



UNIVERSITATEA DIN
BUCUREȘTI
VIRTUTE ET SAPIENTIA



FACULTATEA DE FIZICĂ

IMPLEMENTAREA ÎN LIMBAJUL DE PROGRAMARE JULIA A
UNUI MODEL DETERMINIST DE EMISIE PROMPTĂ ÎN FISIUNE

LUCRARE DE DISERTAȚIE

Absolvent

Paul-Adrian GOGÎȚĂ

Coordonator științific

Prof. univ. dr. Anabella TUDORA

București, 2023

Mulțumiri

Doresc să îmi exprim profunda recunoștință coordonatorului meu științific, doamnei prof. univ. dr. Anabella Tudora, pentru îndrumarea esențială de pe tot parcursul elaborării lucrării de față. Experiența, entuziasmul și critica constructivă venite din partea dumneaei au fost instrumentale în modelarea și rafinarea muncii mele.

Sunt, de asemenea, recunoscător cadrelor didactice din departamentul de fizică nucleară al facultății și apreciez oportunitatea de a beneficia de cunoștințele și înțelepciunea dumnealor pe parcursul anilor mei de studii universitare.

Totodată le mulțumesc colegilor mei din cadrul Atelierului de Securitate Nucleară al RATEN-CITON pentru sprijinul și încurajările lor din perioada în care am urmat studiile universitare de masterat, în special mentorilor mei: doamnei ing. th. dr. Gabriela Florescu și doamnei ing. th. Doina Pantazi.

În cele din urmă, dar nu în ultimul rând, le datorez apreciere și stimă membrilor familiei mele. Aceștia m-au încurajat să îmi urmez ambițiile și m-au susținut la fiecare pas al parcursului meu academic și profesional.

Cuprins

| | | |
|----------|--|-----------|
| 1 | Introducere | 1 |
| 2 | Descrierea modelului <i>DSE</i> | 7 |
| 2.1 | Rezolvarea ecuațiilor secvențiale în emisia promptă | 9 |
| 2.1.1 | Partiționarea energiei totale de excitație | 9 |
| 2.1.1.1 | Partiționarea <i>TXE</i> cu modelare la sciziune | 10 |
| 2.1.1.2 | Partiționarea <i>TXE</i> folosind diferite parametrizări | 11 |
| 2.1.2 | Parametrul densității de nivele | 12 |
| 2.1.3 | Secțiunea eficace de evaporare a neutronului | 13 |
| 3 | Implementarea modelului <i>DSE</i> în limbajul <i>Julia</i> | 15 |
| 3.1 | Structura codului de calcul | 16 |
| 4 | Rezultate obținute | 23 |
| 5 | Concluzii | 33 |
| 6 | Anexe | 35 |
| 6.1 | Rezolvarea integralelor spectrului de evaporare | 35 |
| 6.1.1 | Secțiune eficace de evaporare constantă | 35 |
| 6.1.2 | Secțiune eficace de evaporare variabilă | 36 |
| 6.2 | Unicitatea soluției ecuației transcendente | 37 |
| | Referințe bibliografice | 38 |

Introducere

Descoperirea fisiunii nucleare a avut loc pe 19 decembrie 1938, atunci când chimiștii germani Otto Hahn și Fritz Strassmann au realizat acest progres major în urma unor demersuri experimentale remarcabile. Ulterior, în ianuarie 1939, fizicienii Lise Meitner și nepotul ei Otto Robert Frisch au oferit o explicație teoretică adecvată pentru această descoperire, procesul de scindare a nucleului fiind denumit "fisiune" de către Frisch, acesta făcând o analogie cu diviziunea biologică a celulelor vii. Reacția de fisiune nucleară poate avea loc în mod spontan pentru anumite nuclee actinide sau poate fi indusă prin bombardarea unui nucleu greu cu o particulă, cum ar fi: un neutron, un proton, un ion greu sau un foton, în urma acesteia fiind degajată o cantitate mare de energie de aproximativ 200 MeV.

Multe dintre aspectele procesului de fisiune nucleară rămân neelucidate până în ziua de astăzi, la nivelul comunității științifice existând un efort susținut de a îmbunătăți cunoașterea acestui fenomen fizic datorită aplicațiilor fisiunii din diferite domenii tehnice, de pildă: energetica nucleară, gospodărirea deșeurilor radioactive, controlul de garanții nucleare, securitatea nucleară, ș.a.m.d., precum și pentru a lărgi spectrul cunoașterii fundamentale a fizicii nucleare.

Investigarea mecanismelor reacției de fisiune implică în mod obișnuit studiul a două etape: etapa pre-sciziune și etapa post-sciziune. Etapa de pre-sciziune se referă la ceea ce se întâmplă cu un nucleu fisionant până la scindarea acestuia. Etapa post-sciziune include ceea ce se întâmplă cu numeroasele nuclee (rezultate din scindarea nucleului fisionant în diferite moduri) împreună cu emisia promptă a neutronilor și cuantelor γ din nucleele respective, urmată de dezintegrări β^- și de emisia întârziată a neutronilor și cuantelor γ până la atingerea stabilității de către nuclee. Pe scurt, etapa pre-sciziune consideră un singur nucleu fisionant studiat pe parcursul evoluției sale complexe de-a lungul căii de fisiune, pornind de la deformarea sa în stare fundamentală și ajungând la deformarea sa finală urmată de scindarea în două sau mai multe nuclee numite fragmente de fisiune inițiale. Studiul teoretic al evoluției nucleului fisionant de-a lungul căii de fisiune se concentrează pe descrierea barierei de fisiune, considerată cu două maxime pentru o mare parte a actinidelor și cu trei maxime pentru anumite actinide cu mase mai mici. În calculele de reacții nucleare (de obicei reacții induse de neutroni ale nucleelelor actinide) etapa pre-sciziune include tratarea canalului de fisiune aflat în competiție cu alte canale de reacție disponibile (împrăștiere elastică și inelastică, captură γ , (n,xn) , (n,xp) ș.a.) care au loc prin diferite mecanisme de reacție: interacție directă, emisie la pre-echilibru și formare de nucleu compus. În mod evident, reacțiile de fisiune și dezexcitare γ au loc numai în cadrul mecanismului de formare a nucleului compus.

Cercetările cu privire la modelarea reacțiilor nucleare având scopul de a furniza date evaluate precise ale secțiunilor eficace (inclusiv a secțiunii eficace de fisiune) s-au concretizat prin coduri de calcul complexe ce modelează reacțiile nucleare. Aceste coduri de calcul sunt utilizate pentru evaluarea datelor de reacții nucleare, de pildă: **SAMMY** (care include tratarea regiunii de rezonanță, dezvoltat la ORNL în SUA), **ECIS** (care include tratarea mecanismului interacțiilor directe folosind canale cuplate și DWBA, dezvoltat la CEA Saclay în Franța de către Jacques Raynal), **GNASH** (care include modelul statistic și tratarea emisiei de pre-echilibru, dezvoltat la LANL în SUA), **EMPIRE** și **TALYS**, ambele incluzând toate mecanismele de reacție:

interacție directă & canale cuplate, emisie de pre-echilibru și formare de nucleu compus tratate prin model statistic. Codul TALYS a fost dezvoltat în Europa la NRG Petten în Țările de Jos, la CEA Bruyères-le-Châtel în Franța, la Universitatea din Bruxelles în Belgia și la IAEA-NDS. Codul EMPIRE are mulți dezvoltatori și colaboratori din întreaga lume, printre care: NNDC BNL în SUA, IAEA-NDS în Viena, Universitatea din București în România, JSI Ljubljana în Slovenia, LLNL și ORNL în SUA și mulți alții.

Comparativ cu pre-sciziunea ce caracterizează un singur nucleu împreună cu canalul de fisiune aflat în competiție cu alte canale de reacție, etapa post-sciziune a fisiunii include multe nuclee numite fragmente de fisiune care rezultă dintr-o varietate mare de moduri în care nucleul fisionant se poate scinda, de la fisiunea simetrică și până la fragmentări distinct asimetrice. Fisiunea binară presupune spargerea nucleului fisionant în două fragmente numite uzual ușor și greu, ea reprezentând modul cel mai probabil de fisiune în cadrul căruia se conservă tipul și numărul nucleonilor: $\{A_0 = A_L + A_H\}$ & $\{Z_0 = Z_L + Z_H\}$. Aplicarea legii de conservare a energiei totale în două momente cheie ale post-sciziunii duce la următoarele relații fundamentale:

1. Energia eliberată în momentul sciziunii (numită în literatura de specialitate *Q-value*) exprimată în funcție de valorile defectelor de masă ale nucleului fisionant și ale fragmentelor complementare ușor și greu:

$$Q = \Delta(A_0, Z_0) - [\Delta(A_H, Z_H) + \Delta(A_L, Z_L)] \quad (1.1)$$

2. Bilanțul energetic stabilit la accelerarea totală a fragmentelor de fisiune, dar înainte de a începe emisia promptă:

$$Q + E_{CN}^* = TXE + TKE \quad (1.2)$$

unde **TXE** (*Total eXcitation Energy*) este energia totală de excitație a fragmentelor de fisiune (aceasta determină capacitatea fragmentelor total accelerate de a emite neutroni prompti și cuante γ prompte), **TKE** (*Total Kinetic Energy*) reprezintă energia cinetică totală a fragmentelor de fisiune, iar E_{CN}^* este energia de excitație a nucleului compus în cazul fisiunii induse (nulă în cazul fisiunii spontane).

Fragmentele de fisiune sunt nuclee abundente în neutroni aflate în stare excitată, caracterizate prin timpi de viață foarte scurți. Acestea se dezexcită rapid prin emisia secvențială de neutroni prompti și cuante γ prompte, transformându-se în nuclee aflate fie în stare fundamentală, fie într-o stare izomeră de viață lungă, care nu sunt plasate pe curba de stabilitate β . Emisia neutronilor prompti și a cuantelor γ prompte din fragmentele de fisiune constituie faza de *emisie promptă* a fisiunii, denumirea datorându-se duratei scurte de desfășurare a acestora care are ordinul de mărime comparabil cu cel al timpului caracteristic pentru interacțiile cu mecanism de formare a nucleului compus. Producții inițiale de fisiune (sau ultimele fragmente reziduale în urma emisiei prompte) pot suferi în continuare dezintegrări β^- sau pot emite neutroni întârziți și cuante γ întârziate (într-o cantitate mult mai mică față de emisia promptă) până când ating o configurație stabilă sub forma produșilor finali de fisiune. Procesul descris anterior constituie etapa de fisiune întârziată a cărei durată este dependentă de timpul de înjumătățire al dezintegrărilor β^- , aceasta acoperind un interval de timp ce variază de la câteva secunde și până la sute și mii de ani.

Având în vedere că scopul acestei lucrări este legat de implementarea unui model de emisie promptă, se vor prezenta sumar în cele ce urmează evoluția și dezvoltarea modelelor de emisie promptă prin menționarea câtorva modele fizice și coduri de calcul care au adus contribuții semnificative cunoașterii, aplicațiilor și popularității emisiei prompte.

De la descoperirea reacției de fisiune nucleară și până acum trei decenii, studiul emisiei prompte a beneficiat de mai puțină atenție din partea comunității științifice preocupate cu modelarea

reacțiilor nucleare prin comparație cu faza de pre-sciziune a fisiunii. Acest fapt este evidențiat de bibliotecile de date nucleare evaluate de la acea vreme în care evaluarea datelor privind emisia promptă se baza pe modele depășite ce nu țineau cont de ipoteze și considerente fizice ale fenomenului de fisiune, având parametri bazați pe sistematici fragile și pe fitarea datelor experimentale disponibile. Exemple ale unor astfel de abordări sunt evaluările spectrelor de neutroni prompti pentru majoritatea actinidelor unde s-au utilizat expresii ale distribuțiilor Maxwell și Watt ce erau incapabile să realizeze predicții ale spectrelor de neutroni prompti în absența datelor experimentale.

Primul avans semnificativ realizat în modelarea emisiei prompte a fost modelul dezvoltat de Madland și Nix descris în ref. [1], cunoscut sub numele de model **Los Alamos**. Tratarea emisiei prompte din cadrul acestui model bazată pe fragmentarea cea mai probabilă s-a bucurat de apreciere și popularitate în rândul comunității științifice la scurt timp după apariție, deoarece își are fundamentul în considerente fizice solide și necesită un număr rezonabil de parametri de intrare. În consecință, începând cu anii '90, majoritatea evaluărilor de date nucleare ale spectrelor de neutroni prompti incluse în diferite biblioteci de date nucleare evaluate au fost realizate prin utilizarea modelului Los Alamos.

De asemenea, cercetările de pionierat în ceea ce privește distribuția energiei fragmentelor de fisiune și distribuția temperaturii reziduale realizate de către Terrell [2, 3], Browne și Dietrich [4] au jucat un rol important, ele fiind menționate de Madland și Nix în ref. [1], precum și de către Madland în cadrul unei prezentări generale asupra istoriei timpurii a modelării spectrelor de neutroni prompti la o reuniune a consultanților AIEA [5]. Alte studii teoretice de la sfârșitul anilor '80 și începutul anilor '90 au adus contribuții importante în ceea ce privește înțelegerea fenomenelor care au loc în momentul sciziunii, bilanțul energetic și partiționarea energiei în fisiune, de pildă cercetările efectuate în cadrul grupului de la Dresda [6]. O privire de ansamblu cuprinzătoare asupra investigațiilor experimentale și teoretice din domeniul emisiei prompte realizată la sfârșitul anilor '80 poate fi găsită în ref. [7].

Versiunea inițială a modelului Los Alamos dezvoltată de Madland și Nix [1] având prima implementare într-un cod de calcul publicată la începutul anilor 2000 [8], precum și versiunile ulterioare ale aceluiași model, iau în considerare fie o singură fragmentare numită fragmentare cea mai probabilă, fie câteva fragmentări asociate fiecărui mod de fisiune ca fiind cele mai probabile folosind conceptul de fisiune multimodală [9, 10, 11]. Îmbunătățirile aduse ulterior modelului Los Alamos s-au concentrat în principal pe extinderea sa la energii incidente mari ale neutronului de peste 30 de MeV prin luarea în considerare a șanselor multiple de fisiune pentru nucleele compuse obținute în urma emisiei de particule încărcate [12], precum și pe luarea în considerare a neutronilor prompti emiși din alte surse decât din fragmentele de fisiune total accelerate prin includerea anizotropiei [13, 14].

Acestea fiind spuse, modelul Los Alamos în diferitele sale versiuni poate furniza numai valori medii totale ale mărimilor fizice de interes implicate în emisia promptă, însă în cadrul multor aplicații ale fisiunii nucleare sunt necesare informații suplimentare legate de aceste mărimi, precum: distribuții detaliate ale neutronilor prompti și ale razelor γ , multiplicitățile și energiile neutronilor și fotonilor prompti în funcție de fragmentul care le emite și/sau de energia sa cinetică, diferite corelații între multiplicitățile, energiile sau alte mărimi caracteristice ale neutronilor și fotonilor prompti, ș.a.m.d.. Cerințele enumerate anterior au dus la dezvoltarea de tehnici experimentale sofisticate și moderne, precum și la concepția modelărilor teoretice bazate pe tratarea detaliată a emisiei prompte, eveniment cu eveniment.

O privire de ansamblu detaliată asupra investigațiilor teoretice și experimentale ale emisiei prompte în fisiune la nivelul anului 2015 se află în ref. [14], incluzând rezultatele unui proiect de cercetare coordonat de către AIEA dedicat spectrelor de neutroni prompti ai actinidelor. Modelele de emisie promptă prezentate în cadrul ref. [14] sunt clasificate în două categorii:

modelări bazate pe un tratament probabilistic de tip Monte Carlo și modelări deterministe.

Cele mai cunoscute coduri de calcul de emisie promptă incluse în prima categorie sunt:

FIFRELIN (dezvoltat la CEA Cadarache în Franța), **CGMF** (dezvoltat de o echipă numeroasă aparținând Los Alamos National Laboratory în SUA), **FREYA** (dezvoltat de oameni de știință din cadrul Lawrence Berkeley & Lawrence Livermore National Laboratories și California University în SUA) și **GEF** (dezvoltat la Erzhausen în Germania, și la CENBG-CNRS, CEA-Saclay, GANIL în Franța).

Codurile de calcul enumerate anterior tratează emisia neutronilor și fotonilor considerând fiecare eveniment de fisiune prin simulări Monte Carlo ale dezexcitării fragmentelor de fisiune. Toate codurile cu tratare Monte Carlo (cu excepția GEF) utilizează distribuția maselor, sarcinilor electrice și energiilor cinetice a fragmentelor inițiale de fisiune $Y(A, Z, TKE)$ pentru eșantionarea evenimentelor de fisiune. Un dezavantaj al simulărilor Monte Carlo îl constituie necesitatea cunoașterii detaliilor legate de structura nucleară a unei game largi de nuclee, în condițiile în care o pentru o mare parte a acestora nu există suficiente date experimentale. Tot în publicația [14] se găsesc descrieri succinte ale codurilor de calcul CGMF, FREYA și FIFRELIN.

Codul CGMF a apărut în urma combinării a două coduri de calcul dezvoltate anterior la Los Alamos: un cod cu statistică Hauser-Feshbach [15] și un cod Monte Carlo [16]. Detalii suplimentare despre caracteristicile și capacitățile codului CGMF se găsesc în ref. [17, 18, 19, 20]. Informații legate de considerentele fizice ce stau la baza codului FREYA (Fission Reaction Event Yield Algorithm), capabilitățile sale și parametri de intrare utilizați pot fi găsite în publicațiile [21, 22, 23, 24, 25, 26]. Codul FIFRELIN include la rândul său un tratament Hauser-Feshbach al dezexcitării fragmentelor de fisiune și ia în considerare mai multe aspecte fizice, de pildă: partiționarea energiei între fragmentele de fisiune complementare prin modelare la sciziune [27], densitățile de nivele ale fragmentelor, dezexcitarea γ a fragmentelor de fisiune [28] și multe altele descrise în ref. [29, 30, 31]. Codul GEF (GEneral description of Fission observables) [32] include abordări de tip semiempiric și este ușor de utilizat datorită formatului simplu al datelor de intrare și al opțiunilor implicite. Merită menționat faptul că în cadrul codului GEF se calculează distribuțiile inițiale și distribuțiile în urma emisiei prompte a fragmentelor de fisiune în mod suplimentar față de rezultatele ce țin de emisia promptă.

Codurile de calcul bazate pe modelări deterministe iau în considerare un număr mare de fragmentări și energii cinetice pentru a realiza construcția domeniului fragmentărilor, astfel fiind capabile să ofere rezultate detaliate ale mărimilor implicate în procesul de emisie promptă sub formă de matrici caracterizate de configurația (A, Z, TKE) , fără a fi nevoie furnizarea distribuțiilor $Y(A, Z, TKE)$ ca date de intrare.

În prezent există două astfel de modele deterministe dezvoltate la Universitatea din București: modelul **PbP** (*Point-by-Point*) și modelul **DSE** (*Deterministic Sequential Emission*). Ambele modele folosesc aceeași construcție deterministă a domeniului fragmentărilor și aceeași metodă de partiționare a energiei totale de excitație corespunzătoare perechii de fragmente complementare total accelerate bazate pe modelarea la sciziune. Principala diferență dintre cele două modele constă în tratarea diferită a emisiei secvențiale ce presupune evaporarea succesivă a neutronilor dintr-un fragment de fisiune (inițial sau rezidual) care devine următorul fragment rezidual. Exemplificând, prima secvență de emisie indexată $k = 1$ presupune evaporarea primului neutron prompt dintr-un fragment inițial total accelerat (fragmentul rezultat din sciziunea nucleului fisionant) care duce la formarea primului fragment rezidual, a doua secvență de emisie indexată $k = 2$ presupune evaporarea celui de-al doilea neutron prompt din primul fragment rezidual care rezultă în formarea celui de-al doilea fragment rezidual ș.a.m.d.. Modelul PbP are la bază o tratare globală a emisiei secvențiale din fiecare fragment și la fiecare energie cinetică, acoperind toate configurațiile posibile din punct de vedere fizic, în timp ce modelul DSE tratează emisia secvențială în mod detaliat, secvență cu secvență.

Prima publicație referitoare la modelul PbP datează din anul 2005 [33], acesta fiind folosit inițial pentru obținerea valorilor medii ale diferitelor mărimi ce servesc drept parametri de intrare pentru versiunile modelului Los Alamos cu o singură fragmentare cea mai probabilă sau cu mai multe fragmentări corespunzătoare fiecărui mod de fisiune [10, 11, 34]. Ulterior, modelul PbP a mai fost folosit pentru evaluarea datelor nucleare [14], pentru a evidenția corelațiile dintre comportarea rezonantă a secțiunilor eficace sub-barierice corespunzătoare actinidelor nefisile (pre-sciziune) și fluctuațiile semnificative ale mărimilor ce caracterizează emisia promptă a acestora (post-sciziune) [35, 36], la investigarea efectelor par-impare globale [37, 38, 39], precum și la predicția multiplicității neutronilor prompti $\nu(A)$ la energii mari [40, 41]. O prezentare generală a modelului PbP a fost publicată în ref. [42].

Cel de-al doilea model determinist având o tratare detaliată a emisiei secvențiale are rezultate prezentate pentru prima dată în cadrul ref. [43]. Scopul inițial al acestui model a fost investigarea distribuțiilor de temperatură reziduală pentru a vedea dacă este posibilă descoperirea unor forme analitice explicite ale acestor distribuții [44]. Aplicarea ulterioară a modelului DSE în cadrul mai multor cazuri de fisiune (printre care fisiuni spontane și fisiuni induse de neutroni termici și rapizi) a evidențiat comportări sistematice de interes ale mărimilor ce caracterizează fragmentele reziduale și emisia promptă secvențială [45], printre care definirea unei expresii analitice generale a distribuției temperaturilor reziduale pentru toate secvențele de emisie $P(T)$ (folosită inclusiv în cadrul modelului PbP [44]) și pentru fiecare secvență de emisie în parte $P_k(T)$. Rezultatele distribuțiilor descrise anterior au putut fi astfel incluse în modelul Los Alamos [46] pentru a-i permite acestuia să determine spectrele totale ale neutronilor prompti, dar și spectrele de emisie ale fiecărui neutron emis succesiv din fragmentele ușor și greu ale celei mai probabile fragmentări. Detalii suplimentare referitoare la rezultatele tratării secvențiale a emisiei prompte se găsesc în ref. [47, 48, 49, 50].

În cadrul lucrării de față se va prezenta implementarea modelului DSE într-un limbaj de programare de paradigmă nouă [51], astfel încât să fie respectate bunele practici consacrate în dezvoltarea codurilor de calcul.

Descrierea modelului *DSE*

Modelul DSE presupune o tratare deterministă a procesului de emisie promptă, în care ecuațiile modelului descriu emisia neutronilor prompti în mod detaliat, secvență cu secvență. În cadrul acestui model se consideră că procesul de emisie a neutronilor prompti din fragmentele de fisiune este descris prin spectre de evaporare Weisskopf-Ewing în sistemul centrului de masă (prin evaporare se înțelege procesul invers formării nucleului compus prin captura neutronică):

$$\begin{aligned}\varphi(\varepsilon; T) &= K(T) \varepsilon \sigma_c(\varepsilon) e^{-\frac{\varepsilon}{T}} \\ K(T) &= \left[\int_0^\infty \varepsilon \sigma_c(\varepsilon) e^{-\frac{\varepsilon}{T}} d\varepsilon \right]^{-1}\end{aligned}\quad (2.1)$$

unde ε reprezintă energia exprimată în sistemul centrului de masă, T se referă la temperatura nucleară a fragmentului rezidual, σ_c este secțiunea eficace de formare a nucleului compus în procesul invers evaporării, iar $K(T)$ este parametrul de normare.

Spre deosebire de tratarea globală ce implică integrarea spectrului de evaporare $\varphi(\varepsilon; T)$ pe distribuția temperaturilor reziduale $P(T)$ care înglobează întreaga informație a procesului emisie promptă, de la fragmentul inițial și până la ultimul fragment rezidual, abordarea detaliată presupune rezolvarea iterativă a ecuațiilor corespunzătoare fiecărei secvențe de emisie obținute prin aplicarea principiului conservării energiei:

$$\overline{E}_r^{(k-1)} - S_n^{(k-1)} - \langle \varepsilon \rangle_k = a_k T_k^2; \quad k = \{1, \dots, k_{\max}\} \quad (2.2)$$

în care k denotă indicele secvenței de emisie ce cuprinde intervalul complet al fragmentelor reziduale, $\overline{E}_r^{(k-1)}$ este energia medie de excitație a nucleului ce emite neutronul, $S_n^{(k-1)}$ reprezintă energia de separare a neutronului din acest nucleu, iar $\langle \varepsilon \rangle_k$ semnifică energia medie a neutronului emis în sistemul centrului de masă. Termenul $a_k T_k^2$ se referă la energia de excitație a fragmentului în urma emisiei neutronului prompt din secvența respectivă, în concordanță cu aproximația modelului de gaz Fermi, a_k reprezentând parametrul densității de nivele, iar T_k fiind temperatura nucleului rezidual.

Construcția deterministă a domeniului al fragmentărilor care ia în considerare toate configurațiile de fragmente inițiale (A, Z) și valori ale TKE ce apar cu probabilitatea dată de distribuția $Y(A, Z, TKE)$ este caracteristică modelelor PbP și DSE [14, 44, 42]. Acest domeniu al fragmentărilor acoperă un interval al numerelor de masă care se întinde de la fisiunea simetrică și până la o asimetrie maxim probabilă, având pasul de o unitate. Fiecărui astfel de număr de masă i se atribuie numere atomice corespunzătoare valorilor întregi din vecinătatea sarcinii celei mai probabile $Z_p(A)$ determinată prin următoarele expresii:

$$\begin{aligned}Z_p(A) &= Z_{UCD}(A) + \Delta Z(A) \\ Z_{UCD}(A) &= A \cdot \frac{Z_0}{A_0}\end{aligned}\quad (2.3)$$

unde $Z_{UCD}(A)$ provine din comportamentul sistematic numit *Unchanged Charge Distribution* exprimat anterior în funcție de A_0 și Z_0 ale nucleului fisionant, iar $\Delta Z(A)$ poartă numele de polarizare de sarcină. Probabilitatea de apariție a fiecărei valori Z pentru o valoare A dată se exprimă prin intermediul distribuției izobare de sarcină care este o Gaussiană cu abatere standard $\text{rms}(A)$ și centrată pe valoarea $Z_p(A)$:

$$p(Z, A) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \text{rms}(A)} e^{-\frac{(Z - Z_p(A))^2}{2 \text{rms}(A)^2}} \quad (2.4)$$

în care valorile $\Delta Z(A)$ și $\text{rms}(A)$ (*root mean square*) sunt furnizate în mod uzual de modelul Z_p al lui Wahl [52]. Dacă nu există valori corespunzătoare pentru parametrii de intrare ai modelului Z_p în cazul de fisiune studiat, atunci se pot folosi valorile medii $\langle \text{rms} \rangle = 0.6$ și $\langle \Delta Z \rangle = \pm |0.5|$ având semnul minus pentru fragmentele grele și semnul plus pentru cele ușoare. Fiecărei fragmentări obținute prin metoda descrisă anterior i se atribuie o valoare TKE, astfel încât toate configurațiile plauzibile (A, Z, TKE) să fie luate în considerare de către modelul de calcul. Rezultatele primare ale modelului DSE se regăsesc sub forma de matrici care vor avea forma generică $q_k(A, Z, \text{TKE})$, q_k făcând referire la mărimi fizice importante din emisia promptă precum: temperatura și energia nucleelor reziduale, energia medie a neutronilor prompti în sistemul centrului de masă ș.a.m.d.. Matricile q_k sunt indexate la fiecare configurație (A, Z, TKE) din domeniul fragmentărilor, atât din zona fragmentelor inițiale ușoare cât și din cea a fragmentelor inițiale grele, precum și la fiecare secvență de emisie k . Este posibilă de asemenea obținerea rezultatelor mediate pe toate secvențele de emisie ale q_k :

$$q(A, Z, \text{TKE}) = \frac{1}{k_{\max}(A, Z, \text{TKE})} \sum_{k=1}^{k_{\max}} q_k(A, Z, \text{TKE}) \quad (2.5)$$

Pentru a putea compara rezultatele furnizate de modelul DSE cu diferite seturi de date experimentale disponibile este necesară medierea acestora pe distribuția fragmentelor inițiale $Y(A, Z, \text{TKE})$, astfel încât să rezulte distribuții uni-parametrice de forma $q(A)$, $q(Z)$, $q(\text{TKE})$, sau mărimi medii totale $\langle q \rangle$:

$$\begin{aligned} \langle q \rangle &= \frac{\sum_{A, Z, \text{TKE}} q(A, Z, \text{TKE}) \cdot Y(A, Z, \text{TKE})}{\sum_{A, Z, \text{TKE}} Y(A, Z, \text{TKE})} \\ \tilde{q}(A) &= \frac{\sum_{Z, \text{TKE}} q(A, Z, \text{TKE}) \cdot Y(A, Z, \text{TKE})}{\sum_{Z, \text{TKE}} Y(A, Z, \text{TKE})} \\ \tilde{q}(Z) &= \frac{\sum_{A, \text{TKE}} q(A, Z, \text{TKE}) \cdot Y(A, Z, \text{TKE})}{\sum_{A, \text{TKE}} Y(A, Z, \text{TKE})} \\ \tilde{q}(\text{TKE}) &= \frac{\sum_{A, Z} q(A, Z, \text{TKE}) \cdot Y(A, Z, \text{TKE})}{\sum_{A, Z} Y(A, Z, \text{TKE})} \end{aligned} \quad (2.6)$$

De cele mai multe ori, distribuțiile experimentale sunt furnizate sub forma de distribuții duble $Y(A, TKE)$, matricea $Y(A, Z, TKE)$ folosită în calculele de mediere fiind calculată astfel:

$$Y(A, Z, TKE) = p(Z, A) \cdot Y(A, TKE) \quad (2.7)$$

unde $p(Z, A)$ este distribuția izobară de sarcină dată de ecuația (2.4).

Rezolvarea ecuațiilor secvențiale în emisia promptă

Pentru a rezolva ecuațiile modelului secvențial de emisie promptă este necesar să se țină cont de următoarele aspecte ce vor fi detaliate în următoarele secțiuni ale acestui capitol:

1. În cazul primei secvențe de emisie indexată $k = 1$ apare termenul $\bar{E}_r^0 = E^*$ care reprezintă energia de excitație a fragmentului total accelerat înaintea emisiei prompte. Această energie se obține folosind diferite metode de *partiționare a TXE* pentru fiecare pereche de fragmente complementare din domeniul fragmentărilor și la fiecare valoare a TKE pentru care $TXE(A, Z, TKE) > 0$.
2. Energiile de excitație ale nucleelor reziduale sunt suficient de mari pentru a considera densitățile lor de nivele în regimul de gaz Fermi, astfel fiind permisă scrierea energiei rezidualului din secvența de emisie indexată de k sub forma: $\bar{E}_r^k = a_k T_k^2$. O consecință a introducerii expresiei anterioare în ecuațiile modelului DSE este aceea că parametrul densității de nivele nu poate avea o dependență explicită de energie (așa cum este cazul în modelul superfluid al lui Ignatyuk [53]). Pentru a fi îndeplinită această cerință se vor folosi sistematici adecvate pentru determinarea parametrului densității de nivele al fragmentelor de fisiune (inițiale și reziduale) ce apar în ecuațiile secvențiale de emisie promptă (2.2).
3. Calculul energiei neutronului emis în SCM dintr-o anumită secvență implică cunoașterea formei analitice a secțiunii eficace de formare a nucleului compus în procesul invers evaporării. La finalul capitolului se vor prezenta 2 expresii analitice pentru $\sigma_c(\varepsilon)$, precum și modul în care acestea determină rezolvarea ecuațiilor secvențiale (2.2).

Partiționarea energiei totale de excitație

În literatura de specialitate se folosește exprimarea *partiționare TXE* atunci când se face referire la determinarea energiilor de excitație ale fragmentelor complementare total accelerate înainte de emisia promptă, deși partiționarea propriu-zisă are loc în momentul sciziunii. Motivul este că există și metode de partiționare care nu se bazează pe modelări la sciziune, ci împart TXE în mod direct prin utilizarea anumitor parametrizări rezultate în urma modelării la sciziune sau prin fitul datelor experimentale ale multiplicității neutronilor prompti $\nu(A)$. Un exemplu de parametrizare menționată anterior este raportul temperaturilor fragmentelor complementare la accelerare totală $R_T = \frac{T_L}{T_H}$ despre care se discută în ref. [54].

Rezultatul final în urma aplicării metodelor de partiționare TXE pentru fiecare fragmentare și valoare a TKE este matricea energiilor de excitație a fragmentelor inițiale total accelerate $E^*(A, Z, TKE)$, configurațiile cu sens fizic în care se poate partiționa TXE fiind acelea unde $TXE(A, Z, TKE) > 0$. Calculul valorii TXE pentru fiecare configurație (A, Z, TKE) se realizează folosind ecuația (1.2), cu precizarea că se va omite de acum înainte menționarea explicită a configurației (A, Z, TKE) pentru a nu încărca suplimentar textul și expresiile matematice:

$$\text{TXE}(A, Z, \text{TKE}) = Q(A, Z) + E_{\text{CN}}^* - \text{TKE} \quad (2.8)$$

Bilanțul energiilor de excitație corespunzătoare perechii de fragmente de fisiune complementare aflate la accelerare totală are următoarea expresie:

$$\text{TXE} = E_{\text{L}}^* + E_{\text{H}}^* \quad (2.9)$$

Scopul oricărei metode de partiționare a TXE este determinarea energiilor de excitație E_{L}^* și E_{H}^* ale fiecărui fragment de fisiune total accelerat din ecuația (2.9), acestea fiind clasificate după cum urmează:

1. Metode de partiționare bazate pe ipoteze fizice despre ceea ce se întâmplă în momentul sciziunii, numite metode de partiționare cu modelare la sciziune.
2. Metode de partiționare care evită ceea ce se întâmplă la sciziune, caz în care partajarea TXE se realizează direct la accelerare totală în acord cu diferite parametrizări.

Partiționarea TXE cu modelare la sciziune

Modelarea la sciziune ține cont de următoarele ipoteze bazate pe considerente fizice [55]:

1. Fragmentele de fisiune sunt mult mai deformate la momentul sciziunii decât la accelerarea lor totală. În consecință, diferența dintre energia de deformare a fragmentului la sciziune și cea la accelerare totală se regăsește ca energie de excitație suplimentară a fragmentului total accelerat față de energia de excitație dobândită în momentul sciziunii, aceasta purtând numele de *energie de extra-deformare*:

$$\Delta E_{\text{def}} := E_{\text{def}}(\beta_2^{\text{sc}}) - E_{\text{def}}(\beta_2^{\text{a.t.}}) \quad (2.10)$$

Energia de deformare a unui nucleu se definește ca fiind diferența dintre energia acelui nucleu deformat (dată de un model colectiv) și energia aceluiași nucleu (același A și același Z) considerat sferic:

$$E_{\text{def}}(A, Z, \beta_2) := E_{\text{col.}}(A, Z, \beta_2) - E_{\text{col.}}(A, Z, 0) \quad (2.11)$$

De regulă, modelul colectiv folosit pentru calcularea energiilor de deformare este modelul picătura de lichid (*Liquid Drop Model*), ceea ce determină scrierea ecuației (2.11) ca:

$$E_{\text{def}}(\beta_2) = E_{\text{LDM}}(\beta_2) - E_{\text{LDM}}(0) \quad (2.12)$$

unde β_2 este parametrul de deformare cvadrupolar, iar $\beta_2 = 0$ denotă forma sferică.

Expresia energiei de excitație asociate fiecărui fragment inițial de fisiune total accelerat devine astfel:

$$E_{\text{L,H}}^* = E_{\text{sc}}^{\text{L,H}} + \Delta E_{\text{def}}^{\text{L,H}} \quad (2.13)$$

Iar includerea ecuației (2.13) în ecuația (2.9) conduce la:

$$\begin{aligned} \text{TXE} &= E_{\text{L}}^* + E_{\text{H}}^* \\ &= E_{\text{sc}}^{\text{L}} + \Delta E_{\text{def}}^{\text{L}} + E_{\text{sc}}^{\text{H}} + \Delta E_{\text{def}}^{\text{H}} \\ &= E_{\text{sc}}^* + \Delta E_{\text{def}}^{\text{L}} + \Delta E_{\text{def}}^{\text{H}} \end{aligned} \quad (2.14)$$

2. Fragmentele de fisiune complementare se află într-o stare de echilibru termodinamic la momentul sciziunii, iar densitățile lor de nivele se află în regimul de gaz Fermi:

$$\left. \begin{aligned} T_L^{\text{sc}} &= T_H^{\text{sc}} \\ E_{\text{sc}}^{L,H} &= a_{L,H} T_{L,H}^2 \end{aligned} \right\} \Rightarrow \frac{E_{\text{sc}}^L}{E_{\text{sc}}^H} = \frac{a_L}{a_H} \quad (2.15)$$

Folosind relațiile (2.14) și (2.15) determinate în urma aplicării celor două ipoteze obținem următorul sistem cu două ecuații și două necunoscute:

$$\left\{ \begin{aligned} E_{\text{sc}}^L + E_{\text{sc}}^H &= \text{TXE} - \Delta E_{\text{def}}^L + \Delta E_{\text{def}}^H \\ \frac{E_{\text{sc}}^L}{E_{\text{sc}}^H} &= \frac{a_L}{a_H} \end{aligned} \right. \quad (2.16)$$

Rezolvarea sistemului de ecuații admite următoarele soluții pentru energia de excitație partiționată în momentul sciziunii:

$$E_{\text{sc}}^{L,H} = \frac{\text{TXE} - \Delta E_{\text{def}}^L + \Delta E_{\text{def}}^H}{1 + \frac{a_{H,L}}{a_{L,H}}} \quad (2.17)$$

Includerea soluțiilor (2.17) în ecuația (2.13) permite aflarea energiilor de excitație corespunzătoare fragmentelor de fisiune total accelerate.

Partiționarea TXE folosind diferite parametrizări

În cadrul implementării modelului DSE descrisă în această lucrare au fost folosite două metode de partiționare directă a TXE la accelerare totală ce evită modelarea la sciziune [14]:

1. Partiționarea TXE în baza raportului $\frac{E_H^*}{\text{TXE}}$ (A_H), care se obține în urma modelării la sciziune într-un cod de calcul separat.
2. Partiționarea TXE prin utilizarea raportului temperaturilor fragmentelor inițiale la accelerare totală $R_T = \frac{T_L}{T_H}$ în felul următor:

$$\begin{aligned} R_T = \frac{T_L}{T_H} &\Rightarrow R_T^2 = \frac{T_L^2}{T_H^2} \Rightarrow \frac{a_L}{a_H} R_T^2 = \frac{E_L^*}{E_H^*} \Rightarrow E_L^* = E_H^* \frac{a_L}{a_H} R_T^2 \\ \text{TXE} = E_L^* + E_H^* &= E_H^* \left(1 + \frac{a_L}{a_H} R_T^2 \right) \Rightarrow \frac{E_H^*}{\text{TXE}} = \frac{1}{1 + \frac{a_L}{a_H} R_T^2} \end{aligned} \quad (2.18)$$

Determinarea parametrizărilor $R_T = \text{constant}$ sau $R_T(A_H)$ se poate realiza în următoarele moduri:

- Prin fitul datelor experimentale ale $\nu(A)$ cu rezultatele codului de calcul care a primit la intrare diferite parametrizări ale R_T (metodă folosită în codurile CGMF [56], HF³D [57], FREYA [22]).
- Prin calculul raportului $R_T = \frac{T_L}{T_H} = \sqrt{\frac{E_L^* a_H}{E_H^* a_L}}$ pe baza rezultatelor obținute pentru E_{LH}^* la accelerare totală în urma modelării la sciziune [54].

Parametrul densității de nivele

După cum a fost menționat anterior, rezolvarea ecuațiilor de emisie secvențială din cadrul modelului DSE nu permite existența unei dependențe explicite de energie a parametrului densității de nivele, așa cum este cazul modelelor mai sofisticate, de pildă modelul superfluid al lui Ignatyuk [53]. Depășirea acestei dificultăți se realizează prin utilizarea a două sistematici fenomenologice, în speță a modelului propus de Gilbert și Cameron ce ia în calcul corecțiile de pături [58] și a modelului propus de von Egidy și Bucurescu pentru **BSFG** (*Back-Shifted Fermi Gas*) [59, 60]. O comparație relevantă între rezultatele celor două parametrizări incluse în implementarea curentă a modelului DSE și rezultatele modelului superfluid a fost realizată în ref. [44]:

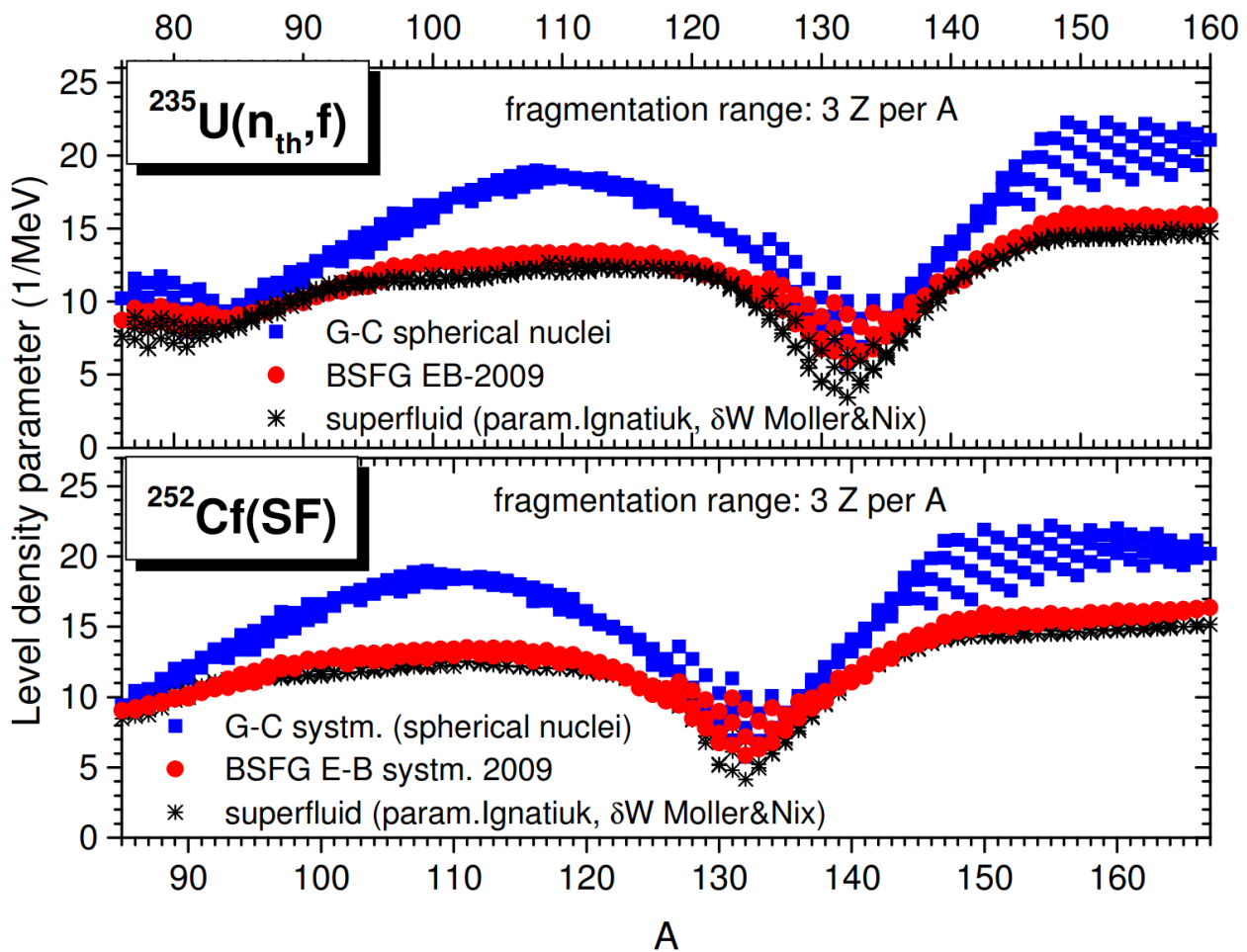


Figura 2.1: Figura preluată din ref. [44] redă fidelitatea rezultatelor sistematicii Egidy-Bucurescu (roșu) față de rezultatele modelului superfluid (negru) pe întregul interval al fragmentărilor de interes pentru studiul emisieii prompte. Diferențe semnificative apar în zona fragmentelor grele cu numărul de masă în apropierea valorii $A = 130$ din cauza numerelor magice de neutroni ($N = 82$) și protoni ($Z = 50$) ce indică o ocupare completă a nivelelor energetice intrinseci (de pături).

Deși utilizarea a două sistematici diferite este utilă pentru a verifica sensibilitatea anumitor rezultate față de valoarea parametrului densității de nivele, se va folosi cu preponderență modelul dezvoltat de von Egidy și Bucurescu deoarece se dovedește a fi mai consecvent cu realitatea fizică conform fig. 2.1.

Secțiunea eficace de evaporare a neutronului

În această ultimă parte a capitolului dedicat descrierii modelului DSE se va detalia modul în care alegerea diferitelor forme analitice pentru secțiunea eficace de evaporare a neutronului influențează modul de rezolvare al ecuațiilor (2.2).

Prima expresie analitică a secțiunii eficace de evaporare utilizată este cea a unei constante independente de energie: $\sigma_c(\varepsilon) = \sigma_0$. În acest caz se obțin următoarele forme ale spectrului de evaporare și momentului de ordin I:

$$\begin{aligned}\varphi(\varepsilon; T) &= \frac{\varepsilon}{T^2} e^{-\frac{\varepsilon}{T}} \\ \langle \varepsilon \rangle(T) &= \int_0^\infty \varepsilon \varphi(\varepsilon; T) d\varepsilon = 2T\end{aligned}\tag{2.19}$$

Introducerea expresiei analitice a energiei neutronului emis în SCM din secvența k în ecuația (2.2) permite obținerea temperaturilor nucleelor reziduale pentru fiecare secvență de emisie sub forma de soluții ale unei ecuații polinomiale de gradul al doilea:

$$\begin{aligned}\overline{E}_r^{(k-1)} - S_n^{(k-1)} - \langle \varepsilon \rangle_k &= a_k T_k^2 \\ \Rightarrow a_k T_k^2 + 2T_k - (\overline{E}_r^{(k-1)} - S_n^{(k-1)}) &= 0 \\ \Rightarrow T_k &= \frac{1}{a_k} \left[\sqrt{1 + a_k (\overline{E}_r^{(k-1)} - S_n^{(k-1)})} - 1 \right]\end{aligned}\tag{2.20}$$

O altă propunere pentru forma analitică a secțiunii eficace de evaporare este sugerată de către Iwamoto în ref. [61] ca fiind o sumă dintre termenul constant $\sigma_0 = \pi R^2 = \pi r_0^2 A^{\frac{2}{3}}$ și un alt termen ce depinde de funcția de forță a neutronului de undă s:

$$\sigma_s(\varepsilon) = \frac{\pi}{k^2} T_0 = \frac{(\pi \hbar)^2}{m \sqrt{\varepsilon}} S_0 = \frac{\sigma_0 \alpha}{\sqrt{\varepsilon}}\tag{2.21}$$

unde $k = \frac{\sqrt{2m\varepsilon}}{\hbar}$ este numărul de undă, $T_0 = 2\pi \sqrt{\varepsilon} S_0$ reprezintă coeficientul de transmisie al neutronului de undă s, iar $\alpha = \frac{\pi \hbar^2}{m r_0^2 A^{\frac{2}{3}}} S_0$. Se obține în acest fel forma compactă a expresiei analitice corespunzătoare secțiunii eficace de evaporare variabilă:

$$\sigma_c(\varepsilon) = \sigma_0 \left(1 + \frac{\alpha}{\sqrt{\varepsilon}} \right)\tag{2.22}$$

Noua formă a secțiunii de evaporare determină expresiile corespunzătoare ale spectrului de evaporare și momentului de ordin I:

$$\begin{aligned}\varphi(\varepsilon; T) &= \frac{\varepsilon + \alpha \sqrt{\varepsilon}}{T^{\frac{3}{2}} (\sqrt{T} + \frac{\alpha \sqrt{\pi}}{2})} e^{-\frac{\varepsilon}{T}} \\ \langle \varepsilon \rangle(T) &= \frac{T \left(2\sqrt{T} + \frac{3\alpha \sqrt{\pi}}{4} \right)}{\sqrt{T} + \frac{\alpha \sqrt{\pi}}{2}}\end{aligned}\tag{2.23}$$

În acest caz, ecuația (2.2) nu se va mai reduce la o ecuație polinomială, ci devine o ecuație transcendentă care se rezolvă numeric prin diferite metode specifice ecuațiilor neliniare:

$$\begin{aligned}
 \overline{E}_r^{(k-1)} - S_n^{(k-1)} - \langle \varepsilon \rangle_k &= a_k T_k^2 \\
 \Rightarrow a_k T_k^2 + T_k \frac{2\sqrt{T_k} + \frac{3\alpha_k\sqrt{\pi}}{4}}{\sqrt{T_k} + \frac{\alpha_k\sqrt{\pi}}{2}} - (\overline{E}_r^{(k-1)} - S_n^{(k-1)}) &= 0 \\
 \Rightarrow f(T_k) &= 0
 \end{aligned} \tag{2.24}$$

Justificarea complexității matematice și computaționale adăugate de folosirea unei secțiuni eficiente de evaporare variabilă este dată de gradul ridicat de precizie în reproducerea rezultatelor numerice obținute pentru energiile medii ale neutronilor emiși $\langle \varepsilon \rangle(T)$ calculate cu modele statistice și potențiale optice (de exemplu *Becchetti-Greenlees & Koning-Delaroche*), după cum reiese din fig. 2.2:

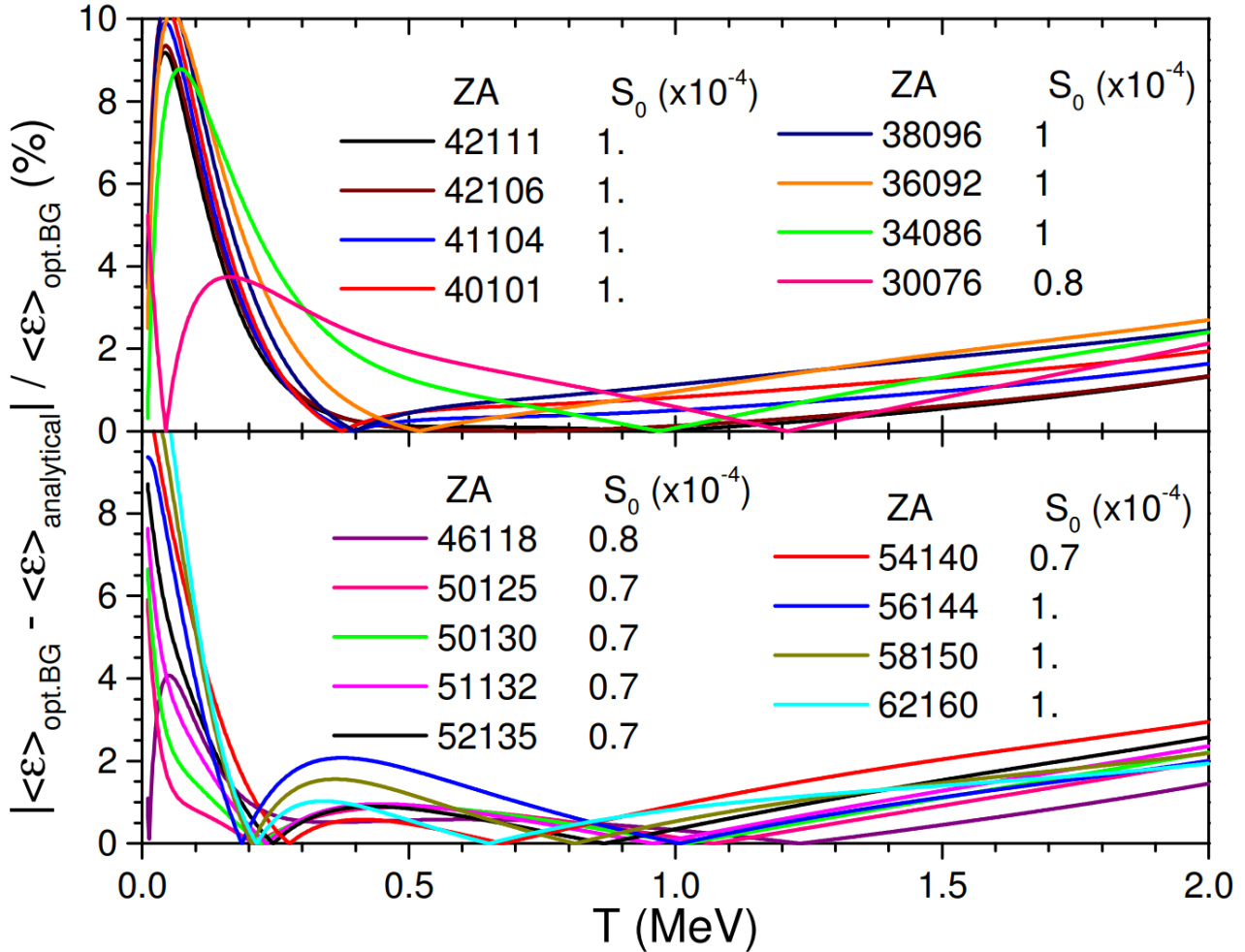


Figura 2.2: Figura preluată din ref. [44] arată diferențele relative dintre valorile $\langle \varepsilon \rangle(T)$ calculate folosind expresia analitică a secțiunii de evaporare a neutronului detaliată anterior și cele obținute prin integrarea numerică a spectrului de evaporare folosind parametrizări fenomenologice și calcule de model optic pentru $\sigma_c(\varepsilon)$.

Implementarea modelului DSE în limbajul *Julia*

Limbajul de programare Julia a început să fie dezvoltat în anul 2012 în cadrul unui colectiv academic al MIT (*Massachusetts Institute of Technology*) [51] cu intenția de a îmbina caracteristicile limbajelor de programare utilizate cel mai des în sfera calculului științific și a analizei de date. Julia a fost concepută pentru a satisface nevoia de viteză, eficiență, dinamism și ușurință în utilizare pentru non-programatori prin combinarea atributelor limbajelor de programare interpretate cum ar fi *Python* (ușurință de utilizare), cu cele ale limbajelor de programare compilate precum *C* și *Fortran* (rapiditate și eficiență în ceea ce privește timpul de execuție și memoria alocată). Printre caracteristicile specifice limbajului de programare Julia ce îl fac potrivit pentru calculul științific și analiza de date se numără:

1. Un sistem cu tip dinamic al variabilelor (*dynamic type system*) cu polimorfism parametric ce facilitează scrierea de cod generic și adaptabil, capabil să gestioneze lucrul cu diverse tipuri de structuri de date. Julia are capacitatea de a deduce tipul variabilelor și expresiilor în timpul procesului de compilare (*type inference*), ceea ce ajută la optimizarea codului rezultat.
2. Trimiterea cu referință multiplă (*multiple dispatch*), o paradigmă de programare care determină cea mai potrivită modalitate de execuție a codului luând în considerare tipul tuturor argumentelor ce aparțin unui set de instrucțiuni (subrutine sau funcții).
3. Utilizarea unui compilator **JIT** (*Just In Time*) care generează cod mașină nativ înaintea execuției propriu-zise, fapt ce îi permite limbajului Julia să aibă viteza și eficiența asociate în mod obișnuit cu limbajele compilate, păstrând în același timp interactivitatea și productivitatea asociate limbajelor interpretate. Compilatorul **JIT** este implementat folosind cadrul **LLVM** (*Low Level Virtual Machine*) proiectat pentru construirea de compilatoare și optimizarea codului în funcție de arhitectura unității logice care execută instrucțiunile de calcul. Interacțiunea dintre utilizator și limbaj se realizează prin intermediul **REPL** (*Read-Evaluate-Print Loop*) integrată într-un **IDE** (*Integrated Development Environment*) sau într-o interfață cu linie de comandă.
4. Includerea unui manager integrat de extensii și librării de subrutine (*package manager*) ce facilitează instalarea și gestionarea dependențelor și versiunilor acestora, permițând astfel crearea de medii de lucru reproductibile pentru execuția diferitelor proiecte și coduri pe unități de calcul diferite.
5. Existența unei interfețe pentru folosirea subrutinelor din exteriorul codului principal (*Foreign Function Interface*) facilitează apelarea directă a funcțiilor scrise în alte limbaje de programare, cum ar fi C, Fortran sau Python. Această interfață elimină nevoia scrierii unui cod de legătură suplimentar, promovând astfel interoperabilitatea Julia cu

alte limbaje de programare (utilă atunci când se impune folosirea de coduri și subrutine moștenite, sau *legacy* [62, 63]).

6. Un cadru de lucru standardizat pentru implementarea calculului paralel și distribuit ce urmărește utilizarea eficientă a resurselor computaționale ale procesoarelor și clusterelor folosite în domeniul calculelor distribuite la scară largă.

Limbajul de programare Julia este o inițiativă de tip *open source* care găzduiește o comunitate dinamică de dezvoltatori și utilizatori, caracterul *open source* oferind utilizatorilor libertatea de a utiliza, modifica, și aduce contribuții limbajului și bibliotecilor de subrutine asociate. Avantajele enumerate anterior au dus la o creștere semnificativă a adopției limbajului într-un timp relativ scurt (versiunea oficială 1.0 a fost lansată în anul 2018) de multe instituții care activează în sfera cercetării, dezvoltării, calculului numeric și analizei de date, printre care: M.I.T., Stanford U., U.C. Berkeley, Pfizer, Banca Rezervei Federale din New York ș.a.. În cele ce urmează se va prezenta structura codului de calcul în care a fost implementat modelul DSE, disponibil conform ref. [64].

Structura codului de calcul

Codul de calcul este împărțit în mai multe fișiere ce conțin inițializarea structurilor de date, corpurile funcțiilor și modurile de apelare a acestora.

Fișierul principal (rădăcină) al codului are numele *main_DSE.jl*, acesta facilitând legăturile dintre toate celelalte fișiere ale programului.

Primul fișier auxiliar accesat de Julia este *init.jl*, unde instrucțiunile determină afișarea în **REPL** a timpului de pornire în format *HH:MM:SS*, stabilirea căii implicite spre folderul proiectului (necesară operațiilor de citire și scriere cu fișiere aflate în sub-foldere), verificarea existenței sub-folderului *input_data/* ce conține fișierele cu date de intrare și definirea la nivel abstract a două tipuri de structuri vectoriale ce stabilesc formatul distribuțiilor din cod: *Distribution* pentru distribuții cu parametri multipli și *Distribution_unidym* pentru distribuții cu un singur parametru.

Codul cuprins în fișierele *input.jl* și *options.jl* permite utilizatorului inițializarea anumitor variabile globale, a parametrilor necesari pentru citirea ulterioară a informațiilor din *input_data/* și selectarea opțiunilor de calcul, dintre care cele mai importante:

- Afixele numelor fișierelor de ieșire generate de cod: *file_output_identifier* și *fissionant_nucleus_identifier* de tip *String*.
- Perechea (A_0 , Z_0) corespunzătoare nucleului fisionant.
- Limitele domeniului fragmentărilor: $A_{H_{\min}}$, $A_{H_{\max}}$.
- Intervalul de valori și pasul TKE.
- Tipul fisiunii: fisiune spontană (*SF*), sau fisiune indusă de neutroni (n, f).
- Alegerea sistematicii pentru calculul parametrului densității de nivele: Gilbert-Cameron (*GC*) sau Egidy-Bucurescu (*BSFG*).
- Prescripția pentru secțiunea de evaporare a neutronului: constantă sau variabilă.
- Numărul de Z per A din domeniul fragmentărilor.

- Metoda de partiționare a TXE.
- Variabilele booleene cu prefixul *secondary_output* ce permit utilizatorului alegerea operațiunilor secundare efectuate de cod: medieri pe distribuția $Y(A,Z,TKE)$, calculul distribuțiilor mărimilor în urma emisiei prompte, calculul spectrului de neutroni și realizarea de reprezentări grafice în Julia.

În urma parcurgerii instrucțiunilor anterioare, programul execută secvențele de verificare din *error_handling.jl* menite să identifice neconcordanțe în formatul sau valorile parametrilor de intrare furnizați. Programul va afișa în **REPL** un mesaj de eroare specific în cazul în care există nereguli depistate de secvențele de verificare.

Fișierul *aux_func.jl* conține în prima parte cod ce inițializează structuri de date și citește datele de intrare din fișiere conform specificațiilor din *input.jl* și *options.jl*. În cea de-a doua parte a fișierului sunt definite corpurile următoarelor funcții de calcul:

1. **Most_probable_charge** returnează valoarea Z_p conform (2.3).
2. **p_A_Z** calculează valoarea distribuției izobare de sarcină (2.4) pentru argumentele $Z, Z_p(A) \& rms(A)$ date la intrare.
3. **Q_value_released** calculează $Q(A,Z)$ folosind ecuația (1.1). Funcția va returna valoarea *NaN* (*Not a Number*) în cazul în care $Q < 0$ sau excesele de masă pentru unul din fragmentele ușor sau greu nu au putut fi găsite în fișierul furnizat la intrare.
4. **Separation_energy** determină energia de separare a unei particule (A_{part}, Z_{part}) dintr-un nucleu (A,Z) dată prin ecuația:

$$S = \Delta(A - A_{part}, Z - Z_{part}) + \Delta(A_{part}, Z_{part}) - \Delta(A, Z)$$

Funcția verifică existența exceselor de masă implicate în formula de calcul în mod similar funcției descrise anterior.

5. **Compound_nucleus_energy** verifică tipul fisiunii specificat în *input.jl* și returnează valoarea 0 în cazul fisiunii spontane (*SF*) sau valoarea energiei de excitație a nucleului compus în cazul fisiunii induse de neutroni (n, f).
6. **Total_excitation_energy** calculează valoarea TXE conform ecuației (2.8) și o returnează în cazul în care este pozitivă, sau returnează valoarea *NaN* în cazul în care $TXE < 0$.
7. **Fragmentation_domain** construiește domeniul fragmentărilor într-o structură vectorială de tip *Distribution* cu elementele sortate crescător după numărul de masă **A**, apoi după numărul de protoni **Z**. În câmpul de date numit sugestiv *Value* sunt stocate valorile $p(Z, A)$.
8. **Energy_FermiGas** determină energia în regim de gaz Fermi: $E = aT^2$ pentru valorile a și T date la intrare.
9. **Average_neutron_energy** calculează energia medie a neutronului emis în SCM $\langle \varepsilon \rangle_k$ pentru valoarea T_k dată (în cazul σ_c constantă) sau pentru valorile α_k și T_k date (în cazul σ_c variabilă). Polimorfismul parametric permite existența a multiple definiții ale funcției având același nume atâta timp cât între acestea există diferențe în numărul sau tipul argumentelor.

10. **Process_main_output** construiește obiectul vectorial ce conține mărimile principale obținute în urma rezolvării ecuațiilor modelului DSE care vor fi folosite mai departe în cod.
11. **Sort_q_A_Z_TKE** sortează orice structură generică de forma $q(A, Z, TKE)$ în mod crescător după A , apoi după Z și apoi după TKE .
12. **Maximum_sequences_A_Z_TKE** construiește structura $n(A, Z, TKE)$ de tip *Distribution* ce reține valorile numărului maxim de secvențe de emisie pentru fiecare configurație posibilă (A, Z, TKE) .
13. **Neutron_multiplicity_A_Z_TKE** calculează valoarea $\nu(A, Z, TKE)$ pe baza $n(A, Z, TKE)$ la fiecare configurație (A, Z, TKE) utilizând medierea pe secvențele de emisie în felul următor:

$$\begin{aligned}
\nu(A, Z, TKE) &= \frac{1}{n(A, Z, TKE)} \sum_{k=1}^{n(A, Z, TKE)} k = \\
&= \frac{1}{n} \frac{n(n+1)}{2} \\
&= \frac{n+1}{2}, \forall n \in \mathbb{N}^*
\end{aligned} \tag{3.1}$$

Funcția reține valorile calculate într-o structură vectorială generică asemănătoare celei din funcția anterioară.

14. **Neutron_multiplicity_Pair_A_Z_TKE** produce structura în care se rețin valorile $\nu_{\text{pair}}(A, Z, TKE)$ folosind datele din $\nu(A, Z, TKE)$.
15. **SeqAvg_A_Z_TKE** mediază structurile generice de forma $q_k(A, Z, TKE)$ date la intrare pe secvențele de emisie conform ecuației (2.5) și returnează noua matrice $\tilde{q}(A, Z, TKE)$.

Următorul fișier accesat de program se numește *density_parameters.jl* și conține definițiile funcțiilor (2 funcții de calcul și o funcție selector între acestea numită **density_parameter**) ce calculează parametrul densității de nivele pentru un fragment dat (A, Z) și pentru tipul sistematiei specificată în datele de intrare prin variabila *density_parameter_type*.

Fișierul numit *txe_partitioning.jl* cuprinde instrucțiunile ce realizează calculele de partiționare a TXE folosind fie modelarea la sciziune, fie parametrizările $E_H^*/TXE(A_H)$, & $R_T(A_H)$ furnizate prin segmente racordate. Numele comun al funcțiilor de calcul și a funcției selector este **TXE_partitioning** (lucru posibil datorită polimorfismului parametric), iar cel al funcției auxiliare pentru lucrul cu segmente racordate este **Segments_TXE_partitioning**. Obiectivul funcțiilor din acest fișier este furnizarea structurii vectoriale $E^*(A, Z, TKE)$ ce conține valorile energiilor de excitație ale fragmentelor inițiale total accelerate pentru toate configurațiile fizice (A, Z, TKE) .

În cadrul fișierului *dse_eq_solvers.jl* se află partea programului responsabilă cu rezolvarea ecuațiilor modelului DSE (2.2) pentru formele analitice ale secțiunii de evaporare a neutronului discutate în capitolul anterior. Modul în care funcțiile de calcul **DSE_equation_solver** baleiază configurațiile (A, Z, TKE) și parcurg secvențele de emisie în mod iterativ folosind condiția $\bar{E}_r^{(k-1)} > S_n^{(k-1)}$ este similar pentru ambele prescripții ale $\sigma_c(\varepsilon)$, diferența principală constând în modul de rezolvare al ecuației $f(T_k) = 0$ și găsirea soluției T_k . În cazul secțiunii de evaporare constantă există o formă analitică a soluției T_k dată de ecuația (2.20) ce este implementată în

mod direct în codul de calcul, iar în cazul secțiunii de evaporare variabilă găsierea soluției T_k implică rezolvarea numerică a ecuației transcendente (2.24). Funcția **Solve_transcendental_eq** rezolvă ecuația transcendentă folosind metoda biseției ce găsește rădăcina unică T_k în intervalul $[0, \infty)$ (vezi anexa), aceasta având implementate limite superioare și inferioare pentru valorile T_k de 2 MeV și respectiv 0.01 MeV pentru a corespunde implementării existente din codul Fortran. Rezolvarea ecuației transcendente necesită cunoașterea valorilor pentru funcția de forță a neutronului de undă s , demers realizat în implementarea curentă prin racordarea cu segmente a datelor din **RIPL-3** [65] pentru $S_0(A)$ în cadrul funcției **Neutron_strength_function** după cum este ilustrat în fig. 3.1.

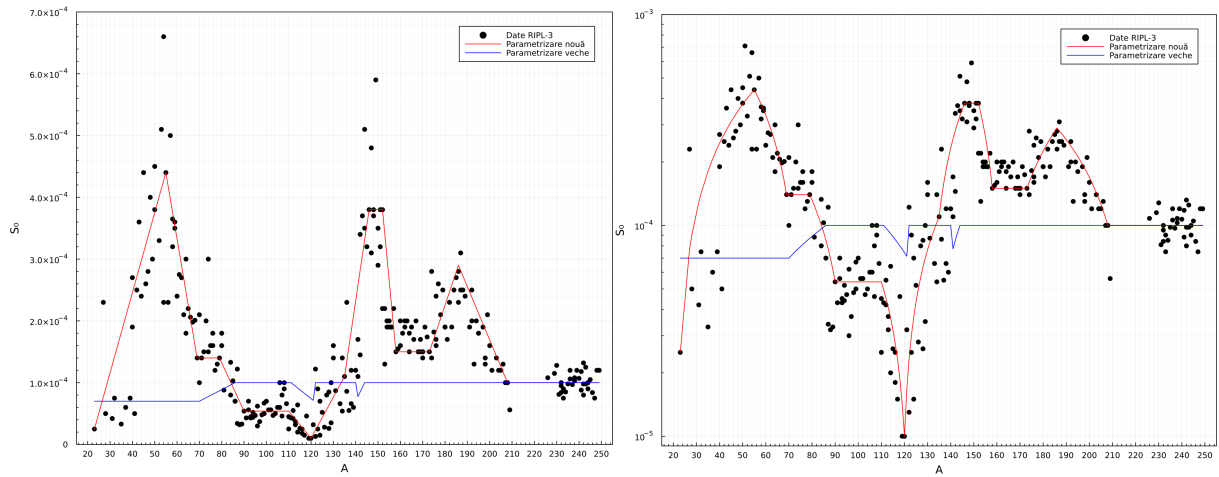


Figura 3.1: Comparație dintre parametrizarea $S_0(A)$ folosită în implementări anterioare (segmente albastre), parametrizarea $S_0(A)$ utilizată în mod curent (segmente roșii) și valorile din baza de date **RIPL-3** [65], ilustrată în scară liniară (stânga) și în scară logaritmică (dreapta).

Instrucțiunile din *write_output.jl* produc 2 fișiere de ieșire cu prefixele specificate de variabilele *file_output_identifier* și *fissionant_nucleus_identifier*: fișierul *readme.out* ce rezumă parametrii de intrare ai execuției curente a programului și fișierul *main_DSE.out* ce conține rezultatele primare ale programului. Scrierea rezultatelor în *main_DSE.out* se realizează în ordine crescătoare după A_H , apoi după Z_H și după TKE pentru fiecare fragmentare indexată de (A, Z, TKE) în felul următor: pe prima linie sunt scrise valorile A_H , Z_H , TKE, $Y(A, Z, TKE)$ sau $p(Z, A)$ (după caz), E_L^* , E_H^* , a_L^0 , a_H^0 , pe linia următoare este scrisă valoarea numărului maxim de secvențe de emisie al fragmentului ușor $n_L = n(A_L, Z_L, TKE)$, iar pe liniile succesive sunt scrise valorile corespunzătoare fiecărei secvențe de emisie (pe coloane) indexate cu $k = \{1, \dots, n_L\}$ ale mărimilor: S_n^k , a_k , T_k , \bar{E}_r^k , $\langle \varepsilon \rangle_k$ ce caracterizează fragmentul ușor. Liniile ulterioare sunt populate în mod analog cu valorile corespunzătoare fragmentului greu complementar, întreaga procedură repetându-se pentru toate configurațiile fizice (A, Z, TKE) pentru care programul a rezolvat ecuațiile succesive ale modelului DSE.

Secvențele de cod ce vor fi discutate în continuare sunt apelate de către program doar în cazul în care a fost furnizată la intrare o distribuție experimentală $Y(A, TKE)$, iar parametrii booleani dați la intrare în fișierele *input.jl* & *options.jl* au fost declarați cu valoarea *true*.

Fișierul *secondary_outputs.jl* este format din corpurile funcțiilor responsabile cu calcule ce implică folosirea distribuției $Y(A, Z, TKE)$ împreună cu instrucțiunile de apelare ale acestor funcții care realizează calcule de mediere a structurilor vectoriale primare și scriu rezultatele în fișiere de date cu nume sugestive și extensia *.dat*. Descrierea funcțiilor din acest fișier este următoarea:

1. **Process_yield_data** construiește matricea $Y(A, Z, TKE)$ de tip *Distribution* folosind datele furnizate la intrare pentru distribuția experimentală $Y(A, TKE)$ și structura creată în partea principală a programului de funcția **Fragmentation_domain**.
2. Funcțiile **Average_over_Z**, **Average_over_TKE_Z**, **Average_over_A_Z**, **Average_over_A_TKE** și **Average_value** realizează procedeele de mediere a structurilor generice de forma $q(A, Z, TKE)$ descrise în ecuațiile (2.6) și returnează structuri vectoriale cu un singur argument de tip *Distribution_unidym* în cazul medierilor realizate pe câte 2 parametri, sau valori medii totale în cazul funcției **Average_value** care mediază $q(A, Z, TKE)$ pe $Y(A, Z, TKE)$ după toți cei trei parametri. Funcția **Average_value** dispune de o definiție suplimentară prin polimorfism parametric ce îi permite calculul valorii medii totale prin furnizarea ca argumente de intrare a unei distribuții generice uni-parametrice și a distribuției de yield corespunzătoare.
3. **Yield_post_neutron** calculează distribuțiile $Y(A_p, Z, TKE)$ și $Y(A_p, Z)$ ale fragmentelor în urma emisiei neutronilor prompti având ca argumente de intrare matricile $Y(A, Z, TKE)$ și $n(A, Z, TKE)$. Funcția folosește faptul că numărul maxim de secvențe $n(A, Z, TKE)$ furnizat de modelul DSE este întotdeauna un număr întreg, astfel că și $A_p(A, Z, TKE) = A - n(A, Z, TKE)$ este tot un număr întreg [54].
4. **Kinetic_Energy_post_neutron** determină structurile vectoriale pentru energia cinetică a fragmentelor în urma emisiei prompte $KE_p(A, Z, TKE)$ și pentru energia cinetică totală a perechii de fragmente complementare $TKE_p(A, Z, TKE)$ conform următoarelor formule:

$$\begin{aligned}
 KE(A, Z, TKE) &= TKE \frac{A_0 - A}{A_0} \\
 KE_p(A, Z, TKE) &= KE(A, Z, TKE) \frac{A - n(A, Z, TKE)}{A} \\
 TKE_p(A, Z, TKE) &= KE_p(A_H, Z_H, TKE) + KE_p(A_L, Z_L, TKE)
 \end{aligned} \tag{3.2}$$

5. **Average_Kinetic_Energy_post_neutron** construiește $KE_p(A_p)$ și $TKE_p(A_p)$ de tip *Distribution_unidym* pe baza $KE_p(A, Z, TKE)$, $TKE_p(A, Z, TKE)$, $Y(A, Z, TKE)$ și $n(A, Z, TKE)$.
6. **Ratio_of_Temperatures** calculează raportul temperaturilor fragmentelor la accelerare totală $R_T(A, Z, TKE) = \frac{T_L}{T_H}$ din matricea $E^*(A, Z, TKE)$ furnizată ca argument de intrare. Funcția returnează structurile vectoriale corespunzătoare raportului $R_T(A, Z, TKE)$ și temperaturilor fragmentelor total accelerate $T_0(A, Z, TKE)$.
7. **Singular_yield_distributions** returnează următoarele distribuții de tip *Distribution_unidym* pentru matricea $Y(A, Z, TKE)$ dată la intrare: $Y(A)$, $Y(Z)$, $Y(TKE)$, $TKE(A_H)$ și $KE(A)$ sortate crescător după argumentul fiecărei distribuții.
8. **Average_yield_argument** calculează valoarea medie totală $\langle q \rangle$ a unei distribuții generice $Y(q)$ cu un singur argument.
9. **Vectorized_TXE_Q** returnează matricile $Q(A, Z)$, $Q(A)$ și $TXE(A, Z, TKE)$.
10. **Probability_of_occurrence** calculează distribuțiile de probabilitate generice $P(q)$ pentru datele din câmpul *Value* din structura $q(A, Z, TKE)$ furnizate ca argument de intrare împreună cu pasul de baleiaj Δq și cu distribuția $Y(A, Z, TKE)$.

11. **Sort_q_Argument** sortează crescător distribuția generică $q(\text{arg.})$ de tip *Distribution_unidym* după valorile argumentului.

În fișierul *neutron_spectrum.jl* se află funcțiile necesare calculului spectrului de neutroni ce este realizat de program dacă variabila booleană *neutron_spectrum* a fost declarată cu valoarea *true*. Funcția **Neutron_spectrum_builder** declanșează calculul spectrului de neutroni prin afișarea în **REPL** a timpului de start în format *HH:MM:SS*, apoi apelează una din subrutinele de calcul în funcție de tipul secțiunii eficace de evaporare a neutronului. În cadrul funcțiilor de calcul se parcurge intervalul energetic furnizat la intrare pentru care se va calcula spectrul, fiecărei valori de energie corespunzându-i un baleiaj complet al configurațiilor (A, Z, TKE). Pentru fiecare configurație (A, Z, TKE) se va calcula valoarea spectrului de neutroni în sistemul laboratorului la fiecare valoare de energie: $N(E) = w_L N_L(E) + w_H N_H(E)$ cu factorii de pondere $w_{L,H} = E_{L,H}^*/\text{TXE}$ sau $w_{L,H} = \nu_{L,H}/\nu_{\text{pair}}$, unde contribuția fiecărui fragment la spectrul din **SL** se calculează astfel:

$$N_{L,H}(E) = \int_{u_1}^{u_2} \frac{\Phi(\varepsilon)}{4\sqrt{\varepsilon E_f}} d\varepsilon \quad (3.3)$$

cu $E_{f_{L,H}} = \frac{A_{H,L}}{A_{L,H}} \frac{\text{TKE}}{A_0}$ și $u_{1,2} = (\sqrt{E} \mp \sqrt{E_f})^2$. Spectrul în **SCM** $\Phi(\varepsilon)$ se determină prin efectuarea medierii pe secvențele de emisie a spectrelor de evaporare $\varphi_k(\varepsilon; T_k)$ [44]:

$$\Phi(\varepsilon) = \frac{1}{k_{\max}} \sum_{k=1}^{k_{\max}} \varphi_k(\varepsilon; T_k) \quad (3.4)$$

Programul va scrie într-un fișier de date valorile spectrului calculat, iar pe o coloană suplimentară va scrie și valorile aceluiași spectru normat la o distribuție Maxwell echivalentă în care $T_M = \frac{2}{3} \langle E \rangle$, $\langle E \rangle$ fiind momentul de ordin I al spectrului calculat. Procedura de normare este realizată de funcția **Normalise_spectrum_to_Maxwellian** care ține seama și de diferența intervalelor energetice pe care sunt normate distribuția Maxwell teoretică, respectiv spectrul calculat de program.

Ultimul fișier auxiliar al codului de calcul este *plots.jl*. Acesta conține instrucțiuni de realizare a reprezentărilor grafice pentru mărimile calculate care sunt apelate dacă variabila *generate_plots* a fost declarată cu valoarea *true*. Suplimentar, dacă variabila *multidim_plots* are și ea valoarea *true*, programul va face reprezentări grafice interactive pentru $\nu(A, Z, \text{TKE})$ și $Y(Z, A_p)$ de tip suprafață tridimensională și respectiv hartă termografică.

Execuția codului de calcul se încheie prin afișarea în **REPL** a timpului curent în format *HH:MM:SS* și a mesajului *program execution succesful!*. În fig. 3.2 este ilustrat un exemplu de afișaj al mesajelor în interfața **REPL** ca urmare unei execuții reușite a programului.

```
*begin program execution at 23:19:38
*loading input parameters and Julia libraries
*reading AME2020.ANA done!
*reading DeltaZ_rms_A.CF52 done!
*reading CF52YATKE.VES done!
*building fragmentation domain
*partitioning Total Excitation Energy
*solving DSE energy conservation equations
*processing DSE equations primary output
*writing DSE output data to file
*averaging data over CF52YATKE.VES experimental Yield distribution
*executing data plots
*plotting nu_A done!
*plotting nuPair_AH done!
*plotting Ratio_nuH_nuPair done!
*plotting P_nu done!
*end program execution at 23:21:44
*program execution succesful!
```

Figura 3.2: Exemplu de mesaje afișate în interfața **REPL** în urma unei execuții a codului de calcul având o parte din variabilele opțiunilor secundare inițializate cu valoarea *true*, fără a include calculul spectrului de neutroni.

Rezultate obținute

În acest capitol se vor prezenta rezultatele implementării modelului DSE în limbajul de programare Julia comparate cu datele de ieșire ale implementării aceluiași model în limbajul Fortran (implementare ce a fost deja validată [66]) și cu seturi de date experimentale (acolo unde ele există). Situația studiată pentru care au fost obținute rezultatele din figurile grafice ce urmează a fi prezentate este fisiunea spontană a ^{252}Cf , iar datele de intrare relevante execuției codului de calcul sunt următoarele:

- Limitele intervalului de valori pentru numărul de masă la construcția domeniului fragmentărilor: $A_{\text{Hmin}} = 126$ & $A_{\text{Hmax}} = 174$.
- Intervalul de valori pentru TKE: de la 130 de MeV la 230 de MeV, cu un pas de 2 MeV.
- Sistemica parametrului densității de nivele: Egidy–Bucurescu *BSFG*.
- Expresia analitică a secțiunii eficace de evaporare a neutronului: variabilă.
- Numărul de valori Z per A, luate ca cei mai apropiați întregi din jurul $Z_p(A)$: 5 valori.
- Metode de partiționare a TXE: parametrizările E_H^*/TXE din modelare la sciziune și $R_T(A_H)$ cu model superfluid.
- Baza de date cu excesele de masă ale nuclizilor: AME2020.
- Distribuția experimentală $Y(A, \text{TKE})$: VESPA [67].

Primele rezultate prezentate sunt ale mărimilor Q -value și **TXE** ce caracterizează perechea de fragmente complementare total accelerate, calculul acestor mărimi fiind realizat înaintea partiționării TXE. Matricea $Q(A)$ s-a obținut prin medierea $Q(A,Z)$ pe distribuția izobară de sarcină $p(Z,A)$, iar matricile TXE(A) și TXE(TKE) provin din medierea TXE(A,Z,TKE) pe distribuția $Y(A,Z,TKE)$. Este de menționat faptul că incertitudinile valorilor calculate se datorează propagării incertitudinilor exceselor de masă din baza de date AME2020 folosite în determinarea $Q(A,Z)$.

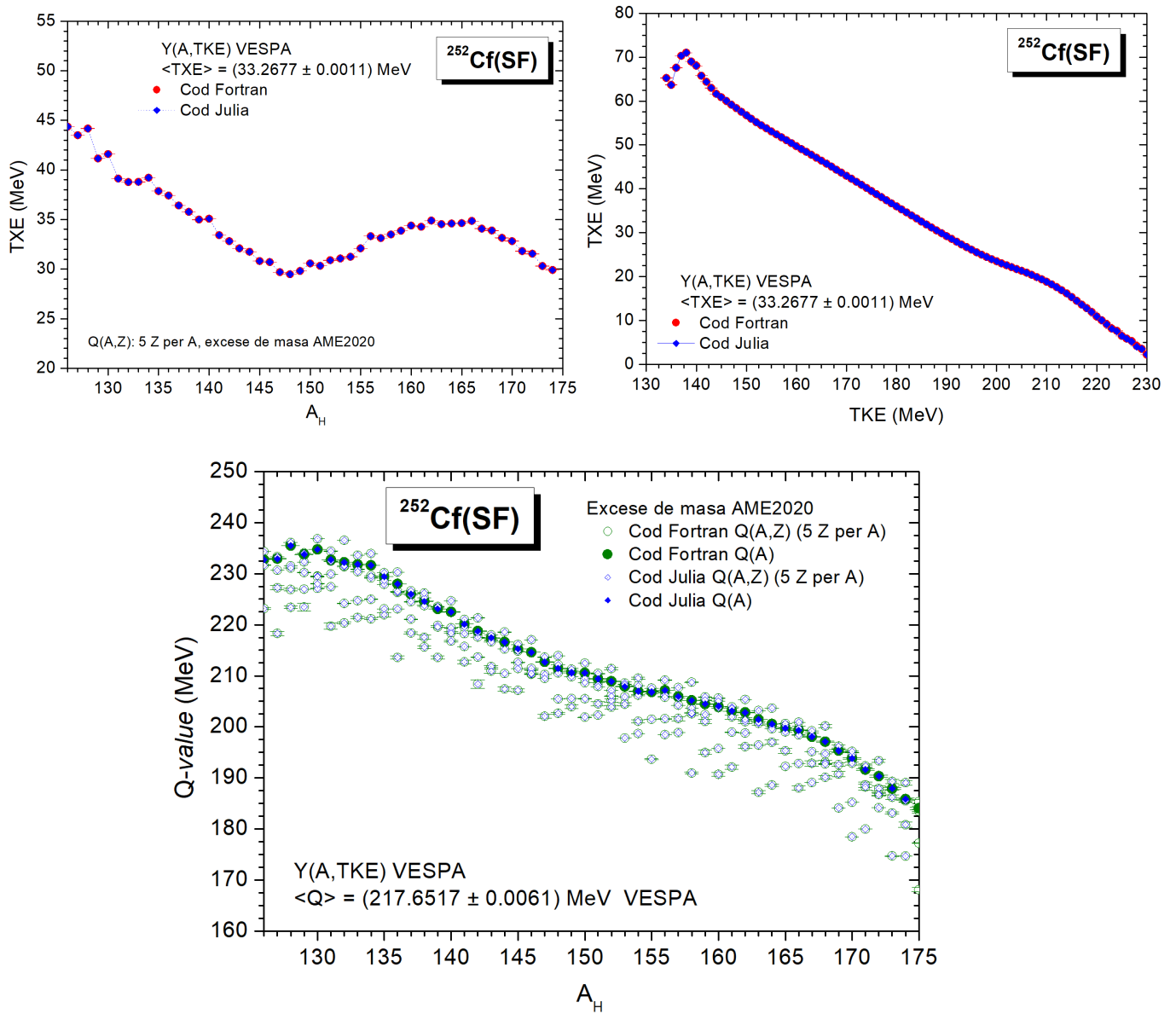


Figura 4.1: În partea de sus sunt ilustrate rezultatele pentru TXE ca funcție de A (stânga), și ca funcție de TKE (dreapta), calculate de codurile scrise în Julia (albastru) și Fortran (roșu), precum și valorile medii totale $\langle \text{TXE} \rangle$. În partea de jos se află reprezentarea grafică a matricilor $Q(A,Z)$ (simboluri goale) și $Q(A)$ (simboluri pline) obținute de codurile Julia (romburi albastre) și Fortran (cercuri verzi) împreună cu valoarea medie totală $\langle Q \rangle$.

În fig. 4.2 sunt expuse valorile energiei de excitație a fragmentelor total accelerate ca funcție de A , obținute prin medierea matricii $E^*(A, Z, TKE)$ pe distribuția $Y(A, Z, TKE)$. Matricea $E^*(A, Z, TKE)$ se determină în urma aplicării unei metode de partiționare a TXE pentru fiecare configurație (A, Z, TKE) , în cazul de față fiind folosit raportul E_H^*/TXE obținut din modelarea la sciziune.

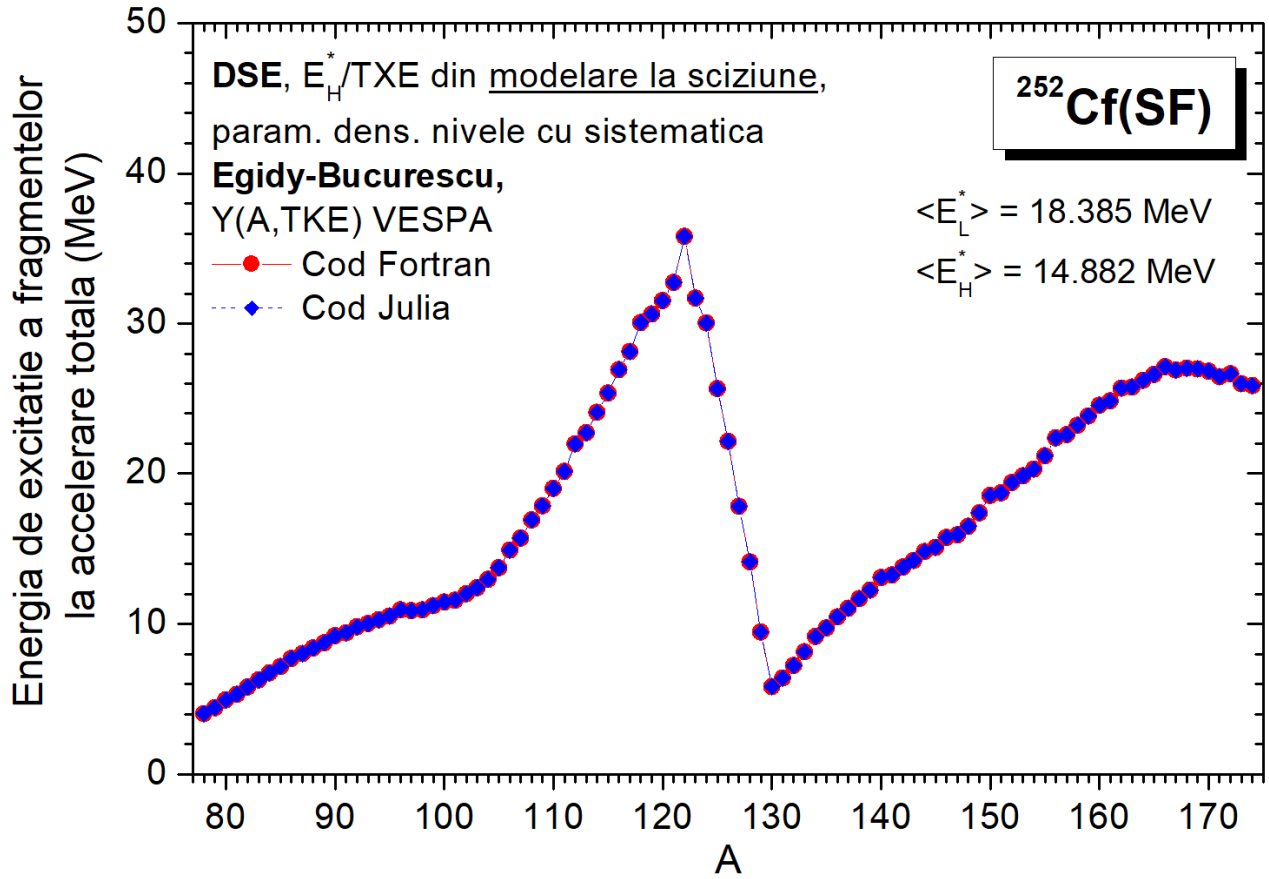


Figura 4.2: Energia de excitație a fragmentelor total accelerate ca funcție de A , determinată cu implementările Julia (albastru) și Fortran (roșu), precum și valorile medii totale corespunzătoare fragmentelor din grupurile ușor și greu. De menționat că valorile medii totale calculate cu cele două coduri diferă începând cu cea de-a patra zecimală. Se poate remarca structura cu formă de dinți de fierăstrău (*sawtooth*) a reprezentării $E^*(A)$.

Raportul temperaturilor fragmentelor total accelerate $R_T = \frac{T_L}{T_H}$ calculat în urma partiționării TXE este prezentat în fig. 4.3. Calculele au fost făcute atât cu modelul DSE prin implementările Julia și Fortran, cât și cu modelul PbP [42] care folosește modelul superfluid în determinarea parametrului densității de nivele. Variația semnificativă a $R_T(A_H)$ față de valoarea medie prezentă în cazul $^{252}\text{Cf}(\text{SF})$ sugerează faptul că nu mai este adecvată folosirea unei valori constante a raportului R_T pentru partiționarea TXE precum în cazul de fisiune $^{235}\text{U}(n_{th}, f)$ descris în ref. [54]. În consecință, au fost realizate două parametrizări ale $R_T(A_H)$ prin racordare cu segmente pe baza rezultatelor obținute cu cele 2 modele de emisie promptă.

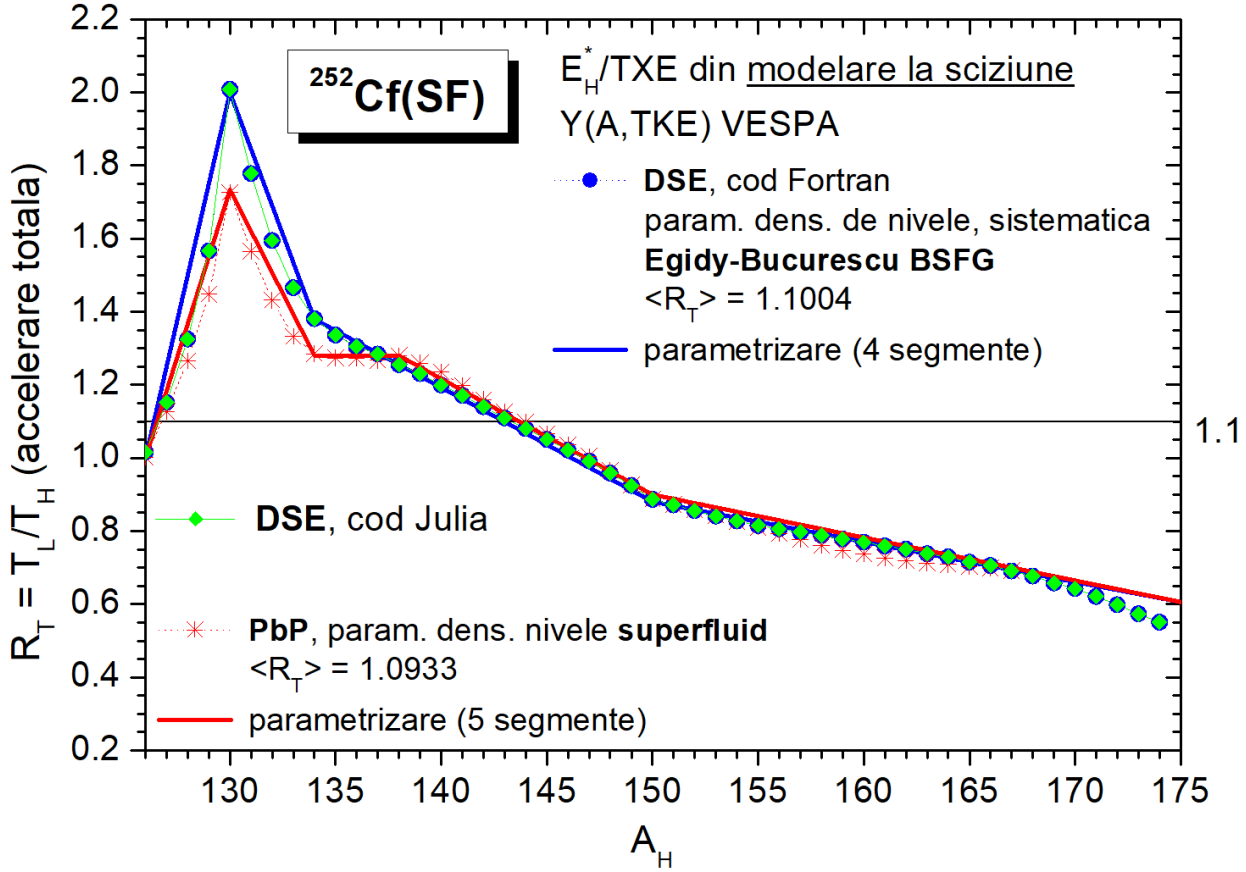


Figura 4.3: Raportul dintre temperaturile fragmentelor inițiale la accelerare totală ca funcție de A_H , calculat cu modelul DSE în implementările Julia (verde) și Fortran (albastru), precum și cu modelul PbP (roșu) în care se folosește modelul superfluid pentru a descrie parametrul densității de nivele. Se observă diferențe între rezultatele modelelor DSE și PbP în jurul valorii $A_H = 130$ datorate prescripțiilor diferite ale parametrului densităților de nivele (fig. 2.1), precum și variația $R_T(A_H)$ față de valoarea medie. În figură apar de asemenea și valorile medii totale $\langle R_T \rangle$ corespunzătoare calculelor efectuate cu cele două modele, precum și parametrizările $R_T(A_H)$ (segmente racordate).

Multiplicitatea neutronilor prompti este una din cele mai importante mărimi caracteristice emisiei prompte și beneficiază de existența multor seturi de date experimentale în cazul $^{252}\text{Cf}(\text{SF})$. Calculul matricii $\nu(A, Z, TKE)$ a fost efectuat pentru două metode de partiționare a TXE folosind parametrizările E_H^*/TXE din modelare la sciziune și $R_T(A_H)$ cu model superfluid, aceasta fiind ulterior mediată pe distribuția $Y(A, Z, TKE)$ pentru a se obține $\nu(A)$. Rezultatele codului Fortran expuse în fig. 4.4 au fost obținute în aceleași condiții ca cele ale codului Julia, cu excepția TKE care a baleiat valori în intervalul 140 MeV – 200 MeV (mai restrâns decât intervalul 130 MeV – 230 MeV precizat la începutul capitoului). În fig. 4.4 se poate vedea bunul acord dintre valorile calculate ale $\nu(A)$ și datele experimentale, excepție făcând rezultatele din jurul $A = 120$ și pentru care $A > 165$, unde rezultatele modelului DSE subestimează datele experimentale. De asemenea, în jurul valorii $A = 130$ este evidențiată influența partiționării TXE asupra $\nu(A)$ prin minimum mai puțin pronunțat al valorilor obținute cu partiționarea bazată pe $R_T(A_H)$. Forma de dinți de fierăstrău (*sawtooth*) este prezentă și în cazul $\nu(A)$, aceasta fiind o consecință a propagării efectelor de pături (nuclee magice și dublu magice) în sistematicile parametrilor densității de nivele (fig. 2.1) ale fragmentelor de fisiune în momentul sciziunii și la accelerare totală, sistematici folosite pentru calculul $E^*(A)$ care prezintă aceeași structură [68].

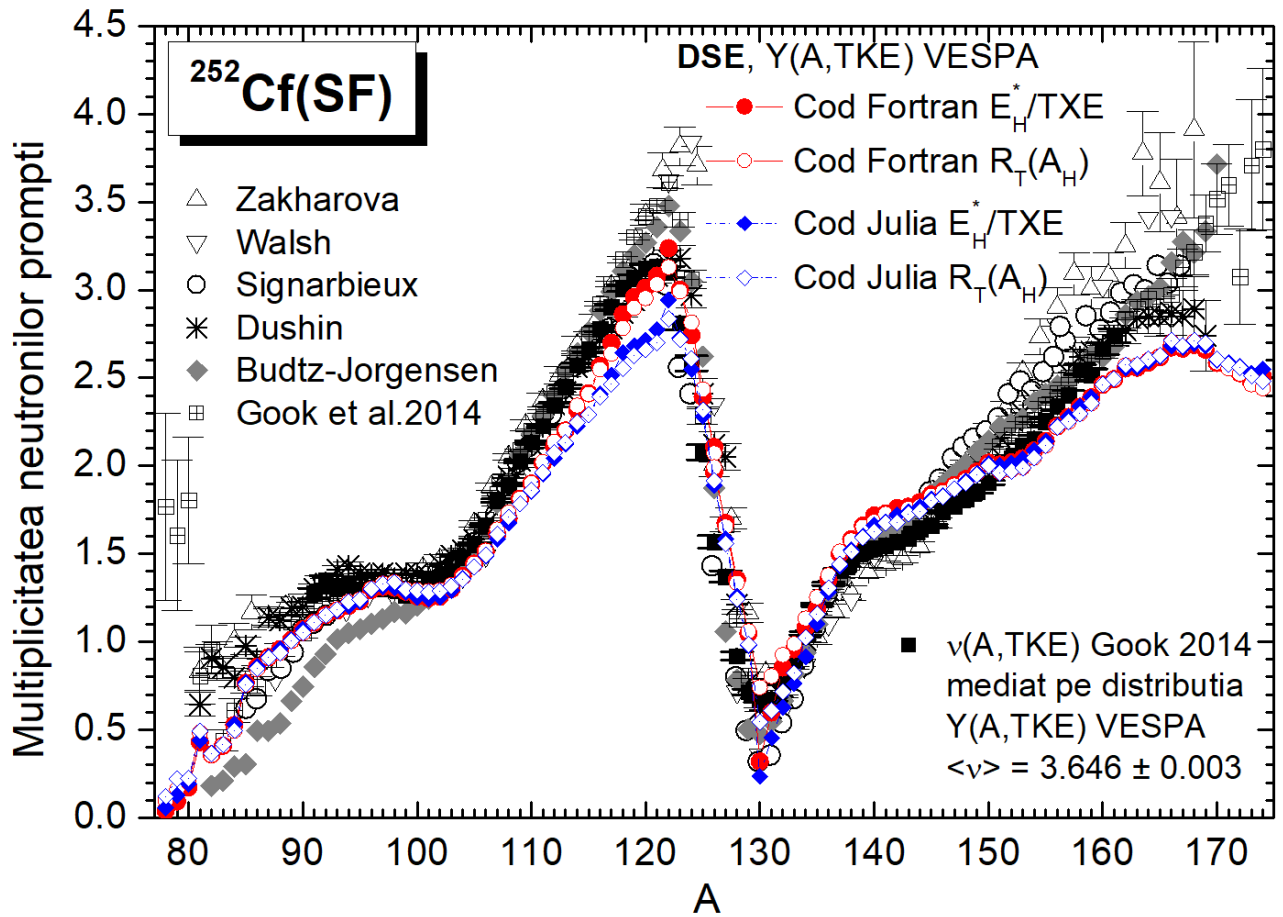


Figura 4.4: Rezultatele obținute pentru $\nu(A)$ cu implementările Julia (albastru) și Fortran (roșu), folosind partiționarea TXE bazată pe modelarea la sciziune (simboluri pline) și $R_T(A_H)$ (simboluri goale), împreună cu date experimentale (simboluri de culoare închisă). Se observă aceeași structură de tip dinți de fierăstrău (*sawtooth*) caracteristică pentru $E^*(A)$.

O particularitate importantă a modelului DSE este capacitatea de a calcula mărimile reziduale implicate în emisia promptă la fiecare secvență de emisie, distribuția temperaturilor reziduale $P(T)$ fiind un exemplu al unei astfel de mărimi cu rol semnificativ în modelele de emisie promptă cu tratare globală [44, 46, 47, 48]. Fig. 4.5 evidențiază o bună potrivire a rezultatelor celor două coduri de calcul pentru $P(T)$ și $P_k(T)$ atât în cazul fragmentelor ușoare, cât și al fragmentelor grele. Diferențele relative dintre mediile totale ale temperaturii reziduale, energiei de excitație a fragmentelor reziduale și energiei neutronului emis în SCM calculate cu implementările Julia și Fortran se află sub 1%, creșterea acestei diferențe cu numărul secvenței de emisie datorându-se propagării erorilor de trunchiere ce au loc în calculele aritmetice cu virgulă flotantă.

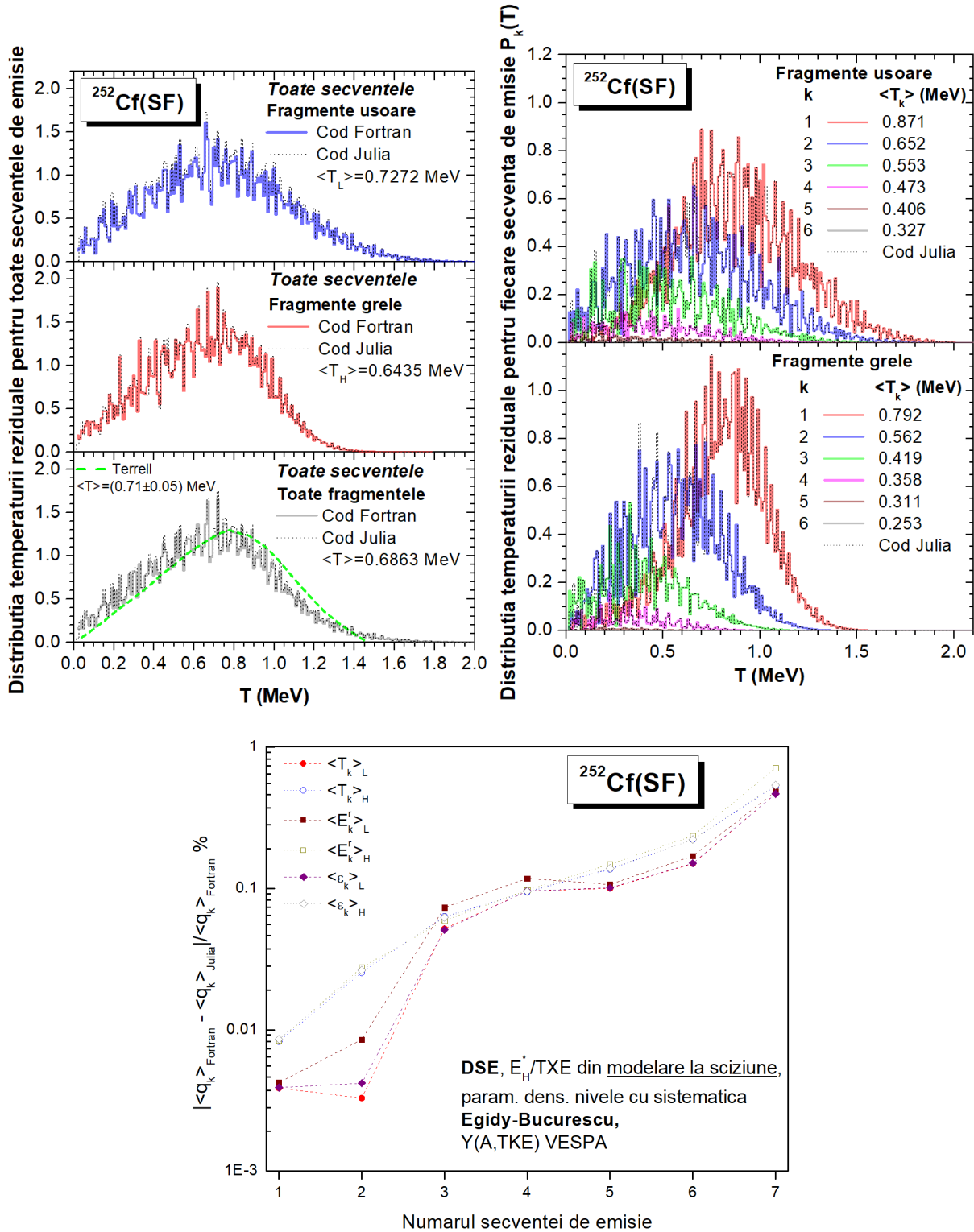


Figura 4.5: În partea de sus: distribuțiile temperaturii reziduale în cazul $^{252}\text{Cf}(\text{SF})$ pentru toate secvențele de emisie $P(T)$ (stânga) și pentru fiecare secvență de emisie $P_k(T)$ (dreapta). Rezultatele codului Fortran sunt reprezentate cu linii colorate continue, iar rezultatele codului Julia apar ilustrate cu linie punctată de culoare închisă. În fiecare grafic al figurii sunt date temperaturile medii totale, calculate ca fiind momentul de ordin I al fiecărei distribuții $P(T)$ sau $P_k(T)$. În partea de jos: diferențele relative, exprimate în procente (scară logaritmică), dintre mediile totale ale mărimilor reziduale la fiecare secvență de emisie calculate cu Fortran și Julia pentru grupul fragmentelor ușoare (simboluri pline) și grele (simboluri goale).

Distribuțiile fragmentelor în urma emisiei prompte: $Y(Z, A_p)$, $Y(A_p)$, $Y(N_p)$, precum și energiile cinetice ale acestor fragmente se calculează în cadrul modelului DSE cunoscând faptul că, la fiecare configurație (A, Z, TKE) se poate afla numărul de masă al ultimului fragment rezidual în funcție de numărul de neutroni prompti emiși folosind expresia: $A_p(A, Z, TKE) = A - n(A, Z, TKE)$.

În fig. 4.6 sunt ilustrate rezultatele obținute cu codurile de calcul scrise în Julia și Fortran pentru $Y(A_p)$, acestea aflându-se în acord cu datele experimentale și evidențiind maxime și minime în structura distribuției în jurul valorilor $A_p = 142$ și $A_p = 106$.

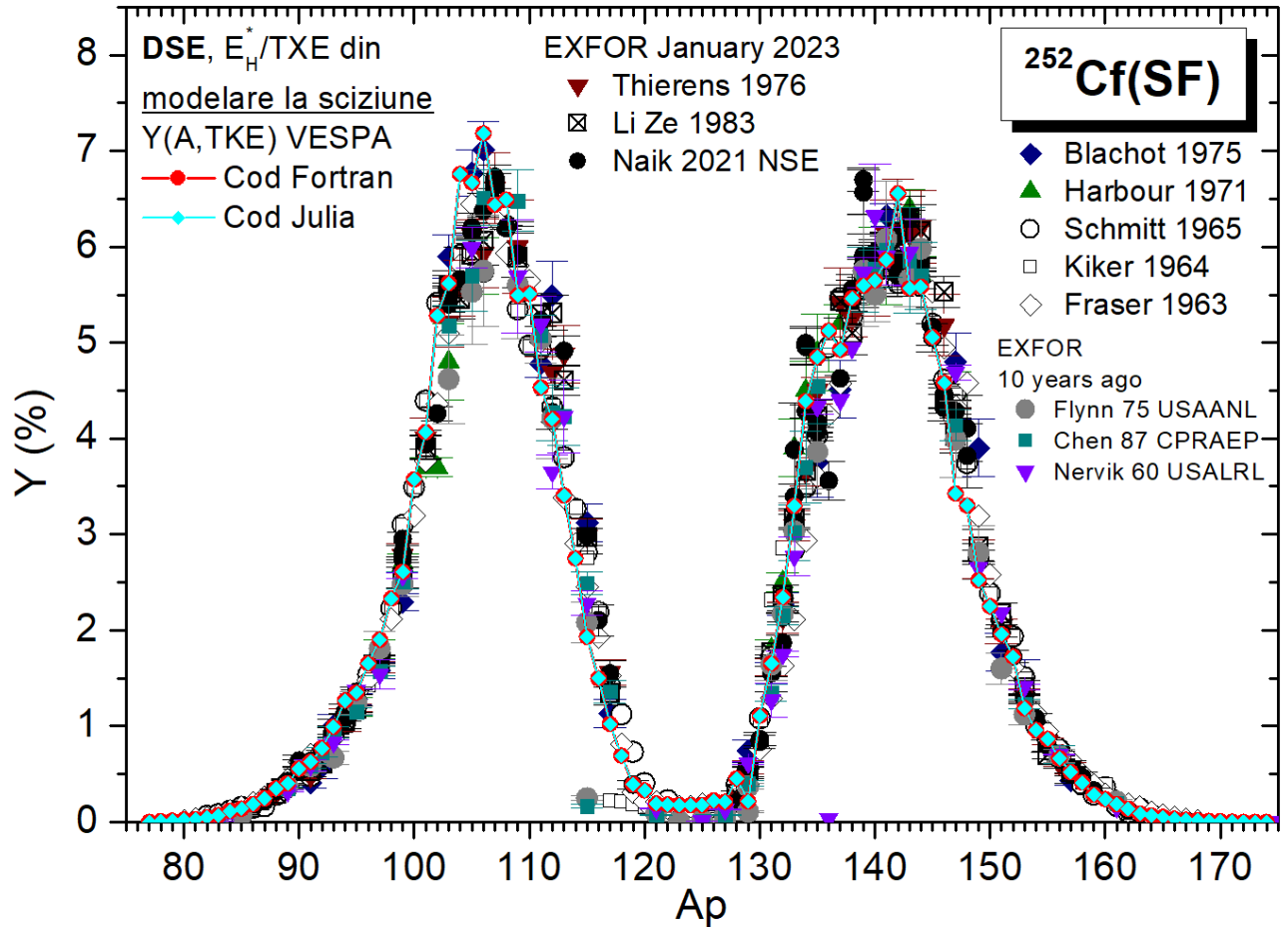


Figura 4.6: Distribuția fragmentelor reziduale $Y(A_p)$ calculată cu implementările Julia (albastru deschis) și Fortran (roșu), împreună cu date experimentale preluate din **EXFOR** (simboluri de culoare închisă).

Considerentele anterioare se aplică și în cazul distribuției $Y(Z, A_p)$ prezentată în fig. 4.7, unde se observă influența partiționării TXE asupra rezultatelor calculate precum și potrivirea dintre acestea și datele experimentale disponibile în **EXFOR** pentru $Z = \{51, 52, \dots, 55\}$. Acordul datelor experimentale cu distribuția calculată $Y(Z, A_p)$ dovedește validitatea construcției deterministe a domeniului fragmentărilor descrisă în capitolul al doilea.

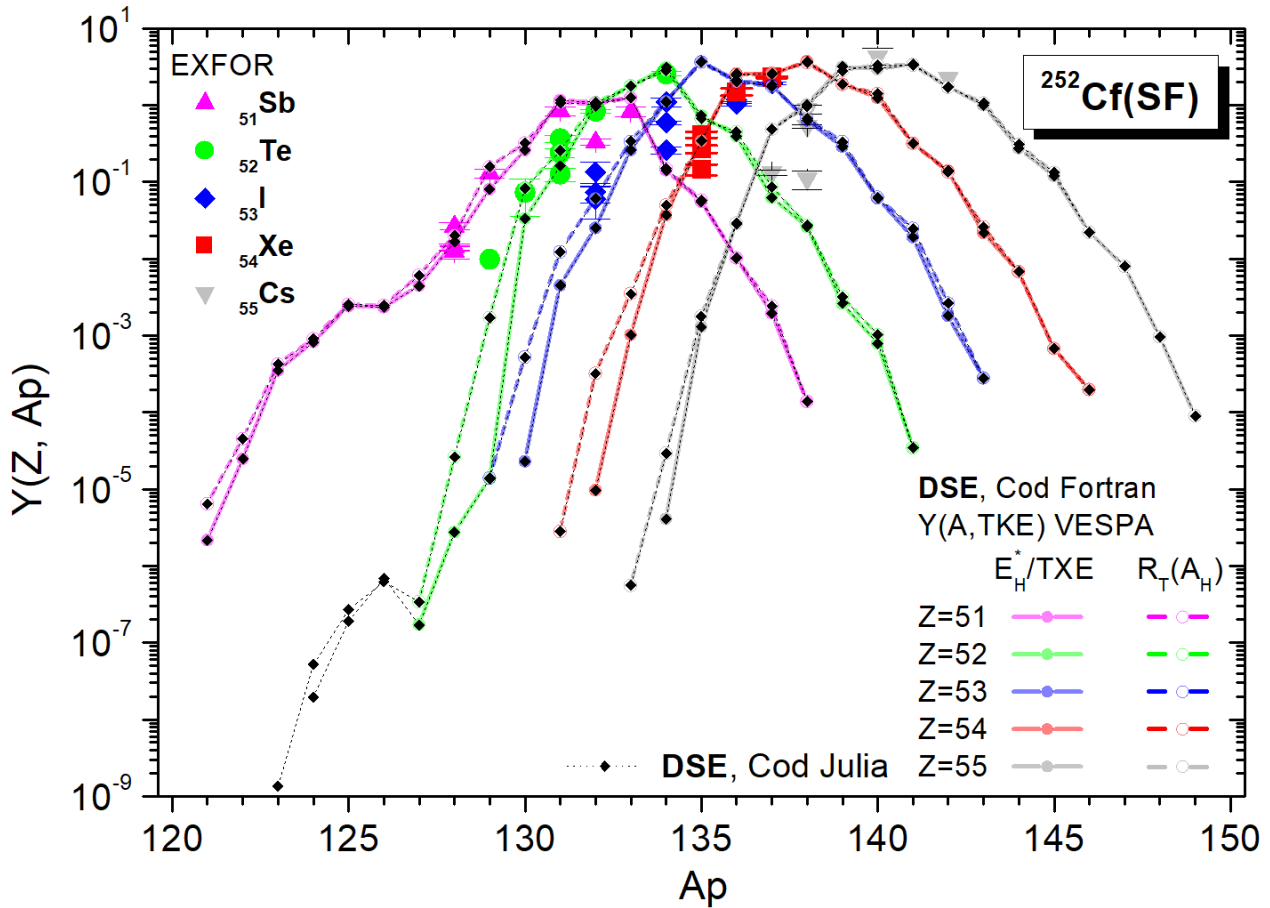


Figura 4.7: Distribuția $Y(Z, A_p)$ (scară logaritmică) calculată cu codurile Fortran (puncte colorate unite cu linii pentru ghidarea ochiului) și Julia (romburi negre unite cu linie punctată) folosind ambele metode de partiționare TXE precizate la începutul capitoului: E_H^*/TXE din modelare la sciziune (simboluri pline) și $R_T(A_H)$ cu model superfluid (simboluri goale). Datele experimentale sunt reprezentate cu simboluri colorate de dimensiuni mari.

Structura distribuției $Y(N_p)$ din fig. 4.8 prezintă maxime și minime ($N_p = 62, 64, 82, 84, 86$) corelate în mod direct cu cele observate în cazul $Y(A_p)$ ce se datorează fragmentelor inițiale pare în Z cu probabilitate mare de apariție: ^{56}Ba , ^{54}Xe , ^{44}Ru , ^{42}Mo . Tot în aceeași figură se observă influența nesemnificativă a metodei de partiționare TXE asupra structurii $Y(N_p)$, poziția maximelor și minimelor rămânând neschimbată în cazul aplicării ambelor metode de partiționare.

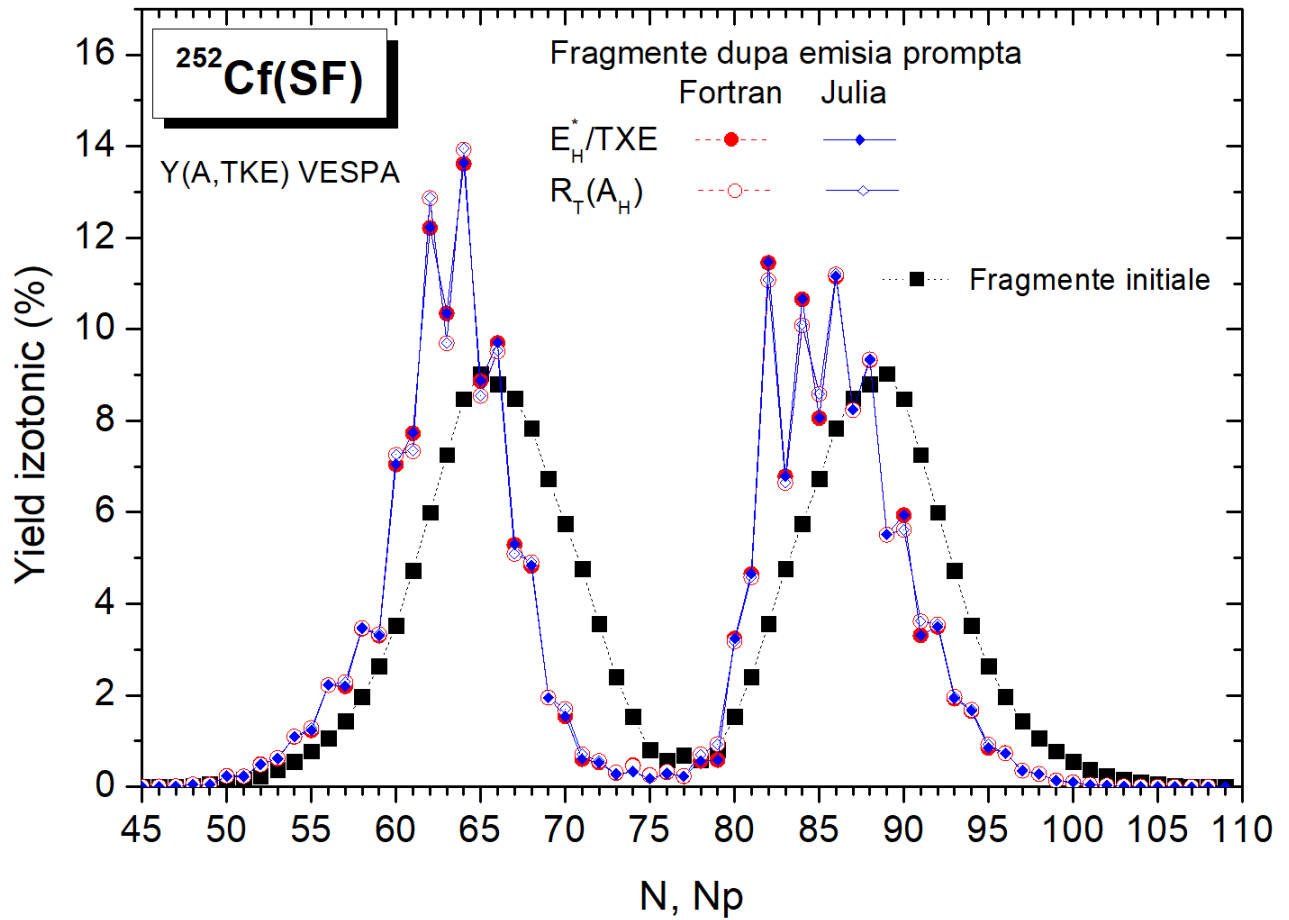


Figura 4.8: Rezultatele calculate pentru distribuția $Y(N_p)$ în codurile Fortran (cercuri roșii) și Julia (romburi albastre) folosind partiționările E_H^*/TXE (simboluri pline) și $R_T(A_H)$ (simboluri goale), împreună cu distribuția fragmentelor inițiale $Y(N)$ (negru).

Energia cinetică a ultimelor fragmente reziduale în urma emisiei prompte prezentată în fig. 4.9 se determină în cadrul fiecărei configurații inițiale (A, Z, TKE) prin aplicarea formulelor (3.2), urmată de medierile specifice pe distribuția $Y(A, Z, \text{TKE})$. Potrivirea rezultatelor obținute cu cele două coduri de calcul este bună atât în cazul $\text{KE}_p(Z)$ cât și $\text{KE}_p(A_p)$, mici diferențe fiind sesizabile în cazul valorilor $\text{KE}_p(A_p)$ corespunzătoare numerelor de masă $A_p = \{122, 123, 124, 125, 126\}$. Se menționează faptul că valorile medii totale $\langle \text{KE}_p \rangle$ calculate cu cele două coduri diferă începând cu cea de-a patra zecimală (considerând rotunjirile aferente).

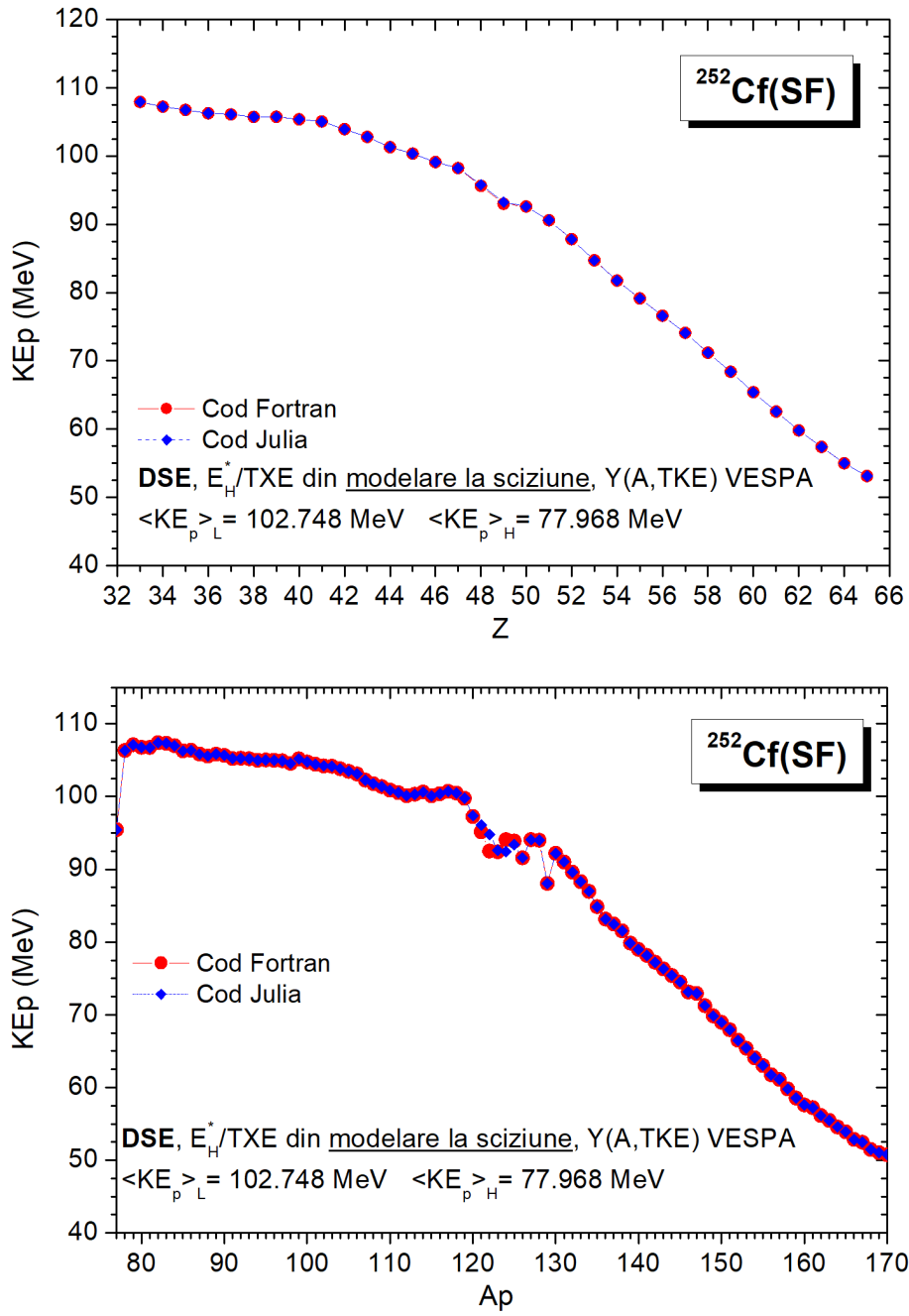


Figura 4.9: Valorile energiei cinetice a fragmentelor reziduale în urma emisiei prompte ca funcție de Z (sus) și de A_p (jos) calculate de codurile Julia (albastru) și Fortran (roșu), precum și valorile medii totale $\langle KE_p \rangle$ corespunzătoare grupurilor de fragmente ușor și greu.

Concluzii

În cadrul lucrării au fost prezentate detaliile implementării modelului **DSE** în limbajul de programare *Julia*, având ca elemente de noutate folosirea unei noi parametrizări pentru funcția de forță a neutronului de undă s și folosirea metodei biseției pentru rezolvarea ecuațiilor secvențiale transcendente în cazul secțiunii eficace de evaporare variabilă.

Rezultatele obținute cu implementarea propusă în cazul fisiunii spontane a ^{252}Cf se află într-un bun acord cu rezultatele unei implementări validate a modelului scrisă în limbajul Fortran și cu datele experimentale existente în cazul mărimilor: $\nu(A)$, $Y(A_p)$ și $Y(Z, A_p)$.

Demersul validării codului de calcul prezentat poate continua prin realizarea de comparații suplimentare dintre mărimi calculate și seturi de date experimentale (de exemplu $\nu(\text{TKE})$, $\langle \varepsilon \rangle(A)$, $\langle \varepsilon \rangle(\text{TKE})$, $P(\nu)$, spectre de neutroni prompti ș.a.), precum și prin verificarea sensibilității mărimilor calculate la folosirea altor distribuții experimentale $Y(A, \text{TKE})$, la reducerea pasului TKE (de la 2 MeV la 1 MeV) și la eliminarea pragului superior de 2 MeV impus soluțiilor ecuațiilor transcendente. De asemenea, se pot realiza calcule pentru situații de fisiune diferite de fisiunea spontană a ^{252}Cf .

În baza celor menționate, se dovedește faptul că implementarea modelului DSE în limbajul de programare Julia constituie un instrument util ce poate fi folosit în evaluarea de date nucleare.

Anexe

Rezolvarea integralelor spectrului de evaporare

Secțiune eficace de evaporare constantă

În cazul secțiunii eficace de evaporare a neutronului constantă, parametrului de normare din ecuația (2.1) devine:

$$\begin{aligned} K(T)^{-1} &= \sigma_0 \int_0^\infty \varepsilon e^{-\frac{\varepsilon}{T}} d\varepsilon \bigg|_{\substack{\text{S.V.: } x = \frac{\varepsilon}{T} \\ \Rightarrow d\varepsilon = T dx}} = \sigma_0 \int_0^\infty (T x) \cdot e^{-x} \cdot (T dx) = \\ &= \sigma_0 T^2 \int_0^\infty x e^{-x} dx = \sigma_0 T^2 \Gamma(2) = \sigma_0 T^2 \end{aligned}$$

Iar expresia spectrului de evaporare are forma:

$$\varphi(\varepsilon; T) = \varepsilon \cancel{\sigma_0} \frac{1}{\cancel{\sigma_0} T^2} e^{-\frac{\varepsilon}{T}} = \frac{\varepsilon}{T^2} e^{-\frac{\varepsilon}{T}}$$

Calculând momentul de ordin I al spectrului de evaporare obținut anterior avem că:

$$\langle \varepsilon \rangle(T) = \int_0^\infty \varepsilon \frac{\varepsilon}{T^2} e^{-\frac{\varepsilon}{T}} d\varepsilon \bigg|_{\substack{\text{S.V.: } x = \frac{\varepsilon}{T} \\ \Rightarrow d\varepsilon = T dx}} = T \int_0^\infty x^2 e^{-x} dx = T \cdot \Gamma(3) = 2 T$$

Secțiune eficace de evaporare variabilă

Utilizarea unei secțiuni eficace de evaporare a neutronului având expresia:

$$\sigma_c(\varepsilon) = \sigma_0 \left(1 + \frac{\alpha}{\sqrt{\varepsilon}} \right)$$

duce la următorul rezultat pentru parametrul de normare al spectrului Weisskopf-Ewing:

$$\begin{aligned} K(T) &= \left[\int_0^\infty \varepsilon \sigma_c(\varepsilon) e^{-\frac{\varepsilon}{T}} d\varepsilon \right]^{-1} = [\tilde{K}_0(T) + \tilde{K}_1(T)]^{-1} \\ \tilde{K}_0(T) &= \sigma_0 \int_0^\infty \varepsilon e^{-\frac{\varepsilon}{T}} d\varepsilon = \sigma_0 T^2 \\ \tilde{K}_1(T) &= \alpha \sigma_0 \int_0^\infty \sqrt{\varepsilon} e^{-\frac{\varepsilon}{T}} d\varepsilon \Bigg|_{\substack{\text{S.V.: } x = \frac{\varepsilon}{T} \\ \Rightarrow d\varepsilon = T dx \text{ \& } \sqrt{\varepsilon} = \sqrt{T x}}} = \alpha \sigma_0 \int_0^\infty \sqrt{T x} e^{-x} T dx = \\ &= \alpha \sigma_0 T^{\frac{3}{2}} \int_0^\infty x^{\frac{1}{2}} e^{-x} dx = \alpha \sigma_0 T^{\frac{3}{2}} \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \sigma_0 T^2 \frac{\alpha}{2} \sqrt{\frac{\pi}{T}} \end{aligned}$$

Spectrul de evaporare devine astfel:

$$\varphi(\varepsilon; T) = \varepsilon \cancel{\sigma_0} \left(1 + \frac{\alpha}{\sqrt{\varepsilon}} \right) \frac{1}{\cancel{\sigma_0} T^2} \frac{1}{1 + \frac{\alpha}{2} \sqrt{\frac{\pi}{T}}} e^{-\frac{\varepsilon}{T}} = \frac{\varepsilon + \alpha \sqrt{\varepsilon}}{T^{\frac{3}{2}} (\sqrt{T} + \frac{\alpha \sqrt{\pi}}{2})} e^{-\frac{\varepsilon}{T}}$$

Iar calculul momentului de ordin I al spectrului de evaporare este după cum urmează:

$$\begin{aligned} \langle \varepsilon \rangle(T) &= \frac{1}{T^2} \frac{1}{1 + \frac{\alpha}{2} \sqrt{\frac{\pi}{T}}} \int_0^\infty \varepsilon^2 \left(1 + \frac{\alpha}{\sqrt{\varepsilon}} \right) e^{-\frac{\varepsilon}{T}} d\varepsilon = \frac{1}{T^2} \frac{1}{1 + \frac{\alpha}{2} \sqrt{\frac{\pi}{T}}} [\langle \varepsilon \rangle_0(T) + \langle \varepsilon \rangle_1(T)] \\ \langle \varepsilon \rangle_0(T) &= \int_0^\infty \varepsilon^2 e^{-\frac{\varepsilon}{T}} d\varepsilon \Bigg|_{\substack{\text{S.V.: } x = \frac{\varepsilon}{T} \\ \Rightarrow d\varepsilon = T dx}} = \int_0^\infty (x T)^2 e^{-x} T dx = T^3 \int_0^\infty x^2 e^{-x} dx = T^3 \Gamma(3) = 2 T^3 \\ \langle \varepsilon \rangle_1(T) &= \int_0^\infty \alpha \varepsilon^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{\varepsilon}{T}} d\varepsilon \Bigg|_{\substack{\text{S.V.: } x = \frac{\varepsilon}{T} \\ \Rightarrow d\varepsilon = T dx}} = \alpha \int_0^\infty (x T)^{\frac{3}{2}} e^{-x} T dx = \alpha T^{\frac{5}{2}} \int_0^\infty x^{\frac{3}{2}} e^{-x} dx = \\ &= \alpha T^{\frac{5}{2}} \Gamma\left(\frac{5}{2}\right) = \alpha T^{\frac{5}{2}} \frac{3\sqrt{\pi}}{4} \\ \Rightarrow \langle \varepsilon \rangle(T) &= \frac{1}{1 + \frac{\alpha}{2} \sqrt{\frac{\pi}{T}}} \left[2 T + \alpha \frac{3\sqrt{\pi T}}{4} \right] = \frac{8 T \sqrt{T} + 3 \alpha T \sqrt{\pi}}{4 \sqrt{T} + 2 \alpha \sqrt{\pi}} = \frac{T \left(2 \sqrt{T} + \frac{3 \alpha \sqrt{\pi}}{4} \right)}{\sqrt{T} + \frac{\alpha \sqrt{\pi}}{2}} \end{aligned}$$

Unicitatea soluției ecuației transcendente

Forma generală a ecuațiilor transcendente de tipul $f(T_k) = 0$ ce trebuie rezolvate cu ajutorul metodelor numerice de aflare a rădăcinilor ecuațiilor neliniare este:

$$a_k T_k^2 + \frac{T_k \left(2\sqrt{T_k} + \frac{3\alpha_k\sqrt{\pi}}{4} \right)}{\sqrt{T_k} + \frac{\alpha_k\sqrt{\pi}}{2}} - (\bar{E}_r^{(k-1)} - S_n^{(k-1)}) = 0$$

Pentru a ne asigura de robustețea implementării metodelor de găsim a rădăcinilor ecuației de mai sus în cadrul codului de calcul (în speță metoda biseției), trebuie să arătăm faptul că $f(T_k) = 0$ admite o singură soluție reală pozitivă, adică că $f(T_k)$ intersectează axa reală o singură dată pe tot domeniul maximal posibil al valorilor temperaturii reziduale. În acest scop realizăm următoarele notații ajutătoare: $\delta := \bar{E}_r^{(k-1)} - S_n^{(k-1)}$, $\beta_1 := \frac{3\alpha_k\sqrt{\pi}}{4}$ și $\beta_2 := \frac{\alpha_k\sqrt{\pi}}{2}$, cu $\delta, \beta_1, \beta_2 > 0$, ce duc la noua formă a funcției $f(T)$ (omitem scrierea indicelui k pentru a nu încălca ecuațiile):

$$f(T) = a T^2 + T \frac{2\sqrt{T} + \beta_1}{\sqrt{T} + \beta_2} - \delta, \quad T \in [0, \infty)$$

Evaluăm funcția la capetele intervalului de valori pentru T :

$$\begin{aligned} f(0) &= -\delta < 0 \\ \lim_{T \rightarrow +\infty} f(T) &= +\infty > 0, \text{ pentru } a > 0 \end{aligned}$$

Observăm conform celor de mai sus că funcția $f(T)$ intersectează axa reală **cel puțin odată**, adică este garantată existența a cel puțin unei soluții în intervalul $[0, \infty)$. Pentru stabilirea monotoniei funcției studiate calculăm prima derivată în felul următor:

$$\begin{aligned} \frac{df}{dT} &= 2aT + \frac{2\sqrt{T} + \beta_1}{\sqrt{T} + \beta_2} + T \frac{\frac{1}{\sqrt{T}}(\sqrt{T} + \beta_2) - \frac{1}{2\sqrt{T}}(2\sqrt{T} + \beta_1)}{(\sqrt{T} + \beta_2)^2} = \\ &= 2aT + \frac{2\sqrt{T} + \beta_1}{\sqrt{T} + \beta_2} + T \frac{1 + \beta_2\sqrt{T} - \frac{\beta_1}{2\sqrt{T}}}{(\sqrt{T} + \beta_2)^2} = \\ &= 2aT + \frac{2T + \beta_1\sqrt{T} + 2\beta_2\sqrt{T} + \beta_1\beta_2 + \beta_2T\sqrt{T} - \frac{\beta_1}{2}\sqrt{T}}{(\sqrt{T} + \beta_2)^2} = \\ &= 2aT + \frac{2T + \beta_1\beta_2 + \frac{\beta_1}{2}\sqrt{T} + \beta_2\sqrt{T}(T+2)}{(\sqrt{T} + \beta_2)^2} \Rightarrow \frac{df}{dT} > 0, \quad \forall T \in [0, \infty) \\ \left. \frac{df}{dT} \right|_{T=0} &= \frac{\cancel{\beta_1\beta_2}}{\beta_2^2} = \frac{\beta_1}{\beta_2} = \frac{3}{2} \end{aligned}$$

Am demonstrat astfel monotonia strict crescătoare a funcției $f(T)$ pe întreg intervalul de valori al argumentului acesteia, ceea ce dovedește unicitatea soluției găsite de metodele numerice aplicate în rezolvarea ecuației transcendente $f(T) = 0$.

Referințe bibliografice

- [1] D.G. Madland and J.R. Nix. New calculation of prompt fission neutron spectra and average prompt neutron multiplicities. *Nuclear Science and Engineering*, 81(2):213–271, 1982.
- [2] James Terrell. Fission neutron spectra and nuclear temperatures. *Physical Review*, 113(2):527, 1959.
- [3] James Terrell. Physics and chemistry of fission. *Vienna: IAEA*, 1965.
- [4] J.C. Browne and F.S. Dietrich. Hauser–Feshbach calculation of the ^{252}Cf spontaneous–fission neutron spectrum. *Physical Review C*, 10(6):2545, 1974.
- [5] David G. Madland. Theoretical descriptions of neutron emission in fission. Technical report, International Atomic Energy Agency (IAEA), 1991.
- [6] A. Ruben, H. Märten, and D. Seeliger. Energy partition in nuclear fission. *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei*, 338:67–74, 1991.
- [7] Hans D. Lemmel. Physics of neutron emission in fission. Technical report, International Atomic Energy Agency, 1989.
- [8] G. Vladuca and Anabella Tudora. Prompt fission neutron multiplicity and spectrum evaluations for $n + ^{238}\text{U}$ reaction. *Annals of Nuclear Energy*, 28(16):1653–1665, 2001.
- [9] Takaaki Ohsawa, Tetsuo Horiguchi, and Miki Mitsuhashi. Multimodal analysis of prompt neutron spectra for $^{238}\text{Pu}(\text{sf})$, $^{240}\text{Pu}(\text{sf})$, $^{242}\text{Pu}(\text{sf})$ and $^{239}\text{Pu}(\text{n}_{\text{th}},\text{f})$. *Nuclear Physics A*, 665(1-2):3–12, 2000.
- [10] F.-J. Hambsch, Stephan Oberstedt, G. Vladuca, and Anabella Tudora. Prompt fission neutron multiplicity and spectra evaluation in the frame of the multi-modal fission model for $^{237}\text{Np}(\text{n},\text{f})$ and $^{238}\text{U}(\text{n},\text{f})$. *Nuclear Physics A*, 709(1-4):85–102, 2002.
- [11] F.-J. Hambsch, Stephan Oberstedt, Anabella Tudora, G. Vladuca, and Ivan Ruskov. Prompt fission neutron multiplicity and spectrum evaluation for $^{235}\text{U}(\text{n},\text{f})$ in the frame of the multi-modal fission model. *Nuclear Physics A*, 726(3-4):248–264, 2003.
- [12] Anabella Tudora, G. Vladuca, and B. Morillon. Prompt fission neutron multiplicity and spectrum model for 30–80 MeV neutrons incident on ^{238}U . *Nuclear Physics A*, 740(1-2):33–58, 2004.
- [13] F.-J. Hambsch, Anabella Tudora, G. Vladuca, and Stephan Oberstedt. Prompt fission neutron spectrum evaluation for $^{252}\text{Cf}(\text{SF})$ in the frame of the multi-modal fission model. *Annals of Nuclear Energy*, 32(10):1032–1046, 2005.

- [14] R. Capote, Y.-J. Chen, F.-J. Hambsch, N.V. Kornilov, J.P. Lestone, O. Litaize, B. Morillon, D. Neudecker, S. Oberstedt, T. Ohsawa, et al. Prompt fission neutron spectra of actinides. *Nuclear Data Sheets*, 131:319–332, 2016. <https://doi.org/10.1016/j.nds.2015.12.002>.
- [15] Toshihiko Kawano, Patrick Talou, Mark B. Chadwick, and Takehito Watanabe. Monte Carlo simulation for particle and γ -ray emissions in statistical Hauser–Feshbach model. *Journal of Nuclear Science and Technology*, 47(5):462–469, 2010.
- [16] P. Talou, B. Becker, T. Kawano, M.B. Chadwick, and Y. Danon. Advanced Monte Carlo modeling of prompt fission neutrons for thermal and fast neutron-induced fission reactions on ^{239}Pu . *Physical Review C*, 83(6):064612, 2011.
- [17] Patrick Talou, Ramona Vogt, Jørgen Randrup, Michael Evan Rising, S.A. Pozzi, J. Verbeke, Madison Theresa Andrews, S.D. Clarke, P. Jaffke, Marian Jandel, et al. Correlated prompt fission data in transport simulations. *The European Physical Journal A*, 54(1):9, 2018.
- [18] Matthew J. Marcath, Robert C. Haight, Ramona Vogt, Matthew Devlin, Patrick Talou, Ionel Stetcu, Jørgen Randrup, Patricia F. Schuster, Shaun D. Clarke, and Sara A. Pozzi. Measured and simulated $^{252}\text{Cf}(\text{sf})$ prompt neutron-photon competition. *Physical Review C*, 97(4):044622, 2018.
- [19] Amy Elizabeth Lovell, Ionel Stetcu, Patrick Talou, G. Rusev, and Marian Jandel. Prompt neutron multiplicity distributions inferred from γ -ray and fission fragment energy measurements. *Physical Review C*, 100(5):054610, 2019.
- [20] Amy Elizabeth Lovell, Patrick Talou, Ionel Stetcu, and Keegan John Kelly. Correlations between fission fragment and neutron anisotropies in neutron-induced fission. *Physical Review C*, 102(2):024621, 2020.
- [21] Jerome M. Verbeke, J. Randrup, and R. Vogt. Fission Reaction Event Yield Algorithm, FREYA– For event-by-event simulation of fission. *Computer Physics Communications*, 191:178–202, 2015.
- [22] Jerome M. Verbeke, J. Randrup, and R. Vogt. Fission Reaction Event Yield Algorithm FREYA 2.0.2. *Computer Physics Communications*, 222:263–266, 2018.
- [23] Stefano Marin, Vladimir A. Protopopescu, Ramona Vogt, Matthew J. Marcath, Stephan Okar, Michael Y Hua, Patrick Talou, Patricia F. Schuster, Shaun D. Clarke, and Sara A. Pozzi. Event-by-event neutron–photon multiplicity correlations in $^{252}\text{Cf}(\text{sf})$. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 968:163907, 2020.
- [24] J.M. Verbeke, L.F. Nakae, and R. Vogt. Neutron–neutron angular correlations in spontaneous fission of ^{252}Cf and ^{240}Pu . *Physical Review C*, 97(4):044601, 2018.
- [25] Jackson Van Dyke, L.A. Bernstein, and Ramona Vogt. Parameter optimization and uncertainty analysis of FREYA for spontaneous fission. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 922:36–46, 2019.
- [26] R. Vogt and J. Randrup. Improved modeling of photon observables with the event-by-event fission model FREYA. *Physical Review C*, 96(6):064620, 2017.

- [27] O. Litaize and O. Serot. Investigation of phenomenological models for the Monte Carlo simulation of the prompt fission neutron and γ emission. *Physical review C*, 82(5):054616, 2010.
- [28] O. Litaize, O. Serot, D. Regnier, and C. Manaiilescu. Investigation of $n + {}^{238}\text{U}$ fission observables. *Nuclear Data Sheets*, 118:216–219, 2014.
- [29] L. Thulliez, O. Litaize, O. Serot, and A. Chebboubi. Neutron and γ multiplicities as a function of incident neutron energy for the ${}^{237}\text{Np}(n,f)$ reaction. *Physical Review C*, 100(4):044616, 2019.
- [30] Olivier Litaize, Olivier Serot, and Léonie Berge. Fission modelling with FIFRELIN. *The European Physical Journal A*, 51(12):177, 2015.
- [31] Abdelaziz Chebboubi, Olivier Litaize, and Olivier Serot. Impact of FIFRELIN input parameters on fission observables. In *EPJ Web of Conferences*, volume 193, page 01003. EDP Sciences, 2018.
- [32] K.-H. Schmidt, Beatriz Jurado, Charlotte Amouroux, and Christelle Schmitt. GEneral description of Fission observables: GEF model code. *Nuclear Data Sheets*, 131:107–221, 2016.
- [33] Anabella Tudora, B. Morillon, F.-J. Hambsch, G. Vladuca, and Stephan Oberstedt. A refined model for ${}^{235}\text{U}(n,f)$ prompt fission neutron multiplicity and spectrum calculation with validation in integral benchmarks. *Nuclear Physics A*, 756(1-2):176–191, 2005.
- [34] Anabella Tudora. Systematic behaviour of the average parameters required for the Los Alamos model of prompt neutron emission. *Annals of Nuclear Energy*, 36(1):72–84, 2009.
- [35] Anabella Tudora, F.-J. Hambsch, and Stephan Oberstedt. Sub-barrier resonance fission and its effects on fission fragment properties. *Nuclear Physics A*, 890:77–101, 2012.
- [36] A. Tudora, F.-J. Hambsch, and Stephan Oberstedt. Prompt fission neutron emission calculations and description of sub-barrier fission cross section resonances for ${}^{234}\text{U}(n,f)$. *Nuclear Physics A*, 917:43–70, 2013.
- [37] A Tudora, F-J Hambsch, G Giubega, and I Visan. Even-odd effects in prompt emission in fission. *Nuclear Physics A*, 929:260–292, 2014.
- [38] A. Tudora, F.-J. Hambsch, G. Giubega, and I. Visan. Even-odd effects in prompt emission of spontaneously fissioning even-even Pu isotopes. *Nuclear Physics A*, 933:165–188, 2015.
- [39] A. Tudora, F.J. Hambsch, and G. Giubega. Local even-odd effect based on the number of configurations of pre-formed and formed fragmentations in a fissioning nucleus. *Nuclear Physics A*, 953:95–116, 2016. <https://doi.org/10.1016/j.nuclphysa.2016.04.037>.
- [40] A. Tudora, F.-J. Hambsch, and V. Tobosaru. Point-by-Point model calculation of the prompt neutron multiplicity distribution $\nu(A)$ for ${}^{238}\text{U}(n,f)$ at incident neutron energies ranging from 1 MeV to 80 MeV. *Physical Review C*, 94(4):044601, 2016.
- [41] Anabella Tudora, Franz-Josef Hambsch, and Viorel Tobosaru. Prediction of the Prompt Neutron Multiplicity Distribution $\nu(A)$ for ${}^{235}\text{U}(n,f)$ and ${}^{239}\text{Pu}(n,f)$ in the Incident Energy Range of Multichance Fission. *Nuclear Science and Engineering*, 192(1):52–69, 2018.

- [42] A. Tudora and F. J. Hambsch. Comprehensive overview of the Point-by-Point model of prompt emission in fission. *The European Physical Journal A*, 53:1–21, 2017.
- [43] A. Tudora and F.J. Hambsch. EPJ Web of Conf. 169 (2018), Int. workshop Theory-4, Varna 2017.
- [44] A. Tudora, F.-J. Hambsch, and V. Tobosaru. Revisiting the residual temperature distribution in prompt neutron emission in fission. *The European Physical Journal A*, 54(5):87, 2018. <https://doi.org/10.1140/epja/i2018-12521-7>.
- [45] Anabella Tudora. Systematics of different quantities related to sequential prompt emission in fission. *The European Physical Journal A*, 56(3):84, 2020. <https://doi.org/10.1140/epja/s10050-020-00059-2>.
- [46] Anabella Tudora. Inclusion of sequential emission into the most probable fragmentation approach (Los Alamos model) and its validation. *The European Physical Journal A*, 56(6):168, 2020.
- [47] Anabella Tudora. Systematics of input parameters for the Los Alamos model with sequential emission. *The European Physical Journal A*, 56(9):225, 2020.
- [48] D.G. Madland and A.C. Kahler. Refinements in the Los Alamos model of the prompt fission neutron spectrum. *Nuclear Data Sheets*, 131:319–332, 2016. <https://doi.org/10.1016/j.nuclphysa.2016.09.005>.
- [49] D.G. Madland and A.C. Kahler. Corrigendum to; Refinements in the Los Alamos model of the prompt fission neutron spectrum; [Nucl. Phys. A 957 (2017) 289-311]. *Nuclear Physics A*, 961:216–217, 2017.
- [50] Anabella Tudora. Prompt γ -ray results of two deterministic modelings of prompt emission in fission. *The European Physical Journal A*, 56(5):128, 2020. <https://doi.org/10.1140/epja/s10050-020-00123-x>.
- [51] Jeff Bezanson, Stefan Karpinski, Viral B. Shah, and Alan Edelman. Julia: A fast dynamic language for technical computing. *arXiv:1209.5145*, 2012. <https://doi.org/10.48550/arXiv.1209.5145>.
- [52] A. C. Wahl. Atomic Data Nuclear Data Tables. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 38:1–156, 1988.
- [53] A. V. Ignatyuk. Handbook for Calculations of Nuclear Reaction Data Reference Input Parameter Library. Technical Report IAEA-TECDOC-1034, International Atomic Energy Agency, 1998. Segment V, Chapter 5.1.4.
- [54] Anabella Tudora. Influence of energy partition in fission and pre-neutron fragment distributions on post-neutron fragment yields, application for $^{235}\text{U}(n_{\text{th}}, f)$. *The European Physical Journal A*, 58(7):126, 2022. <https://doi.org/10.1140/epja/s10050-022-00766-y>.
- [55] C. Morariu, A. Tudora, F.-J. Hambsch, S. Oberstedt, and C. Manailescu. Modelling of the total excitation energy partition including fragment deformation and excitation energies at scission. *Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics*, 39(5):055103, apr 2012. <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0954-3899/39/5/055103>.

- [56] Patrick Talou, Ionel Stetcu, Patrick Jaffke, Michael E. Rising, Amy E. Lovell, and Toshihiko Kawano. Fission fragment decay simulations with the CGMF code. *Computer Physics Communications*, 269:108087, 2021.
- [57] Okumura, Shin, Kawano, Toshihiko, and Chiba, Satoshi. Prompt and Delayed Neutron Emissions and Fission Product Yield Calculations with Hauser-Feshbach Statistical Decay Theory and Summation Calculation Method. *EPJ Web Conf.*, 211:04005, 2019.
- [58] A. Gilbert and A. G. W. Cameron. A composite nuclear-level density formula with shell corrections. *Canadian Journal of Physics*, 43(8):1446–1496, 1965. <https://cdnsiencepub.com/doi/10.1139/p65-139>.
- [59] T. von Egidy and D. Bucurescu. Systematics of nuclear level density parameters. *Phys. Rev. C*, 72:044311, Oct 2005.
- [60] T. von Egidy and D. Bucurescu. Experimental energy-dependent nuclear spin distributions. *Phys. Rev. C*, 80:054310, Nov 2009.
- [61] O. Iwamoto. Systematics of Prompt Fission Neutron Spectra. *Journal of Nuclear Science and Technology*, 45(9):910–919, 2008.
- [62] Marcel Stanitzki and Jan Strube. Performance of Julia for High Energy Physics Analyses. *Computing and Software for Big Science*, 5(1):10, 2021. <https://doi.org/10.1007/s41781-021-00053-3>.
- [63] J. Eschle, T. Gal, M. Giordano, P. Gras, B. Hegner, L. Heinrich, U. Hernandez Acosta, S. Kluth, J. Ling, P. Mato, et al. Potential of the Julia programming language for high energy physics computing. *arXiv:2306.03675*, 2023. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2306.03675>.
- [64] Codul sursă al implementării modelului în limbajul julia: <https://github.com/PaulGoG/Julia-Workflow-FFUB/tree/master/GoGFinishedWork/Disertatie>.
- [65] R. Capote, M. Herman, P. Obložinský, P.G. Young, S. Goriely, T. Belgia, A.V. Ignatyuk, A.J. Koning, S. Hilaire, V.A. Plujko, M. Avrigeanu, O. Bersillon, M.B. Chadwick, T. Fukahori, Zhigang Ge, Yinlu Han, S. Kailas, J. Kopecky, V.M. Maslov, G. Reffo, M. Sin, E.Sh. Soukhovitskii, and P. Talou. RIPL – Reference Input Parameter Library for Calculation of Nuclear Reactions and Nuclear Data Evaluations. *Nuclear Data Sheets*, 110(12):3107–3214, 2009. <https://doi.org/10.1016/j.nds.2009.10.004>.
- [66] Anabella Tudora. Validation of two deterministic modelings of prompt emission in fission on the basis of recent experimental data. *The European Physical Journal A*, 55(6):98, 2019. <https://doi.org/10.1140/epja/i2019-12782-6>.
- [67] M. Travar, V. Piau, A. Göök, O. Litaize, J. Nikolov, A. Oberstedt, S. Oberstedt, J. Enders, M. Peck, W. Geerts, and M. Vidali. Experimental information on mass- and TKE-dependence of the prompt fission γ -ray multiplicity. *Physics Letters B*, 817:136293, 2021.
- [68] Anabella Tudora. Correlation between the excitation energy of pre-neutron fragments and the kinetic energy of post-neutron fragments; application for $^{235}\text{U}(n_{\text{th}}, f)$. *The European Physical Journal A*, 58(12):258, 2022. <https://doi.org/10.1140/epja/s10050-022-00890-9>.