaluate, necesitățile și realizările pot fi sintetizate astfel:

i) fișiere de date de produși de fisiune: în ceea ce privește numărul de neutroni întârziți, acuratețea cerută este de 5% iar cea realizată este de doar 10%; cu privire la contribuția produșilor de fisiune la k_{eff} pentru reactori rapizi este nevoie de o acuratețe de 6% și s-a realizat numai 10%-15%. Rezultatele la predicția de căldură de dezintegrare sunt ceva mai bune în sensul că pentru timp lung de răcire s-a îndeplinit acuratețea cerută de 10% dar pentru timp scurt de răcire s-a realizat o acuratețe doar de 10% față de cea cerută de 5%.

ii) fișiere de date neutronice pentru dozimetrie: s-au făcut reevaluări, extinderi și comparații cu versiunile mai vechi la trei biblioteci de dozimetrie IRDF-90, ENDF/B-VI și JENDL-3 și au fost adăugate date de covarianță la multe reacții.

Apar unele deficiențe la datele reacțiilor (n,p) , (n,α) și $(n,2n)$ care arată că cele trei biblioteci nu au îndeplinit în totalitate cerințele de acuratețe de 5% cerute de dozimetria neutronică pentru aplicațiile de fuziune.

iii) fișiere de secțiuni de activare: în prezent sunt în fazele de testare, intercomparare și benchmark șase biblioteci acoperind mai mult de 10000 de reacții. Este însă nevoie de mai multe cercetări și experimente pentru că sunt goluri mari de date experimentale iar pe de altă

parte modelele teoretice aplicate în prezent sunt nerafinate și există discrepanțe mari în calculele de secțiuni și mai ales la secțiunile α .

9.2 TESTE INTEGRALE ALE BIBLIOTECILOR ACTUALE DE DATE NUCLEARE EVALUATE

O serie de teste integrale sunt în curs de desfășurare; dintre rezultatele preliminare mai importante amintim:

Benchmark-ul datelor multigrup bazat pe bibliotecile de date evaluate ENDF/B-VI și JEF-2.2 (cu privire la uraniu și plutoniu) a dus la concluzia că k_{eff} la reactorii termici poate fi prevăzut cu o acuratețe mai bună de 1% iar ratele de fisiune cu neutroni epitermici și termici, precum și captura pot fi prevăzute cu o acuratețe de numai câteva procente.

Testele efectuate pe ansambluri critice rapide pentru verificarea calculelor de k_{eff} , de indici spectrali și concentrații de actinide minore în probe iradiate în spectre de reactori rapizi indică deviații în k_{eff} de sub + 1%, rezultat care nu este cu mult mai bun ca cel obținut cu constante de grup ajustate mai vechi. Deviațiile în indici spectrali pentru actinidele majore se plasează de la +5% la +10% iar pentru nuclizii ciclului thoriului de la +10% la +30%; discrepanțe serioase apar și la concentrațiile actinidelor minore [1].

În ceea ce privește datele pentru fuziune, testele preliminare indică discrepanțe între calcule și experiment la ratele de activare și deviații de la -5% la +20% în ratele de reproducere a tritiului [1].

9.3 CONCLUZII ASUPRA SITUAȚIEI ACTUALE A BAZELOR DE DATE NUCLEARE EVALUATE

În ceea ce privește starea prezentă a bibliotecilor de date nucleare evaluate în raport cu cerințele aplicațiilor de fisiune, fuziune etc., se pot trage următoarele concluzii:

i) pentru reactorii termici: fișierele de date nucleare evaluate disponibile sunt satisfăcătoare pentru calculul și proiectarea reactorilor termici la problemele principale, au mai rămas de soluționat numai câteva probleme pe termen scurt.

ii) pentru reactorii rapizi reproducători fișierele actuale sunt mult îmbunătățite față de versiunile anterioare și multe probleme pe termen lung semnalate au fost rezolvate. Rămân însă discrepanțe serioase la secțiunile eficace ale actinidelor majore și minore, la materialele de structură și la producții de fisiune. Rezultă că în prezent nu se pot face calcule de reactori rapizi fără ajustări la unele secțiuni.

iii) pentru sistemele de fuziune fișierele disponibile de date evaluate au fost de asemenea îmbunătățite dar există serioase inconsistențe și multe goluri la toate tipurile de secțiuni de activare dar mai ales la (n, α) , la secțiunile dublu diferențiale ($MF = 6$) și la datele de producție de γ ($MF = 12, 13, 14, 15$).

Completarea acestor biblioteci și îmbunătățirea datelor necesită eforturi pe termen lung.

În ceea ce privește datele de covarianță, acestea sunt disponibile numai pentru fișierele MAT cele mai importante.

Codurile de procesare a datelor nucleare evaluate ca NJOY, AMPX, GRUCON etc. trebuie să acopere condiții importante care în practică s-au dovedit departe de a fi triviale:

acuratețea dobândită în datele evaluate nu trebuie să se piardă sau să micșoreze în cadrul procesării. O serie de exerciții de comparări sistematice efectuate cu aceste coduri de procesare (intercomparări coordonate de IAEA) a dus la identificarea și eventual rectificarea a numeroase inconsistențe și probleme ale acestor coduri. Dar nu toate problemele au putut fi soluționate și ca atare extinderea exercițiilor de intercomparare a codurilor de procesare a datelor evaluate rămâne o problemă de viitor.

9.4 ÎMBUNĂTĂȚIRI PE TERMEN SCURT ALE BIBLIOTECILOR DE DATE NUCLEARE EVALUATE

În prezent se desfășoară o serie de intercomparări cu scopul de testare și îmbunătățire a fișierelor globale și specializate de date evaluate. Sunt de remarcat cele două inițiative internaționale: cea coordonată de OECD-NEA Working Group (cu subgrupurile sale de lucru) și cea coordonată de IAEA-NDS; acestea urmăresc reevaluări, intercomparări și realizarea convergenței celor mai importante date deficitare în cele trei mari biblioteci ENDF/B-VI, JEF-2.2 și JENDL-3. La activitatea acestor două organizații sunt cooptați să participe și cercetători din țările nemembre OECD.

Ideile de bază privind îmbunătățirile pe termen scurt pot fi sintetizate astfel:

*) dezvoltarea și unificarea formatelor ENDF

*) efectuarea de noi măsurători experimentale și evaluări pentru a rezolva problemele existente la secțiunea standard a $^{10}\text{B}(n,\alpha)$

*) îmbunătățirea secțiunilor (n,p) , (n,α) și $(n,2n)$ la materialele de structură (aceste date sunt necesare în fișierele specializate pentru aplicațiile de dozimetrie și fuziune)

*) introducerea și/sau adăugarea dependenței de energie a spectrelor γ de captură și a anizotropiei la distribuțiile unghiulare γ pentru cele mai importante materiale din reactor

*) soluționarea inconsistențelor rămase la secțiunile $(n,2n)$ pentru Li-7, Be și Pb

*) efectuarea de experiențe și calcule de model pentru acoperirea golurilor în spectrele de neutroni și particule încărcate în domeniul energetic 7 - 14 MeV

*) adăugarea datelor de producție γ și a spectrelor de particule emise pentru reacțiile (n,xp) și $(n,x\alpha)$

*) înlăturarea discrepanțelor dintre secțiunile elementelor naturale și cele ale izotopilor din fișierele globale de date evaluate

*) pentru calculele de împrăștiere inelastice este nevoie de adăugarea în biblioteca ENSDF a estimărilor teoretice de spini și parități

*) obținerea unei acurateți mai bune a datelor de covarianță pentru materialele importante și introducerea unor date de covarianță cu o acuratețe mai groabă pentru materialele mai puțin importante; trebuie de asemenea introduse covarianțele pentru datele din MF = 6 și MF = 2.

9.5 CERINTE DE NOI DATE NUCLEARE PANA IN ANUL 2000

9.5.1 Reactori avansați și decomisionare de reactori

S-au dezvoltat și sunt planificate cercetări pentru reactori avansați și firește aici intră și problemele noi legate de siguranța/securitatea nucleară, limitarea deteriorărilor produse de radiații, problema deșeurilor radioactive, probleme economice etc. Astfel:

- pentru combustibil MOX este nevoie de creșterea acurateții secțiunilor în zona de rezonanță pentru izotopii fisili și fertili

- pentru reactorii termici cu combustibili nitriți și pentru reactorii rapizi sunt necesare secțiuni eficiente pentru N-14 și N-15 și secțiuni neutronice ale Pb
 - pentru reactori cu "matrici inerte" nu există secțiuni eficiente ale Ce în nici una din bibliotecile de date evaluate
 - pentru reactorii incineratori de actinide minore și produși de fisiune de viață lungă sunt necesare secțiuni eficiente din MF = 3 și anume σ_{nf} , σ_{ny} , σ_{nn} și σ_{n2n} precum și date de dezintegrare pentru următoarele actinide minore: Np-237, Pu-238, Pu-240, Pu-241, Pu-242, Am-241, Am-242, Am-242m, Am-243, Cm-242, Cm-243, Cm-244 și pentru produși de fisiune de viață lungă ca Tc-99, I-129, Cs-135 etc.
 - pentru calcule de securitate nucleară și pentru calcule de proiectare este nevoie de o bază de date cu acuratețe mai bună, una din cerințele importante este ca exactitatea secțiunilor eficiente ale actinidelor minore să fie la fel de ridicată ca cea a secțiunilor actinidelor majore.
- Aceleași cerințe de date evaluate sunt și pentru decomisionarea reactorilor și pentru estimarea nivelului radiațiilor în mediu ca urmare a accidentelor nucleare (ca de exemplu Cernobil).
- Pentru ciclul de combustibil ^{232}Th - ^{233}U este necesară îmbunătățirea bazei de date pentru Th-232, Pa-231, Pa-232, Pa-233, U-232, U-233 și U-234.

9.5.2 Reactori demonstrațivi de fuziune incluzând proiectul ITER

Trei aspecte ale aplicațiilor necesită eforturi pe termen lung și anume:

- cercetările privind materialele pentru fuziune necesită secțiuni eficiente neutronice și de particule încărcate și date de spectre atomice la energii de peste 50 MeV
- pentru materialele cu activare slabă este nevoie de secțiuni de activare cu neutroni și secțiuni de activare pentru reacții secvențiale cu particule încărcate, asociate cu date de dezintegrare pentru materiale transmutate și impurități
- calculele de proiect și de protecție la reactorii de fuziune necesită secțiuni eficiente de emisie de neutroni, secțiuni de producție γ și de particule încărcate, spectre dublu diferențiale pentru materialele magneților (H, He, B, C, O, W, Pb), pentru materialele de protecție biologică (B, C, O, Si, Ca, Ba), toate acestea asociate cu date pentru materialele de structură.

9.5.3 Aplicații de energii intermediare

În anii '90 au devenit de interes o varietate de domenii de aplicații cu noi cerințe de date nucleare evaluate pentru energii ale particulelor de ordinul GeV-ilor ca [1]:

- dezvoltarea acceleratoarelor de protoni la energii intermediare
- folosirea acestor acceleratori pentru incinerarea deșeurilor și la reproducerea combustibilului
- surse de neutroni de mare intensitate ca: p,d-Li și p,d-Be pentru testarea materialelor (neutronografie) și măsurători de secțiuni eficiente
- cercetări spațiale
- terapie neutronică și protonică pentru cancer
- producție de radioizotopi

Pentru toate aceste aplicații este nevoie de date nucleare evaluate ale reacțiilor cu particule încărcate (ioni grei, μ , π , k) de la aproximativ 20 MeV la câțiva GeV, date care nu se află în bibliotecile actuale de date evaluate decât pentru Fe, Pb-208 și Bi-209. Această

activitate a început deja în Japonia dar e departe de a furniza fișierele de date evaluate [1].

Mai concret, pentru aplicațiile spațiale sunt cerute date ale reacțiilor având ca proiectile neutroni, protoni, particule α , ioni grei, electroni, γ , cu energii de la MeV la GeV pe ținte de la nuclee ușoare până la pământuri rare; sunt cerute secțiuni, spectre energetice, distribuții dublu diferențiale (după energie și unghi) pentru particulele secundare și o serie de date integrale ca: multiplicități pentru particule secundare, pentru produși finali radioactivi și nuclee de recul.

Pentru aplicațiile legate de terapia cancerului este necesară extinderea bibliotecilor de date evaluate de la 20 MeV la 70 MeV pentru H, Be, C, N, O, Ca, Fe, Ni, Cu, Zr, W și Pb. De asemenea sunt cerute date pentru sursa de neutroni ${}^9\text{Be}(p,n){}^9\text{B}$ și pentru reacțiile ${}^{12}\text{C}(p,n)$, ${}^{16}\text{O}(\alpha,n)$.

În cazul producerii de radioizotopi pentru medicină este nevoie de date evaluate pentru reacțiile de monitorizare ce optimizează operarea ciclotronului pentru producerea de izotopi de puritate mare.

9.6 CERINTE PRIVIND CODURILE DE MODEL NECESARE ÎN EVALUARI

Teoria reacțiilor nucleare și modelele la energii joase au fost discutate și revizuite la o mulțime de workshop-uri și reuniuni și reprezintă o parte substanțială a publicațiilor. De altfel NEA-DB în colaborare și cu IAEA a coordonat mai multe intercomparări de modele și coduri de calcul.

Una din cele mai importante concluzii a fost aceea că *datorită numărului mare de parametri de model liberi se pot face futuri foarte bune pe datele experimentale existente. Dar în predicția de date necunoscute apar deviații semnificative, peste factorul 2, între rezultatele diferitelor modele și coduri de calcul aferente.*

Câteva din sugestiile de îmbunătățire a codurilor de model (la energii joase) pot fi sintetizate astfel:

i) Se constată o deviere sistematică a parametrilor de potențial optic din relațiile de dispersie [2], pentru aceasta este necesar și util să se realizeze o colecție a tuturor nivelelor uniparticulă cunoscute. Acest concept a fost aplicat cu succes la calculul secțiunilor eficace neutronice la Si-28.

ii) Se recomandă aplicarea sistematică a lorenzienii generalizate dependente de temperatură la funcțiile de forță γ pentru tranzițiile E1 (modelul Kopecky-Uhl) în calculele de model statistic și la mecanismul quasi-deuteron pentru emisia de fotoni în calculele de preechilibru (model propus de P.Oblozinsky) [1].

iii) Se recomandă introducerea factorilor de creștere colectivi la densitatea de nivele uniparticulă (modelul propus de Ignatiuk).

iv) Se propune adoptarea dependenței de energie a parametrului densității de nivele "a" (propunerea modelului Konshin).

v) Să se verifice dacă sistematica de date de fisiune (dezvoltată de Marten și de Madland) poate fi utilizată în analiza și/sau predicția datelor de fisiune pentru actinidele majore și minore.

vi) Se recomandă incorporarea conservării momentului unghiular și parității în codurile de model care necesită acest lucru.

vii) Se sugerează și dezvoltarea teoriilor de mecanică cuantică statistică

viii) Se impune continuarea și dezvoltarea intercomparărilor de modele și coduri de calcul

9.7 ELEMENTE PRIVIND METODOLOGIILE DE EVALUARE

Scopul unei evaluări este generarea "celui mai bun set" de date nucleare recomandate cu estimări realiste de incertitudini și care reprezintă stadiul actual al cunoașterii respectivei mărimi fizice pe baza informațiilor dobândite din datele experimentale și dacă este posibil și din modelele teoretice.

De exemplu în evaluarea mărimilor fizice dependente de energie (secțiuni eficace, spectre de neutroni etc.) se face distincție între două cazuri și anume:

Primul caz este atunci când deși există multe puncte experimentale $y(E_i)$, fiecare luat la altă energie specifică E_i , nu există un model teoretic $y(E)$. În această situație procedura de evaluare este în esență o procedură de fitare ce utilizează datele experimentale cu incertitudinile lor pentru obținerea unui set de parametri. Aceasta înseamnă că toată informația disponibilă este concentrată în câțiva parametri [3]. Asemenea evaluări sunt cunoscute sub numele de "*evaluări libere de model*".

Al doilea caz este atunci când există un model teoretic credibil. În asemenea circumstanțe, procedura de evaluare e confinată la reducerea bazei de date experimentale izolate și cere introducerea adițională a unui grid convenabil de energie valabil pentru toate experimentele implicate în procedura de evaluare [3]. Această situație poartă numele de "*evaluare dependentă de model*".

Sunt metodologiile de evaluare care se situează la extremele condițiilor privind experimentele și teoriile. Astfel sunt mărimi fizice pentru care s-au obținut date experimentale de calitate și atunci evaluarea se face pe baza lor. La cealaltă extremă se plasează unele mărimi fizice pentru care datele experimentale sunt puține, incerte, afectate de erori mari (cum ar fi de exemplu secțiunile inelastice neutronice pe nivelele joase rotaționale la nuclee actinide); în acest caz în evaluare se folosesc modelele teoretice cu toate că parametrii implicați nu sunt decisivi [4].

Există și cazuri în care sunt disponibile multe date experimentale, furnizate de diverse grupuri și laboratoare (fiecare cu echipamente și metode experimentale proprii) și evaluatorii trebuie să examineze critic experimentele respective și să aibă toate sursele de informații cu privire la detaliile acelor experiențe. Situația devine cu atât mai complicată cu cât apar cazuri când unele seturi de date sunt "mult distanțate" față de celelalte și trebuie decis căror seturi să li se acorde cea mai mare încredere.

Pentru a înțelege mai bine toate problemele și dificultățile legate de evaluare vom da în continuare exemple cu privire la situațiile extreme prezentate mai sus.

În evaluarea multor date se folosesc modele teoretice (mai ales cele consacrate pentru descrierea mecanismelor de reacție); și aici apar o serie de probleme legate de considerentele fizice în alegerea atât a modelului celui mai adecvat cât în special al parametrilor de input. În cele ce urmează vom da și un exemplu în acest sens și anume utilizarea calculului de canale cuplate în tratarea împrăștierei neutronilor pe ^{208}Pb .

9.7.1 FITAREA DATELOR SI TEHNICI DE EVALUARE PENTRU SPECTRELE DE NEUTRONI

Vom descrie pe scurt procedura de evaluare adoptată pentru spectrul neutronilor rezultați din fisiunea spontană a Cf-252 [3]. Procedura corespunde cazului "evaluare dependentă de model" dar a cuprins și aspecte ale cazului unei evaluări libere de model.

Calitatea fiecărei evaluări, conform părerii actuale a evaluatorilor, depinde mai mult de exactitatea și corectitudinea interpretării datelor de input și nu așa de mult de tehnica de evaluare. Aceasta cu atât mai mult cu cât cerințele de date de intrare au devenit mai stringente în ultima vreme deoarece codurile de calcul de evaluare cer la input și matricea de covarianță pentru incertitudini. Numai dacă există suficiente informații poate fi utilizat întregul potențial al acestor coduri pentru o evaluare obiectivă bazată pe metode statistice.

Pașii procedurii de evaluare

Baza de date experimentale: Măsurători ale spectrului de neutroni din fisiunea spontană a Cf-252 au început să fie publicate încă din 1955. Multe din aceste măsurători au fost analizate cu distribuție Maxwell:

$$N(E) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{\sqrt{E}}{T\sqrt{T}} e^{-\frac{E}{T}} \quad (9.1)$$

Mai târziu s-a început descrierea spectrului pe baza teoriei (model Madland). Noile experimente au identificat câteva corecții critice care au influențat puternic rezultatul final al analizei datelor [3].

Selecția datelor experimentale finale folosite în evaluare a fost guvernată de două aspecte: tehnicile avansate de corecție a datelor, de care s-a ținut seama în experiențe și documentarea asupra procedurii experimentale care este mandatară estimării realiste a matricii de covarianță.

Generarea matricilor de covarianță a datelor: generarea acestor matrici, care cuprind detaliile procedurii experimentale, are sens dacă este bazată pe factori fundamentali; fiecare experiment fiind analizat pentru completitudinea și validitatea metodei experimentale folosite.

Datele experimentale au fost "legate" la un set comun de constante și modificate în cazul corecțiilor incomplete sau amestecate [3]. Multe din datele experimentale au fost menționate ca valori numerice ale spectrului la energii discrete, $N(E_i)$. Toate experimentele ale căror rezultate au fost folosite în evaluare s-au bazat pe metoda timpului de zbor.

Distribuția energetică $N(E)$ a spectrului de neutroni a fost obținută din măsurarea distribuției temporare $n(t)$ cu ajutorul relației (9.2) în care mărimile ce definesc intensitatea sursei de neutroni sunt: ν numărul de neutroni per act de fisiune, N_f numărul de evenimente de fisiune, ϵ_f eficacitatea detectorului de fisiune. Ω reprezintă unghiul solid, $\epsilon(E)$ este eficacitatea detectorului de neutroni, $C(E, \Omega)$ reprezintă funcția de corelație complexă de direcție:

$$N(E) = \frac{\left| \frac{\partial t}{\partial E} \right| n(t) C(E, \Omega)}{\nu \frac{N_f}{\epsilon_f} \frac{\Omega}{4\pi} \epsilon(E)} \quad (9.2)$$

Transformarea de la t la E este dată de $\delta t/\delta E$ cu:

$$E = m_0 \left[\left(1 - \frac{L^2}{c^2 t^2} \right)^{-1/2} - 1 \right] \quad (9.3)$$

cu m_0 masa neutronului (de repaus) și L lungimea traiectoriei de zbor a neutronului.

Mărima $n(t)$ din (9.2) a fost mai înainte corectată de coincidențele întâmplătoare și de efectele de fond. Dar $n(t)$ este o mărime derivată, datorită lărgimii finale 2τ a canalului de TOF (time of flight); ceea ce se măsoară este o integrală a lui $n(t)$:

$$\frac{1}{2\tau} \int_{t-\tau}^{t+\tau} n(t) dt = f_{bin} n(t_i) \quad (9.4)$$

unde f_{bin} reprezintă corecția lărgimii binului de care trebuie ținut cont dacă $n(t)$ este o funcție cu o schimbare rapidă de pantă. Este de asemenea necesară și corecția asupra rezoluției temporale a experimentului.

Ceea ce se măsoară în prezent este:

$$\bar{n}(t) = \int n(t+\tau) g(\lambda) d\lambda \quad (9.5)$$

cu $g(\lambda)$ funcția de rezoluție temporală a experimentului, $g(\lambda)$ cuprinzând lărgimea temporală a picului γ , timpul finit de zbor în interiorul detectorului de neutroni și lărgimea ferestrei de TOF. Aceasta înseamnă că determinarea lui $n(t)$ necesită deconvoluția ecuației (9.5). Corecțiile ecuațiilor (9.4) și (9.5) variază cu energia neutronului și pentru fiecare experiență. Dacă nu sunt specificate explicit, atunci ele se recalculează pentru a obține detaliile necesare pentru matricea de covarianță.

O altă mărime de care s-a ținut cont este incertitudinea dE a scalei energetice pentru neutron. Această incertitudine a fost transformată într-o incertitudine a spectrului dN cu ajutorul relației:

$$\left(\frac{dN}{N} \right)^2 = \left[\left(\frac{1}{2} - \frac{E}{T} \right) + \frac{E}{\epsilon} \frac{\partial \epsilon}{\partial E} \right]^2 \left(\frac{dE}{E} \right)^2 \quad (9.6)$$

în care primul termen din dreapta egalității este derivata relativă a spectrului în funcție de energia neutronică, presupunând că forma spectrului este maxwelliană; al doilea termen

corespunde derivatei eficacității detectorului de neutroni. Incertitudinea scalei de energie cuprinde incertitudinea asupra căii de zbor, a ferestrei TOF și a definirii timpului zero.

Componentele incertitudinii la aceste corecții (și pentru toate mărimile ce influențează rezultatele ecuației (9.2)) împreună cu corelațiile dintre ele, formează matricea finală de covarianță. Pentru fiecare experiment a fost calculată o asemenea matrice bazată pe detaliile procedurii experimentale [3].

Grila comună de energie: datele folosite la evaluare au acoperit domeniul energetic 25 keV - 20 MeV. Pentru a avea o bază comună a procesului de evaluare s-a stabilit un grid (grilă) de 70 de energii fixate ale neutronilor. Fiecare punct experimental în intervalul energetic ΔE între $(E_g - \Delta E/2)$ și $(E_g + \Delta E/2)$ a fost mutat la energia E_g . În acest scop s-a fitat o distribuție Maxwell pentru fiecare set de date experimentale. Panta acestui fit a fost utilizată pentru a transforma datele la energiile de grid. În această procedură schimbarea în energie este de regulă mică și contribuția incertitudinii este neglijabilă.

Evaluarea: în ultimul timp s-au făcut mari progrese în descrierea spectrelor de neutroni de fisiune pe baza modelului Madland și Nix. Pentru fisiunea spontană a Cf-252 pe domeniul energetic 0.5 - 8 MeV rezultatele modelelor teoretice sunt foarte asemănătoare și au fost folosite cu succes pentru aproximarea seturilor singulare de date experimentale [3]. Dar modelele, chiar și cele mai moderne, au deficiențe în descrierea spectrelor pe tot domeniul de energie, de la câțiva keV la 20 MeV. Pentru început evaluarea nu a inclus model ci s-a făcut pe baza generării celui mai bun set de date experimentale [3].

La evaluare s-a folosit metoda generală a celor mai mici pătrate cu combinarea experimentelor individuale (cu privire la varianțele și covarianțele lor). Trebuie menționat că nu toate rezultatele experiențelor au fost "date experimentale absolute", unele date experimentale au fost normalizate de către experimenterii mai ales în cazurile când intensitatea sursei de neutroni sau eficacitatea detectorului de neutroni n-au fost date în unități absolute. La aceste experimente, determinarea factorului de normare a reprezentat o parte a procedurii de evaluare [3].

Evaluarea a cuprins peste 400 de puncte experimentale și a condus la o valoare $\chi^2 = 0.94$ pe grad de libertate, indicând faptul că nu sunt inconsistențe reale între datele experimentale.

În figura 9.1 este arătat rezultatul acestei evaluări a spectrului neutronilor de fisiune spontană a Cf-252; figura reprezintă raportul față de spectrul Maxwell cu temperatura $T = 1.42$ MeV [3].

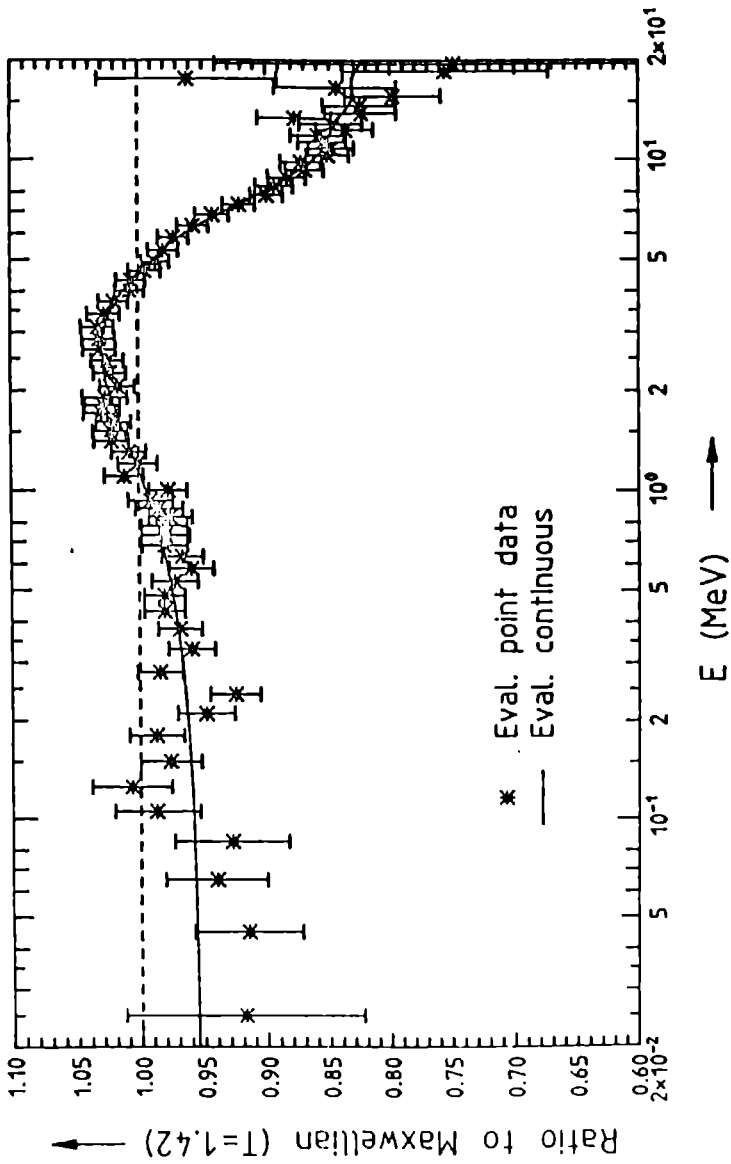
Deviațiile standard au fost scoase din evaluarea matricii de covarianță. Acestea sunt 10% la 25 keV, scad sub 2% între 0.3 MeV și 8 MeV (sunt sub 1.5% între 1 MeV și 6 MeV), între 8 MeV și 16 MeV sunt sub 5% și sunt peste 25% la 20 MeV.

Netezirea datelor: Evaluarea în puncte este foarte utilă pentru testarea modelelor teoretice dar pentru aplicații practice și firește pentru interpolări de date este de preferat o formă netedă.

Datorită dispersiilor diferite ale punctelor individuale, interpolarea convențională cu funcții spline nu este prea utilă. Metoda recomandată este aplicarea unei interpolări cu spline cubic ponderat. În această metodă se folosesc ca ponderi dispersiile datelor dar formalismul matematic nu ține seama de corelații. La prezenta evaluare s-a aplicat metoda spline ponderat pe tot domeniul energetic.

O alternativă la procedura menționată este "basic spline" [5]. Această metodă cuprinde

Figura 9.1

Spectrul neutronilor rezultați din fisiunea spontană a ^{252}Cf 

implicit toate condițiile de continuitate care asigură netezirea funcțiilor la pozițiile punctelor și sunt funcții de bază ale modelului de fitare, cu presupunerea că fitul este liniar și permite luarea în considerație a întregii matrici de covarianță a datelor. Rezultatul fitului depinde puternic de poziția și numărul de puncte în intervalul de fitare.

Normalizarea spectrului: distribuția spectrală a fost normalizată cu relația:

$$\int_0^{\infty} N(E) dE = 1 \quad (9.7)$$

În cazul în care $N(E)\Delta E$, nu este o bună aproximație a integralei (a se vedea relația (9.4)), pentru integrarea numerică se folosește rezultatul evaluării continue. În cazul spectrului Cf-252 s-a obținut pentru integrala (9.7) valoarea 1.0045, ceea ce confirmă corectitudinea calibrării detectorului de neutroni (deviația în calibrare are incertitudinea de 1.5%).

Normarea influențează structura matricii evaluate de covarianță. Pentru un spectru continuu matricea reprezintă grupele de energie și incertitudinile asociate cu aceste grupe de energie. Evaluarea în puncte s-a bazat pe condensarea datelor în grupe, matricea de covarianță obținută în acest caz, V , este potrivită pentru spectrul continuu. Matricea a fost transformată:

$$V' = S V S^T \quad (9.8)$$

pentru a ține seama de normare. Elementele matricii S de transformare sunt date în detaliu în [6].

În concluzie, rezultatele finale de evaluare care se dau sunt curba continuă de evaluare și matricea asociată de covarianță V' .

Fitarea cu model teoretic

Deși sunt argumente serioase care sprijină evaluarea pe baza datelor experimentale totuși alternativa evaluării pe baza modelelor teoretice, în cazul spectrelor neutronilor de fisiune, nu este deloc de neglijat. Un exemplu l-ar putea constitui evaluarea realizată de F.H.Fröhner folosind modelul simplu Watt [7].

Un avantaj al folosirii modelelor teoretice este că se poate astfel ocoli procedura de transformare cu grilă de energie și procedura de netezire a spectrului. Pe de altă parte, utilizarea modelului teoretic implică riscul de a pierde o parte a informației conținute în procedura de evaluare pe baza datelor experimentale; de exemplu cunoașterea incertitudinii valorii $N(E)$ la anumite E , importantă în aplicații [3].

În ceea ce privește împrăștierea datelor experimentale, fitul cu spectru Watt ar putea da o bună aproximație a spectrului dar acest fit are doar doi parametri ajustabili iar valoarea lui χ^2 este de natură globală.

Ceea ce se recomandă este aplicarea fitului cu model teoretic pe punctele experimentale preevaluate. Dar indiferent de cât de rafinat este modelul teoretic (Watt, Madland și Nix [8]) există dezavantajul că se pierd informațiile asupra incertitudinilor. De exemplu folosind modelul Watt se ajunge, prin propagarea incertitudinilor, la o incertitudine cu un ordin sau chiar două mai mică decât în cazul metodei de evaluare a datelor

experimentale [3].

În concluzie, atunci când se introduc modele teoretice într-un proces de evaluare, este bine să se aibă mai întâi rezultatele unei evaluări libere de model. Numai astfel se poate estima realist dacă modelul este adecvat sau nu pentru respectivul proces de evaluare.

9.7.2 EVALUAREA SECȚIUNILOR DE CAPTURĂ ȘI DE IMPRĂȘTIERE INELASTICĂ ALE U-238

Neutronii generați în fisiune se împrăștie pe nuclee și se anihilează prin absorbții, apare astfel în reactor un spectru propriu de neutroni; secțiunile eficace de captură și inelastice ale U-238 joacă un rol decisiv în acest proces.

În stadiul actual al activității de evaluare a acestor secțiuni, o problemă importantă o constituie diminuarea eforturilor experimentale (datorită lipsei de fonduri), ca atare evaluatorii trebuie să utilizeze datele experimentale disponibile în prezent și trebuie să fac uz de toate metodele de evaluare cunoscute și să dezvolte unele noi [4]. Una din cerințe este ca secțiunile evaluate să fie "valori absolute", ceea ce constituie o problemă, deoarece majoritatea secțiunilor eficace sunt măsurate relativ la unele referințe care sunt selectate în funcție de echipamentele și tehnicile folosite în acele experimente. Ca atare datele individuale trebuie să treacă printr-o renormalizare înainte de evaluarea propriu-zisă. Nu există garanție că rezultatele sunt corecte și nu sunt metode clare care să confirme direct corectitudinea lor. Pe de altă parte datele evaluate trebuie să reproducă experimentele integrale, dacă datele nu sunt evaluate corect atunci experimentul integral nu dă rezultate bune. Metodele de evaluare încearcă să producă o valoare absolută corectă sau măcar cea mai probabilă valoare, dacă evaluatorul nu poate avea încredere că este cea corectă.

Din punct de vedere al metodologiei de evaluare cele două secțiuni ale U-238 se plasează la extreme [4] deoarece secțiunea de captură este evaluată pe baza datelor experimentale iar secțiunea inelastică este evaluată cu ajutorul modelelor teoretice. Motivele constau în faptul că secțiunea de captură poate fi măsurată pe tot domeniul energetic de interes, cu densitate mare de puncte. Din contră, pentru secțiunea inelastică nu există destule date experimentale. Mai mult, secțiunea de captură este exprimată numai în funcție de energia incidentă a neutronilor pe când secțiunea eficace inelastică este legată de secțiunile parțiale (pe nivelele U-238) și poate fi dată ca distribuție unghiulară pentru fiecare nivel. Ca atare pentru secțiunea inelastică au fost folosite modele teoretice.

Metode de evaluare a secțiunii de captură la U-238

Secțiunile $MT=102$ din $MF=3$ din fișierele JENDL-3, ENDF/B-VI și JEF-2.2 sunt consistente, evaluatorii celor trei fișiere au căzut de acord asupra validității metodelor folosite.

Osatura evaluării o constituie, pentru JEF, lucrările lui Fröhner [9], Sowerby [10], [11] și Moxon [12], [13]. Firește pentru o evaluare de calitate trebuie alese măsurări de acuratețe; s-au făcut măsurări cu metoda timpului de zbor la instalația ORELA între 1eV și 100 KeV. S-au analizat trei experimente, s-au selectat datele de transmisie și s-au comparat cantitativ cu alte date. Au fost alese datele lui Macklin [14] ca fiind cele cu cea mai bună acuratețe.

Forma rezonanțelor din spectrele TOF a fost analizată cu ajutorul codului REFIT (este vorba de metoda de "analiză a formei"), probleme fiind la considerarea mărimii suprafeței

de sub picul de rezonanță. Metoda de analiză a formei este superioară metodei de analiză a suprafeței dar este mare consumatoare de timp de calcul. În plus codul REFIT poate analiza simultan datele de transmisie și de captură, rezolvându-se astfel acoperirea picurilor de rezonanță și de asemenea se ține cont și de extragerea corectă a fondului [4]. Deși nu a fost rezolvată discrepanța între valoarea evaluării pentru secțiunea (n, γ) și cea cerută de aplicațiile de reactori, totuși metoda analizei de formă a îmbunătățit situația prin aplicarea simultană la datele de transmisie și de captură.

Un alt rezultat bun a fost normalizarea datelor de TOF pentru obținerea secțiunii eficace absolute.

Prühsner a evaluat simultan secțiunea eficace totală, inelastică și de captură în domeniul energetic 10 - 300 keV folosind formule teoretice pentru secțiuni individuale; dar formulele pot fi incorecte deși se pot ușor fida datele experimentale ajustând parametrii din formule. Această metodă este bună din punct de vedere al aplicării în "deducerea fizică a curbelor" dar este valabilă pentru cazuri limitate și domeniul energetic limitat [4].

Metoda de evaluare a secțiunii inelastice a U-238

Măsurările și analizele secțiunii inelastice stăp pentru U-238 cât și pentru alte actinide per-pere nu constituie subiectul multor studii privind evaluarea; fiind nucleu puternic deformat, modelul optic sferic (mult folosit în evaluări) este în acest caz total neadecvat.

Deși datele din MF = 3, MT = 4 (secțiune totală inelastică) sunt aproape similare în cele trei biblioteci de date evaluate ENDF/B-VI, JENDL-3 și JEF-2.2, se constată mari discrepanțe la secțiunile parțiale MT = 51, 52, Motivul îl constituie faptul că secțiunea MT = 4 poate fi evaluată convențional prin extragerea din MT = 1 a secțiunilor competitive cu împrăștierea inelastică (și existând date de secțiuni non elastice). Dar metodele și parametrii aplicați sunt prea ambigui pentru a da o evaluare agrată.

Evaluarea secțiunii (n, n') nu poate fi discutată fără considerarea celorlalte reacții competitive: (n, n) , (n, f) , (n, xn) , (n, γ) , $(n, \text{particula încălzită})$, chiar dacă unele din aceste secțiuni au valori mici comparativ cu celelalte.

Cea mai importantă reacție competitivă în domeniul energetic de la pragul împrăștierei inelastice până la 5 MeV este fisionea, de la 5 la 10 MeV fisionea și $(n, 2n)$, de la 10 la 15 MeV acestora li se adaugă $(n, 3n)$ iar între 15 și 20 MeV trebuie considerată și $(n, 4n)$ pe lângă celelalte enumerate. La energii peste 8 MeV secțiunea (n, n') este cea mai mică dintre ele.

Din punct de vedere teoretic trebuie desigur incluse toate procesele competitive. Trebuie considerate mecanismul direct, mecanismul de nucleu compus și cel de preechilibru. La ora actuală se folosesc curent metodele DWBA și canale cuplate pentru mecanismul direct și Hauser-Feshbach pentru mecanismul de nucleu compus. Cum nucleul U-238 este deformat și cuplajul între canalul elastic și mai multe canale inelastice este puternic, se recomandă folosirea metodelor canalelor cuplate [4] în tratarea interacției directe.

Metodele de evaluare pentru secțiunea (n, n') a U-238 pot fi grupate în două categorii după cum iau în considerare contribuția mecanismului de nucleu compus (NC) și de interacție directă (ID) și anume:

Metoda incoerentă: În acest caz contribuțiile ID și NC sunt calculate separat și rezultatele sunt adunate incoerent. Această metodă a fost studiată de grupul Lowell [15], [16], [17], [18], [19], de grupul Bruyères le Châtel (Haouat) [20] și de grupul Oxford (Hodgson) [21]. În toate cazurile contribuția NC s-a calculat cu H.F. Incluzând corecția

Moldauer pentru fluctuațiile lărgimilor de nivele.

Separat s-a calculat contribuția ID cu metoda canalelor cuplate. Coeficienții de transmisie pentru canalele neutronice obținuți din calculele de canale cuplate au fost mediați pe j (pentru a nu avea dependență de spinul sistemului compus) și astfel au fost folosiți în calculele de model statistic.

Metoda coerentă ține cont de posibila interacție între componentele ID și NC folosind aproximația unificată, prin transformarea Engelbrecht-Weidenmüller și ansamblul statistic al matricii S .

Parametrii potențialului optic au fost cei ai grupului Bruyères le Châtel sau alții puțin modificați. De altfel toate lucrările pot fi considerate independente de setul de parametri de potențial optic. Valorile absolute ale secțiunii sunt fixate prin ajustarea parametrilor ce au fost selectați să fiteze respectiva formulă și decizi de cel ce a efectuat calculele. Forma funcției de excitație reflectă caracteristicile formalismului folosit pentru calcularea ei.

Care din cele două metode este mai bună pentru calcularea secțiunii (n, n') nu se poate decide decât prin compararea formei secțiunii eficace teoretice cu datele experimentale. Cu alte cuvinte nu se poate spune care din cele două metode este mai bună [4].

Pe de altă parte metoda coerentă necesită un timp lung de calcul și aplicarea ei la evaluare devine aproape imposibilă. De altfel nu sunt semnalate în literatură lucrări privitoare la metoda coerentă aplicată la distribuții unghiulare.

În concluzie, pentru $MF = 3$ al U-238 problema secțiunii de captură a fost în mare parte rezolvată. În ceea ce privește secțiunea inelastică se recomandă folosirea metodei incoerente, cu încercarea de a rafina parametri de potențial optic deformat. Fiind totuși nevoie de comparare cu datele experimentale, în cazul împrăstierii inelastice, trebuie avută în vedere discrepanța sistematică între secțiunile (n, n') măsurate în două feluri de experimente: experiențe în care se detectează direct neutronii și experiențe cu detecție indirectă $(n, \gamma n')$ în care se detectează γ . Discrepanțele ajung la 20% - 30% între rezultatele celor două tipuri de experiențe. Se speră că experimentele pentru obținerea de valori ale secțiunii dublu diferențiale vor fi cele ce vor hotărâ în evaluarea datelor (n, n') la U-238.

9.7.3 EVALUAREA SECȚIUNII DE FISIUNE A ^{239}Pu ÎNTRE 1 keV ȘI 100 keV

S-a constatat că secțiunea de fisiune a Pu-239 măsurată de Weston [22] în condiții excelente de rezoluție, este cu aproximativ 5% mai mică decât secțiunile de fisiune măsurate mai recent și decât toate evaluările majore, în domeniul energetic 1 - 100 keV [23]. Ca atare este nevoie de o nouă evaluare a datelor experimentale. Planul adoptat de evaluatori (subgrupul 5 coordonat de NEA) a cuprins două părți și anume:

- examinarea critică a experienței Weston cu rezervarea posibilității de a efectua alte măsurători experimentale în punctele cu probleme
- examinarea tuturor celorlalte surse de informații cu privire la valorile experimentale ale secțiunii de fisiune a Pu-239.

Examinarea experienței Weston-Todd: măsurările au fost făcute cu metoda timpului de zbor la instalația ORELA, folosind cameră multiparalelă de fisiune, forma fluxului de neutroni a fost măsurată relativ la camera BF_3 până la energia de 1 keV și cu scintilator sticlă de Li-6 la energii mai mari. Internormalizarea fluxului a fost făcută cu o incertitudine statistică mai mică de 0.1%. În final curba secțiunii de fisiune a fost normalizată la valoarea termică.

Evaluatorii au considerat că posibilele probleme sunt legate de grosimea probei, de autoabsorbție și de timpul mort. În plus integrala de fisiune este cunoscută cu o incertitudine semnificativă. S-a decis să se facă un program de experimente la Oak Ridge și la Geel.

Pe de altă parte Weston și Todd au efectuat noi măsurători la instalația ORELA, rezultatele acestora, nepublicate, au fost evaluate de H. Derrien. Această evaluare este un fit simultan pe mai multe date experimentale cu metoda bayesiană, folosind codul SAMMY ce permite ajustări de fond și de coeficienți de normare [23]. Pentru analiză au fost alese seturi de date experimentale cu rezoluție energetică bună și/sau fond scăzut.

Examinarea altor surse de informații: s-a decis abordarea a două căi pentru descrierea secțiunii de fisiune: una bazată pe datele lui Weston, cealaltă bazată pe datele din ENDF/B-VI. Amândouă ar trebui să se bazeze pe accesii descriere a canalelor neutronice și să fie validate de experimente integrale.

Pentru descrierea canalelor neutronice s-au folosit date de transmisie cu rezoluție bună obținute la ORELA de către J. Harvey [24] folosind trei probe răcite la temperatura azotului lichid, cu grosimea astfel aleasă încât să se facă compromis între nevoia de a avea acuratețe mare și nevoia de a atenua efectele de autoecranare [23]. Din aceste date a rezultat o secțiune totală ce a fost în bun acord cu datele lui Poenitz dar cam cu 3% - 4% mai mică decât MF = 3, MT = 1 din bibliotecile JEF2 și ENDF/B-VI.

Baza de date construită de Poenitz și Derrien a fost considerată ca referință pentru secțiunea totală în domeniul 1 - 500 keV.

Raza de împrăștiere și funcțiile de forță $S(l=0)$ și $S(l=1)$ în domeniul rezonanțelor au fost extrase din fit simultan, cu scopul obținerii parametrilor de rezonanță pentru fișierul MF = 2 al bibliotecii JEF2. Pe baza acestora s-au obținut parametrii de potențial optic ai lui Lagrange (1990) care au fost comparați cu parametrii de potențial optic utilizați pentru evaluările din 1986 pentru JEF. Ca urmare, partea reală și imaginară a potențialului optic au fost renormalizate, domeniul de interacție efectivă și potențialul spin-orbită au rămas neschimbate. Folosind acest nou potențial optic s-a obținut pe tot domeniul energetic un fit mai bun al datelor experimentale (mai ales la distribuțiile unghiulare și la secțiunea totală peste 5 MeV).

Ca atare secțiunea de fisiune bazată pe Weston 1984 este mai mică decât celelalte evaluări la energii peste 1 MeV (domeniu de interes pentru reactorii rapizi). Se constată de asemenea o scădere a secțiunii inelastice față de JEF2, ceea ce influențează mult valoarea lui k_{eff} .

Biblioteca JEF2.2 (conținând aceste evaluări) a fost procesată într-o bibliotecă cu 1968 grupe de energie conținând secțiuni de diluție infinită și tabele de probabilități care au fost produse cu codurile NJOY-THEMIS și CALENDF. S-a pus accent pe asigurarea calității, în sensul asigurării conservării informațiilor în cursul procesării. S-au calculat date integrale cu această nouă bibliotecă cu structură fină de grup.

Modificările secțiunilor eficace făcute pentru minimizarea discrepanțelor între datele experimentale integrale și cele calculate au fost obținute prin ajustări statistice cu presupunerea că toate datele au distribuție normală. Covarianțele însă încă nu sunt realizate corespunzător [23].

Modificările în secțiunile eficace sunt semnificative numai dacă sunt mai mari decât deviația standard a datelor mai vechi.

Cu privire la ajustările secțiunilor din biblioteca JEF2 se recomandă: pentru secțiunea inelastică (MF = 3, MT = 4) o scădere cu aproximativ 10% iar pentru secțiunea de fisiune o creștere de aproximativ 1% între 1 keV și 25 keV și o scădere de aproximativ 1% între 70

keV și 180 keV.

În cazul în care se face pe de o parte o renormalizare cu +3.2% a datelor Weston 1984 și pe de altă parte o ajustare a secțiunii de fisiune obținută din benchmark-ul la JEF2, atunci discrepanțele (JEF2/Weston - 1) x 100 între datele Weston revizuite și JEF2 se reduc semnificativ dar nu sunt eliminate total sub 10 keV [23].

Rezultate asemănătoare se obțin și în cazul bibliotecii ENDF/B-VI, astfel sunt discrepanțe de aproximativ 2% între fitul lui Poenitz și datele Weston renormalizate [23].

În ceea ce privește evaluarea de model, trebuie definitivat cel mai bun set de parametri de potențial optic de canale cuplate [23].

9.7.4 METODOLOGIE DE EVALUARE PE BAZA DE CANALE CUPLATE

Aplicație la împrăștierea neutronilor pe ^{208}Pb

Când în evaluare se folosește analiza prin model statistic, parametrizarea de model optic este absolut necesară pentru calcularea secțiunii totale, a secțiunii elastice de interacție directă și a coeficienților de transmisie.

Având în vedere caracterul dublu magic al nucleului Pb-208, era de așteptat ca un model optic sferic să fie adecvat descrierii împrăștierei neutronilor rapizi pe acest nucleu. Dar calculele cu potențial fenomenologic uni-canal au arătat că în acest caz modelul poate fi inadecvat, în particular adâncimea (tăria) potențialului de absorbție de suprafață determinată prin fitarea secțiunii diferențiale elastice este inconsistentă cu tăria aceluiași potențial obținută din fitul secțiunii totale [25]. Ca atare evaluatorii au presupus că efectele nivelelor joase colective nu pot fi neglijate [26]. Ei au efectuat un studiu al aplicării metodei canalelor cuplate cu potențial fenomenologic la împrăștierea neutronilor pe Pb-208 în domeniul energetic 8.5 - 10 MeV (considerând firește neglijabile împrăștierea prin mecanismul de nucleu compus și contribuția modurilor de excitație colective de energie mare [26]). Rezultatele acestor calcule au fost comparate cu datele experimentale ale secțiunii totale între 8.5 MeV și 10 MeV, cu secțiunea elastică diferențială la 8.5 MeV, 9 MeV, 9.5 MeV și 10 MeV și cu secțiunea inelastică diferențială pe nivelul 3⁻ (2.615 MeV) la energia de 8.5 MeV. Evaluatorii [26] au ajuns la concluzia că modelul de canale cuplate vibrațional în ordinul întâi asigură o bună descriere a acestor date.

Metoda de analiză s-a bazat pe: (1) adoptarea unui potențial optic central rezultat din analiza uni-canal a datelor din [25] cu privire la secțiunea totală a procesului $n + ^{208}\text{Pb}$ și pe (2) efectuarea calculelor de canale cuplate cu potențial deformat cuplând progresiv nivele știute ca fiind de natură colectivă, cu compararea rezultatelor obținute cu datele de secțiune totală și de împrăștiere elastică diferențială. Calculele de canale cuplate au fost făcute cu codul ECIS.

Adâncimea părții reale a potențialului (pentru acest domeniu energetic) a fost dedusă cu ajutorul calculelor uni-canal din datele de secțiune totală [25], s-a folosit parametrizarea: $V(E) = 50.0 - 0.28 E$, presupusă a avea o acuratețe de 1%.

Pentru adâncimea potențialului de absorbție de suprafață s-a utilizat parametrizarea: $W_D(E) = 0.39 E - 0.5$, ce a fost determinată din datele de secțiune totală ale Western Michigan University [27] și ale laboratorului de la Los Alamos [28], acestea din urmă fiind multiplicat cu factorul 1.0047 pentru a ține cont de o mică diferență legată de normalizare. S-a presupus pentru W_D o acuratețe de 10% pe domeniul energetic studiat [26]. Nu s-a considerat absorbție de volum în potențialul fenomenologic utilizat.

Modelul colectiv folosit pentru Fb-208 a fost vibrațional de ordinul întâi cu cuplaj complex. În calculele de canale cuplate s-au considerat toate nivelele excitate presupuse a fi

de natură colectivă, plasate sub 10 MeV energie de excitație și anume: $3^-(2.615 \text{ MeV})$, $2^+(4.085 \text{ MeV})$, $4^+(4.323 \text{ MeV})$, $6^+(4.424 \text{ MeV})$, $8^+(4.610 \text{ MeV})$ precum și rezonanța octupolară (LEOR: low-energy octupole resonance) 3^- centrată pe $E_x = 5.38 \text{ MeV}$.

Parametrii β_L au fost luați din [29], pentru starea $3^-(2.615 \text{ MeV})$ s-a considerat $\beta_3 = 0.115$ iar pentru LEOR s-a folosit $\beta_3 = 0.10$. Toate excitațiile colective au fost considerate unifononice. Potențialul spin orbită a fost luat nedeformat [26].

Rezultatele privind această metodologie de analiză pentru împrăștierea neutronilor pe Pb-208 sunt date în tabelul 9.1 [26], unde sunt prezentate χ^2 și χ^2_r , ce se bazează pe compararea cu valorile măsurate pentru secțiunea totală și respectiv pentru secțiunea elastică diferențială. Pentru σ_{tot} valorile experimentale au fost interpolate cu ajutorul unui fit cu cele mai mici pătrate pe domeniul energetic 8 - 14 MeV, considerându-se o incertitudine de 1% pentru secțiunea totală. Pentru $\sigma_{\text{el}}(\theta)$ valorile χ^2_r sunt bazate pe incertitudinile relative ale secțiunii diferențiale elastice, cu excepția datelor de la 9.5 MeV unde a fost dată numai incertitudinea totală.

Tabel 9.1

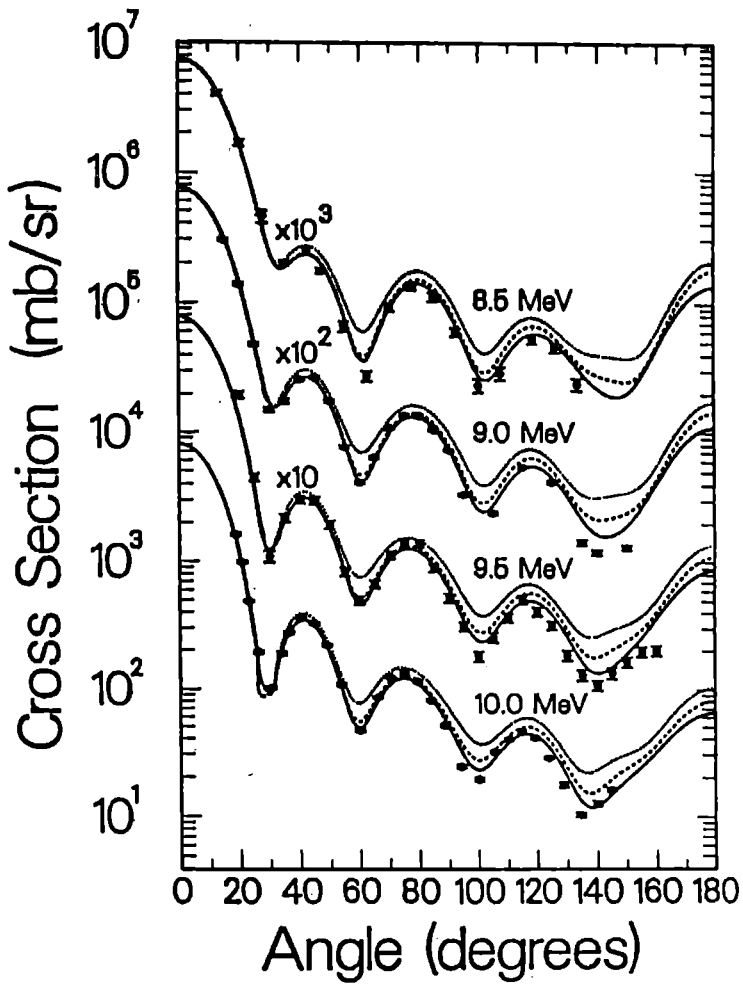
Energia (MeV)	Data	c.c. $\beta_L = 0$	c.c. $3^-, 2^+, 8^+$	c.c. $3^-, 2^+, 8^+$, LEOR ₁	c.c. $3^-, 2^+, 8^+$, LEOR ₃	uni-can. fit $\sigma_{\text{el}}(\theta)$
8.5	d.el.	34	6.7	3.2	3.1	2.4
	tot.	0.	0.4	1.8	1.1	8.4
9.0	d.el.	265	58	20	20	9.0
	tot.	0.0	0.2	0.9	0.8	7.5
9.5	d.el.	62	17	6.7	7.0	3.3
	tot.	0.0	0.1	0.5	0.3	9.2
10.0	d.el.	200	42	14	15	7.3
	tot.	0.0	0.0	0.0	0.1	11

Coloanele succesive din tabel arată creșterea acordului cu datele experimentale atunci când calculele uni-canal (canale cuplate cu toate $\beta_L = 0$) sunt înlocuite cu calcule de canale cuplate cu cuplaje din ce în ce mai complexe. Notația LEOR₃ indică faptul că rezonanța octupolară în vecinătatea energiei $E_x = 5.38 \text{ MeV}$ a fost reprezentată prin trei stări ponderate potrivit pentru a descrie întinderea pe întreaga lărgime a LEOR. Notația LEOR₁ se referă la considerarea unei singure stări centrată pe energia $E_x = 5.38 \text{ MeV}$ [26].

Secțiunea elastică diferențială este comparată direct cu datele experimentale în figura 9.2. Linia punctată reprezintă calculul cu potențial optic sferic, linia întreruptă indică rezultatele calculelor de canale cuplate fără considerarea LEOR iar linia plină reprezintă calculul de canale cuplate cu considerarea și a cuplajului LEOR [26].

Din tabelul 9.1 ca și din figura 9.2 se constată că lipsa cuplajului stărilor colective conduce la un fit slab al secțiunii elastice diferențiale mai ales la unghiurile înapoi, cu toate că modelul optic sferic reproduce bine secțiunea totală experimentală (ceea ce este de așteptat din moment ce absorbția de suprafață $W_D(E)$ a fost dedus din analiza uni-canal a secțiunii

Figura 9.2

Secțiunea elastică diferențială pentru procesul $n + {}^{208}\text{Pb}$ 

totale experimentale [25]). Pe de altă parte, așa cum se vede în coloana din dreapta a tabelului 9.1, calculele uni-canal care fitează bine secțiunea elastică diferențială conduc la un fit slab al secțiunii totale.

Concluzia evaluatorilor cu privire la parametrizarea de canale cuplate este că trebuie folosit modelul vibrațional în prim ordin cu considerarea cuplajului tuturor nivelelor colective ale Pb-208, inclusiv al rezonanței LEOR [26]; adâncimile potențialului real $V(E)$ și imaginar de suprafață $W_D(E)$ fiind deduse cu ajutorul analizei uni-canal a secțiunii totale.

Bibliografie:

- [1] Schmidt J.J. Internat. Symp. on Nucl. Data Eval. Method. (Ed. Ch. L. Dunford), 1992, 3-25
- [2] Schmidt J.J. Report INDC(NDS)-270/L, 1993
- [3] Mannhart W. "Data fitting and evaluation techniques for neutron spectra" in Internat. Symp. Nucl. Data Eval. Method., (1992), 247-256
- [4] Yukinori Kanda "U-238 capture and inelastic scattering", Internat. Symp. Nucl. Data Eval. Method., (1992), 88-97
- [5] Kanda Y., Venohara Y., INDC(NDS)-192/L (1988), 81
- [6] Mannhart W. INDC(NDS)-146/L (1983), 229
- [7] Fröhner F.H., Nucl. Sci. Eng., 106 (1990), 345
- [8] Madland D.G. INDC(NDS)-251/L (1991), 201
- [9] Fröhner F.H., Nucl. Sci. Eng. 103 (1989), 119
- [10] Sowerby M. Proc. Int. Conf. on Nucl. Data for Basic and Applied Sci. (Gordon and Breach, New York), 1986, 1511
- [11] Sowerby M., Corvi F., Proc. Int. Conf. on Nucl. Data for Sci. and Tech, Mito, Japon, (1988), 37
- [12] Maxon M.C., Sowerby M.G., Nakajima Y., Nordborg C., Proc. Internat. Reactor Phys. Conf. (1988), I-281
- [13] Moxon M.C., Sowerby M.G., Brisland J.B., Proc. Internat. React. Phys. Conf. PHYSDR'90, Marseille, France (1990), III-41
- [14] Macklin R.L., Perez R.B., Saussure G.De., Jugle R.W., Proc. Int. Conf. Nucl. Data for Sci. Tech., Mito, Japon (1989), 71
- [15] Beghian L.E., Kegel G.H.R., Marcella T.V. et al., Nucl. Sci. Eng. 69 (1979), 71
- [16] Chan D.W.S., Egan J.J., Mittler A., Sheldon E., Phys. Rev. C26 (1982), 841
- [17] Chan D.W.S., Sheldon E., Phys. Rev. C26 (1982), 861
- [18] Sheldon E., Beghian L.E., Chan DWS et al., J. Phys. G12, (1986), 443
- [19] Shao J.Q., Couchell G.P., Egan J.J., Kegel G.H.R., Li S.Q., Mittler A., Schier W.A., Nucl. Sci. Eng. 92 (1986), 350
- [20] Haouat G., Lachan J., Lagrange Ch., Jary J., Sigaud J., Patin Y., Nucl. Sci. Eng. 81 (1982), 491
- [21] Hodgson P.E., Kobos A.M., Nucl. Sci. Eng. 89 (1985), 1111
- [22] Weston L.W., Todd J.H., Nucl. Sci. Eng. 88 (1984), 567
- [23] Fort E., "Pu-239 fission cross section between 1 keV and 100 keV", Internat. Symp. on Nucl. Data Eval. Meth. (Ed. Ch. Dunford), 1992, 98-105
- [24] Spencer R.R. et al., Nucl. Sci. Eng. 96 (1987), 318
- [25] Shamu R.E., Barnes S.M., Ferguson S.M., Haouat G., Lachkar J., J. Phys. G:

Nucl.Part.Phys. **17** (1991), 525

[26] Young P.G., Shamu R.E. "Methodology of coupled-channels optical-model analyses; a study of n+Pb-208 scattering at low energies", Int.Symp.on Nucl.Data Eval.Method. (1992), 365-370

[27] Ferguson S.M., Shamu R.E. Bull. Am.Phys.Soc.**21** (1976),985; Satkowiak L.J., Ferguson S.M., Shamu R.E. Phys.Lett.**175B** (1986),266

[28] Lisowski P.W., Auchampaugh M.S., Moore M.S., Morgan G.L., Shamu R.E. "Neutron cross sections measurements at WNR", BNL-NCS-51245 (1980); Schutt R.L., Shamu R.E., Lisowski P.W., Moore M.S., Morgan G.L. Phys.Lett.B **203** (1988),22

[29] Martin M.J. Nuclear Data Sheets **47** (1986), 797

10. ELEMENTE PRIVIND BIBLIOTECILE DE DATE NUCLEARE PROCESATE

Dependența energetică a multor date nucleare evaluate, cum ar fi de exemplu secțiunile eficace, este foarte complexă (unele reacții pot necesita mai mult de 10000 de date punctuale pentru o reprezentare cu exactitate). Cu excepția unor programe Monte-Carlo care pot utiliza direct, ca fișiere de intrare, bibliotecile de date nucleare punctuale evaluate, toate celelalte coduri, pentru o gamă largă de aplicații, au nevoie de o tehnică de reducere (colapsare) a datelor, de exemplu mediere pe grup.

Una din cele mai importante aplicații, în care rolul bibliotecilor de date nucleare și de coduri de calcul este esențial, o constituie calculul și proiectarea reactorilor nucleari.

Proiectarea reactorilor nucleari necesită rezolvarea ecuației de transport a neutronilor în geometrie complexă 3D cu descrierea întregii zone active (tratarea în detaliu a elementelor combustibile și a celorlalte componente). O asemenea problemă este imposibil de soluționat fără apelarea la aproximații. Cea mai obișnuită cale este de a presupune că distribuția fină de flux poate fi dată prin suprapunerea unei distribuții macroscopice de flux (determinată în esență de forma, mărimea și compoziția de material a zonei active descrisă de macro-regiuni omogene) și o structură fină a modulării de flux (ținând cont de heterogenități locale). Această abordare permite împărțirea procesului de proiectare a reactorilor în două etape. Schema de calcul pentru proiectarea de reactori este prezentată în figura 10.1 [15].

Etapa 1 o constituie **calculele de celulă** și constă în rezolvarea ecuației Boltzmann pentru fiecare celulă elementară (o bară de combustibil sau un ansamblu de bare) pentru a obține o distribuție fină energetică și spațială a fluxului de neutroni. Acest lucru cere o descriere cât mai fidelă din punct de vedere al energiei (alegerea unui număr suficient de mare de grupe de energie, tipic aproximativ 100 de grupe pentru reactorii termici și în jur de 2000 de grupe pentru reactorii rapizi), ceea ce obligă la o descriere geometrică simplificată. Aceasta se realizează introducând ipoteza de aproximare a rețelei infinite de celule identice. Firește este necesar un calcul de celulă pentru fiecare celulă elementară constituantă a zonei active (diferite moduri de asamblare, de îmbogățiri ale combustibilului etc.). Sarcina principală a codului de calcul de celulă este omogenizarea și condensarea secțiunilor eficace.

Etapa a doua, calculele de proiect de reactor, implică descrierea geometriei întregii zone active dar cu ajutorul macro-regiunilor omogene (nu este o descriere fină a heterogenităților locale). În general la această etapă este folosită o structură de grup largă (tipic 2 - 3 grupe pentru reactorii termici și 6 - 30 grupe pentru reactorii rapizi). În acest fel fluctuațiile de flux sunt foarte line și nu este nevoie să se rezolve exact ecuația de transport (este prea greu să se rezolve în trei dimensiuni) dar metoda este suficient de precisă pentru a se putea folosi ecuația de difuzie.

10.1 BIBLIOTECI DE CONSTANTE DE GRUP INDEPENDENTE DE PROBLEMA

Așa cum am prezentat în capitolul 2 de clasificare a datelor nucleare, aceste biblioteci sunt derivate din bibliotecile de date punctuale evaluate. Parametrii sunt mediați pe o structură fină de grup, tipic între 2000 și 200 de grupe (de exemplu codul SAND II are un grid extins de energie cu 640 de grupe între 10^{-4} eV și 20 MeV). În mod normal este suficientă utilizarea unei funcții de pondere netede. În secțiunea următoare vom da definiția

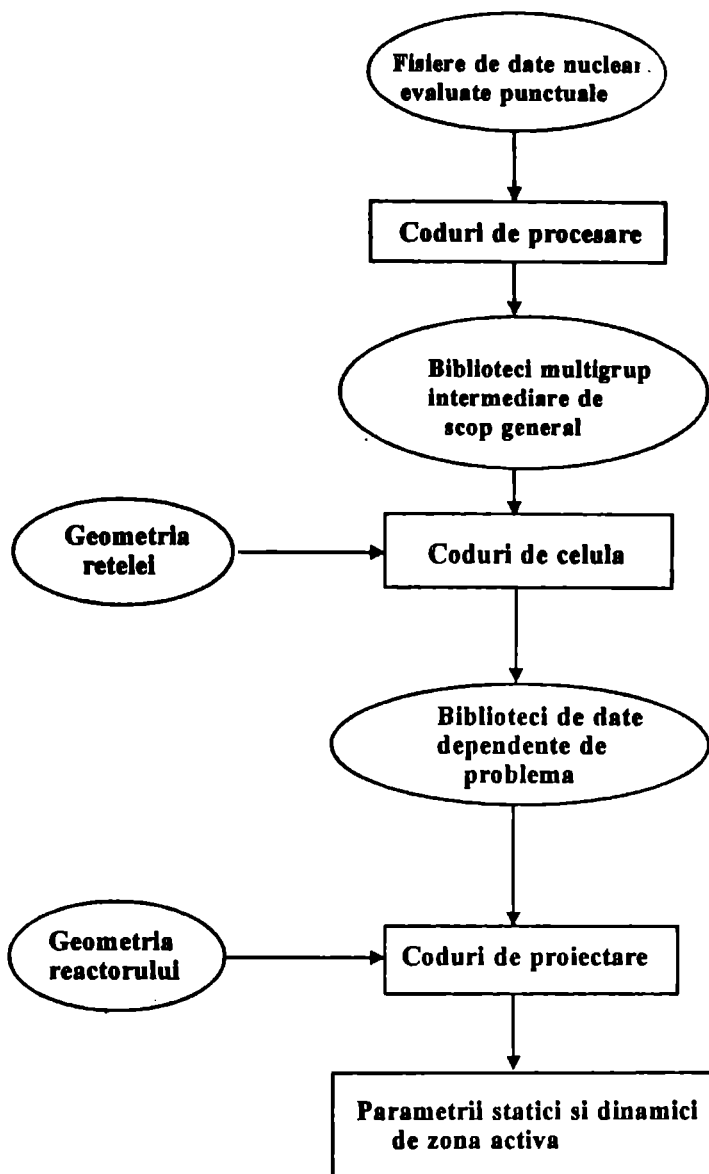


Figura 10.1

constantelor de grup.

Biblioteca astfel construită este folosită ca sursă pentru condensarea constantelor de grup într-o structură de grup largă (grosieră), de exemplu constante multigrup, utilizând ca funcție de pondere o aproximație grosieră a spectrului de neutroni. La acest stadiu mesh-ul de energie este suficient de fin astfel încât variațiile locale ale spectrului neutronic pot fi neglijate.

10.2 BIBLIOTECI DE CONSTANTE MULTIGRUP

Biblioteca de constante multigrup pot fi derivate din bibliotecile de constante de grup independente de problemă prin condensarea de grup sau pot fi calculate direct din bibliotecile de date punctuale evaluate prin folosirea unei funcții de pondere adecvate.

Constantele multigrup reprezintă o problemă clar orientată (ca de exemplu reactori termici, reactori rapizi, probleme de fuziune, probleme de protecție etc.). Criteriul care definește un grup de probleme pentru care setul de date este valabil, îl constituie similitudinea în partea netedă a spectrului (de exemplu spectrul la care structura detaliată este neglijată), acest spectru fiind folosit la medierea secțiunilor eficace.

Să considerăm ca exemplu un reactor idel omogen infinit cu moderator hidrogen și absorbant ce prezintă legea $1/v$ la energii termice. Firește neutronii iau naștere cu distribuția spectrului de fisiune. Presupunând un mediu hidrogenoid fără absorbție și cu secțiune de împrăștiere constantă, neutronii încetiniți vor avea distribuția $1/E$. Cu absorbție slabă $1/v$ la energii termice, spectrul neutronic rezultat va avea aproximativ o distribuție maxwelliană. Ca atare un spectru având forma spectrului de fisiune în zona rapidă, forma $1/E$ în zona intermediară și forma Maxwell în zona termică, este reprezentativ pentru problema reactorilor termici pe intervale energetice limitate și este "un candidat" ca funcție de pondere în prepararea bibliotecilor multigrup [1]. Variațiile spațiale ale spectrului de neutroni nu sunt luate în considerație.

Pentru a avea exactitatea dorită în calcule, deviația spectrului local adevărat de neutroni față de cel presupus, este determinată de discretizarea energetică în domeniul tipic de la 400 la 26 grupe. La energii unde se așteaptă rate mai mari ale reacțiilor de interes este necesară o discretizare mai fină.

În interiorul fiecărui grup de energie, netezirea spectrului descrie tendința generală și nu structura detaliată, ca atare de acest lucru trebuie ținut cont la tratarea explicită a unor probleme ca rezonanțele autoprotecție și lărgirea Doppler (în mod uzual sub formă de tabele separate). De regulă se neglijează interferența între rezonanțe a diferiților nucleizi constituenți.

Pentru probleme de protecție, când spectrele de neutroni variază semnificativ cu compoziția de material, nu este în mod normal posibil să se obțină biblioteci multigrup generale cu mai mult de 50 de grupe (multe din acestea fiind în zona intermediară și rapidă), pe când pentru calcule de zonă activă sunt adecvate biblioteci cu 26 de grupe, cu accent pe zona termică.

10.3 BIBLIOTECI DE CONSTANTE CU GRUPE PUTINE DEPENDENTE DE PROBLEMA

Aceste biblioteci sunt rezultatul stadiului final al procesului de condensare (reducție) a datelor începând cu datele multigrup și folosind metodele de transport de neutroni și γ . Numărul de grupe variază de la 1 la 18 și este făcută omogenizarea spațială. Se pot deduce parametrii echivalenți ai ecuației de difuzie (secțiuni macroscopice și constante de difuzie).

Aceste date reprezintă o problemă puternic orientată, ele se calculează de la caz la caz și în mod normal nu sunt considerate ca aplicație la datele nucleare în conformitate cu clasificarea prezentată în capitolul 2 al acestei lucrări.

În mod uzual seturile de date multigrup se dovedesc a fi prea largi pentru metodele deterministe de rezolvare a ecuației de transport și este o practică comodă aceea de reducere a numărului de grupe în doi pași. Pentru a face o estimare a spectrului neutronic local se pleacă de la bibliotecile de constante multigrup, se face un calcul zero-dimensional (mod fundamental) sau uni-dimensional, cu compoziție potrivită de material în zone individuale omogene. Acest spectru este apoi folosit pentru colapsarea constantelor de grup (specifice pentru fiecare zonă) de la 38 la 18 grupe. Cu această structură de grup este posibil să se facă calcule de transport pe întreaga scală, pentru a obține câteva constante de grup (uzual de la 1 la 18 grupe) prin colapsare de grup și omogenizare spațială (de exemplu parametrul ecuației de difuzie pentru calcul de celulă sau de ansamblu combustibil la o putere, temperatură și ardere specificate). Datele obținute din acest pas formează intrarea pentru algoritmi de distribuție de flux 2D, 3D folosiți în proiectarea de zonă activă.

10.4 DEFINIREA CONSTANTELOR DE GRUP

10.4.1 Parametri dependenți de energie

Cel mai tipic exemplu îl constituie secțiunile eficace, medierea lor pe grup este definită de ecuația (10.1) în care σ_x reprezintă parametrul ce se mediază, $w(E)$ este funcția de pondere, E_g energia marginii grupului și g indicele de grup.

Funcția de pondere poate fi aleasă arbitrar dar pentru conservarea ratei de reacție când se trece de la o structură fină la o structură largă de grup, se vede clar că funcția de pondere pentru medierea secțiunii eficace trebuie să fie spectrul particulelor incidente (adică spectrul neutronic sau γ) [1]. Pentru medierea altor parametri firește se pot aplica alte funcții de pondere.

$$\langle \sigma_x \rangle_g = \frac{\int_{E_{g+1}}^{E_g} \sigma_x(E) w(E) dE}{\int_{E_{g+1}}^{E_g} w(E) dE} \quad (10.1)$$

Pentru construirea constantelor de grup independente de problemă, pe o grilă fină de energie, funcția de pondere nu este importantă și poate fi presupusă constantă.

În cazul datelor multigrup, funcția de pondere este aleasă ca un spectru lin care se suprapune aproximativ peste spectrul real.

Pentru aplicații privind reactorii termici funcția de pondere este luată de forma:

- spectru maxwellian pentru zona termică
- formă $1/E$ pentru zona intermediară
- spectrul de fisiune pentru zona rapidă

În alte aplicații ca probleme de protecție, fuziune etc. este nevoie de un spectru de ponderare diferit. De altfel fiecare clasă de probleme necesită rafinări ale gridului de energie în diferite domenii energetice și este practic imposibil să se construiască o bibliotecă generală de constante multigrup care să fie bună pentru toate domeniile de aplicații și să aibă și un

număr rezonabil de grupe [1].

10.4.2 Secțiuni multigrupale dublu-diferențiale

Este vorba de medierea secțiunilor dublu diferențiale elastice și inelastice (cu dependență de energie și de unghi) conținute în fișierul MF = 6 din bibliotecile punctuale de date evaluate. În urma medierii se realizează o matrice de împrăștiere. De dependența unghiulară se ține seama prin polinoamele Legendre $P_l(\mu)$, de aceea în realizarea bibliotecilor de date evaluate punctuale se recomandă opțiunea de reprezentare a secțiunilor diferențiale prin polinoame Legendre (a se vedea capitolul 6 al prezentei lucrări). Elementele momentului de ordin 1 al matricii de împrăștiere sunt definite de relația următoare:

$$\langle \sigma_{s,l}^{g \rightarrow h} \rangle_g = \frac{\int_{-1}^1 d\mu \int_{E_{g+1}}^{E_g} w(E) dE \int_{E_{h+1}}^{E_h} \sigma_s(E \rightarrow E', \mu) P_l(\mu) dE'}{\int_{E_{g+1}}^{E_g} w(E) dE} \quad (10.2)$$

în care μ este cosinusul unghiului de împrăștiere în SL, $P_l(\mu)$ este polinomul Legendre de ordin 1 și $\sigma(E \rightarrow E', \mu)$ este secțiunea de împrăștiere de la E la E' la unghiul μ .

Pentru împrăștierea elastică și inelastică pe nivele discrete, unghiul μ și energia E' a particulelor secundare nu sunt independente, ele sunt legate prin legile de conservare a momentului cinetic și energiei și definite de raportul între masa țintei și masa particulei emergente pentru împrăștierea elastică și de Q pentru împrăștierea inelastică pe nivele discrete. Acest lucru simplifică considerabil procesul de reducere al matricilor de împrăștiere.

Pentru împrăștierea inelastică în continuum și pentru împrăștierea inelastică la energii termice trebuie procesate și alte date (distribuția neutronilor secundari și respectiv legea de împrăștiere). Alternativ pot fi introduse unele aproximații ca "spectrul de evaporare" pentru a reprezenta distribuția neutronilor secundari (dată în MF = 5, MT = 91) pentru neutronii din împrăștierea inelastică în continuum și modelul "gaz liber" pentru împrăștierea inelastică la energii termice [1].

10.4.3 Tehnici de tratare a autoecranării de rezonanță

Expresia (10.1) în domeniul rezonant poartă numele de autoecranare rezonantă. Există mai multe tehnici de tratare a acesteia. În cazul reactorilor termici este tipică folosirea integralei de rezonanță definită astfel:

$$RI = \int_{E_{r+1}}^{E_r} \sigma(E) w^*(E) dE \quad (10.3)$$

La diluție infinită (adică concentrații mici de absorbant care nu perturbă spectrul de neutroni), funcția de pondere $w^*(E)$ este un spectru lin de neutroni. Pentru absorbânți în cantitate moderată ea este de forma $1/E$.

Când un absorbant puternic este prezent în concentrație mare într-un mediu infinit, o bună parte din neutroni este absorbită ceea ce produce o scădere a spectrului de neutroni la energia rezonanței (o antirezonanță în spectru), astfel reducându-se rata de reacție. Când absorbantul de dimensiuni finite este înconjurat de moderator, neutronii din moderator tind să compenseze antirezonanța, ceea ce este aproximativ analog cu diluția nucleelor absorbante [1]. Acest efect nu se poate însă propaga în adâncime în absorbant din cauza nucleelor de la suprafața absorbantului care "ecranează" nucleele din centrul său la energia rezonanței [1]. Ca atare gradul de diluție al absorbției efective depinde de compoziția de material și de geometrie.

Secțiunile mediate ale absorbanților puternici se pot calcula prin rezolvarea riguroasă a ecuației de încetinire pentru amestecuri ale absorbantului cu un moderator hidrogenoid idealizat cu secțiune constantă de împrăștiere și diferite concentrații. În acest mod secțiunea de absorbție autoecranată poate fi parametrizată în funcție de secțiunea σ_0 (secțiunea de fond Bondarenko).

Deoarece rezolvarea riguroasă a ecuației de încetinire necesită timpi lungi de calcul se folosesc aproximații relativ simple care dau rezultate satisfăcătoare; astfel este aproximația rezonanțelor intermediare (IR) introdusă de Goldstein și Cohen [3]. Se introduce un parametru λ care reprezintă "o măsură" a lărgimii rezonanței astfel încât funcția de pondere are expresia:

$$w^*(E) = \frac{\sigma_0 + \lambda \sigma_p(E)}{\sigma_0 + \lambda \sigma_a(E) + \sigma_s(E)} w(E) \quad (10.4)$$

unde σ_0 este secțiunea Bondarenko, σ_a este secțiunea de absorbție, σ_p secțiunea de împrăștiere potențială, σ_s secțiunea de împrăștiere și λ parametrul Goldstein-Cohen.

Când $\lambda = 1$ se obține aproximația rezonanței înguste (NR: Narrow Resonance Approximation), când $\lambda = 0$ ecuația se reduce la aproximația rezonanței largi (WR: Wide Resonance Approximation). Goldstein și Cohen au folosit o tehnică variațională pentru determinarea parametrului λ dar Forti propune o aproximație mai simplă [4] care leagă parametrul λ de lărgimea rezonanței:

$$\lambda = \begin{cases} 1 - \frac{\Gamma_{p,r}}{2\alpha E_r} & \alpha > \frac{\Gamma_{p,r}}{E_r} \\ \frac{\alpha E_r}{2\Gamma_{p,r}} & \alpha \leq \frac{\Gamma_{p,r}}{E_r} \end{cases} \quad (10.5)$$

unde E_r este energia rezonanței r și

$$\alpha = 1 - \frac{A-1}{A+1}$$

cu A raportul dintre masa țintei și masa neutronului.

$\Gamma_{p,r}$ este lărgimea "practică" a rezonanței r care cuprinde domeniul energetic în care contribuția rezonanței depășește partea non-rezonantă a secțiunii. Expresia sa aproximativă este:

$$\Gamma_{p,r} = \Gamma_{t,r} \sqrt{\frac{\Sigma_0}{\Sigma_p}}$$

în care $\Gamma_{t,r}$ este lărgimea totală a rezonanței, Σ_0 este secțiunea macroscopică a picului rezonanței și Σ_p secțiunea macroscopică de împrăștiere potențială a absorbantului.

10.4.4 Colapsarea secțiunilor grupale

Așa cum s-a menționat anterior, numărul de grupe peste care este definită secțiunea, este adesea redus prin condensarea de grup (colapsare). Se presupune că datele sunt furnizate pe un decupaj fin de energie. Un număr de grupe fine poate fi colapsat într-un grup larg printr-o procedură similară cu cea definită de ecuațiile (10.1) - (10.3), numai că semnul integralei este înlocuit cu suma peste grupurile fine "g" care vor constitui grupul larg "h":

$$\langle \sigma_x \rangle_h = \frac{\sum_g \langle \sigma_x \rangle_g \langle w \rangle_g}{\sum_g \langle w \rangle_g} \quad (10.6)$$

și în mod similar se procedează și pentru matricele de împrăștiere și integralele de rezonanță.

10.4.5 Omogenizarea spațială

Omogenizarea spațială se poate face folosind același criteriu al conservării ratei de reacție, utilizând ca funcție de pondere distribuția spațială a fluxului de neutroni.

Considerând un grup de energie "g" și un volum de omogenizare V, secțiunea mediată este dată de relația:

$$\langle \sigma_x \rangle = \frac{\int_{(h)} \sigma_x(\vec{r}) w(\vec{r}) dV}{\int_{(h)} w(\vec{r}) dV} \quad (10.7)$$

în care pentru claritate indicele de grup a fost omis. Utilizând expresii similare cu (10.7) se pot media matricele de împrăștiere și integralele de rezonanță.

O asemenea procedură simplă de mediere și folosirea unui flux simplu sunt posibile în cazul în care nu există scurgeri de neutroni din regiunea în care se face omogenizarea. În general, secțiunile omogenizate prin utilizarea unui flux simplu și prin ponderare de volum, satisfac condiția de conservare a ratei de reacție dar nu se reproduc curenții parțiali de neutroni la marginile regiunii. S-au dezvoltat însă în ultimii ani noi metode de omogenizare [5] care au eliminat această deficiență și ajută astfel la îmbunătățirea rezultatelor calculului globale.

10.5 ALEGEREA CODURILOR DE PROCESARE A BIBLIOTECILOR DE DATE PUNCTUALE EVALUATE

Codurile de calcul folosite la procesarea bibliotecilor de date evaluate sunt de cele mai multe ori foarte complexe din cauză că iau în considerare multe tipuri de date și multe forme diferite de reprezentare a datelor. Din acest motiv realizarea de asemenea programe de multe ori nu este de loc trivială.

În ultimii ani s-a depus un efort enorm pentru a îndepărta erorile de procesare ale constantelor multigrup. Cele mai cunoscute și utilizate pachete de coduri de procesare a diverselor tipuri de biblioteci sunt următoarele:

Pachetul de coduri **ENDF Utility Codes** se aplică la bibliotecile de date evaluate punctuale; verifică regulile formatului ENDF și consistența datelor, furnizând prezentarea în formă tabelară (LISTEF) și grafică (PLOT EF) a bibliotecilor de date evaluate.

Pachetul de coduri **ENDF Pre-Processing Codes** reprezintă un set modular de coduri relativ scurte și simple care permit pas cu pas o serie de operații asupra fișierelor de date evaluate cum ar fi: liniarizare, reconstrucția rezonanțelor, prepararea de constante de grup etc. Aceste coduri sunt foarte utile pentru verificarea datelor evaluate punctuale și afișarea grafică dar nu sunt potrivite pentru prepararea unei biblioteci multigrup generale deoarece aceste coduri nu au capacitatea de prelucrare a unor tipuri de date (ca de exemplu matrici de împrăștiere) și nici interfață cu bibliotecile multigrup utilizate cel mai mult.

Ordinea obișnuită în care se folosesc aceste coduri este următoarea [6]:

- **CONVERT** formatează toate codurile din pachet pentru utilizarea pe computerul și sistemul de operare al utilizatorului.

- **LINEAR**: întrucât formatul ENDF al fișierelor de date evaluate permite reprezentarea datelor cu diverse reguli de interpolare, acest cod asigură liniarizarea secțiunilor eficiente.

- **RECENT**: adaugă contribuția rezonanțelor la secțiunea de fond.

- **SIGMA1**: construiește lărgirea Doppler a rezonanțelor secțiunilor la temperatura sau temperaturile necesare în aplicații.

- **FIXUP**: definește toate secțiunile eficiente astfel încât acestea să fie exact egale cu suma secțiunilor componente, face corecții de format și alte teste și corecturi ale datelor. Trebuie subliniat că secțiuni, ca de exemplu secțiunea totală, pot fi făcute egale cu suma componentelor lor la toate energiile (nu numai la energiile tabelate ci la toate energiile) numai dacă este folosită interpolarea liniară în definirea tuturor secțiunilor. De aici rezultă importanța ordinii pașilor în care se folosesc codurile din acest pachet.

- **LEGEND**: convertește distribuțiile unghiulare și coeficienții Legendre la tabele cu date interpolate liniar (are aceeași funcțiune ca și **LINEAR** care este aplicabil numai la secțiuni eficiente integrate).

- **SIXPAK**: în cazul în care utilizatorul nu poate utiliza datele dublu diferențiale din MF = 6, se utilizează acest cod pentru a converti aceste date la forma simplă diferențială (MF = 4 și 5).

- **DICTON**: actualizează indicele de secțiune în MF = 1, MT = 451.

După rularea acestor coduri rezultatul va fi o bibliotecă de date punctuale evaluate verificată din punct de vedere al consistenței și într-o formă care poate fi mai ușor utilizată în procesarea ulterioară. Tot din acest pachet fac parte și alte coduri care asigură o serie de prelucrări folositoare ca de exemplu:

- **MERGER**: combină fișiere de date evaluate, de pildă poate forma o bibliotecă de tip ENDF din mai multe fișiere separate, poate extrage dintr-o bibliotecă completă părțile necesare utilizatorului sub formă de fișiere separate etc.

- **GROUPIE**: calculează secțiuni multigrup auto-ecranate; utilizarea acestui cod este o cale simplă și economică de obținere a secțiunilor multigrup pentru unele aplicații.

- **COMPLIT**: este un cod care execută compararea secțiunilor din două evaluări diferite. Se recomandă ca înainte de rularea acestui cod să se convertească secțiunile la forma multigrup cu ajutorul programului GROUPIE.

- **EVALPLOT**: plotează secțiuni eficiente, distribuții unghiulare, coeficienți Legendre și/sau distribuții energetice.

- **MIXER**: poate fi folosit pentru a defini secțiuni pentru combinații de materiale ca de exemplu oțel inoxidabil.

- **VIRGIN**: poate fi utilizat pentru a obține calcule exacte de transmisie, se poate simula transmisia prin orice fel de material dat sau straturi de materiale diferite la o temperatură dată. Rezultatele includ atât fluxul transmis cât și ratele de reacție în funcție de grosimea materialelor străbătute.

- **RELABEL**: este un cod de mentenanță care asigură actualizarea celorlalte coduri din pachetul PRE-PRO; acest cod este folosit de utilizatori numai dacă aceștia își propun să facă modificări în codurile pachetului.

10.5.1 SISTEMUL NJOY

Acest sistem de procesare este desemnat pentru scop general de aplicații. El poate trata practic toate informațiile conținute în bibliotecile de date punctuale evaluate și a fost în permanență perfecționat și actualizat în conformitate cu schimbările în regulile formatului ENDF. Sistemul asigură interfață la un număr larg de biblioteci de constante multigrup. Datorită suportului internațional acest sistem este pe cale să devină codul standard de procesare a datelor nucleare [7].

Firește că există posibile alternative la NJOY ca de exemplu AMPX77, GRUCON, MC²-II, GROUCH-G/B; sistemul AMPX acoperă aproape toate funcțiunile lui NJOY dar nu include procesarea Monte-Carlo a datelor. În plus există o serie de coduri ca de exemplu FOURACES, FEDGROUP, care continuă să fie folosite de mulți utilizatori fiind adecvate pentru obținerea de biblioteci procesate pentru o serie de aplicații speciale.

Cu toate acestea sistemul NJOY rămâne cel mai potrivit și mai mult utilizat la realizarea trecerii de la bibliotecile de date punctuale evaluate la bibliotecile pentru cele mai importante aplicații. În vederea obținerii bibliotecilor necesare proiectării zonelor active pentru reactori termici și rapizi, a instalațiilor de fuziune, de radioterapie, calculul unor "funcții de răspuns" speciale care caracterizează efectele locale ale transportului radiației etc., precum și analiza de sensibilitate a perturbațiilor (care necesită noi feluri de date procesate cum ar fi matricile de covarianță pentru secțiunile multigrup), o etapă obligatorie este procesarea datelor evaluate punctuale cu sistemul NJOY.

NJOY este compatibil cu formatul ENDF-6 (pentru a folosi bibliotecile ENDF/B-VI și JEF-2.2) iar versiunile sale mai vechi pot procesa și formatele ENDF-4 și ENDF-5 [7]. Realizarea mai multor versiuni ale sistemului NJOY s-a datorat și necesității de a se adăuga noi capacități de procesare ca răspuns al schimbării sistemelor de calcul și a componentelor și cu scopul de a identifica și a rezolva o serie de erori (a se vedea capitolul 2 al prezentei lucrări). Versiunea cea mai recentă a NJOY este deja disponibilă la NEA-DB-CPS și a fost realizată prin unirea eforturilor autorilor (grupul condus de Robert E. MacFarlane de la Los

Alamos National Laboratory) cu cele ale specialiștilor de la NEA-DB (E.Sartori) și de la RSIC (R.Roussin și B.L.Kirk).

Filozofia de programare a NJOY

Sistemul NJOY este scris în FORTRAN și indiferent de versiune s-a ținut totdeauna cont de câteva principii generale de programare [6]:

(1) o serie de instrucțiuni elementare (ca de exemplu READ și WRITE pentru un singur tip de linii ENDF) sunt păstrate separat în diferite subrutine.

(2) o serie de funcțiuni complexe (cum ar fi reconstrucția rezonanțelor) sunt păstrate separat în diferite module, prin modul înțelegând un șir de subrutine cuprinse sub un singur nume, cel al modului.

(3) comunicarea de date între diverse module este permisă numai cu ajutorul scrierii și citirii în mod secvențial a fișierelor; acest lucru permite ca fiecare modul să poată funcționa ca un program separat.

(4) în tot cursul programării s-a urmărit creșterea vitezei de execuție în dauna memoriei ocupate care devine mare.

(5) întreaga codificare FORTRAN a fost făcută într-un stil uniform și cu multe linii de comentariu.

Aceste concepte fac ca sistemul NJOY să fie relativ ușor de extins și de modificat deși este un sistem mare (peste 50000 de instrucțiuni FORTRAN). Aceasta înseamnă că schimbările făcute într-o subrutină nu necesită schimbări și în alte subrutine iar modificări mari într-un modul nu implică modificarea altor module, acest lucru face ușoară actualizarea sistemului NJOY pentru a ține pasul cu progresele în formatul ENDF și cu evoluția nevoilor de procesare a datelor [7].

O atenție deosebită s-a acordat implementării NJOY pe o mare varietate de computere și sisteme de operare, FORTRAN 77 în care este scris este compatibil cu compilatoarele CDC, Cray, IBM, VAX, CONVEX, SUN și alte numeroase sisteme. Este posibil să se execute module individuale NJOY și pe PC dar totuși sistemul în întregime este rulat numai pe computere mari.

O trăsătură, care distinge NJOY de celelalte sisteme de procesare a fișierelor de date evaluate punctuale, o constituie faptul că acest sistem poate procesa biblioteci de date neutronice de interacție într-o formă consistentă pentru ambele tipuri de coduri de transport: Monte-Carlo și cele care utilizează date multigrup.

Această consistență este garantată de faptul că NJOY începe totdeauna operațiunea de procesare cu producerea unui tabel explicit al valorilor de secțiuni eficace pentru toate reacțiile prin interpolare liniară (pe calea reconstrucției rezonanțelor și liniarizare) la un număr mare de puncte de energie. Aceste date sunt salvate într-un fișier de date punctuale numit PENDF. Printr-o ușoară reformatare a fișierului PENDF, sistemul NJOY produce o bibliotecă destinată codurilor punctuale Monte-Carlo. Prin integrare peste energii a datelor PENDF se generează biblioteci de date mediate pe grup. Faptul că datele au fost produse în tabele prin interpolare liniară face ca fișierul PENDF să aibă dimensiuni mari dar pe de altă parte se simplifică programarea și crește viteza de calcul la toate operațiile de procesare ulterioare cum ar fi lărgirea Doppler, integrarea pe grupe de energie, plotarea datelor etc.

Modulele sistemului NJOY sunt următoarele:

- NJOY este programul "driver" care apelează celelalte module la cerere și conține un meniu cu subrutinele comune folosite de celelalte module.

- RECONR este un modul ce reconstruiește explicit dependența de energie a secțiunilor din parametrii de rezonanță dați în fișierul MF = 2 și din legi de interpolare.

altele ca $INT = 2$. Valorile energiei pentru toate reacțiile sunt cu aceeași grilă (grid energetic); rezultatele obținute cu acest modul se scriu în fișierul PENDIF.

- BROADR este modulul ce calculează lărgirea Doppler a rezonanțelor ce sunt citite din fișierul de input PENDIF iar noile rezultate se scriu într-un nou fișier PENDIF.

- UNRESR este un modul care folosește o metodă analitică de calcul a secțiunilor de autoecranare punctuale (tabelate versus temperatură și secțiune Bondarenko) pe care le salvează tot pe fișierul PENDIF folosind o secțiune MT specială a lui $MF = 2$.

- HEATR calculează producția de căldură și secțiunile de producere a deteriorărilor în materiale (proporționale cu deplasările per atom) pe care le adaugă la fișierul PENDIF.

- THERMR este modulul folosit pentru calculul împrăștierii neutronilor la energii termice, rezultatele sunt salvate în PENDIF sub $MT = 221 - 250$ în $MF = 3$ și 6 . Ca atare formatul lui $MF = 6$ din PENDIF diferă de formatul ENDF-6.

- GROUPT generează secțiuni de autoecranare multigrup folosind metoda Bondarenko și matricile de transfer pentru neutroni, fotoni și particule încărcate. Rezultatele sunt înregistrate într-un fișier asemănător ca format cu ENDF numai GENDF.

- GAMINR calculează secțiunile eficace pentru interacția γ cu atomii, rezultatele sunt integrate pe fișierul GENDF.

- ERRORR și COVR sunt modulele folosite pentru calcularea și formatarea datelor de covarianță multigrup. Fișierul de ieșire al modulului ERRORR este în format "ERRORR-output" iar biblioteca de output a modulului COVR se numește BOXR.

- MODER este modulul care se folosește la conversia între diverse moduri de fișiere (ASCII, BCD, EBCDIC etc.) și modul binar, tot acest modul servește la construirea de noi fișiere ENDF, PENDIF sau GENDF conținând materiale (MAT) selecționate din fișierele de input.

- DTFR este folosit la generarea matricilor de transfer pentru coduri de transport care acceptă formatul DTF; modulul asigură și plotarea secțiunilor eficace editate, a matricii de transport de neutroni sau γ și a matricii de producție γ .

- CCCR este modulul utilizat la generarea fișierelor standard de interfață ISOTXS, BRKOXS, DLAYXS folosind ieșirea de la modulul GROUPT.

- MATXS converteste date multigrup obținute cu modulul GROUPT în formatul MATXS. Cu datele în format ENDF-6, o bibliotecă MATXS poate conține secțiunile eficace ale tuturor reacțiilor și matrici de transfer pentru neutroni, γ și particule încărcate. O dată ce informațiile există în formatul MATXS acestea pot fi utilizate în multe feluri pentru generarea bibliotecilor de intrare specifice codurilor de transport.

- AGER este modulul destinat producerii bibliotecii în format ACE (un format gen ENDF compact) destinată codului Monte-Carlo MCNP.

- POWR este un modul folosit pentru generarea bibliotecilor multigrup pentru codurile EPRI-CELL și EPRI-CPM. Multe grupuri de cercetare în domeniul reactorilor termici au făcut modificări în acest modul pentru a putea produce bibliotecii pentru sistemul de calcul WIMS.

- PLOTR este modulul care asigură plotarea secțiunilor conținute în fișierele ENDF, PENDIF, GENDF precum și a fișierelor de date experimentale.

10.6 ACTUALIZAREA UNEI BIBLIOTECI MULTIGRUP

Exemplu - Biblioteca WIMS

Pachetul WIMS este un sistem de coduri versatil destinat analizei de reactori. Versiunea WIMS-D/4 a sistemului este disponibilă la NEA-DB-CPS și este folosită în foarte

multe laboratoare din lume. Înșă un dezavantaj al sistemului WIMS îl constituie biblioteca sa de constante multigrup care este deficitară pentru o serie de materiale de interes [8]. Ea se bazează de altfel pe date destul de vechi cu privire la secțiunile eficace. Acordul bun cu valorile măsurate în celulele de reactor a putut fi realizat de-a lungul mai multor secvențe de ajustări de date. Aceste ajustări au fost de regulă empirice și nu reflectă consistent îmbunătățirile în datele nucleare. Ca urmare a realizării de noi biblioteci de date evaluate punctuale [9] s-a impus realizarea unei noi biblioteci WIMS-D pentru creșterea performanțelor sistemului WIMS.

Pentru început vom prezenta trăsăturile de bază ale activității de actualizare a unei biblioteci multigrup (cu exemplificare la biblioteca WIMS), actualizarea acestuia fiind prezentată apoi pe etape.

Având în vedere că documentația cu privire la biblioteca WIMS este răspândită în multe publicații și versiuni, nefiind totdeauna adecvată, câteva idei de bază sunt date în continuare:

*) Spectrul de fisiune conține o serie de ajustări care nu sunt în concordanță cu măsurările experimentale ale spectrului dar aceste ajustări îmbunătățesc concordanța dintre calculele WIMS și măsurările integrale la o varietate de benchmark-uri de configurații simple de zonă activă. În plus același spectru de fisiune este folosit pentru toți izotopii fisili.

*) Mare atenție trebuie acordată randamentelor produșilor de fisiune per act de fisiune deoarece unii precursori sunt tratați global cu valoarea randamentului pentru unul dintre produșii de fisiune (cu alte cuvinte randamentul pentru unul din produși este aplicat și pentru ceilalți).

*) Uneori definiția secțiunii potențiale și puterea de stopare per letargie sunt corect tratate dar definiția secțiunii de transport e în întregime "trucată". Secțiunea de transport este definită uzual la energii termice ca:

$$\langle \sigma_{tr} \rangle_g = \langle \sigma_a \rangle_g + \langle \sigma_{s0} \rangle_g - \langle \sigma_{s1} \rangle_g \quad (10.8)$$

unde: $\langle \sigma_{tr} \rangle_g$ este secțiunea de transport în grupul g , $\langle \sigma_a \rangle_g$ este secțiunea de absorbție în grupul g , $\langle \sigma_{s0} \rangle_g$ este momentul de ordin zero al secțiunii de împrăștiere și este dat de:

$$\langle \sigma_{s0} \rangle_g = \sum_h \langle \sigma_{s0} \rangle_{g \rightarrow h}$$

$\langle \sigma_{s1} \rangle_g$ este momentul de ordin 1 al secțiunii de împrăștiere dat de:

$$\langle \sigma_{s1} \rangle_g = \sum_h \langle \sigma_{s1} \rangle_{g \rightarrow h}$$

În regiunea rapidă și de rezonanță ecuațiile incorporate în codul WIMS cer o definiție diferită a secțiunii de transport. Momentul de ordin 1 al secțiunii de împrăștiere fiind dat de realția:

$$\langle \sigma_{s1} \rangle_g = \frac{\sum_h \langle \sigma_{s1} \rangle_{h \rightarrow g} \langle J \rangle_h}{\sum_h \langle J \rangle_h} \quad (10.9)$$

în care $\langle J \rangle_h$ este curentul de neutroni mediat pe grup. Când nu este disponibilă o aproximație mai bună se poate folosi forma $1/E$.

Diferența între cele două definiții ale secțiunii de transport este mică în cazul nucleelor grele dar în cazul moderatorului definirea incorectă a secțiunii de transport poate conduce la erori semnificative [1].

*) Secțiunea de absorbție este suma dintre secțiunea de fisiune și toate celelalte secțiuni ale reacțiilor ce produc neutroni. În domeniul rapid în codul WIMS este făcută o corecție pentru a conserva aproximativ balanța de neutroni în cazul reacțiilor în care se produc mai mulți neutroni (ca $(n,2n)$, $(n,3n)$ etc.).

*) Parametrul χ (spectrul neutronilor de fisiune) este folosit numai în unele versiuni ale sistemului WIMS

*) Parametrul Goldstein-Cohen definit în secțiunea 10.4.3 trebuie inclus în noua bibliotecă.

*) Pentru secțiunea de fisiune macroscopică Σ_f și pentru randamentul de fisiune $\nu\Sigma_f$ sunt utilizate definiții standard.

*) Matricile de împrăștiere sunt definite în modul uzual, cu excepția unor modificări și anume: pentru nuclizi care nu au tabelate matrici de împrăștiere P_1 , elementele diagonale ale matricii de împrăștiere P_0 sunt modificate astfel încât suma pe linii (secțiunea $\langle \sigma_{s0} \rangle$) și secțiunea de absorbție să reproducă secțiunea de transport și nu secțiunea totală. Astfel matricea de transport P_1 este definită fără termenul $(2l+1)$ la numărător, care este cerut în unele coduri.

*) Integralele de rezonanță sunt definite ca în secțiunea 10.4.3 numai că sunt normate la lărgime, ele nu trebuie confundate cu secțiunile de autoecranare deoarece apar erori în special în grupele de energie mică.

Date fiind cele spuse se conturează două strategii posibile pentru actualizarea bibliotecilor multigrup și în special a bibliotecii WIMS și anume:

i) să se creeze o nouă bibliotecă multigrup folosind noile biblioteci de date punctuale evaluate

ii) să se înlocuiască în biblioteca multigrup existentă datele materialelor individuale și să se adauge date

Pentru prima strategie este recomandat să se folosească o bibliotecă ENDF testată astfel încât rezultatele să poată fi comparate cu benchmark-urile bibliotecii.

A doua strategie pare mai atractivă deoarece rezultatele testării cu biblioteca originală pot servi ca referință și efectele schimbărilor operate în bibliotecă pot fi testate individual. De asemenea biblioteca poate fi extinsă prin adăugarea de noi materiale fără să fie afectate serios performanțele bibliotecii pentru problemele de test la care autorul a ajustat datele.

În continuare prezentăm procedura de actualizare a bibliotecii WIMS-D cu accent în special pe procesarea și validarea datelor. Programul de actualizare al WIMS-D a constituit și constituie o activitate internațională dat fiind numărul foarte mare de utilizatori ai codului WIMS [10].

Biblioteca WIMS-D include multe tipuri de date (secțiuni eficace, date de rezonanță, randamente de produși de fisiune și o mulțime de alte mărimi derivate din acestea). Formatul

bibliotecii este strict și destul de rigid, ca atare deseori este imposibil să se definească date care sunt validate pentru toate cazurile de interes [10].

Activitatea de actualizare în general a unei biblioteci multigrup și în particular a bibliotecii WIMS-D poate fi împărțită în mai multe etape astfel:

- (1) Aprecierea performanțelor curente ale bibliotecii
- (2) Validarea metodelor de procesare a datelor
- (3) Actualizarea bibliotecii pentru câteva materiale primare
- (4) Validarea bibliotecii parțiale actualizate prin compararea rezultatelor calculate cu cele definite de măsurători integrale
- (5) Actualizarea bibliotecii WIMS-D pentru produși de fisiune
- (6) Validarea bibliotecii parțiale actualizate pentru ardere
- (7) Completarea bibliotecii actualizate prin adăugarea datelor pentru materiale de interes

(1) Aprecierea performanțelor curente ale bibliotecii WIMS-D4

Înainte de a se trece la generarea unei noi biblioteci trebuie apreciate performanțele actuale ale sistemului de calcul WIMS pe cazuri selectate, folosind biblioteca existentă (primară). Cazurile test trebuie astfel definite încât acuratețea rezultatelor calculate să poată fi comparată cu rezultate experimentale. Acest lucru necesită formarea unei baze de date care să conțină informații ale celor mai bine definite experimente integrale care pot fi modelate cu codul WIMS.

Fișierele de intrare ale codului WIMS au fost apoi optimizate pentru a minimiza erorile de modelare (prin tratarea geometrică cât mai riguros posibil) și erorile de convergență (de exemplu erori datorate discretizării spațiale sau ordinului de aproximație al ecuației de transport).

Rezultatele acestui studiu reprezintă referința față de care se pot aprecia în bună măsură diferențele relative datorate folosirii unor noi date nucleare.

(2) Validarea metodelor de procesare a datelor

Metodele de procesare a datelor trebuie considerate cu mare atenție în scopul de a decupla cât mai mult posibil erorile în datele de bază de celelalte surse de erori. Acest lucru poate fi făcut în cursul calculului numeric de benchmark.

Se consideră câteva biblioteci de date evaluate de bază care au fost utilizate într-o analiză (raportată în literatură) pentru a modela o celulă-rețea de reactor, folosind metode de mare acuratețe (de exemplu Monte Carlo). Prin generarea bibliotecii multigrup WIMS-D din asemenea fișiere ENDF și prin modelarea aceleiași celule cu codul WIMS, se pot determina erorile sistematice din codul WIMS.

Presupunând că erorile de procesare a datelor au fost înlăturate, diferențele rămase sunt rezultatul limitărilor formatului bibliotecii WIMS-D sau reprezintă limitele modelelor folosite în codul WIMS.

Acest pas este crucial pentru activitățile ce vor urma: obținerea unui acord bun între calculele WIMS și rezultatele de referință este o confirmare a definirii corecte a datelor și a metodelor de procesare folosite în prepararea bibliotecii WIMS-D. Acest lucru e bazat pe presupunerea că dacă erorile din modelările lui WIMS sunt mici și nu sunt nerezolvabile, furnizarea cazurilor de test se alege în cadrul problemelor pentru care este desemnat codul WIMS (calcul de celulă-rețea la reactori termici). Dacă este posibil, benchmark-ul numeric

este ales să conțină numai câteva materiale pentru a simplifica procesarea datelor la aceasta etapă [10].

(3) Actualizarea preliminară a bibliotecii parțiale

Având metodele de procesare stabilite și verificate, se poate trece la actualizarea parțială a bibliotecii, actualizare bazată pe selectarea unei noi biblioteci de date evaluate punctuale (ENDF). Se procesează numai acele materiale care sunt necesare în calculele de benchmark integral (care a fost identificat la etapa (2)). Rezultatele calculului sunt comparate cu datele măsurate și cu datele calculate cu biblioteca inițială (originală). În urma acestei comparații se pot obține indicații asupra capacității sistemului WIMS-D/4 împreună cu biblioteca actualizată, de a reproduce parametrii măsurai și astfel se poate aprecia dacă există sau nu un câștig cu privire la performanțele sistemului comparativ cu biblioteca inițială. Prin considerarea discrepanțelor sistematice identificate la etapa (2) este posibil uneori să se aprecieze dacă datele de bază (ENDF) sunt adecvate [10].

(4) Actualizarea bibliotecii WIMS-D pentru date de produși de fisiune

Datele de produși de fisiune sunt importante pentru calculele de ardere (burn-up). În biblioteca inițială au fost introduse unele simplificări ale lanțurilor de ardere. De exemplu precursorii intermediari ai unor produși de fisiune au fost tratați la un loc cu izotopul final (cum ar fi precursorul samariului), așa cum s-a spus de altfel la începutul acestui subcapitol.

În generarea noii biblioteci, o parte a aproximațiilor din biblioteca inițială pot fi înlăturate pentru a avea o acuratețe mai bună dar trebuie ținut seama să nu se depășească limitările curente existente în codul WIMS-D/4. În cazul în care se definesc pseudo-produși de fisiune trebuie acordată mare atenție la validare.

(5) Actualizarea finală a bibliotecii

Dacă s-au rezolvat problemele identificate la etapele anterioare, se poate spune că se poate face practic actualizarea bibliotecii. Ceea ce mai rămâne de făcut este adăugarea datelor pentru noi materiale importante pentru aplicații (materiale structurale speciale, materiale de detectori, materiale moderatoare, otrăvuri etc.).

În mod obișnuit materialele de structură și otrăvurile nu prezintă probleme dar trebuie menționat că absorbanții cu tabele de integrale de rezonanță sunt în mod normal asociați numai cu componentele de combustibil.

În privința introducerii de noi moderatori pot apărea dificultăți dacă trebuie calculată matricea de împrăștiere P_1 din cauză că sistemul WIMS-D/4 permite definirea numai a patru matrici de împrăștiere P_1 . Pe de altă parte însă este rar cazul să fie mai mult de patru moderatori diferiți în aceeași celulă. Există însă soluția preparării unei biblioteci "de lucru" specifică nevoilor utilizatorilor, în care să se introducă datele în exces.

(6) Proiectul de actualizare a bibliotecii WIMS-D

Acest proiect a fost inițiat de IAEA în 1990.

Etapa 1 a inclus optimizarea fisierelor de intrare ale sistemului WIMS pentru cinci benchmark-uri experimentale de rețele de reactori termici. Principalul rezultat al acestei etape a fost realizarea de fișiere de input standard pentru WIMS-D/4 care modelează rețele pentru

TRX-1,2 și BAPL-1,2,3. Au fost obținut un set de rezultate de referință calculate cu biblioteca inițială WIMS și raportate în [11].

Etapa 2, terminată în 1993, a implicat procesarea secțiunilor eficace folosind ca bibliotecă de plecare de date punctuale evaluate ENDF/B-IV. Nu au existat coduri standard pentru prepararea bibliotecii WIMS-D, biblioteca inițială a fost generată în anii 60-70 folosind coduri și fișiere de date evaluate care acum sunt depășite [10].

Totuși unele coduri se consideră că au capacitatea de a prepara datele pentru biblioteca WIMS-D. Datele intrate în biblioteca WIMS după procesarea acestora cu codurile AMPX-II, FEDGROUP-C86, FEDGROUP-R și diferitele versiuni ale codului NJOY au fost comparate [12] pentru a aprecia dacă există o creștere a "încrederii" în diversele coduri și metode de procesare. În urma analizelor efectuate în această etapă s-au constatat diferențe între rezultate și s-au identificat sursele acestora, ca atare au fost aduse corecții și îmbunătățiri la modulul WIMSR al codului NJOY91.38 [13] și s-a stabilit calea procesului de preparare a bibliotecii WIMS-D folosind sistemul NJOY. Această cale a fost propusă pentru toate celelalte etape ale proiectului de actualizare a bibliotecii WIMS [10].

Biblioteca ENDF/B-IV de pornire pentru WIMS-D a fost testată pe benchmark-uri numerice. Cazurile test numerice le-au constituit rezultatele calculor pe rețelele TRX-1,2 și BAPL-1,2,3 furnizate de zece laboratoare diferite din USA, utilizând coduri Monte-Carlo și biblioteca ENDF/B-IV. Au fost comparați următorii parametri integrali: k_{eff} (coeficientul de criticitate efectiv), ρ^{28} (raportul ratelor reacțiilor de captură epitermică și termică la U-238), δ^{25} (raportul ratelor reacțiilor de fisiune epitermică și termică la U-235), δ^{28} (raportul ratelor reacției totale de fisiune la U-238 și U-235) și C^* (raportul ratelor reacției de captură în U-238 și ratelor reacției de fisiune în U-235 măsurate numai în rețeaua TRX).

Rezultatele calculor efectuate cu codul WIMS sunt în concordanță foarte bună cu rezultatele de referință ale acestor parametri. Cea mai mare parte a valorilor calculate cu WIMS se plasează în interiorul intervalului de incertitudine al rezultatelor de referință, ceea ce indică faptul că metodele de procesare stabilite sunt adecvate, acesta constituind de altfel rezultatul principal al acestei etape a proiectului de actualizare WIMS.

În tabelul 10.1 sunt prezentate pentru exemplificare rezultatele obținute la coeficientul de criticitate efectiv pentru fiecare rețea și anume: în prima coloană sunt date valorile de referință ale lui k_{eff} cu incertitudinile lor în procente iar în a doua coloană rezultatele calculor cu WIMS (folosind ca bază ENDF/B-IV) și diferența în procente față de valoarea de referință a lui k_{eff} .

Tabel 10.1

rețeaua	k_{eff}	% teste experimentale	k_{eff}	% calcule WIMS
TRX-1	0.98760	32	0.98707	-5
TRX-2	0.99350	31	0.98916	-44
BAPL-1	0.99140	30	0.99321	+18
BAPL-2	0.99320	9	0.99325	+1
BAPL-3	0.99395	21	0.99373	-2

Etapa 3 a proiectului a constat în prepararea bibliotecii parțial actualizate WIMS-D pe baza a noi biblioteci de date punctuale evaluate și anume: JEF-2.2, ENDF/B-VI, CENDL-2, JENDL-3.1 [14]. Au fost aplicate aceleași metode de procesare ca în cazul utilizării bibliotecii de bază ENDF/B-IV și același tip de fișiere de input pentru WIMS. Parametrii integrali calculați pentru cazurile test (benchmark) au fost în bun acord cu valorile măsurate, aproape toate valorile încadrându-se în plaja incertitudinilor experimentale. Diferențele în rezultate datorate utilizării diferitelor baze de date evaluate punctuale sunt relativ mici.

Concluzia a fost că metodele de procesare a datelor folosite pentru prepararea bibliotecii WIMS-D au efect mult mai mare în rezultatele finale decât utilizarea de biblioteci diferite de date evaluate punctuale [10].

Etapile ulterioare ale proiectului sunt în desfășurare.

10.7 ACTIVITATEA PRIVIND PROBLEMELE TEST SPECIFICE (BENCHMARK)

În cadrul celor patru centre majore de date nucleare funcționează comitele internaționale de specialiști care stabilesc problemele de interes în aplicațiile majore pașnice de fizică nucleară (cu precădere legate de reactorii nucleari și domeniile conexe lor cum ar fi gestiunea deșeurilor, protecția mediului, transportul și retratarea combustibilului etc.). Aceste probleme sunt abordate fie prin sponsorizarea de meetinguri de specialiști, ale căror rezultate sunt raportate la comitetelor ce asigură diseminarea lor, fie prin organizarea și coordonarea unor exerciții privind probleme de test specifice (benchmark) unde rezultatele experimentale și soluțiile calculelor la diferite probleme sunt comparate în scopul de a testa acuratețea metodelor și a codurilor de calcul folosite în diverse programe naționale [16]. Întrunirile comitetelor de specialiști includ o trecere în revistă a fiecărui program național de fizica reactorilor precum și o revizuire a desfășurării sau raportul final asupra problemei test. Industria nucleară și autoritățile legislative din domeniul nuclear trebuie să se sprijine pe performanțele codurilor de calcul și a bibliotecilor de date nucleare în toate calculele importante de energetică nucleară. Dat fiind impactul internațional al accidentelor nucleare majore și criza de încredere a populației, este de mare importanță ca modelele, metodele și datele nucleare să fie acceptate internațional. Acest lucru este cel mai bine îndeplinit prin validarea la scară internațională a acestora cu participarea tuturor țărilor la activitatea de testare. Cea mai bogată activitate în acest sens o are OECD-NEA care prin comitetul sau de fizica reactorilor (NEA-CRP, Reactor Physics Committee) a organizat și sponsorizat activitatea de benchmark pe cele două direcții:

i) probleme test de calcule în care o serie de coduri dezvoltate independent în diverse laboratoare și țări sunt intercomparate cu un set de probleme fizice bine definite [16]

ii) probleme test experimentale în care aceste coduri sunt comparate cu un set de măsurări experimentale "curate" [16].

Aceste studii de probleme test au ca scop verificarea corectitudinii codurilor de calcul de reactori precum și a bazelor de date aferente, în vederea creșterii încrederii în metode și coduri în special în domeniile în care experimentele sunt foarte costisitoare sau lipsesc. Trecerea în revistă a studiilor de benchmark făcute în ultimii 20 de ani este dată în [16], unele activități de benchmark pe termen lung sunt încă în desfășurare iar noi probleme test au fost deja planificate. În continuare, pentru exemplificare, vom prezenta foarte pe scurt câteva probleme test mai recente.

10.7.1 Probleme test de criticitate

Participanții la acest tip de problemă test au examinat capacitatea mai multor metode și coduri de a calcula cu acuratețe coeficientul de criticitate k_{eff} pentru o serie de sisteme care au fost măsurate să fie experimental critice [16].

Prima fază a exercițiului a fost orientată către siguranța criticității transportului materialului fier la iar a doua fază către siguranța de criticitate a dizolvării elementelor combustibile pentru reprocessarea combustibilului. În urma acestui tip de probleme test s-a stabilit procedura ce trebuie folosită (acceptată internațional de autoritățile în domeniul nuclear) pe baza comparării metodelor folosite în diverse țări. Pentru acest tip de problemă s-a găsit o metodă de referință pentru calculul efectelor de autoecranare a rezonanțelor și pe de altă parte s-a putut avansa în rezolvarea problemei dificile a heterogenităților combustibilului. În tabelul 10.2 este prezentat un sumar al problemelor test din această categorie.

10.7.2 Calcule test ale protecției recipientilor de transport al combustibilului

Au fost intercomparate o serie de coduri de proiectare a protecției pentru transportul combustibilului uzat (ars). Diferitele aspecte ale protecțiilor curent folosite sunt prezentate în tabelul 10.3.

S-au identificat și rezolvat o serie de probleme cum ar fi alegerea intervalelor de mesh, alegerea bibliotecilor de date multigrup și modelarea geometrică.

Tabel 10.3

Probl.	Recipient perete/capac/bază	Cavitatea pt. combustibil	Protecția neutronică	Sursă
1a	Fe turnat/ OL /Fe turnat	uscată	nu	omogenă
1b	Fe turnat/ OL/ Fe turnat	uscată	6cm CH ₂ la exterior	omogenă
1c	Fe turnat/ OL/ Fe turnat	uscată	nu	omogenă
2a	OL/ OL/ OL	uscată	60 bare polietilenă	omogenă
2b	Fe turnat/ OL/ Fe turnat	uscată	8cm rășină epoxidică	omogenă
3a	OL/ OL/ OL	uscată	nu	omogenă
3b	Fe turnat/ OL/ Fe turnat	uscată	straturi rășină epoxi	omogenă
4a	Fe turnat/ OL/ Fe turnat	uscată	nu	coș cu 5 elemente
4b	Fe turnat/ OL/ Fe turnat	uscată	nu	
5	Fe turnat/ OL/ Fe turnat	uscată	nu	UO ₂ calculată
6	Fe turnat/ OL/ Fe turnat	uscată	nu	MOX calculată

Este în desfășurare un studiu suplimentar în care predicțiile făcute cu diverse coduri

Tabel 10.2

Referință	Combustibil					moderator / soluție / otrăvă / absorbant			
	Geometrie	Rețea geometrie/pas	Tip	²³⁵ U w(%)	PuO ₂ w(%)	H ₂ O borată (ppm)	Otrăvă (g/l) NaNO ₃ / Gd(NO ₃) ₃	Hf(dist.) (cm)	Fisil (g/l) U / Pu
1. CEA	bară	pătrat/1.600	UO ₂	4.75			65.75 / 0.600		
2. CEA	bară	triunghi/1.350	UO ₂	4.75					
3. JAERI	bară	pătrat/1.956	UO ₂	2.60		147			
4. JAERI	bară	pătrat/1.956	UO ₂	2.60		554			
5. JAERI	bară	pătrat/1.825	PuO ₂ , UO ₂	0.72	3.01	0			
6. BNFL	bară	triunghi/2.398	UO ₂	4.31			/0.482		
7. BNFL	bară	triunghi/1.801	UO ₂	4.31			/1.246		
8. BNFL	bară	triunghi/1.598	PuO ₂ , UO ₂	4.31	2.00		/0.673		
9. BNFL	bară	triunghi/1.801	UO ₂	4.31					
10. BNFL	bară	triunghi/3.050	PuO ₂ , UO ₂	0.72	25.2		/0.020		180 / 77.6
11. BNFL	bară	triunghi/3.050	PuO ₂ , UO ₂	0.72	25.2		/0.258		180 / 77.6
12. BNFL	bară	triunghi/3.050	PuO ₂ , UO ₂	0.72	25.2		/1.338		180 / 77.6
13. BNFL	bară	triunghi/2.286	UO ₂	4.30			/0.184		196 /
14. BNFL	bară	triunghi/2.794	UO ₂	4.30			/0.124		196 /
15. GRS/CEA	cluster	pătrat/1.350	UO ₂	4.75		0		+1.8	
16. GRS/CEA	cluster	pătrat/1.350	UO ₂	4.75		0		+5.8	
17. GRS/CEA	cluster	pătrat/1.600	UO ₂	4.75		0		0.8	
18. GRS	cluster	pătrat/1.600	UO ₂	4.75		0		2.4	
19. BNFL	sferă	pătrat/variabil	UO ₂	4.00		1500-3500	/1.000		0-300 /
20. ORNL	sferă	pătr. tri/variabil	UO ₂	2.50		1500-3500			
21. CEA	bară	cerc/variabil	PuO ₂ , UO ₂	0.72	18	1500-3500	/0-1.0		variab./variab.

de calcul și biblioteci pentru dozele de neutroni și γ înafară recipientului sunt comparate cu rezultate experimentale. Acest benchmark, mai complex decât cele anterioare pe această temă, încearcă să stabilească puterea de predicție a modelelor de calcul folosite pentru o problemă concretă [16].

10.7.3 Cazuri test referitoare la problemele de ardere la reactori de înaltă conversie cu apă ușoară

Acest tip de problemă test a fost propus cu scopul de a îmbunătăți utilizarea combustibilului în reactorii cu apă ușoară și conservarea plutoniului [17], [18].

În ultimii ani s-a investit mult efort în diferite țări pentru conceperea proiectului de reactori de înaltă conversie cu apă ușoară (HCLWR - High Conversion Light Water Reactor). Scopul a fost rezolvarea a două probleme: ratele de conversie și factorul de ardere. NEA a sponsorizat și coordonat un benchmark internațional cu privire la validarea metodelor de calcul referitoare la arderea în rețele închise pentru aplicații de HCLWR. Este vorba de două rețele cu raport moderator/combustibil de 0.6 și respectiv 1.1 și zona activă (în șase configurații) a primei faze a experimentului PROTEUS care au fost analizate cu diferite coduri multigrup și un cod Monte-Carlo. Au fost necesare mai multe iterații ale calculului de benchmark pentru a rezolva discrepanțele largi găsite în primul set de rezultate.

Rezultatele obținute cu codurile de calcul și bibliotecile actuale indică soluții de o calitate comparabilă cu cea a soluțiilor benchmark-urilor de reactori standard LWR.

Multe organizații și laboratoare participante la acest tip de problemă test au dezvoltat și îmbunătățit schemele lor proprii de calcul și metodele de generare a bibliotecilor de date pentru a putea calcula rețele închise în condiții de lipsă și prezență a moderatorului. Trebuie subliniat că prin această problemă test s-a reușit acoperirea golului care exista între metodele pentru LWR și FBR (Fast Breeder Reactor). O serie de aproximații validate pentru LWR și FBR au putut fi generalizate astfel încât validitatea lor acoperă acum și spectrul intermediar al HCLWR.

Sunt planificate în continuare probleme test destinate clarificării problemelor rămase deschise (cum ar fi efectul Doppler pentru rețele închise).

Bibliografie:

- [1] Trkov A. Proceeding of the Workshop on Nuclear Reactors, Physics, Design, Safety, Trieste (1994), 94-114
- [2] Pronyaev V.G., Lemmel H.D., McLaughlin K. INDL/A-83 IAEA "Nuclear Data Library for Evaluated Neutron Reaction Data" IAEA-NDS-12, rev.7, part.1 (1983), part.2 (1984), suppl. (1986)
- [3] Goldstein R., Cohen E.R. "Theory of Resonance Absorption of Neutrons", Nucl.Sci.Eng. 13 (1962), 132-140
- [4] Forti G. "Evaluation of Resonance Integrals in Homogenous and Heterogenous Systems - an Intermediate Approximation", Nucl.Sci.Eng. 19 (1964), 449-457
- [5] Trkov A., Ravnic M. "Effective Diffusion Homogenization of Cross Sections for PWR Core Calculation", Nucl.Sci.Eng. 116, 2 (1994), 86-95
- [6] Cullen D.E. "The 1995 ENDF Pre-processing Codes" IAEA-NDS-39
- [7] Muir D.W. "NJOY a comprehensive system for the processing of ENDF formatted nuclear data", Workshop on Reactor Physics Calculations for Applications in

Nuclear Technology" (1990), 55-72

[8] Taubman C.J. "The WIMS69-group library tape 166259", Atomic Energy Establishment Winfrith AEEW-M1324, 1975

[9] Lemmel H.D. Index to BROND-2, CENDL-2, ENDF/B-VI, JEF2, JENDL-3, IRDF, IAEA-NDS-107, rev.8 (1993)

[10] Trkov A. Proceeding of the Workshop on Nuclear Reactors. Physics, Design, Safety, Trieste (1994), 115-125

[11] Ganesan S. "WIMS library update project" INDC(NDS)-290 (1993)

[12] Trkov A., Holubar A., Ravnic M. "WIMS library update project - final report on stage 2", Institute "Josef Stefan", Ljubljana, Slovenia, IJS-DP-6726 rev.1, 1993

[13] Trkov A., Zidi T., Ganesan S. "NJOY verification for WIMS library preparation", Institute "Josef Stefan", Ljubljana, Slovenia, IJS-DP-6622, 1992

[14] Trkov A., Ravnic M. "Application of ENDF/B-VI data for the WIMS lattice code", Ann.Nucl.Energy 20, no.8 (1993), 561-561

[15] Peerani P. "Cross section libraries for nuclear reactor calculation", Proceeding of the workshop on "Nuclear Reactors, Physics, Design, Safety", ICTP-Trieste (1994)

[16] Sartori E. "Activities on the NEA Reactor Physics Committee and International Benchmark Studies for Reactor Physics Codes", Proceeding of the workshop on "Reactor Physics Calculations for Applications in Nuclear Technology", ICTP-Trieste (1990), 24-40

[17] Bernnat W., Ishiguro Y., Sartori E., Stepanek J., Takano M. "Advances in the Analysis of NEACRP High Conversion LWR Benchmark Problems", Proceeding Conf. PHYSOR'90 (1990)

[18] Miller P., Nagel P., Salvatores M., Sartori E. "Shielding Experimental Benchmark Data Base of the NEA-DB", Proceeding Conf. ICRS7 (1988)

11. ELEMENTE PRIVIND INCERTITUDINILE DATELOR NUCLEARE OBTINUTE DIN CALCULE DE MODELE

Metoda tradițională de obținere a datelor nucleare necesare în aplicații a fost măsurarea lor; au rezultat astfel multe seturi de date experimentale acoperind combinația țintă/proiectil/ reacție, care au fost de mare importanță în trecut. În prezent există o mare cantitate de date nucleare evaluate în formatul standard ENDF și accesabile internațional în forme din ce în ce mai comode. Aceste baze de date sunt în plus acompaniate de o serie largă de coduri de accesare a acestor fișiere, de procesare și de manipulare a datelor.

Rămâne însă întrebarea ce se face atunci când o informație cerută asupra combinației țintă/proiectil/reacție nu este inclusă în fișierele de date nucleare evaluate cu suficientă acuratețe? Ceea ce se recomandă este folosirea unui model teoretic adecvat și fitarea lui pe o selecție de date experimentale măsurate cu acuratețe pentru tipuri de date vecine. Termenul de fit utilizat aici se referă la *procesul de ajustare al parametrilor de input ai modelului cu scopul de a aduce predicțiile modelului teoretic în acord general cu valorile măsurate, dată fiind considerarea atât a incertitudinilor parametrilor cât și ale datelor măsurate*. Această operație de fitare este necesară datorită stadiului actual al cunoștințelor asupra metodelor absolute de calcul al datelor nucleare. Fiște că toate modelele nucleare se bazează pe aproximații (interacția nucleon-nucleu înseamnă rezolvarea ecuației Schrödinger de mai multe corpuri, imposibil dată fiind capacitatea actuală a computerelor). Așa cum s-a mai spus în prezenta lucrare, calitatea generației actuale de modele de reacție folosite la calcularea datelor nucleare poate fi judecată numai prin compararea predicțiilor acestora cu datele experimentale și prin intercomparare a acestor predicții cu rezultatele furnizate de modele echivalente.

Ca terminologie fitarea calculului de model înseamnă evaluări teoretice [1]. O dată cu îmbunătățirea acurateții datelor calculate, includerea informațiilor experimentale folosind metoda celor mai mici pătrate corelate liniar furnizează o bază cantitativă de estimare a incertitudinilor și corelațiilor datelor nucleare. Aceste incertitudini ulterioare și corelațiile lor (numite covarianțe) sunt importante și datele cantitative cu privire la ele trebuie incluse în fișierele de date evaluate (în formatul ENDF este vorba de MF = 30, 31, ... 40 pentru particula incidentă neutron).

11.1 PROBLEME ÎN ANALIZA INCERTITUDINII CALCULELOR

Este știut că se pot defini, estima și manipula incertitudinile parametrilor de model teoretic folosind cele mai mici pătrate (c.m.m.p.). Un exemplu recent de utilizare a celor mai mici pătrate în evaluarea parametrilor de rezonanță pentru materiale structurale îl constituie codul SAMMY [2] pentru matricea R. Trebuie spus că există mari probleme la extinderea acestui tip de analize când sunt prezente erori legate de folosirea de modele inadecvate pentru respectiva problemă fizică.

În abordarea analizei incertitudinilor calculului trebuie separate cele două probleme:

- incertitudinea parametrilor
- incertitudinea metodei

De asemenea trebuie avut în vedere faptul că cele două obiective:

- îmbunătățirea acurateții predicțiilor modelelor nucleare cu ajutorul analizei prin cele mai mici pătrate a datelor experimentale disponibile
- dezvoltarea estimărilor obiective și acoperitoare asupra incertitudinilor în aceste

predicții îmbunătățite au un caracter limitat [3].

Principalele probleme de care trebuie ținut cont în analiza incertitudinilor pot fi sintetizate astfel [3]:

- aplicarea metodei celor mai mici pătrate asupra parametrilor de intrare are succes numai în cadrul folosirii unor modele particulare

- modelul nu este același lucru cu cod de calcul; astfel modelul reprezintă aproximația teoretică ce poate fi descrisă matematic și înțeleasă clar de comunitatea specialiștilor iar modelul se implementează în subrutine și rutine de calcul care împreună cu parametrii de input fitați întră în diferite coduri de calcul.

- trebuie avută în vedere comportarea nesistematică a valorilor parametrilor care emerg din fit: unii parametri fluctuează puternic de la nucleu la nucleu datorită în principal efectului de pături sau altor fenomene de structură nucleară. Acesta este și motivul existenței unor tabele largi de parametri ce depind de masă, energie etc.; această situație putem spune că este "neelegantă" sub aspect teoretic dar este deosebit de utilă pentru producerea datelor nucleare. Ca atare sunt de așteptat fișiere foarte mari de parametri iar analiza de incertitudine a acestor parametri implică o activitate intensă computațională [3].

11.2 METODA CELOR MAI MICI PATRATE PARTITIONATE

11.2.1 Estimarea dispersiei minime

O serie de probleme în domeniul general al evaluărilor de date se reduce la necesitatea de îmbunătățire a datelor evaluate pe baza unui set de date experimentale ținând cont de relațiile teoretice cunoscute dintre aceste date. Ca exemplu, presupunem că am măsurat mărimile fizice x , y și z cu erorile experimentale pure Δx , Δy și Δz . Dacă se știe că din punct de vedere teoretic între aceste mărimi fizice există o relație (constrângere):

$$x_{adevarat} + y_{adevarat} = z_{adevarat}$$

atunci asemenea relații reprezintă o sursă suplimentară de informații ce poate fi utilizată împreună cu datele experimentale pentru noi estimări ale valorilor adevărate având incertitudini mai mici.

O metodă foarte utilă de a combina informații din mai multe surse pentru a obține estimări îmbunătățite este metoda celor mai mici pătrate corelate. Ecuatiile uzuale utilizate în această metodă se cunosc sub numele de "ecuații normale" și ele dau o metodă de minimizare a incertitudinilor în cunoașterea valorilor mărimilor fizice dat fiind un set de măsurători relevante și incertitudinile lor [3]. În limbaj statistic metoda celor mai mici pătrate corelate e văzută ca o metoda de construire a estimatorilor liniari de minimă varianță ai valorilor adevărate. Intr-un rezultat cunoscut ca teorema Gauss-Markov "ecuațiile normale" au fost privite de Gauss, Markov și Aitken ca furnizând estimările de minimă dispersie (varianță) nu numai asupra mărimilor fizice dar și asupra fiecărei funcții liniare a acestor marimi fizice, ceea ce este important în aplicații. Mai mult, nu este cerută vreo presupunere cu privire la forma distribuțiilor de probabilitate a erorilor măsurate ci numai ca aceste distribuții să aibă dispersie finită.

În marea majoritate a aplicațiilor, mărimile fizice măsurate se împart în două categorii numite "parametri" și "date".

Prin parametri se înțelege un set complet de informații numerice cerute ca input în calculele teoretice de date nucleare; de exemplu: mase de stări fundamentale, spini, parități,

proprietăți de nivele discrete incluzând scheme de dezintegrare, funcții de forță, distanțe medii între nivele ($\langle D \rangle$), parametri pentru funcțiile densităților de nivele, parametri ai barierelor de fisiune, parametri de potențial de model optic etc. În terminologia curentă legată de modelele nucleare READ înseamnă parametri iar WRITE înseamnă date nucleare [3].

La punctul de plecare al analizei de incertitudine, o parte din parametri au fost măsurați în sens "tradițional" (de exemplu proprietăți ale nivelelor discrete), pe când alții au fost estimați din tendințele sistematice (de exemplu parametri ai barierelor de fisiune, înălțimi, curburi etc.).

Când valorile măsurate pot fi împărțite în cele două clase: parametri și date atunci matricea de sensibilitate cu privire la setul total de date experimentale poate fi estimată pentru că are o structură partițională specială. Astfel matricea de sensibilitate pentru porțiunea de parametri din totalul de măsurări e chiar matricea identică. Numai matricea de sensibilitate pentru porțiunea de date este cea netrivială. Se poate obține un mare avantaj din această structură partiționată a matricii totale de sensibilitate, din punctul de vedere al cerințelor de inversare a matricii pentru a rezolva ecuațiile normale. Metoda celor mai mici pătrate partiționate conferă avantaje în activitatea de ajustare a datelor în sensul că parametrilor și datele îmbunătățite ca și covarianțele lor finale pot fi date sub forma de sume ale valorilor originale experimentale plus un termen de ajustare. În cazul unor mărimi fizice ce au fost foarte bine determinate din măsurările inițiale, schimbările induse de procesul de fitare conduc la ajustări foarte mici.

Problema incertitudinilor rezultatelor calculelor de modele diferă de alte aplicații ale metodei celor mai mici pătrate corelate deoarece numărul de componente în setul de parametri poate fi mult mai larg ca numărul de date măsurate. Acest lucru dă o motivare serioasă găririi de aproximații care să ocolească inversarea matricii mari de covarianță a parametrilor și datelor. Un algoritm care îndeplinește reducerea cerințelor de inversare a matricii a fost elaborat de Linnik [4] și dezvoltat de Gandini [5], [6] pentru ajustări de date necesare la aplicațiile de reactori nucleari.

Însă în majoritatea studiilor de ajustare se consideră că măsurările de parametri sunt o clasă total necorelată cu măsurările de date. Justificările teoretice oferite de mai toate lucrările în domeniu consideră că măsurările (cu repartiții normale) și ecuațiile de ajustare sunt obținute prin căutare (search) printre repartițiile (distribuțiile) posibile de probabilitate pentru a găsi una care să facă maximă probabilitatea de a observa actualele cantități măsurate [3].

11.2.2 Eroare, incertitudine și covarianță

Presupunem că există un set de parametri $\{v_j$ cu $j = 1 - k\}$ corespunzător măsurării sau evaluării a k parametri diferiți de model ce au valorile adevărate c_j . Se presupune că valorile măsurate sunt perturbate de erorile e_j .

$$v_j = c_j + e_j \quad \text{cu} \quad \langle e_j \rangle = 0 \quad \text{și} \quad \langle v_j \rangle = c_j$$

Aici $\langle \dots \rangle$ semnifică operația de "așteptare matematică" care înseamnă medie pe distribuția de probabilitate a erorilor întâmplătoare asociate pe fiecare element (indiferent dacă este scalar, vector, matrice). Considerăm v_j , c_j , e_j elementele vectorilor coloană \mathbf{v} , \mathbf{c} , \mathbf{e} respectiv și $\mathbf{0}$ este vectorul coloană nul:

$$v = c + e ; \quad \langle e \rangle = 0 ; \quad \langle v \rangle = c \quad (11.1)$$

Presupunem de asemenea că erorile e_j au momente de ordin 2 finite. Momentele de ordin 2 ale erorilor formează elementele matricei de dispersie (auto-covarianță) $D(v)$ definită ca:

$$D(v) = \langle (v - \langle v \rangle)(v - \langle v \rangle)^* \rangle = \langle e e^* \rangle$$

unde simbolul * semnifică matrice transpusă, e este vector coloană cu k elemente, e^* este vector linie cu k elemente, $D(v)$ este matrice pătrată de $(k \times k)$ elemente. Vectorul v și matricea de dispersie $D(v)$ arată starea cunoașterii noastre asupra parametrilor înainte de fitul pe datele măsurate.

Elementul diagonal $[D(v)]_{ii}$ este dispersia (varianța) lui v_i și este egal cu $(\Delta v_i)^2$ unde Δv_i este eroarea standard. Elementele nediagonale $[D(v)]_{ij}$ semnifică domeniul pe care v_i și v_j sunt subiectul unei/unor surse comune de eroare.

Introducem acum și datele măsurate w_i cu $i = 1 - m$; măsurările sunt și ele afectate de erorile întâmplătoare f_i :

$$w_i = y_i + f_i \quad \text{cu} \quad \langle f_i \rangle = 0 \quad \text{și} \quad \langle w_i \rangle = y_i$$

unde y_i este valoarea adevărată (care s-ar fi obținut într-un experiment ideal fără eroare) pentru măsurătoarea i .

Considerăm de asemenea w , y și f ca vectori:

$$w = y + f ; \quad \langle f \rangle = 0 ; \quad \langle w \rangle = y \quad (11.2)$$

$$D(w) = \langle (w - \langle w \rangle)(w - \langle w \rangle)^* \rangle = \langle f f^* \rangle$$

Matricile de covarianță descriind incertitudinile și corelațiile între parametri și date sunt definite în mod analog:

$$C(v, w) = \langle (v - \langle v \rangle)(w - \langle w \rangle)^* \rangle = \langle e f^* \rangle$$

11.2.3 Noțiuni privind algebra analizei de incertitudine

Având introdus conceptul de matrice de covarianță este util să prezentăm câteva proprietăți ale acestor matrici.

Astfel, pentru o matrice arbitrară H și vectorii coloană r , s și t avem următoarele relații:

$$C(r, s) = [C(s, r)]^*$$

$$C(Hr, s) = HC(r, s)$$

$$C(r, Hs) = C(r, s)H^*$$

$$C(r + s, t) = C(r, t) + C(s, t)$$

$$C\left(\begin{bmatrix} r \\ s \end{bmatrix}, t\right) = \begin{bmatrix} C(r, t) \\ C(s, t) \end{bmatrix}$$

$$C(t, \begin{bmatrix} r \\ s \end{bmatrix}) = [C(t, r) \quad C(t, s)]$$

unde $[A/B]$ reprezintă un vector sau o matrice partitionată obținută prin adăugarea rândurilor lui B în partea de jos a lui A și similar $[A \ B]$ reprezintă o matrice partiționată la care coloanele lui B au fost adăugate la dreapta coloanelor lui A .

Relațiile următoare sunt importante pentru diverse matrici de auto-covarianță și covarianță (cross-covarianță):

$$D(r) = C(r, r)$$

$$D(r + s) = D(r) + D(s) + C(r, s) + C(s, r)$$

$$D\left(\begin{bmatrix} r \\ s \end{bmatrix}\right) = \begin{bmatrix} D(r) & C(r, s) \\ C(s, r) & D(s) \end{bmatrix}$$

a patra și a opta relație se aplică numai dacă vectorii r și s au aceeași dimensiune; relația a noua poate fi obținută din relațiile a patra, a șasea și a șaptea. De asemenea aplicarea relațiilor a doua, a treia și a șaptea conduce la un rezultat important:

$$D(Hr) = HD(r)H^* \quad (11.3)$$

care reprezintă legea de propagare a erorilor. Relația este folositoare în aplicații de analiză de incertitudine dar este riguroasă numai în cazul când H este cu adevărat constantă, de exemplu în acest caz independentă de vectorul oarecare r .

11.2.4 Funcții liniare față de funcții neliniare

Fiecare y_i din (11.2) este presupus a fi o funcție cunoscută de elementele vectorului c al parametrilor:

$$y_i = y_i(c)$$

În mod obișnuit aceste funcții nu sunt cunoscute analitic dar sunt programate în codul de calcul. Aceste funcții pot fi rapid neliniare dar aici presupunem că ele pot fi "liniarizate", ceea ce înseamnă să presupunem că:

- este posibil să se localizeze un set de parametri c_0 în jurul valorii adevărate c
- lângă acest punct în spațiul parametrilor toate funcțiile $y_i(c)$ pot fi calculate cu destulă acuratețe folosind dezvoltarea în prim ordin în serie Taylor.

Aceste două presupuneri pot fi sintetizate astfel:

$$y(c) \cong y(c_0) + R(c_0)(c - c_0) \quad (11.4)$$

unde elementul ij al matricii $R(c_0)$ conține derivatele parțiale ale lui $y_i(c)$ în punctul c_0 :

$$R_{ij} = (\partial y_i / \partial c_j) |_{c_0} \quad (11.5)$$

Aceste presupuneri fiind făcute, funcția $y_i(c)$ poate fi liniarizată. Problemă generală de neliniaritate este ilustrată în figura 11.1. Dependența funcțională $y(c)$ este arătată aici pentru cazul unei funcții y_i de un singur parametru c_j sau pe scurt $y(c)$. În acest caz w reprezintă valoarea măsurată a funcției având valoarea adevărată $y(c)$.

De obicei în codurile de modele nucleare curba $y(c)$ este neliniară; există o conexiune interesantă între gradul de neliniaritate ce poate fi tolerat în $y(c)$ și acuratețea măsurătorilor disponibile v și w . Înainte de toate punctul de convergență al soluției va fi oriunde pe curba $y(c)$. Din cauza proprietăților de minimă dispersie a soluției, aceasta va fi astfel aproximată încât să fie cât mai aproape posibil de valorile măsurate v și w . De aceea este convenabil să se definească de la început *elipsa erorii* ca o regiune centrată pe punctul măsurat $\{v, w\}$ și care acoperă domeniul în care ne așteptăm să găsim valorile adevărate c și y (cu o încredere dată de incertitudinile Δv și Δw).

Punctul de convergență al soluției va fi oriunde pe curba $y(c)$ din interiorul elipsei hașurate. Validitatea soluției celor mai mici pătrate cere ca funcția $y(c)$ să fie "rezonabil" de liniară pe porțiunea ce intersectează elipsa. Dacă funcția e măsurată cu acuratețe (adică Δw este mic) atunci segmentul pe care curba este liniară este foarte scurt [3].

Metoda de "potrivire" a neliniarităților cu cele mai mici pătrate liniare este ilustrată în figura 11.2. Se înlocuiește curba adevărată $y(c)$ cu un segment liniar tangent la curbă în punctul inițial de referință $c = v = c_0(0)$. Se folosește soluția rezultată $a'(0)$ pentru parametri, pentru a obține o localizare mai bună a punctului de referință $c = c_0(1)$ care va fi folosit pentru obținerea celei de-a doua soluții $a'(1)$. Continuând iterațiile pe schema de calcul numită "iterația Newton" se ajunge la soluția stabilă $c_0(n) = c_0(n-1)$. Singurul efect major al curbării puternice a funcției înafara elipsei erorilor este de a încetini procesul de convergență. Acest lucru poate fi evitat prin utilizarea unui set rezonabil de parametri inițiali, de preferință unul obținut din futuri mai vechi ale unor date de același tip.

Forma funcțională din relația (11.4) sugerează faptul că putem simplifica notațiile introducând un set modificat de parametri și date ce compensează valorile constante c_0 și $y(c_0)$. De aceea introducem vectorii x , a și b și finând seama de relațiile (11.1) și (11.2) vom avea expresiile:

$$x = c - c_0 \quad (11.6)$$

Figura 11.1

Acuratețe față de neliniaritate. Ilustrarea relației dintre gradul de neliniaritate al lui $y(c)$ și acuratețea măsurătorilor de parametri și date

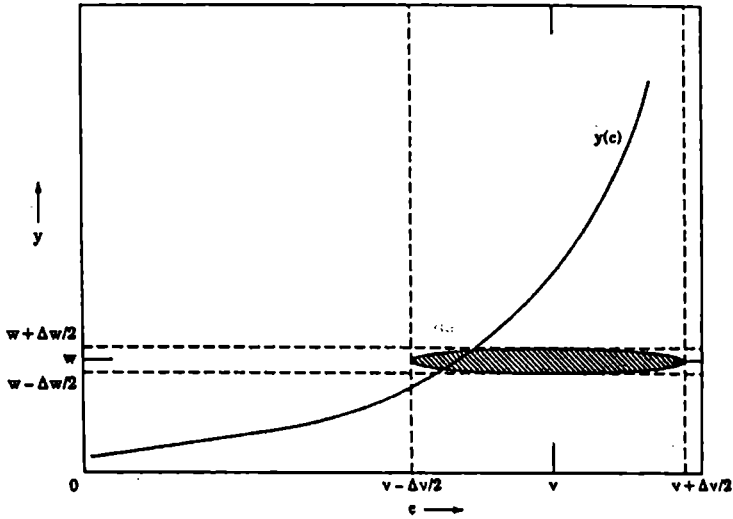
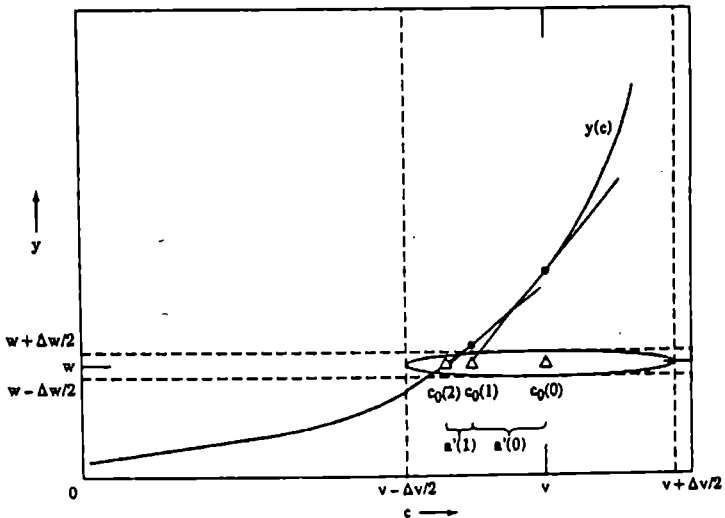


Figura 11.2

Iterația Newton. Efectul principal al curburii puternice înafara elipsei erorilor este încetinirea convergenței procesului iterativ



$$\mathbf{a} \equiv \mathbf{v} - \mathbf{c}_0 = (\mathbf{c} - \mathbf{c}_0) + \mathbf{e} \quad (11.7)$$

$$\mathbf{b} = \mathbf{w} - \mathbf{y}(\mathbf{c}_0) = (\mathbf{y}(\mathbf{c}) - \mathbf{y}(\mathbf{c}_0)) + \mathbf{f} \quad (11.8)$$

și de asemenea:

$$\langle \mathbf{a} \rangle = \mathbf{c} - \mathbf{c}_0 \quad (11.9)$$

$$\langle \mathbf{b} \rangle = \mathbf{y}(\mathbf{c}) - \mathbf{y}(\mathbf{c}_0) \equiv R(\mathbf{c}_0) (\mathbf{c} - \mathbf{c}_0) \quad (11.10)$$

în ultima relație s-a folosit liniarizarea (11.4) și este de subliniat că este unicul punct în derivare a metodei celor mai mici patrate parționarte unde s-a folosit această aproximație.

Substituind (11.6) în (11.9) și (11.10) se obțin următoarele expresii importante:

$$\langle \mathbf{a} \rangle = \mathbf{x} \quad (11.11)$$

$$\langle \mathbf{b} \rangle = R\mathbf{x} \quad (11.12)$$

și pentru matricile de covarianță:

$$C(\mathbf{a}, \mathbf{a}) = \langle (\mathbf{a} - \langle \mathbf{a} \rangle)(\mathbf{a} - \langle \mathbf{a} \rangle)^* \rangle = \langle \mathbf{e}\mathbf{e}^* \rangle = C(\mathbf{v}, \mathbf{v}) \quad (11.13)$$

$$C(\mathbf{b}, \mathbf{b}) = \langle (\mathbf{b} - \langle \mathbf{b} \rangle)(\mathbf{b} - \langle \mathbf{b} \rangle)^* \rangle = \langle \mathbf{f}\mathbf{f}^* \rangle = C(\mathbf{w}, \mathbf{w}) \quad (11.14)$$

$$C(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = \langle (\mathbf{a} - \langle \mathbf{a} \rangle)(\mathbf{b} - \langle \mathbf{b} \rangle)^* \rangle = \langle \mathbf{e}\mathbf{f}^* \rangle = C(\mathbf{v}, \mathbf{w}) \quad (11.15)$$

Deoarece noile mărimi introduse (pentru a simplifica relațiile matematice) nu schimbă matricile de covarianță, în continuare vom considera \mathbf{x} , \mathbf{a} și \mathbf{b} ca mărimi primare de interes. Până acum am arătat cum se convertește o problemă neliniară la una liniară (de fapt o problemă liniară fără constante aditive explicite) în regiunea de convergență a soluției. Acordul între funcțiile originale și cele liniarizate în acea vecinătate este crucial deoarece garantează că valorile fitate ale parametrilor și datelor vor fi consistente în contextul funcției originale $y_i(\mathbf{c})$. Trebuie de asemenea făcută observația că pentru a face liniarizarea s-a presupus că amestecul între comportarea la distanță a funcției liniarizate și funcția originală poate fi neglijat în calculul varianței [3]. Acest lucru permite folosirea legii de propagare a

erorilor (11.3) pentru propagarea covarianței parametrilor către covarianța datelor.

11.2.5 Surse experimentale față de surse teoretice de informare

Este important de subliniat că matricile de covarianță $C(a,a)$, $C(b,b)$ și $C(a,b)$ introduse mai sus, descriu proprietăți ale erorilor experimentale sau evaluărilor, e și f , care depind numai de experimentul folosit. Valorile așteptate $\langle a \rangle$ și $\langle b \rangle$ sunt ambele funcții de aceeași parametri x . Punctul principal al metodei celor mai mici pătrate constă în conexiunea logică existentă între cele două seturi de valori așteptate (relațiile (11.11) și (11.12)), care este o informație adițională ce poate fi introdusă pentru a reduce incertitudinea în cunoașterea noastră asupra parametrilor x .

11.3 METODA CELOR MAI MICI PATRATE PARTITIONATE. OBTINEREA DISPERSIEI MINIME

Considerăm că scopul este găsirea celei mai bune estimări a valorii adevărate atât pentru parametrul x (adică parametrul de input al modelului nuclear) cât și pentru funcțiile de x (datele calculate folosind acești parametri). În cazul aproximației liniare este posibil să atingem ambele scopuri deodată. Acest lucru înseamnă a spune că estimarea statistică cea mai bună a parametrilor ce se poate obține dat fiind un set de măsurători, produce rezultate calculate identice cu estimarea statistică cea mai bună a acelor date, dat fiind același set de măsurători.

Este comod să se introducă un nou vector coloană de n elemente, notat z , care reprezintă într-o formă generică întreaga clasă a mărimilor ale căror valori adevărate sunt de interes:

$$z = Sa + Tb \quad (11.16)$$

Această relație semnifică interesul față de un set specific de combinații liniare ale mărimilor fizice ale căror valori măsurate sunt a_j și b_j . Rezultă că nu trebuie specificate valori particulare pentru matricile constante S și T până la sfârșitul operației de derivare.

Situația când se dorește să se folosească măsurările datelor b numai în scopul îmbunătățirii parametrilor a este inclusă ca un caz particular: $n = k$, $S = I$ (matricea unitate) și $T = 0$ (matricea nulă), astfel $z = a$. Situația inversă, când se dorește folosirea cunoașterii anterioare asupra parametrilor pentru a îmbunătăți datele este cazul particular $z = b$.

O dată avute disponibile seturile de valori a_j și b_j , s-ar putea face combinația liniară (11.16) dar această abordare directă nu va produce cea mai bună estimare posibilă a valorii adevărate a lui z . Valoarea de așteptare $\langle z \rangle$ este legată de valoarea adevărată a parametrilor conținuți în vectorul x prin:

$$\langle z \rangle = S \langle a \rangle + T \langle b \rangle \quad (11.17)$$

sau din ecuațiile (11.11) și (11.12):

$$\langle z \rangle = S \langle x \rangle + TR \langle x \rangle \quad (11.18)$$

Scopul este acum, date fiind S și T , de a găsi "cea mai bună estimare" a lui $\langle z \rangle$, o estimare care să cuprindă întreaga întindere a efectelor variabilității sau incertitudinii în a și b . Acest lucru este făcut ținând cont de avantajul asupra informațiilor despre adevărata valoare a lui a care este conținută în măsurarea vectorului b și informația similară despre adevărata valoare a lui b care este conținută în a .

Introducem acum notația z' pentru estimatorul liniar de minimă varianță a valorii adevărate $\langle z \rangle$. Pentru început luăm z' ca o combinație liniară arbitrară a tuturor parametrilor inițiali și a datelor:

$$z' = Va + Wb \quad (11.19)$$

unde W și V sunt matrici conținând factori de pondere arbitrari, strategia fiind de a găsi valori ale ponderilor care minimizează dispersiile elementelor individuale ale lui z' . Dorind ca z' să fie estimator, $\langle z' \rangle$ trebuie să fie egal cu $\langle z \rangle$, ceea ce restricționează alegerile posibile ale ponderilor. Din definițiile lui z' și z (relațiile (11.19) și respectiv (11.16)), se obține:

$$V \langle a \rangle + W \langle b \rangle = S \langle a \rangle + T \langle b \rangle$$

sau din relațiile (11.11) și (11.12):

$$Vx + WRx = Sx + TRx$$

Adevărata valoare a lui x este necunoscută, pentru a putea garanta o soluție "obiectivă", V și W trebuie să fie astfel alese încât să satisfacă condiția:

$$V = S + TR - WR$$

Această condiție asupra lui V și W poate fi acum folosită pentru a elimina pe V din (11.19):

$$z' = Sa + TRa - WRa + Wb$$

Aplicând (11.16) și rearanjând termenii se obține:

$$z' = z + (W-T)(b - Ra)$$

unde vectorul Ra conține valori ale datelor măsurate ca și ale celor calculate din evaluarea anterioară a parametrilor.

Introducem acum notația p pentru **discrepanță**, care reprezintă diferența dintre observație și predicție:

$$p = b - Ra \quad (11.20)$$

astfel încât:

$$z' = z + (W - T)p \quad (11.21)$$

Matricea de covarianță a discrepanțelor p se poate obține din expresia (11.20) utilizând relațiile de covarianță prezentate în secțiunea 11.2.3 :

$$D(p) = D(b) - C(b, a)R^* - RC(a, b) + RD(a)R^*$$

În vederea găsirii elementelor matricii W este convenabil să se introducă o a doua matrice arbitrară Q obținută din matricea W prin adăugarea de mărimi cunoscute:

$$Q \equiv W - T + C(z, p)G \quad (11.22)$$

unde:

$$G^{-1} \equiv D(p) \quad (11.23)$$

Utilizând relațiile (11.21), (11.22), (11.23) se poate scrie o expresie a incertitudinilor lui z' ce rezultă din incertitudinile în z și p (izvorâte din incertitudinile în a și b):

$$D(z') = C[z + Qp - C(z, p)Gp, z + Qp - C(z, p)Gp] \quad (11.24)$$

$$D(z') = D(z) + D(Qp) - C(z, p)GC(p, z)$$

pentru a ajunge la acest rezultat s-a folosit relația (11.23) în colapsarea celor nouă covarianțe inițiale la trei.

Acum se poate minimiza dispersia lui z' estimat. Elementele diagonale ale lui $D(Qp)$ în expresia (11.24) sunt dispersii și ca atare nu pot fi făcute negative prin orice alegere a lui Q , totuși ele pot fi făcute egale cu zero (punând toate elementele lui Q egale cu zero). Estimatorul de minimă varianță z' , singurul cu cele mai mici bare de eroare, este deci obținut prin substituirea $Q = 0$ în relațiile (11.21), (11.22) și (11.24) :

$$z' = z - C(z, p)Gp \quad (11.25)$$

$$D(z') = D(z) - C(z, p)GC(p, z) \quad (11.26)$$

$$D(z') = D(z) - D[C(z,p)Gp] \quad (11.27)$$

Ecuatiile (11.25) și (11.26) sunt soluțiile dorite de minimă dispersie ale problemei de c.m.m.p. partiționate ale cazului măsurătorilor cu corelații generale. Cea mai mare matrice de covarianță care este necesar să fie inversată $D(p)$ este de ordinul numărului de date, nefiind puse restricții în corelațiile parametrilor/date și nefiind făcute presupuneri asupra formei distribuțiilor de probabilitate ale erorilor [3].

Ecuatiile c.m.m.p. partiționate pot fi acum particularizate pentru cazuri de interes, făcând alegeri particulare asupra lui S și T . Așa cum s-a menționat mai sus, soluții ale parametrilor înșiși s-au obținut prin specificarea că mărimea de interes este simplu $z_1 = a$, soluții ale parametrilor sunt astfel imediat obținute din relațiile (11.25) și (11.26).

Introducând notația evidentă a' pentru cele mai bune estimări:

$$a' = a - C(a,p)Gp \quad (11.28)$$

$$D(a') = D(a) - C(a,p)GC(p,a) \quad (11.29)$$

unde, folosind (11.20), avem:

$$C(a,p) = C(a,b) - D(a)R^* \quad (11.30)$$

Considerăm cazul opus particular în care vrem să obținem estimări îmbunătățite numai pentru date, aceasta înseamnă $z_2 = b$. Din nou, din ecuațiile (11.25) și (11.26), avem:

$$b' = b - C(b,p)Gp \quad (11.31)$$

$$D(b') = D(b) - C(b,p)GC(p,b) \quad (11.32)$$

unde iarăși din relația (11.20):

$$C(b,p) = D(b) - C(b,a)R^* \quad (11.33)$$

O caracteristică interesantă a ecuației (11.32) constă în faptul că deși interesul primar este de a folosi datele experimentale pentru a îmbunătăți o bază existentă de parametri de model, informația inițială asupra parametrilor conține unele informații predictive, deci incertitudinile datelor sunt astfel reduse într-o oarecare măsură în procesul de ajustare.

Al treilea caz interesant este funcția generală liniară a parametrilor: $z_3 = La$:

$$C(z_3, p) = C(La, p) = LC(a, p)$$

și din ecuația (11.25) avem din nou:

$$\begin{aligned} z' &= La - LC(a, p)Gp = L[a - C(a, p)Gp] \\ z' &= La' \end{aligned} \quad (11.34)$$

Acest rezultat este echivalentul teoremei Gauss-Markov pentru cazul partiționat. Importanța practică a acesteia este că minima varianță estimată a' a parametrilor poate fi folosită pentru a calcula direct varianța minimă pentru o funcție liniară arbitrară a parametrilor [3].

Ca o verificare a consistenței interne a metodei, se poate demonstra că aceste "predicții" ajustate sunt identice cu măsurătorile ajustate. Pentru a arăta acest lucru, putem extrage Ra' , calculat cu ajutorul relației (11.28), din b' , relația (11.32):

$$\begin{aligned} b' - Ra' &= (b - Ra) - C[(b - Ra), p]Gp \\ b' - Ra' &= p - C(p, p)Gp = p - D(p)Gp = 0 \end{aligned}$$

Este de menționat că egalitatea $b' = Ra'$ nu este impusă ca o constrângere la soluțiile c.m.m.p. partiționate ci mai degrabă rezultă din faptul că b' și Ra' sunt amândouă garantate să furnizeze o estimare unică de minimă varianță a lui $\langle b \rangle = \langle Ra \rangle = Rx$, astfel ele trebuie să fie identice. Deoarece $b' = Ra'$ trebuie de asemenea ca b' și Ra' să aibă covarianțe identice:

$$D(b') = RD(a')R'$$

Dacă tipul de date z_3 nu este mult diferit de b , adică $L \approx R$, atunci se poate scrie următoarea relație importantă:

$$D(z') = LD(a')L' \cong RD(a')R' = D(b')$$

cea ce înseamnă că cea mai bună estimată a unor tipuri de date calculate, care nu sunt prea diferite de datele măsurate folosite în fit, poate aproxima acuratețea acestor date măsurate.

Rezultatele de mai sus pot fi puse într-o formă compactă prin introducerea, ca alegere particulară a lui z , a "uniunii" lui a și b . Notăm cu u următoarea combinație liniară particulară de a și b :

$$u = \begin{bmatrix} I_{kk} \\ 0_{n,k} \end{bmatrix} a + \begin{bmatrix} 0_{k,m} \\ I_{m,m} \end{bmatrix} b \quad (11.35)$$

și obținem:

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} \mathbf{a} \\ \mathbf{b} \end{bmatrix}$$

Din teoremele din secțiunea 11.2.3 rezultă imediat:

$$D(\mathbf{u}) = \begin{bmatrix} D(\mathbf{a}) & C(\mathbf{a}, \mathbf{b}) \\ C(\mathbf{b}, \mathbf{a}) & D(\mathbf{b}) \end{bmatrix}$$

și:

$$C(\mathbf{u}, \mathbf{p}) = \begin{bmatrix} C(\mathbf{a}, \mathbf{p}) \\ C(\mathbf{b}, \mathbf{p}) \end{bmatrix}$$

Comparând relația (11.35) cu (11.16) se constată că \mathbf{u} este de asemenea o alegere particulară legitimată a lui \mathbf{z} , deci se poate aplica iarăși relația (11.25) și (11.26) pentru a obține cea mai bună estimată corespunzătoare:

$$\mathbf{u}' = \mathbf{u} - C(\mathbf{u}, \mathbf{p}) G \mathbf{p} = \begin{bmatrix} \mathbf{a}' \\ \mathbf{b}' \end{bmatrix} \quad (11.36)$$

și:

$$D(\mathbf{u}') = D(\mathbf{u}) - C(\mathbf{u}, \mathbf{p}) G C(\mathbf{p}, \mathbf{u}) \quad (11.37)$$

În relațiile (11.36) și (11.37) parametrii \mathbf{a}' ajustați prin influența datelor \mathbf{b} sunt reprezentați alături de datele \mathbf{b}' ajustate prin influența parametrilor \mathbf{a} . Aceste ecuații simetrice sunt implementate în codul ZOTT pentru PC [7].

11.4 INCERTITUDINI DE MODEL

Un aspect important al incertitudinilor calculului de model este tratarea deficiențelor în modele. Apare problema că două sau mai multe modele, destul de diferite, pot fi făcute să dea fituri rezonabile ale aceluiași date experimentale, din cauza incertitudinilor de model și incertitudinilor parametrilor.

Pe de altă parte evaluatorul este liber să aleagă, din modelele existente, unul pe care îl preferă, bazându-se pe considerente fizice sau practice și apoi evaluatorul să facă o analiză de incertitudine în propria sa evaluare obținută cu modelul ales de el. Impactul subiectivității, în alegerea modelului de către evaluator, nu poate fi prea mare. Desigur, față de datele experimentale alese pentru fit, diferențele, obținute de modele la fel de satisfăcătoare, vor fi mici. Dacă evaluatorul va alege modelul "cu cea mai bună fizică", atunci el va obține rezultate (atât date cât și covarianțe) care vor extrapola cel mai bine regiunea unde nu există date experimentale.

Problema mult mai importantă este însă situația când după efectuarea ajustării

parametrilor pe baza c.m.m.p., cel mai bun model disponibil dă un fit slab al datelor experimentale. În discutarea acestei situații trebuie mai întâi făcută distincția între **discrepanțe și inconsistențe**.

Discrepanța este o stare normală de fapt, referindu-se la existența de diferențe între predicții și măsurători, care sunt comparabile cu incertitudinile estimate ale acestor predicții și măsurători. De fapt, așa cum s-a arătat în secțiunile 11.2 și 11.3, metoda c.m.m.p. permite ca discrepanțele să fie considerate ca o nouă sursă de informații asupra parametrilor.

Inconsistența, pe de altă parte, este o cu totul altă problemă. Inconsistența poate fi global definită ca situație în care discrepanțele observate sunt neverosimile din punct de vedere statistic. Exemplul din figurile 11.1 și 11.2 demonstrează o situație în care există o discrepanță largă (distanța pe verticală între $y(c(0))$, simbolizat cu cercul plin cel mai din dreapta și w , triunghiul cel mai din dreapta) dar nu există inconsistență deoarece curba $y(c)$ trece de fapt prin elipsa erorilor.

Inconsistența este o proprietate a întregii informații de input - parametrii inițiali \mathbf{a} și datele \mathbf{b} , respectivele lor covarianțe și sensibilitățile R . Pentru a obține o măsură cantitativă a inconsistenței într-un set de date, mai întâi se examinează vectorul discrepanță:

$$\mathbf{p} = \mathbf{b} - R\mathbf{a} \quad (11.38)$$

Spre deosebire de \mathbf{b} și \mathbf{a} , valoarea adevărată a lui \mathbf{p} este acum cunoscută. Această valoare poate fi obținută prin aplicarea ecuațiilor (11.11) și (11.12):

$$\langle \mathbf{p} \rangle = \langle \mathbf{b} \rangle - R \langle \mathbf{a} \rangle = R\mathbf{x} - R\mathbf{x} = \mathbf{0}$$

Unica valoare a lui \mathbf{p} pentru analiza de consistență, care este aptă să fie comparată direct cu eroarea actuală a vectorului de discrepanță, este:

$$\mathbf{p} - \langle \mathbf{p} \rangle$$

cu eroarea așteptată conținută în $D(\mathbf{p})$:

$$D(\mathbf{p}) = \langle (\mathbf{p} - \langle \mathbf{p} \rangle)(\mathbf{p} - \langle \mathbf{p} \rangle)^* \rangle = \langle \mathbf{p}\mathbf{p}^* \rangle$$

Amintim (din secțiunea 11.3) că matricea de covarianță a lui \mathbf{p} este dată în termeni de date de intrare (ale studiului de c.m.m.p.) prin relația următoare:

$$D(\mathbf{p}) = D(\mathbf{b}) - C(\mathbf{a}, \mathbf{b})R^* \quad RC(\mathbf{a}, \mathbf{b}) + RD(\mathbf{a})R^* \quad (11.39)$$

Cea mai utilă măsură a consistenței este obținută din relația:

$$\chi^2 = \mathbf{p}^* G \mathbf{p} \quad (11.40)$$

unde $G^{-1} = D(\mathbf{p})$. Conform tradiției, această măsură a consistenței se numește "hi pătrat". Remarcăm că χ^2 este o mărime scalară.

Dacă \mathbf{p} a fost eșantionat dintr-o distribuție cu covarianțe $D(\mathbf{p})$, atunci χ^2 va avea de asemenea o distribuție de valori. Valoarea așteptată a lui χ^2 obținută prin medierea pe această distribuție este tocmai:

$$\langle \chi^2 \rangle = m \quad (11.41)$$

unde m este, la fel ca înainte, dimensiunea vectorului \mathbf{p} .

Acest rezultat important, relația (11.41), se poate demonstra ușor utilizând o teoremă legată de urma (suma elementelor diagonale) unei matrici pătrate: dacă \mathbf{r} și \mathbf{s} sunt doi vectori coloană arbitrari de dimensiuni egale, atunci:

$$\mathbf{s}^* \mathbf{r} = \text{trace}(\mathbf{r} \mathbf{s}^*)$$

Aplicând această relație se obține:

$$\begin{aligned} \langle \chi^2 \rangle &= \langle \mathbf{p}^* G \mathbf{p} \rangle = \langle \text{trace}(\mathbf{p} \mathbf{p}^* G) \rangle = \\ &= \text{trace} \langle \mathbf{p} \mathbf{p}^* G \rangle = \text{trace} \langle \mathbf{p} \mathbf{p}^* \rangle G = \\ &= \text{trace} D(\mathbf{p}) G = \text{trace} I_{mm} = m \end{aligned}$$

Deci pentru un set particular de informații de input, aplicându-se criteriul χ^2 , dacă acesta nu este îndeplinit, se poate trage concluzia că este neverosimil (improbabil) ca \mathbf{p} să fi fost eșantionat dintr-o distribuție cu covarianțele pretinse $D(\mathbf{p})$, cu alte cuvinte informația de input este inconsistentă.

Intrebarea firească este: cum trebuie acționat în cazul inconsistenței? Primul pas este de a elimina posibilitatea ca inconsistența să fie datorată unei simple greșeli sau confuzii în manipularea datelor. Al doilea pas este de a verifica dacă nu cumva experimenterii au subestimat incertitudinile în rezultatele lor \mathbf{a} și \mathbf{b} . Dacă și acest pas a fost depășit rămâne ca posibilă explicație prezența deficiențelor în însăși modelul aplicat.

Dacă raportul χ^2/m este mare și nu se găsește o explicație alternativă, atunci teoreticienii au un "semnal clar" că ceva este în neregulă cu modelul nuclear respectiv [8]. Acesta este de obicei preludiul unei întregi activități de cercetare pentru corectarea și/sau rafinarea modelului respectiv sau chiar a abordării sau elaborării altor modele.

Pentru a obține această informație despre model (ecuația 11.40) este necesar să se facă analiza de incertitudine, cum s-a descris în secțiunile precedente, până înainte de pasul final al ajustării parametrilor. De exemplu se compară relațiile (11.38) - (11.40) cu relația (11.28) de ajustare a parametrilor. Astfel atât în formalismul detaliat matematic folosit cât și în munca de preparare a informației de input este o mică diferență între:

(a) obținerea unei aprecieri proprii a consistenței între un model dat și un set de măsurări experimentale și

(b) obținerea unui fit al măsurărilor experimentale cu ajutorul c.m.m.p.

Cu alte cuvinte, posibilitatea întâlnirii unei inconsistențe nu este un motiv de aocoli

obținerea unui fit de c.m.m.p ci mai de grabă este un motiv întemeiat ca acest fit să fie făcut.

11.5 SENSIBILITĂȚILE DE MODEL ÎN CODURILE DE CALCUL

În secțiunile precedente am prezentat o metodologie de îmbunătățire a modelelor teoretice și a parametrilor asociați acestora. Modul de abordare de bază recomandat este să se compare predicțiile modelului cu măsurările experimentale și să se extragă din această comparație maximum de informații folosind metoda c.m.m.p. partiționate.

Pentru un set de date experimentale selectat în scop de normalizare, metoda c.m.m.p. furnizează cea mai bună estimare unică a parametrilor și a covarianțelor lor $D(a')$. Atât a' cât și funcțiile liniare de a' au minimă dispersie relativ la alte estimări bazate pe aceleași date. Calculele ulterioare făcute cu parametrii revizuiți implicând date nemăsurate experimental, vor beneficia de acest câștig de informație.

Calculul teoretic de date nucleare poate fi caracterizat prin calcularea pe computer a unui set de variabile independente y_1 (datele) ca funcții $y_1(c)$ de variabilele independente c_j (parametrii). Așa cum s-a spus în secțiunea 11.2, y_1 este determinat prin executarea unui cod de calcul care conține un număr de instrucțiuni de cele mai multe ori de ordinul zecilor de mii.

Astfel formele funcționale sunt cunoscute în practică numai pe calea tabelelor și graficelor (adică nu există expresii analitice). Pe de altă parte, o cerință primară, pentru folosirea metodei c.m.m.p., este de a avea disponibile valori numerice ale derivatelor datelor de ieșire cu privire la parametrii de intrare, ceea ce înseamnă "sensibilități".

Pentru modele simple, cum ar fi de exemplu modelul optic sferic, este posibil (și se face de regulă) calculul de sensibilități prin includerea expresiilor analitice, în codurile de calcul, ca parte a programului integrat calcule/search de parametri (de exemplu codul ECIS de canale cuplate are opțiune de search [9]).

Cu toate acestea, în majoritatea studiilor publicate cu privire la calcule de model statistic Hauser-Feshbach și de canale cuplate, ca și alte calcule de complexitate comparabilă cu acestea, sensibilitățile au fost aproximate de "pseudo-derivate" obținute prin repetarea fiecărui calcul cu o ușoară alterare a imputului pentru un parametru și păstrarea raportului diferențelor rezultate (înmagazinarea într-o arie în memoria operativă). De exemplu pseudo-derivatele au fost folosite în acest mod pentru estimarea sensibilității secțiunilor multigrup (procesate pentru aplicații de reactori) la variația parametrilor individuali ai rezonanțelor [10].

Principala problemă cu pseudo-derivatele este aceea că pentru fiecare pereche parametru-dată trebuie verificat dacă schimbarea în valoarea parametrului este suficient de mare pentru a fi numeric semnificativă dar în același timp suficient de mică pentru a evita neliniarități majore. Această dificultate fundamentală a descurajat pe mulți fizicieni în utilizarea pe scară mai largă a metodei c.m.m.p. la ajustarea parametrilor pentru modelele mai complicate.

În această secțiune vom încerca să prezentăm pe scurt o metodă mai sofisticată care este capabilă să adauge o logică computațională de derivare "exactă" la un program FORTRAN (de complexitate oricât de mare) cu o intervenție foarte mică a utilizatorului în procesul de conversie a programului. Conform Oblov [11] această metodă este numită "computer calculus". Cu această metodă, pot fi optimizați parametrii de input pentru orice model nuclear, folosind c.m.m.p. cu toate beneficiile așteptate.

Interesul este numai pentru modelele care pot în prezent să definească derivate parțiale:

$$R_{ij} = \frac{\partial y_i}{\partial c_j}$$

măcar într-un domeniu al valorilor parametrului în jurul valorii nominalizate c_0 .

Pot exista modele nucleare care violează acest criteriu, de exemplu fiindcă unele y_i sunt funcții discontinue de unii parametri c_j . Într-un asemenea caz se poate "reformula" modelul pentru a evita dificultatea. Dăm în continuare câteva exemple simple de "reformulare de model":

Unii parametri cu incertitudini mari sunt în mod intrinsec întregi sau semiîntregi, cum ar fi spinul și paritatea. Este evident că nu are sens derivarea în funcție de un întreg. În această situație se procedează în felul următor: de exemplu starea fundamentală a unui nucleu impar-impar poate fi cu spinul 0 sau 1 cu probabilități aproape egale. Se poate imagina că această specie e un amestec de nuclee cu spin 0 și spin 1 și astfel c.m.m.p. ajustează "abundența" a priori la 0.5. Dacă datele măsurate sunt capabile să rezolve cele două posibilități, abundența ajustată va fi foarte aproape de 1 sau de 0.

O filosofie asemănătoare poate fi aplicată la situația când există o incertitudine majoră asupra faptului că procesul A sau procesul B sunt responsabile pentru o clasă dată de reacții nucleare. În acest caz se poate include ca parametru factorul de ramificare necunoscut între cele două procese posibile.

Asemenea reformulări ale unui model empiric, făcute pentru conveniența calculului, sunt și logice și potrivite [3].

În metoda "computer calculus" [11] un pre-compiler caută într-un program FORTRAN instrucțiunile aritmetice și construiește din ele instrucțiunile adiționale cerute de calcularea valorilor numerice ale derivatelor R_{ij} în punctul c_0 din spațiul parametrilor.

În această metodă nu este implicată calcularea pseudoderivatelor prin diferențiere numerică de tipul descris mai înainte, astfel sensibilitățile calculate ar avea aceeași acuratețe cu celelalte cantități calculate.

Facem în continuare o scurtă descriere a modului cum "computer calculus" poate lucra într-un cod de calcul ideal deși manipularea actuală a datelor este într-o oarecare măsură mai complicată în implementarea reală a ideii.

Presupunem că toate datele implicate în calcul sunt în memoria operativă (RAM) a computerului pe întreaga durată a calculului. Fiecare locație de stocare poate fi atribuită la una sau două arii reprezentate de vectorii coloană y și c . Pentru vectorul c atribuim toate locațiile de stocare care rămân neschimbate de la începutul până la sfârșitul calculului. Deci c include toți parametrii modelului. Pentru vectorul y se atribuie toate locațiile de stocare care se modifică prin una sau mai multe instrucțiuni ale programului. Deci y conține toate rezultatele intermediare și finale ale calculului, incluzând datele nucleare calculate.

Cu y_0 notăm starea vectorului datelor la începutul calculului, cu y_1 notăm vectorul datelor după executarea primei instrucțiuni a programului și cu y_n vectorul datelor după executarea a n instrucțiuni și așa mai departe (subliniem distincția între notația y_i pentru scalar și y_n pentru vector).

Putem reprezenta simbolic evoluția vectorului datelor răspunzând la efectul instrucțiunilor succesive, cu sublinierea că această schematizare a procesului se aplică la fel atât în cazul procesorilor scalari (în care caz arile y_n și y_{n-1} sunt identice cu excepția unui singur element) cât și procesorilor vectoriali (în care caz se schimbă mai multe elemente la un pas al programului):

$$\begin{aligned}
 y_1 &= f_1(y_0, c) \\
 y_2 &= f_2(y_1, c) \\
 &\vdots \\
 y_n &= f_n(y_{n-1}, c) \\
 &\vdots
 \end{aligned}$$

Dacă codul de calcul conține N instrucțiuni, atunci funcțiile $y_i(c)$ sunt tocmai:

$$y_i(c) = [(y_N(c))]_i$$

Introducem notația R_n pentru a reprezenta starea matricii de sensibilitate după executarea celei de a n -a instrucțiuni. Folosind notația derivatei vectorului introdusă în relația (11.5):

$$R_n = (\partial y_n / \partial c) |_{c_0}$$

Sensibilitățile urmărite R_{ij} vor fi legate de R_n prin relația:

$$R_{ij} = [R_N]_{ij}$$

Derivatele datelor se calculează pas cu pas prin aplicarea repetată a lanțului calculului:

$$\frac{\partial y_1}{\partial c} = \frac{\partial f_1}{\partial y_0} \frac{\partial y_0}{\partial c} + \frac{\partial f_1}{\partial c} = \frac{\partial f_1}{\partial y_0} \mathbf{0} + \frac{\partial f_1}{\partial c} = R_1$$

$$\frac{\partial y_2}{\partial c} = \frac{\partial f_2}{\partial y_1} \frac{\partial y_1}{\partial c} + \frac{\partial f_2}{\partial c} = \frac{\partial f_2}{\partial y_1} R_1 + \frac{\partial f_2}{\partial c} = R_2$$

$$\frac{\partial y_n}{\partial c} = \frac{\partial f_n}{\partial y_{n-1}} \frac{\partial y_{n-1}}{\partial c} + \frac{\partial f_n}{\partial c} = \frac{\partial f_n}{\partial y_{n-1}} R_{n-1} + \frac{\partial f_n}{\partial c} = R_n$$

...

În acest mod, calcularea derivatei rezultatului a câtorva mii de pași de calcul computațional poate fi redusă la o secvență lungă de calcule relativ simple, fiecare implicând numai calculul derivatei din partea dreaptă a unei instrucțiuni aritmetice individuale în funcție de variabilele statice c și variabilele dinamice y . Restul calculului constă în înmulțiri și sumări de matrici [3].

Pentru a face practică această metodă este necesar ca operațiile de: citire a unei linii din codul de calcul, de adăugare a liniilor (instrucțiunilor) cerute pentru programarea calculului derivatelor R_n și de scriere a unui cod mărit, să fie făcute mai mult sau mai puțin automatizat de către alt program de calcul. Un asemenea program trebuie neapărat să aibă mai mult decât complexitatea și generalitatea unui compilator de limbaj de programare plus cunoașterea legilor metodei calculului.

Este de asemenea de menționat că în prezent sunt calculate și stocate numai valorile numerice ale derivatelor (și nu de exemplu expresii analitice complicate). Pe de altă parte, deoarece nu este folosită calcularea de mici diferențe, derivatele trebuie calculate cu aceeași mare exactitate ca și datele însele.

Intrucât sunt m date și k parametri, ariile y și e ocupă $(m+k)$ locații în memoria computerului, pe când R_n ocupă $(m \times k)$ locații; aceasta din urmă poate fi o arie foarte mare dar numai o asemenea arie este necesar să fie alocată. Conținutul acestei arii este modificat la fiecare pas de programare (se toarnă peste) până la sfârșitul calculului (de exemplu până la $n = N$). Cerințele de stocare ale matricilor mari fac să fie avantajoasă folosirea unei memorii virtuale a computerului.

Ca exemplu, este disponibil un pachet software ce face o asemenea analiză automată de sensibilitate pentru programele FORTRAN de modele nucleare. Acest sistem se numește GRESS (un acronim pentru Gradient Enhanced Software System) care este în dezvoltare la Laboratorul National Oak Ridge SUA [12]. Versiunea inițială a codului GRESS a fost aplicată la codul GNASH pe computer/sistem de operare VAX/VMS în 1988. În prezent versiunea GRESS 2.0 (cea mai eficientă) este dependentă de tipul de computer dar celelalte versiuni sunt suportate de VAX (pe ambele sisteme de operare VMS și ULTRIX), IBM-RISC/6000, Sun, Hewlett-Packard 9000.

11.6 FISIERUL ENDF MF=30, PENTRU COVARIANTA DATELOR, COVARIANTA PARAMETRILOR SI SENSIBILITATI

11.6.1 Descriere generală

În cadrul formatului ENDF fișierul MF=30 descrie numeric covarianțele secțiunilor eficace, multiplicățiilor, distribuțiilor unghiulare și energetice, care rezultă din propagarea covarianțelor unui set de parametri precizați (în special parametri de intrare ai codurilor de modele nucleare), folosind un set evaluat al covarianțelor parametrilor și sensibilității parametrilor.

În cazul când datele nucleare sunt evaluate prin aplicarea de modele nucleare, covarianțele datelor rezultate din calculele de model pot fi descrise adecvat și compact prin specificarea matricii de covarianță pentru parametrii precizați, cu ajutorul unui set de coeficienți de sensibilitate care dau rata de schimbare a fiecărei date nucleare de interes în funcție de fiecare din parametrii de model precizați.

Deși fișierul MF=30 este motivat prin aplicațiile teoriei nucleare, folosirea lui MF=30 nu este în prezent restricționată la o metodologie particulară de evaluare. Fișierul MF=30 poate fi utilizat pentru a descrie covarianța de date de orice natură atât timp cât se poate face formal separarea într-un set de parametri cu covarianțe specificate și un set de sensibilități ale datelor [3].

Necesitatea unui format pentru covarianțe de acest tip s-a evidențiat în analiza matricii R pentru elementele standard ușoare în ENDF/B-VI. Parametrii "cheie" sunt aici parametrii câtorva rezonanțe de energie mare în sistemele compuse relevante.

Alt domeniu în care formatul MF=30 are aplicații imediate este reprezentarea covarianțelor secțiunilor eficace, spectrelor de emisie ale particulelor secundare și distribuțiilor unghiulare pentru reacțiile neutronice în domeniul 0.1 - 20 MeV unde datele sunt obținute de regulă din model optic, teorie statistică și preechilibru. Parametrii relevanți sunt în acest caz: parametrii de model optic, parametrii legați de funcțiile densității de nivele, elementele matricii de preechilibru, parametrii din funcțiile de forță γ etc [15].

Așa cum vom arăta în continuare, medierile multigrup ale sensibilității parametrilor sunt identice cu sensibilitățile parametrilor datelor multigrup corespunzătoare, acestea din urmă fiind necesare în multe aplicații. Ca atare, pentru a avea maximum de avantaj din această echivalență, informațiile de sensibilitate sunt reprezentate în fișierul MF=30 într-un format care este cel mai apropiat posibil de formatul de reprezentare al datelor nucleare corespunzătoare astfel încât sensibilitățile pot fi accesate și integrate cu coduri de procesare la care se fac minimum de modificări.

Trebuie subliniat că fișierul MF=30 nu conține informațiile evaluării parametrilor ci mai degrabă incertitudinile în rezultatele calculului de model. De fapt, pentru a limita mărimea fișierelor și pentru a minimiza eforturile legate de procesare, evaluatorii sunt încurajați să reducă (dacă este posibil) numărul de parametri și numărul de sensibilități per parametru la minimum necesar pentru descrierea incertitudinii datelor de importanță practică [3]. Acest lucru nu este o restricție ci mai degrabă o recomandare făcută evaluatorilor care ajustează parametri, de a-și canaliza eforturile spre cele mai semnificative incertitudini și sensibilități. De aceea în definiția formatului lui MF=30 nu s-a făcut restricție pentru nici o formă de teorie nucleară și parametru, ca atare în mod deliberat formatul a fost lăsat cu un grad mare de generalitate. Un avantaj al acestei generalități este faptul că rezultatele unei mari varietăți de metodologii de evaluare pot fi descrise folosind un singur format.

11.6.2 Definiții

În cadrul formatului pentru fișierul MF=30 termenul de "sensibilitate" înseamnă derivată a unei mărimi evaluate (o notăm y) în funcție de logaritmul unuia dintre parametri (notat a_i):

$$y'_i = \frac{\partial y}{\partial (\ln a_i)} = a_i \frac{\partial y}{\partial a_i} \quad (11.42)$$

Un avantaj al folosirii acestei definiții este acela că derivata y'_i se exprimă în aceeași unități de măsură ca și y (indiferent dacă y este secțiune eficace, distribuție energetică, unghiulară sau dublu diferențială pe unghi și energie). Acest lucru înseamnă că integrarea peste energie și unghi se poate face cu schimbări minime în codurile de procesare multigrup. Mai mult utilizarea derivatelor în funcție de logaritmul parametrilor se leagă comod cu utilizarea matricilor de covarianță a parametrilor.

Așa cum este descris pe larg în [13] o subsecțiune din MF=30 este folosită pentru a reprezenta sensibilitățile datelor dintr-o secțiune (numită secțiune de referință) a unui alt MF din subbiblioteca MAT de interes.

Trebuie subliniat că, firește, nu există corespondență directă între grila de energie sau de unghi dintr-o subsecțiune a lui MF=30 și grila din secțiunea la care aceasta se referă. Acest lucru provine din faptul că derivatele în MF=30 nu sunt derivatele valorilor datelor din celelalte fișiere MF ale evaluării. Datele dintr-o asemenea subsecțiune a fișierului MF=30

formează o reprezentare adecvată a dependenței energetice și unghiulare a funcției derivate, făcând uz efectiv de legile standard de interpolare (INT, a se vedea capitolul 6).

Mai trebuie menționat că dacă y este rezultatul unui calcul de model atunci firește că energia incidentă sau unghiul de împrăștiere sunt specificate de utilizatorul codului de model și putem spune că nu au practic incertitudine. Ca atare fișierul MF=30 nu poate fi folosit pentru a reprezenta incertitudinea unui întreg și nici incertitudinea mărimilor fizice ce intervin la gridurile de energie și unghi (cum ar fi mase, Q , etc.).

11.6.3 Tratarea diferitelor tipuri de date

Având în vedere prescripțiile generale cu privire la formatul fișierului MF=30, subsecțiunile din MF=30 referitoare la secțiuni eficace (spre deosebire de multiplicități și distribuții) vor avea aceeași structură de format ca și secțiunile MT din fișierul MF=3. Singura observație este că vor apărea normal și numere negative deoarece este vorba de sensibilități care sunt derivate, pe când în MF=3 vor fi numai numere pozitive fiind vorba de secțiuni eficace.

Cu privire la sensibilitățile legate de distribuțiile unghiulare din fișierul MF=4 trebuie făcute câteva remarci: dacă derivatele unei distribuții unghiulare normale $h(\theta)$ în funcție de un parametru sunt mari, atunci aceste derivate trebuie incluse în MF=30. Întrucât $h(\theta)$ se integrează la 1 prin definiție, integrala după unghi a sensibilităților (egală cu derivata la parametru a integralei după unghi) trebuie să fie zero.

Un alt aspect important cu privire la distribuții unghiulare este legat de posibilitatea de a utiliza două funcții separate pentru a construi data dorită: $f(\mu, E)$, dezvoltarea în polinoame Legendre și $\sigma_s(E)$, secțiunea eficace din MF=3. Pentru sensibilitatea corespunzătoare se folosește regula produsului: de exemplu, secțiunea elastică diferențială $\gamma(\theta)$ fiind formată ca un produs:

$$\gamma(\theta) = \frac{dy}{d\Omega} = y h(\theta) \quad (11.43)$$

sensibilitatea la parametrul a_i va fi:

$$\frac{\partial \gamma(\theta)}{\partial a_i} = y \frac{\partial h(\theta)}{\partial a_i} + h(\theta) \frac{\partial y}{\partial a_i} \quad (11.44)$$

Înmulțind ambii membri ai relației (11.44) cu a_i și conform cu relația (11.42) se obține:

$$\gamma'_i(\theta) = y h'_i(\theta) + y'_i h(\theta) \quad (11.45)$$

Această expresie arată cum sensibilitatea $\gamma'_i(\theta)$ este construită din datele aflate în două subsecțiuni diferite (y'_i și h'_i) ale unei secțiuni din MF=30 și din datele y și h din MF=3 și respectiv MF=4.

Așa cum spuneam în secțiunea 11.6.1, pentru a limita mărimea fișierelor și pentru a ușura procesarea datelor, se recomandă evaluatorilor să nu se refere la secțiuni din evaluarea principală (MF-uri altele decât MF=30) care au sensibilitate mică față de parametrii dați; ca

atare în asemenea situații se pune zero explicit în $MF=30$. De exemplu dacă distribuțiile unghiulare sunt omise din $MF=30$ atunci primul termen din membrul drept al relației (11.45) va fi omis.

Dacă în fișierul $MF=4$ se folosește reprezentarea în polinoame Legendre a lui $h(\theta)$ atunci se permite în $MF=30$ utilizarea dezvoltării Legendre pentru a reprezenta $h_i'(\theta)$.

Aceste considerații cu privire la sensibilitățile datelor din $MF=4$ pot fi extinse asemănător și pentru sensibilitățile spectrelor de neutroni din fișierul $MF=5$, pentru multiplicitățile producției de fotoni ($MF=12$), pentru randamentele produșilor de fisiune etc.

În cazul datelor dublu diferențiale din $MF=6$, considerarea sensibilităților nu implică probleme de fond. În acest caz probabilitatea de emisie devine o funcție $h(E', \theta)$ atât de energia particulei finale cât și de unghiul particulei emergente. Singura complicație care apare este aceea că h_i' din (11.45) este dublu diferențial $h_i' = h_i'(E', \theta)$. Este de imaginat că $h_i'(E', \theta)$ pentru unii parametri dă corelații mai severe decât însuși $h_i(E', \theta)$, astfel încât este permis să se reprezinte sensibilitățile datelor din $MF=6$ în $MF=30$ numai dacă distribuțiile pe unghi și energie pentru acea reacție sunt date ca funcții separate în $MF=4$ și $MF=5$.

11.6.4 Sensibilități multigrupale

Operațiile multigrup efectuate asupra datelor dintr-o evaluare pot fi sintetic considerate ca integrale ponderate peste energia incidentă, energia particulei secundare, unghiul particulei secundare etc. Putem spune că nu există nici o legătură între variabile sau limitele de integrare și parametrii modelelor nucleare care au generat datele evaluate punctuale. Din acest fapt se pot trage foloase în ceea ce privește calculul derivatelor datelor mediate multigrup în funcție de parametri de model.

Considerăm g ca o mărime mediată pe grup generică (cum ar fi momentul Legendre al unui element al matricii de împrăștiere):

$$g = \int \gamma(E, E', \theta) \omega(E, E', \theta) dE dE' d\Omega \quad (11.46)$$

unde ω este funcția de pondere. Cum incertitudinile mărimilor multigrup sunt importante în aplicațiile de reactori, pentru a obține aceste incertitudini este nevoie mai întâi să se calculeze derivata lui g în funcție de parametrul a_i :

$$\begin{aligned} g_i' &= \frac{\partial g}{\partial (\ln a_i)} = a_i \frac{\partial g}{\partial a_i} = \\ &= \int a_i \frac{\partial \gamma(E', E, \theta)}{\partial a_i} \omega(E, E', \theta) dE dE' d\Omega = \\ &= \int \gamma_i'(E, E', \theta) \omega(E, E', \theta) dE dE' d\Omega \end{aligned} \quad (11.47)$$

Comparând relațiile (11.46) și (11.47) se poate trage o concluzie foarte importantă și anume: sensibilitatea unei mărimi multigrup la un parametru de model nuclear este egală cu medierea multigrup a sensibilității la acel parametru a respectivei mărimi fizice punctuale.

Datorită acestui fapt un program de procesare ENDF care calculează secțiuni multigrup conform cu relația (11.46) poate fi utilizat cu puține modificări pentru a calcula

sensibilitatea constantelor multigrup conform cu relația (11.47). După cum am menționat în secțiunea 11.6.1 aceasta este și motivația pentru care formatul de stocare al sensibilităților γ_i' este făcut cât mai apropiat de formatul datelor γ .

11.6.5 Aplicații multigrup ale covarianței parametrilor

Vom prezenta acum câteva idei privind folosirea covarianțelor din fișierul MF=30. Date fiind covarianțele relative:

$$RC(a_i, a_j) = \frac{C(a_i, a_j)}{a_i a_j}$$

din MF=30 și sensibilitățile multigrup g'_m din relația (11.47), este firesc să se obțină covarianța între o dată multigrup g_m și o altă dată multigrup g_n . Aici a fost necesară adăugarea încă a unui indice pentru a reține multiplicitatea tipului de date. Considerând aproximația uzuală că g_m nu este o funcție extrem de neliniară de parametri, dezvoltăm în serie Taylor cu reținerea primului termen:

$$\begin{aligned} C(g_m, g_n) &= \sum_{i,j} \frac{\partial g_m}{\partial a_i} \frac{\partial g_n}{\partial a_j} C(a_i, a_j) = \\ &= \sum_{i,j} a_i a_j \frac{\partial g_m}{\partial a_i} \frac{\partial g_n}{\partial a_j} \frac{C(a_i, a_j)}{a_i a_j} = \\ &= \sum_{i,j} g'_{m,i} g'_{n,j} R C(a_i, a_j) \end{aligned} \quad (11.48)$$

Această relație dă matricea de covarianță multigrup în funcție de sensibilitățile multigrup din relația (11.47) și datele citite direct din fișierul MF=30.

Trebuie făcute acum și unele precizări legate de capacitatea computerelor. Astfel în situațiile ce se prevăd în prezent, numărul de parametri implicați este de ordinul 10 - 100. Să luăm cazul a 50 de parametri. Pe de altă parte, este destul de obișnuit că în aplicațiile curente de reactori numărul de constante multigrup să depășească 10000. În acest caz matricea de covarianță a datelor $C(g_m, g_n)$ devine extrem de mare (10^8 elemente). Matricea de sensibilitate g'_m (cu 500000 elemente) și matricea de covarianță a parametrilor $RC(a_i, a_j)$ (cu 2500 elemente) sunt de asemenea mari. Cum în acord cu (11.48) tot conținutul informației de covarianță este deja conținut în ultimele două elemente, bibliotecile multigrup pentru aplicații neutronice de energii mari vor stoca aceste elemente separat [3].

Ulterior se poate mări eficiența dacă scopul este să se calculeze incertitudinile într-un set de "răspunsuri" prezise (doză, deteriorare prin iradiere, rata de reproducere a combustibilului etc.) care pot fi reprezentate de un vector coloană r (cu un număr tipic de 50 elemente). Matricea de covarianță $D(r)$ pentru date integrale este în relație cu matricea de covarianță a secțiunilor $D(g)$ cu elementele date de relația (11.48) prin legea de propagare a erorilor:

$$D(r) = HD(g)H^* \quad (11.49)$$

unde H este matricea de sensibilitate ce face legătura dintre mărimile integrale r și secțiunile multigrup g . Dimensiuni tipice pentru matricea H sunt (50 x 10000).

Dacă introducem o matrice R (dimensiune 10000 x 50) ce face legătura secțiunilor multigrup cu parametrii de model nuclear, atunci prima linie a relației (11.48) poate fi scrisă în forma matricială:

$$D(g) = RD(a)R^*$$

și relația (11.49) devine acum:

$$D(r) = H[RD(a)R^*]H^* = PD(a)P^* \quad (11.50)$$

Matricea produs $P = HR$ care conține sensibilitățile directe ale datelor integrate la parametrii de model nuclear este foarte compactă având aproape aceeași dimensiune ca matricea de covarianță $D(a)$.

Bibliografie:

[1] Vonach H. "Requirements of theoretical evaluation" in "Nuclear Theory of observations", Pergamon Press, New-York, Oxford, London, Paris (1961)

[2] Larson N.M. "Updated Users' Guide for SAMMY: Multilevel R-Matrix Fits to Neutron Data Using Bayes' Equations" ORNL/TM-9179/R2, Oak Ridge National Laboratory (1989)

[3] Muir D.W. "Review of uncertainties in the results of nuclear model calculations", proceeding of workshop on Computation and Analysis of Nuclear Data Relevant to Nuclear Energy and Safety, ICTP-Trieste (1992), 862-900

[4] Linnik Yu. V. "Method of Least Squares and Principles of Theory of Observations", Pergamon Press, New-York, Oxford, London, Paris (1961)

[5] Gandini A. "Nuclear Data and Integral Measurement Correlation for Fast Reactors", Part 1: Statistical Formulation RT/FI(73)22, Comitato Nazionale Energia Nucleare (1973)

[6] Gandini A., Petilli M. "A code using the Lagrange's multipliers method for nuclear data adjustment" RT/FI(73)39 Comitato Nazionale Energia Nucleare (1973)

[7] Muir D.W. "ZOTT A Computer Program for Zeroing-in on the Truth", RSICC (package PSR-272/1), 1989

[8] Smith D.L. "Probability, Statistic and Data Uncertainties in Nuclear Science and Technology", vol.4 of the OECD-NEA-Nuclear Data committee series (1991)

[9] Raynal J. "Notes on ECIS94" CEA-N-272 (1994)

[10] Salvatores M., Palmiotti G., Derrien H., Fort E., Oliva G. "Resonance Parameter Data Uncertainty Effects of Integral Characteristics of Fast Reactors" Proc. IAEA/OECD/NEANDC Consultants' Meeting on Uranium and Plutonium Isotope Resonance

Parameters, Viena (1981), CEA-CONF-6149 (1981)

[11] Oblow E.M. et al. "Sensitivity Analysis using Computer Calculus: A Nuclear Waste Isolation Application", Nucl.Sci.Eng. 94, (1986), 46

[12] Horwedel J.E., Worley B.A., Oblow E.M., Pin F.G., Wright R.Q. "GRESS version 0.0 user's manual", ORNL/TM-10835, Oak Ridge Nat.Lab. (1988)

[13] Rose P.F., Dunford C.L., ENDF-6 Formats Manual IAEA-NDS-76, rev.1992

[14] Hamilton W. "Statistic in Physical Science: Estimation, Hypothesis Testing and Least Squares", Ronald Press, New-York (1974)

[15] Shibata K. "Sensitivities of Calculated Cross Sections of Fe-56 to Model Parameters", OCDE/GD(94) 21

Shibata K.: Program ZZ-FILE30-MN55, Package-Id NEA 1427/01 (1993)

12. BAZE DE DATE NUCLEARE PENTRU VIITOR

Fenomenele fizicii nucleare și "cuantificarea" lor în termeni de date nucleare formează baza fizică a tehnologiei nucleare în două direcții importante:

a) reacția de fisiune care implică cu precădere fisiunea indusă de neutroni la toate energiile; la fiecare act de fisiune importante fiind emisia fragmentelor excitate, a neutronilor prompti și întârziați. Acestea sunt reflectate, din punctul de vedere al datelor nucleare, de dependența de energia incidentă a secțiunii de fisiune $\sigma_f(E)$, a numărului de neutroni prompti $\nu_p(E)$ și întârziați $\nu_d(E)$, de spectrul energetic al neutronilor prompti și întârziați, de distribuția de masă și de energie cinetică a fragmentelor de fisiune. Descrierea fisiunii cu ajutorul acestor date nucleare este suficientă pentru realizarea siguranței reacției în lanț controlate în reactorii de fisiune și conversia energiei cinetice a fragmentelor de fisiune în căldură și energie electrică

b) în competiție cu reacția de fisiune, neutronii produc o mare varietate de reacții endoterme și exoterme cu o mulțime de nuclee conducând la excitarea și dezintegrarea acestora. Aceste reacții și efectul lor asupra structurii nucleare și dezintegrării sunt "cuantificate" (din punctul de vedere al datelor nucleare) în secțiuni ale respectivelor reacții $\sigma_{rec}(E)$, spectre unghiulare și energetice ale particulelor emise în aceste reacții $f(E, E', \Theta)$, distribuția nivelelor discrete și descrierea continuumului de nivele (funcțiile densității de nivele), proprietățile lor cuantice, timpi de înjumătățire, rapoarte de ramificare, spectrele α , β , γ de dezintegrare.

Toate aceste date nucleare trebuie să fie cunoscute și disponibile fiecărui cercetător și inginer în proiectarea tehnologiilor privitoare la reactorii nucleari, în special ca date de intrare în calculele de proiect și de parametri de siguranță ai reactorului.

Așa cum am spus pe parcursul acestei lucrări, principalele surse de date nucleare sunt măsurările experimentale (folosind acceleratori de particule, reactori de cercetare etc.) și calculele teoretice (utilizând coduri de modele nucleare). Rezultatele experimentelor și cercetărilor teoretice sunt evaluate și convertite în fișiere computerizate de date nucleare punctuale evaluate. Aceste fișiere sunt de multe ori prea mari pentru a putea fi folosite direct, ca input, într-o serie de aplicații (cum ar fi cele de reactori) și ca atare sunt convertite în biblioteci de date multigrup (ce constituie datele de intrare în calculele de proiect și siguranță a reactorilor).

Calculele de reactori se bazează pe ecuația Boltzmann pentru transportul de neutroni și γ , utilizând de regulă [1] fie metoda ordonatelor discrete care necesită date multigrup de intrare fie metoda Monte-Carlo care folosește în fișierele de intrare date punctuale evaluate pentru construirea probabilităților de ciocnire.

Principalii parametri de proiectare de reactori ce se calculează sunt: fluxul de neutroni și γ , factorul de multiplicare (K_{eff}), masa critică a reactorului și îmbogățirea combustibilului, dimensiunile geometrice ale zonei active, puterea nominală a reactorului, conversia materialului fisil și raportul de supragenerare. În ceea ce privește siguranța reactorilor se calculează: caracteristicile cinetice și dinamice ale reactorului incluzând excursiile de reactivitate, coeficienții de temperatură ai reactivității, coeficienții Doppler, factorul de ardere al combustibilului, căldura de dezintegrare după oprirea reactorului, acumularea inventarului de actinide minore (secundare) și de produși de fisiune, deteriorarea materialelor structurale datorită iradierii incluzând aplicarea la dozimetria neutronică a reactorului, activarea materialelor reactorului și dozele de radiații, protecția la neutroni și γ a mediului din jurul reactorului.

Necesitățile de date nucleare se referă la secțiuni, în special neutronice, pentru o mare varietate de elemente și izotopi distribuiți pe tot domeniul sistemului periodic, date pentru multe reacții de împrăștiere de neutroni, de producere de neutroni, de absorbție de neutroni și pentru multe canale de ieșire, acoperind un domeniu energetic larg (de la meV la 15 - 20 MeV), cu fișiere atât în formă de date punctuale cât și date multigrup (sau probabilități de ciocnire) cu formate compatibile cu specificațiile de input ale codurilor de proiectare și securitate a reactorilor [1].

Pentru aplicații de proiectare a reactorilor termici și calcule de securitate a reactorilor, fișierele în prezent disponibile satisfac destul de bine cerințele, problemele rămase sunt legate de procesarea pe computer a acestor fișiere și transferul capacităților de procesare a acestor baze de date către țările în curs de dezvoltare.

În ceea ce privește reactorii rapizi, recent au fost îmbunătățite datele nucleare pentru materialele inițiale de proiect și pentru calcularea coeficienților de siguranță dar din nefericire există încă diferențe considerabile și inconsistențe între cele mai recente fișiere de date evaluate. Golurile și inconsistențele ce trebuie rezolvate sunt în special la datele privitoare la actinidele minore și produșii de fisiune precum și la multe secțiuni de activare și datele de dezintegrare asociate acestora. Există încă probleme și la procesarea acestor fișiere.

Este evident că cerințele uriașe de date nucleare necesare în tehnologiile nucleare nu pot fi satisfăcute numai prin măsurări experimentale. Aceast lucru ar necesita nu numai foarte mult timp și ar fi foarte costisitor dar sunt multe secțiuni neutronice pentru produși de fisiune de viață scurtă și unele actinide minore care la ora actuală sunt "nemăsurabile".

Pe de altă parte, o dată rezultat neutronul dintr-o reacție, trebuie știute datele privitoare la toate reacțiile posibile ale neutronului la o energie dată. În consecință teoria reacțiilor nucleare este cea care trebuie să ajute la completarea informațiilor experimentale.

Problema de bază este dacă datele nucleare calculate cu aceste teorii și modele satisfac cerințele de acuratețe pentru aplicațiile de tehnologii nucleare.

Înainte de anii 70 răspunsul la această întrebare era "nu". Teoria nucleară și modelele aveau în esență un caracter calitativ, ele puteau explica fenomene de bază dar nu permiteau descrieri detaliate microscopice sau predicții ale secțiunilor reacțiilor.

Trebuie însă menționate două excepții și anume:

(1) formalismul pentru zona neutronică rezonantă dezvoltat de Kapoor și Peierls, Blatt și Biedenharn (teoria matricii S), Lane și Thomas (teoria matricii R), aproximația uni-nivel Breit-Wigner și multinivel Breit-Wigner, Adler-Adler și Reich-Moore

(2) potențialul optic sferic nelocal dezvoltat de Perey și Buck

În ultimii 30 de ani teoria matricii S și matricii R și aproximațiile lor au fost folosite cu succes pentru a descrie cu acuratețe și a parametriza o mare cantitate de rezonanțe neutronice măsurate pentru împrăștierea elastică și inelastică, fisiune și captură iar pentru nucleele ușoare și canalele de ieșire de protoni și α , cu forme de rezonanțe de la pură Breit-Wigner la structuri complexe de interferență rezonanță-rezonanță și să prezică proprietăți de rezonanțe mediate în domeniul energetic al rezonanțelor nerezolvate sau nerezolvabile din analiza rezonanțelor rezolvate. De altfel progresul gradat realizat în acuratețea predicției coeficientului Doppler de temperatură este intim legat de creșterea numărului de rezonanțe rezolvate și analizate cu exactitate [1].

Pe de altă parte, potențialul optic sferic Perey-Buck a fost folosit cu succes pentru descrierea secțiunii totale, de reacție și elastice însă numai pentru nuclee sferice.

În ultimii 10 ani s-a realizat un mare progres în modelele de reacții nucleare de la tratarea mecanismului de interacție directă (cu model DWBA și canale cuplate), trecând prin precompound către mecanismul de nucleu compus (cu modele statistice din ce în ce mai

sofisticate) și progrese în descrierea microscopică a densităților de nivele, introducerea factorilor de creștere colectivi etc.

În concurență cu rafinarea modelelor s-a dezvoltat și partea de calcul realizându-se coduri de calcul performante atât pentru sisteme mari ca IBM, CDC, CRAY, supercomputere cât și pentru PC-uri. Codurile de modele realizate sau aflate încă în dezvoltare permit concomitent calculul detaliat al datelor nucleare și dezvoltarea însăși a teoriilor și modelelor.

O primă consecință a rafinării teoriilor de reacții nucleare și a modelelor aferente este faptul că rolul datelor experimentale și teoretice s-a schimbat. Măsurătorile experimentale legate de reacții nucleare, utilizând sursele intense de neutroni disponibile în prezent, se concentrează din ce în ce mai mult pe măsurarea cu precizie a acelor date nucleare pentru care se cere o exactitate deosebită iar măsurătorile cu surse de 14 MeV sunt folosite la ajustarea secțiunilor calculate teoretic.

Se acordă atenție deosebită calculelor pe bază de modele pentru date nucleare la care nu este cerută o acuratețe deosebită și acolo unde este nevoie de un volum mare de date pentru sistematici în scopuri practice (de exemplu secțiuni de activare).

A doua consecință a rafinării modelelor o constituie faptul ca fișierele actuale de date evaluate sunt mult mai mari decât înainte, fiind bazate pe date calculate, realizându-se uneori o supraestimare a încrederii în datele nucleare calculate comparativ cu cele experimentale [2].

A treia consecință este că programele de calcul pe bază de modele disponibile acum pentru PC au devenit mijloace importante în procesul de învățământ universitar și în țările în curs de dezvoltare. Multe grupuri de cercetare din aceste țări participă acum la intercomparări de modele nucleare și la activitatea de evaluare, aducând contribuții însemnate la îmbunătățirea bibliotecilor de date nucleare evaluate și de coduri de calcul.

Recunoscând progresele recente în teoriile, modelele de reacții și codurile de calcul aferente și creșterea puterii lor de precizie de date nucleare, trebuie avut tot timpul în minte faptul că cele mai sofisticate modele sunt până la urmă tot aproximații. Secțiunile reacțiilor și alte date de reacție nu pot fi calculate din principiile primare fiindcă forța de interacție nucleon-nucleon nu este cunoscută exact și ecuația Schrödinger pentru mai multe corpuri nu poate fi rezolvată exact. Ca atare nu sunt încă metode teoretice de încredere care să estimeze acuratețea modelelor de reacție și care să prezică cu exactitate parametrii modelelor nucleare.

În consecință modelele teoretice conțin totdeauna parametri care au fost determinați cantitativ prin fitul calculelor peste datele experimentale, ceea ce face ca fitul să fie cu atât mai ambiguu cu cât sunt folosiți mai mulți parametri. Ca atare calitatea modelelor nucleare nu poate fi judecată decât prin comparație cu datele experimentale.

Ca urmare performanțele modelelor actuale de reacții nucleare pot fi apreciate astfel:

1) Acuratețea cea mai mare o are parametrizarea și descrierea cantitativă a rezonanțelor complexe rezolvate, problema principală fiind metodele și datele pentru tratarea statisticilor de rezonanță în domeniul rezonanțelor nerezolvate.

2) În regiunea cu variație lină a secțiunilor cel mai bun fit cu model al datelor experimentale, pentru o reacție dată și un nucleu dat, poate fi interpolat și extrapolat cu încredere rezonabilă în zona fără date experimentale pentru aceeași reacție și același nucleu.

3) Modelele nucleare pot fi folosite pentru precizarea datelor nucleare necunoscute care se cer cu acuratețe scăzută; fiturile modelelor peste datele experimentale de la nuclee vecine ajută la creșterea exactității datelor prezise.

4) Se pot utiliza modelele nucleare pentru a stabili în primă aproximație sistematici de date nucleare pe domenii largi de nuclee, de reacții și de energie. De exemplu se folosesc calculele de model pentru realizarea în primă aproximație a bibliotecilor de date de activare

pentru 10000 de reacții plus datele de dezintegrare asociate, cerute pentru estimarea dozelor și a radioactivității pentru instalațiile nucleare.

5) Modelele nucleare pot fi folosite pentru consistența internă a secțiunilor măsurate pentru diferite canale de reacție și nuclee vecine. Acest lucru este cel mai mult folosit pentru canalele de împrăștiere elastică și inelastică ale particulelor secundare ale căror secțiuni se obțin de regulă din calcule ID cu potențial optic fenomenologic ai cărui parametri s-au obținut din fitul secțiunii totale și eventual elastice. Problemele care apar sunt la canalele de ieșire ne-neutronice (protoni, α) unde un fit teoretic bun pe secțiunile proceselor (n,n) și (n,p) la un nucleu nu garantează o descriere bună a secțiunii (n,α) [3].

S-au făcut multe parametrizări ale modelelor dezvoltate în ultimii 20 de ani (optic, statistic, pre-compound, direct, multistep direct și compound, modele de fisiune asociate cu descrieri microscopice și factori de creștere pentru densitatea de nivele etc.) pe baza comparării cu datele experimentale. Există multe coduri de model disponibile utilizatorilor și o bază largă de date experimentale (dar încă incompletă) pentru optimizarea parametrilor de model.

În prezent calculele de model servesc pentru obținerea unui volum mare de date necesare în aplicații ca:

- calcule de inventare de actinide și produși de fisiune în reactorii de fisiune, calcule de doze de radiații pentru decomisionarea reactorilor și pentru studiile de incinerare a deșeurilor nucleare

- calcule de activări la materialele folosite în diverse instalații nucleare și a dozelor de radiații în mediul inconjurător

- extinderea la energii intermediare a bazelor de date disponibile la energii joase și aplicații la studiile legate de incinerarea deșeurilor cu surse de spalație și la cercetări din domeniul spațial

Pentru asemenea studii sistematice este nevoie să se dezvolte fisiere de intrare cu parametri de referință într-o formă standard, care să acopere peste 1000 de nuclizi pe tot sistemul periodic. De aceea se pare că cea mai importantă problemă ce trebuie rezolvată pe termen mediu și lung în domeniul bibliotecilor de date nucleare și coduri de calcul este realizarea unei biblioteci de referință de parametri de input [1].

În ultimii ani s-a constatat o scădere a activității în domeniul nuclear din cauza atât a lipsei angajamentului guvernamental în unele țări și influenței unor factori pe termen scurt cât și a opiniei publice negative.

În viitorul apropiat nu se așteaptă o creștere substanțială a capacităților energetice nucleare, aceasta datorită creșterilor modeste în cererea de electricitate și disponibilității de surse de energie relativ ieftine.

În schimb, previziunile pe termen lung arată creșteri importante ale cererii de electricitate. Firește că energia nucleară va contribui la acest lucru dar numai dacă ea recâștigă încrederea opiniei publice și dacă securitatea ei și performanțele sale economice vor fi întărite.

Activitatea de realizare, mentenanță și dezvoltare a bibliotecilor de date nucleare și coduri de calcul urmărește acumularea și conservarea întregii cunoașteri în domeniul nuclear pentru a servi generațiilor viitoare, care pentru aplicații (energetice și non-energetice) nu vor mai trebui să reia o serie de cercetări, experimente și calcule.

În acest scop centrele de date nucleare cooperează pentru ca datele nucleare calculate și procesate ca și datele și alte informații descriptive din experiențe foarte costisitoare

realizate în trecut, să fie stocate, compilate, ordonate, actualizate pe mediul computațional împreună cu codurile de calcul necesare pentru analiza și interpretarea lor.

Bibliografie:

- [1] Schmidt J.J. Workshop on "Computational Analysys of Nuclear Data relevant to Nuclear Energy and Safety", ICTP Trieste, (1992), 1-9
- [2] P.Miller, P.Nagel, M.Salvatores, E.Sartori "Shielding Experimental Benchmark Data Base at the NEA-Data Bank", Proc.Conf.ICRS7 (1988)
- [3] Konshin V.A. "Neutron cross section calculations using optical and pre-equilibrium models", workshop on "Computational and Analysis of Nuclear Data relevant to Nuclear Energy and Safety", Trieste (1992), 775

VERIFICAT
2017



VERIFICAT
2007

**Tiparul s-a executat sub c-da nr. 413/1998,
la Tipografia Editurii Universității din București**

ISBN 973 - 575 - 216 - 6

Lei 12500