

SZAKDOLGOZAT

Hőmérsékletfüggő transzportkernel mintavételezése

Pukler Márton

Témavezető: Dr. Légrády Dávid

egyetemi docens

BME Nukleáris Technikai Intézet



M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2

BME NTI

2019. június 05.

Szakdolgozat témakiírás

A BME Nukleáris Technikai Intézetében fejlesztés alatt álló GUARDYAN direkt időfüggésű, grafikus számítási egység (GPU) alapú Monte-Carlo kód gyors lefolyású reaktortranziensek szimulációjára alkalmas. A tranziensek termohidraulikai visszacsatolásának számításához szükséges a hatáskeresztmetszetek hőmérsékletfüggésének figyelembe vétele. A legegyszerűbb és egyben legmemóriaigényesebb megközelítésben hőmérsékletfüggően tabulált adatsorok közti interpolációval kaphatóak meg adott hőmérsékleten a hatáskeresztmetszetek, ezt az eljárást a GUARDYAN kód tartalmazza. A szakirodalomban található olyan eljárás is, mely a 0K hőmérséklethez tartozó hatáskeresztmetszetek alapján a transzportfolyamat szimulációja közbeni, röptében történő Doppler-kiszéledési modell segítségével veszi figyelembe a hőmérsékletfüggést a Woodcock-szabadúthossz sorsolás egyfajta torzításán keresztül. A két módszer összevetése nehézkes, mert a hatáskeresztmetszeteket a Woodcock-alapú eljárás explicite nem számolja ki. A hallgató feladatai a következők:

- a Woodcock-alapú hőmérsékletfüggési rendszer megismerése, megértése és implementációja a GUARDYAN kódba,
- a modell által szolgáltatott effektív és dinamikus sokszorozási tényező összehasonlítása a hőmérsékletben tabulált hatáskeresztmetszetek eredményeivel.

Önállósági nyilatkozat

Alulírott Pukler Márton a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem fizika BSc szakos hallgatója kijelentem, hogy ezt a szakdolgozatot meg nem engedett segédeszközök nélkül, önállóan, a témavezető irányításával készítettem, és csak a megadott forrásokat használtam fel.

Minden olyan részt, melyet szó szerint, vagy azonos értelemben, de átfogalmazva más forrásból vettem, a forrás megadásával jelöltem.

Budapest, 2019. június 5.

Pukler Márton

Kivonat

A részecskék hőmozgásának jelentős hatása van a neutronok és az anyag kölcsönhatásaira. A valóságban, így a reaktorokban is a részecskék folyamatos hőmozgást végeznek, melyet figyelembe kell venni neutron transzport folyamatok szimulációja során. Ez különösen nehéz, mivel a reaktorokban a hőmérséklet eloszlása sosem homogén.

A neutron transzport szimulációk alatt az előre legenerált hőmérsékletfüggő reakció valószínűségeket a számítógép memóriájában kell tárolni minden egyes hőmérsékleten, amely előfordul a rendszerben, ami nagymértékben korlátozza a hőmérsékleteloszlások figyelembevételének részletességét.

A szakdolgozatomban egy olyan módszert mutatok be és vizsgálok meg, amely képes a részecskék hőmozgásának, valamint a hőmérséklet eloszlásának egzakt figyelembevételére, mindezt kizárólag a 0 K-en vett reakció valószínűségek segítségével. A hőmérsékletfüggő mintavételezés alkalmazásával a szimulációk memóriaigénye nagymértékben csökkenthető.

Köszönetnyilvánítás

Ezúton szeretnék köszönetet mondani témavezetőmnek, Dr. Légrády Dávidnak az érdekes témáért, a témában való segítségért, a szakdolgozat írásában nyújtott tanácsokért és segítségért.

Szeretném megköszönni Tolnai Gábornak a rengeteg segítséget és szakmai útmutatást.

Köszönettel tartozom szüleimnek és testvéremnek, a szeretetért és a támogatásért, amit tanulmányaim során kaptam, kapok.

Külön köszönöm páromnak, Grétának a sok türelmet, szeretetet és támogatást, mellyel hozzájárult a szakdolgozat elkészüléséhez.

Tartalomjegyzék

1. Bevezető	7
2. Neutron transzport fizikai háttere	7
2.1. Neutron kölcsönhatása anyaggal	7
2.1.1. Maghasadás	7
2.1.2. Befogás	8
2.1.3. Szórás	8
2.2. Hatáskeresztmetszet	10
2.3. Reakciósebesség	10
3. A hőmozgás hatása a neutrontranszportra	12
3.1. A hőmozgás hatása a reakciósebességekre	13
4. Hőmérsékletfüggő mintavételezés	13
4.1. Szabadúthossz mintavételezése rejekeciós eljárások segítségével	14
4.2. Majoráns hatáskeresztmetszet meghatározása	15
4.3. Targetmag sebességének mintavételezése	16
4.4. A reakció helyének mintavételezése rejekeció segítségével	18
4.5. Normálási faktor alacsony energiákon	18
4.6. Több izotópot tartalmazó anyagok	19
4.7. Koordináta-rendszer transzformáció	19
5. Demonstráció	20
5.1. A szabadúthosszak eloszlásának vizsgálata	21
5.2. A hatáskeresztmetszetek összehasonlítása hőmérsékletfüggő mintavételezés, valamint hőmérséklet szerinti interpoláció esetén	22
5.3. Relatív eltérés és mintavételezési hatékonyság a teljes energiatartományon	24
5.4. Hőmérsékletfüggő mintavételezés transzportfolyamatokban	27
6. Összefoglalás és kitekintés	32
Irodalomjegyzék	33

1. Bevezető

A GUARDYAN (GPU Assisted Reactor Dynamic Analysis) ([1], [2]. hivatkozások) a BME Nukleáris Technikai Intézetében fejlesztés alatt álló, direkt időfüggésű, grafikus kártyán futó Monte-Carlo kód, amely gyors lefolyású reaktortranziensek szimulációjára alkalmas. A tranziensek termohidraulikai visszacsatolásának számításához szükséges a hatáskeresztmetszetek hőmérsékletfüggésének figyelembevétele. A legegyszerűbb és egyben legmemóriaigényesebb megközelítésben hőmérsékletfüggő módon tabulált adatsorok közti interpolációval kaphatóak meg adott hőmérsékleten a hatáskeresztmetszetek, a GUARDYAN kód ezt az eljárást alkalmazza.

Célom egy olyan módszer megismerése és vizsgálata, amely később akár a GUARDYAN kódban is megvalósítható, és képes a hőmérsékletfüggés egzakt figyelembevételére, valóságú neutron transzportfolyamatok szimulációjára. A jelen szakdolgozat témája a hőmérsékletfüggő mintavételezés módszer bemutatása és vizsgálata.

A hőmérsékletfüggő mintavételezés módszer segítségével, a 0 K-en vett hatáskeresztmetszet adatok alapján tetszőleges hőmérsékleteloszlással rendelkező rendszert lehet vizsgálni. A módszer mögött rejlő ötlet az, hogy a neutronok anyaggal való kölcsönhatásainak valószínűségei nagymértékben függenek az anyagot alkotó részecskék hőmozgásától. A reakciók valószínűségét a neutron és a kölcsönható részecske tömegközépponti rendszerében értékeljük ki, a 0 K-en vett hatáskeresztmetszetek segítségével, a neutron transzportfolyamatokat ez alapján szimuláljuk.

2. Neutron transzport fizikai háttere

Ebben a fejezetben bemutatásra kerülnek a neutron transzport fizikai hátterének alapjai. A fejezet, valamint a 3., illetve a 4. fejezetek a [3]. hivatkozás alapján készültek.

2.1. Neutron kölcsönhatása anyaggal

A neutronok elektromosan semleges részecskék, ezért az anyagban lévő elektronfelhőn szabadon áthatolnak, csak az anyagban lévő atommagokkal lépnek kölcsönhatásba. A három legfontosabb kölcsönhatás a maghasadás, a befogás és a szórás.

2.1.1. Maghasadás

Maghasadás (fisszió) során egy bejövő neutron hatására a targetmag (általában) két kisebb tömegű atommagra hasad, melyeket hasadási termékeknek nevezünk, valamint körülbelül 200 MeV energia felszabadulásával és néhány hasadási neutron keletkezésével jár. A leggyakoribb hasadóanyagokra (^{235}U , ^{239}Pu) az egy maghasadás esetén keletkező hasadási neutronok átlagos száma, függ a hasadást kiváltó neutron

energiájától. Ez a szám 1 MeV energia alatt adott atommagra, közel konstans, értéke 2-3 között mozog, 1 MeV fölött pedig az energia szerint közel lineárisan nő.

A felszabaduló energia nagyrészt a hasadási termékek kapják meg, ezáltal felmelegítve a fűtőanyagot. Az energia kis részét azonban a hasadási neutronok kapják. A hasadási neutronok energiaspektrumát egy Maxwell-Boltzmann-eloszlással szokás jellemezni, melynek maximuma körülbelül 1 MeV-nál található, az eloszlás pontos alakja függ a hasadási magtól.

A hasadási neutronok nem minden esetben a hasadás pillanatában keletkeznek. A keletkező neutronok több, mint 99%-a a hasadás pillanatában, pontosabban a hasadás követő 10^{-12} s-on belül keletkezik, ezeket prompt neutronoknak nevezzük. Ezután a keletkező instabil hasadási magok bomlása során keletkező atommagok egy kis része elegendő energiával rendelkezik ahhoz, hogy bomlásuk során egy neutronot bocsájtson ki, az így keletkező neutronokat késő neutronoknak nevezzük. A késő neutronok a maghasadás során keletkező neutronok kevesebb, mint 1%-át teszik ki, a maghasadás után akár több másodperccel is keletkezhetnek, szerepük a reaktorok szabályozhatóságának szempontjából nagyon jelentős.

A maghasadás a fissziós reaktorok legfontosabb neutronforrása, a reaktorok által termelt energia nagyrészéért a maghasadás felelős.

2.1.2. Befogás

A legegyszerűbb ilyen reakciót radiatív/sugárzásos befogásnak nevezzük, és a következő módon jelölik: (n, γ) . Radiatív sugárzás során a neutron elnyelődik a targetmagban és így eggyel megnöveli annak neutronsámát. A reakció során keletkező atommag gerjesztett állapotú, legerjesztődése során egy γ -fotont bocsájt ki. Másféle neutronbefogással járó reakciók is léteznek például: (n, p) vagy (n, α) , melyek során az elnyelt neutron hatására a targetmag egy protont, illetve egy α részecskét bocsájt ki.

Neutronbefogás segítségével neutronokat vehetünk ki a reaktorból, ezáltal szabályozhatjuk a maghasadás gyakoriságát. Ezt felhasználhatjuk a reaktorok szabályozására. Ez általában kétféle módon történik: a reaktor hűtővizében bórt oldanak fel, olyan arányban, hogy az a neutronok számát közel állandóan tartsa, vagy abszorbens anyagból készült szabályozórudak mozgatásával.

2.1.3. Szórás

A szórásnak két fajtája van: rugalmas szórás, valamint rugalmatlan szórás. Kis energiákon a rugalmas szórás dominál, a rugalmatlan szórás MeV-os energiatartományban fordul elő. Rugalmas szórás esetén a mozgási energia és az impulzus is megmarad, míg rugalmatlan szórás esetén csak az impulzus.

Ha feltételezzük, hogy a targetmag nyugalomban van, akkor a rugalmas szórás leírható a laboratóriumi koordináta-rendszerben. Ha a szórás után a neutron eltérési szöge φ , a laboratóriumi rendszerbeli energiája E , a targetmag tömege, neutron

2. Neutron transzport fizikai háttere

tömeg egységben kifejezve MA_n , ahol M a neutron tömege, A_n a targetmag relatív atomtömege, akkor a neutron energiáját a szórás után (E^*) a következő módon kapjuk:

$$E^* = \frac{E}{(A_n + 1)^2} \left(\cos \varphi + \sqrt{A_n^2 - \sin^2 \varphi} \right)^2. \quad (1)$$

Az egyenlet a laboratóriumi rendszerbeli impulzusmegmaradás és az energiamegmaradás közvetlen következménye.

Neutrontranszport kódokban azonban praktikusabb a tömegközépponti rendszerben vizsgálni a szórásokat, hiszen ebben a rendszerben az összimpulzus nulla. Különösen fontos ez, abban az esetben, ha figyelembe vesszük a targetmagok hőmozgását, mert ilyenkor a laboratóriumi rendszerbeli egyenletek túlságosan elbonyolódnak.

A tömegközéppont sebessége a laboratóriumi rendszerben:

$$\mathbf{V}_C = \frac{M\mathbf{v} + MA_n\mathbf{V}_t}{M + MA_n} = \frac{\mathbf{v} + A_n\mathbf{V}_t}{1 + A_n}, \quad (2)$$

ahol \mathbf{v} a neutron, \mathbf{V}_t pedig a targetmag sebessége (a laboratóriumi rendszerben). A laboratóriumi rendszerbeli sebességeket átválthatjuk tömegközépponti rendszerbe, a következő összefüggések segítségével:

$$\mathbf{v}_C = \mathbf{v} - \mathbf{V}_C = \frac{A_n(\mathbf{v} - \mathbf{V}_t)}{1 + A_n}, \quad (3)$$

$$\mathbf{v}_{t,C} = \mathbf{V}_t - \mathbf{V}_C = -\frac{\mathbf{v} - \mathbf{V}_t}{1 + A_n}. \quad (4)$$

Felhasználva a mozgási energia és a sebesség kapcsolatát leíró összefüggést:

$$E = \frac{1}{2}Mv^2, \quad (5)$$

a tömegközépponti rendszerbeli energia és összimpulzus a következő módon írható fel:

$$\frac{1}{2}v_C^2 + \frac{1}{2}A_n v_{t,C}^2 + Q_r = \frac{1}{2}v_C^{*2} + \frac{1}{2}A_n v_{t,C}^{*2}, \quad (6)$$

$$\mathbf{v}_C + \mathbf{v}_{t,C} = \mathbf{v}_C^* + \mathbf{v}_{t,C}^* = 0, \quad (7)$$

ahol \mathbf{v}_C^* és $\mathbf{v}_{t,C}^*$ a neutron, illetve a targetmag sebessége a szórás után, Q_r pedig a reakció során felszabaduló energia, melynek értéke nulla rugalmas szórás esetén, $Q_r < 0$ rugalmatlan szórás esetén. Rugalmatlan szórás esetén a Q_r energiát az ütköző testek nyelik el, amelyek ezáltal gerjesztett állapotba kerülnek. A 6., illetve a 7. egyenletekből meghatározható a neutronok tömegközépponti rendszerbeli sebessége

a szórás után:

$$v_C^* = \sqrt{v_C^2 + \frac{2A_n Q_r}{(A_n + 1)M}}. \quad (8)$$

Látható, hogy a tömegközépponti rendszerben, rugalmatlan szórás esetén a neutron sebessége a szórás után változatlan, helyette a neutron tömegközépponti rendszerbeli iránya változik meg. Az irányváltozást a neutron eltérülési szögének koszinuszával: μ_C , valamint az eltérülés, \mathbf{v}_C -re merőleges komponensének azimutális szögével: θ_C szokás jellemezni.

Az 1. összefüggés alapján láthatjuk, hogy a szórás következtében a neutronok veszítenek energiájukból. A könnyű atommagok (például: hidrogén, szén) kifejezetten alkalmasak a neutronok lassítására, reaktorokban éppen ezért ezeket moderátorként használják (például: víz, grafit moderátorok).

A targetmagok hőmozgásának figyelembevételkor előfordul bizonyos esetekben, hogy a neutron energiája a szórás után nagyobb, mint a szórást megelőzően. A hőmozgás hatásaival részletesen a 3. fejezetben foglalkozunk.

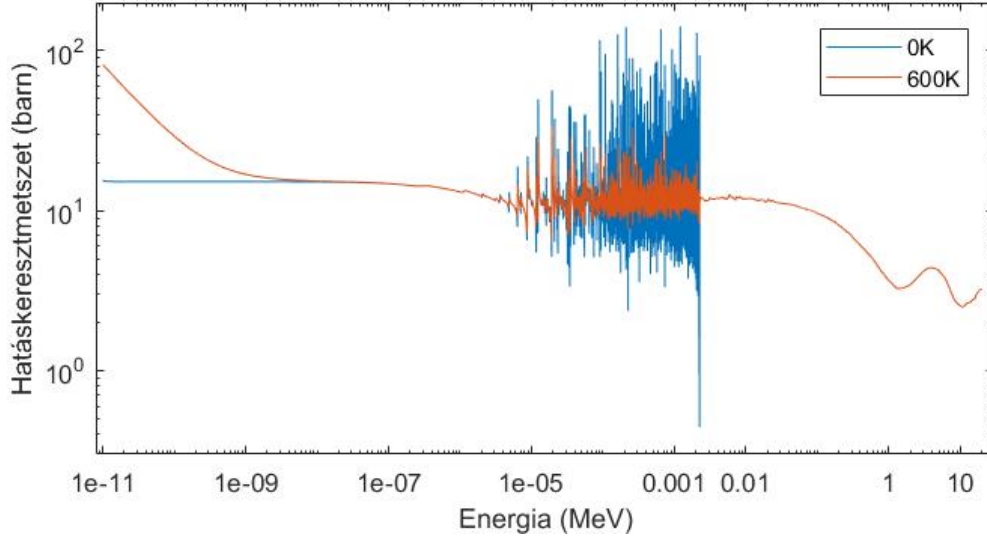
2.2. Hatáskeresztmetszet

A neutron kölcsönhatásainak valószínűségét a hatáskeresztmetszettel: σ írhatjuk le. A hatáskeresztmetszet terület dimenziójú, szokásos mértékegysége a barn, 1 barn 10^{-24} cm²-nek felel meg. A hatáskeresztmetszet neutronok esetén ezenkívül nagymértékben függ a neutron energiájától, valamint a közeg hőmérsékletétől. Példának okáért az 1. ábrán az ²³⁵U izotóp rugalmas szórásra vonatkozó hatáskeresztmetszetét láthatjuk 0 K, illetve 600 K esetén. Az ábrán látható, hogy kis energiákon (10^{-6} MeV alatt), 0 K-en a rugalmas szórás hatáskeresztmetszete konstans, 600 K-en pedig $1/v$ -s viselkedést figyelhetünk meg, ahol v a neutron sebessége (az ábráról ezt nehéz leolvasni, mert mindkét skála logaritmikus). A következő energiatartományban, $10^{-6} - 2 \cdot 10^{-2}$ MeV között mindkét hőmérsékleten számos csúcsot figyelhetünk meg, ezeket rezonanciáknak nevezzük. A rezonanciatartományban a hatáskeresztmetszetek több nagyságrenddel is eltérhetnek egymástól, egymáshoz közel eső energiákon.

2.3. Reakciósebesség

A mikroszkopikus hatáskeresztmetszetek, σ , a különálló részecskék kölcsönhatásainak valószínűségét írják le. Ha a mikroszkopikus hatáskeresztmetszetet megszorozzuk a target részecske N_n atomsűrűségével, akkor megkapjuk annak makroszkopikus hatáskeresztmetszetét, amely adott kölcsönhatás makroszkopikus valószínűségét írja le:

$$\Sigma_{i,n}(E) = N_n \sigma_{i,n}(E), \quad (9)$$



1. ábra. ^{235}U rugalmas szórás hatáskeresztmetszete 0 K, illetve 600 K esetén

ahol i a reakciót, n pedig a target részecskét indexeli. A makroszkopikus hatáskeresztmetszet mértékegysége: cm^{-1} . Ha a vizsgált anyag különböző izotópokból áll, akkor az anyag hatáskeresztmetszete a hatáskeresztmetszetek összege, az izotópok arányával súlyozva:

$$\Sigma_i(E) = \sum_n \Sigma_{i,n}(E) \cdot a_n, \quad (10)$$

ahol a_n az n . izotóp részarányát jelenti az anyagon belül.

A makroszkopikus hatáskeresztmetszet megadja az adott reakció bekövetkezési valószínűségét, P_i -t, egységnyi szabadúthossz megtétele alatt. Ez alapján P_i -re a következő differenciálegyenletet írhatjuk fel:

$$\frac{dP_i(E, l)}{dl} = -\Sigma_i(E)P_i(E, l), \quad (11)$$

ahol l az anyagban megtett távolságot jelenti. Az egyenlet megoldása:

$$P_i(E, l) = \Sigma_i(E)e^{-\Sigma_i(E) \cdot l}, \quad (12)$$

azaz két reakció között a neutronok szabadúthosszának eloszlása exponenciális, ezt Beer-Lambert-törvénynek nevezzük.

A neutron transzport számítások legfőbb kimenete a reakciósebesség és annak deriváltjai. A reakciósebességet célszerű a neutron fluxus segítségével leírni. A neutron fluxus leírásához először definiáljuk neutronok a sűrűségét. A neutronok sűrűsége, $\varrho(E, \mathbf{r})$, az $[E, E + dE]$ infinitezimális intervallumba eső energiával rendelkező, $[\mathbf{r}, \mathbf{r} + d\mathbf{r}]$ infinitezimális térfogatelemben található neutronok számát jelenti.

3. A hőmozgás hatása a neutrontranszportra

Ez alapján a neutron fluxust a neutron sebességvektorának és a neutronok sűrűségének szorzataként definiálhatjuk. Az így kapott neutron fluxus vektoriális mennyiség, azonban a jelen szakdolgozatban csak skalár neutron fluxussal foglalkozunk. A skalár neutron fluxust, $\Phi(E, \mathbf{r})$ -t, a fluxus 4π térszög szerinti integrálásával kapjuk:

$$\Phi(E, \mathbf{r}) = v \varrho(E, \mathbf{r}), \quad (13)$$

ahol v a neutron sebességének nagysága.

A makroszkopikus hatáskeresztmetszet, valamint a (skalár) neutron fluxus segítségével a reakciósebesség, R_i felírható:

$$R_i = \int_V \int_E \Sigma_i(E, \mathbf{r}) \Phi(E, \mathbf{r}) dE d^3r. \quad (14)$$

Az energia szerinti integrálást általában a teljes energiatartományra szokás végezni, azonban időnként érdemes csak egy adott energiaintervallumon integrálni, hogy megkapjuk az adott energiával rendelkező neutronok járulékát.

3. A hőmozgás hatása a neutrontranszportra

A valóságban egy reaktor mindig jelentősen magasabb hőmérsékleten üzemel, mint 0 K, általában legalább szobahőmérsékleten, azaz 300 K-en, az üzemanyagrudak belseje gyakran az 1200 K hőmérsékletet is eléri.

Ha egy anyag hőmérséklete magasabb, mint 0 K, akkor a benne levő atomok a hőmérséklettől függő mértékben folyamatos hőmozgást végeznek. Ideális gázok esetén az anyag hőmérséklete és a részecskék hőmozgása közötti kapcsolatot a Maxwell-Boltzmann-eloszlással lehet leírni:

$$P_{\text{MB}}(E, T) = 2\sqrt{\frac{E}{\pi}} \left(\frac{1}{k_B T} \right)^{3/2} e^{-\frac{E}{k_B T}}, \quad (15)$$

ahol k_B a Boltzmann-állandó, T pedig az anyag hőmérséklete. Habár az eloszlás csak ideális gázokra teljesül, a reaktor szimulációs kódokban (például: MCNP: [5]. hivatkozás) gyakran alkalmazzák ezt az eloszlást valamennyi anyagra (például: kristályos anyagok, folyadékok). Más reaktor szimulációs kódokban (például a GUARDYAN-ben) úgy nevezett $S(\alpha, \beta)$ táblázatokat használnak a rácsba rendeződő és a kötéssel rendelkező anyagok esetén.

A targetmagok hőmozgása számos különböző módon befolyásolja a neutron transzportfolyamatokat, melyeket ebben a fejezetben megismerhetünk.

3.1. A hőmozgás hatása a reakciósebességekre

A targetmagok hőmozgásának következtében a targetmag és a beérkező neutron relatív sebessége, v' kisebb, vagy nagyobb is lehet, mint a neutron v sebessége a laboratóriumi rendszerben, attól függően, hogy milyen a két sebesség irányának viszonya. Ez hatással van a kölcsönhatások valószínűségére és így a reakciósebességekre is. A hőmozgás figyelembevételének legkézenfekvőbb módja az effektív hatáskeresztmetszet, Σ_{eff} , segítségével történik. Az effektív hatáskeresztmetszetet úgy definiáljuk, hogy a segítségével számított reakciósebesség megegyezzen a 0 K-en vett hatáskeresztmetszetekből, a hőmozgás figyelembevételével számított reakciósebességekkel:

$$v\varrho(v, \mathbf{r})\Sigma_{\text{eff},n}(v, T, A_n) = \varrho(v, \mathbf{r}) \int |\mathbf{v}'| \Sigma_n(|\mathbf{v}'|) P(\mathbf{V}_t, T, A_n) d\mathbf{v}', \quad (16)$$

ahol $v\varrho(v, \mathbf{r})$ a fluxust, $P(\mathbf{V}_t, T, A_n)$ pedig a target részecske sebességeloszlását jelenti. Az egyenletből következik az effektív mikroszkopikus hatáskeresztmetszet:

$$\sigma_{\text{eff}}(v, T, A_n) = \frac{1}{v} \int |\mathbf{v}'| \sigma(|\mathbf{v}'|) P(\mathbf{V}_t, T, A_n) d\mathbf{v}'. \quad (17)$$

A targetmagok sebességének eloszlását a Maxwell-Boltzmann-eloszlás segítségével írhatjuk le:

$$P_{\text{MB}} = (V_t, T, A_n) = \left(\frac{\gamma}{\sqrt{\pi}} \right)^3 e^{-\gamma^2 V_t^2}, \quad (18)$$

ahol

$$\gamma(T, A) = \sqrt{\frac{A_n M}{2k_B T}}. \quad (19)$$

A 17., illetve a 18. egyenletek alapján az effektív mikroszkopikus hatáskeresztmetszetre (levezetés nélkül) a következőt kapjuk:

$$\sigma_{\text{eff}}(v, T, A_n) = \frac{\gamma}{v^2 \pi} \int_0^\infty v'^2 \sigma(v') \left(e^{-\gamma^2 (v-v')^2} - e^{-\gamma^2 (v+v')^2} \right) dv'. \quad (20)$$

Az egyenlet segítségével a hőmozgás hatását pontosan figyelembe lehet venni.

4. Hőmérsékletfüggő mintavételezés

A Monte Carlo neutron transzport kódok a szabadúthosszak mintavételezésén alapszanak. Szabadúthossznak a két kölcsönhatás között megtett utat hívjuk és a 12. összefüggésben láthattuk, hogy az eloszlása exponenciális:

$$f(E, x) = \Sigma_{\text{tot}}(E) e^{-x \Sigma_{\text{tot}}(E)}, \quad (21)$$

ahol a szabadúthosszat x jelöli, Σ_{tot} a totális makroszkopikus hatáskeresztmetszet, $f(E, x)$ pedig a szabadúthosszak valószínűségi sűrűségfüggvénye. A szabadúthosszakat az inverz-eloszlásfüggvény módszer segítségével mintavételezhetjük, ehhez ki kell számítanunk az eloszlásfüggvényt:

$$F(E, x) = \int_0^x f(E, x') dx' = 1 - e^{-x\Sigma_{tot}(E)}, \quad (22)$$

az egyenletet invertálva mintavételezhetjük a szabadúthosszakat:

$$x = F^{-1}(E, \xi) = -\frac{1}{\Sigma_{tot}(E)} \log(1 - \xi), \quad (23)$$

ahol ξ egy egyenletes eloszlású véletlen szám a $[0, 1)$ intervallumon. A szabadúthosszakat csak abban az esetben mintavételezhetjük a 23. összefüggésnek megfelelően, ha a szabadút megtétele alatt a hatáskeresztmetszet konstans vagy szakaszosan konstans. Ellenkező esetben rejekciós eljárásokat kell alkalmazni a szabadúthosszak helyes mintavételezésére.

4.1. Szabadúthossz mintavételezése rejekciós eljárások segítségével

Fontos megjegyezni, hogy a vizsgált anyag homogenitását csak az inverz-eloszlásfüggvény módszer követeli meg. Ezt a megszorítást könnyedén feloldhatjuk rejekciós mintavételezés segítségével, ami két eloszláson alapszik: az eredeti eloszláson (21. összefüggés), valamint egy majoránsfüggvényen, melyekre:

$$f_{maj}(z) \geq f(z) \quad (24)$$

összefüggés teljesül, tetszőleges z érték esetén és ahol a majoráns, f_{maj} , mintavételezhető az inverz-eloszlásfüggvény módszer segítségével. Az elmélet szerint, ha mintavételezünk a majoráns szerint és a mintavételezett mennyiséget

$$P = \frac{f(z)}{f_{maj}(z)} \quad (25)$$

valószínűséggel fogadjuk el, akkor $f(z)$ -nek megfelelő eloszlást kapunk. Ha a mintavételezett mennyiséget nem fogadjuk el, akkor előlről kezdjük a mintavételezést, ezt mindaddig folytatjuk, amíg el nem fogadunk egyet.

A szabadúthosszak rejekciós mintavételezésén alapszik például az úgy nevezett Woodcock-módszer ([4]. módszer), amely segítségével inhomogén anyagokban mintavételezhetjük a szabadúthosszakat. A szabadúthosszakat a 23. összefüggés se-

4. Hőmérsékletfüggő mintavételezés

gítségével sorsolhatjuk, ahol a totális hatáskeresztmetszetet egy majoráns hatáskeresztmetszettel helyettesítjük, amely értéke konstans és teljesül rá a

$$\Sigma_{\text{maj}}(E) \geq \Sigma_{\text{tot}}(E, x) \quad (26)$$

összefüggés. A sorsolt szabadúthosszat ezután

$$P(E, x) = \frac{\Sigma_{\text{tot}}(E, x)}{\Sigma_{\text{maj}}(E)} \quad (27)$$

valószínűséggel fogadjuk el. Ha a sorsolt szabadúthosszat nem fogadjuk el, akkor előlről kezdjük annak mintavételezését az x helyről (azaz a neutron folytatja az útját), amíg el nem fogadjuk a szabadúthosszat.

Hőmérsékletfüggő mintavételezés esetén hasonló problémát kell megoldani. A hatáskeresztmetszetek nem (csak) térben inhomogének, hanem energia szerinti folytonos eloszlással rendelkeznek. A hatáskeresztmetszetek értékét azért nem tekinthetjük állandónak adott energiával rendelkező neutronok esetén, mert azokat a tömegközépponti rendszerben vett E' energián kell tekinteni, amely függ a neutron laboratóriumi rendszerbeli E energiájától, valamint a targetmag mozgásától.

4.2. Majoráns hatáskeresztmetszet meghatározása

A majoráns hatáskeresztmetszetet úgy kell definiálni, hogy az értéke mindig nagyobb vagy egyenlő legyen, mint a totális hatáskeresztmetszet értéke:

$$\Sigma_{\text{maj}}(E) \geq \Sigma_{\text{tot}}^0(E', x), \quad (28)$$

ahol a 0 index a 0 K-en vett hatáskeresztmetszeteket jelöli. A majoráns meghatározásához először meg kell határozni a tömegközépponti rendszerben vett E' energiához tartozó relatív sebesség, v' , értékének minimális és maximális értékét. A relatív sebesség a következő módon írható fel:

$$v' = \sqrt{v^2 + V_t^2 - 2vV_t\mu}, \quad (29)$$

ahol V_t a targetmag sebessége, μ pedig a két sebesség bezárt szögének iránykoszinusza a tömegközépponti rendszerben. Ennek a maximumát $\mu = -1$, minimumát pedig $\mu = 1$ esetben kapjuk, ekkor:

$$v'_{\text{max}} = v + V_t, \quad (30)$$

$$v'_{\text{min}} = \begin{cases} v - V_t, & \text{ha } V_t \leq v \\ 0 \approx v_0, & \text{ha } V_t > v, \end{cases} \quad (31)$$

ahol v_0 a legkisebb energiaértékhez tartozó sebességet jelöli.

A két extrémumot V_t -nek a lehető legnagyobb értéke esetén kapjuk. A targetmagok sebességének eloszlása a sebességek nagyságára felírt Maxwell-Boltzmann-eloszlást követi:

$$P_{\text{MB}}(V_t) = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \gamma^3 V_t^2 e^{-\gamma^2 V_t^2}, \quad (32)$$

ahol γ -t a 19. összefüggésben definiáltuk. Az eloszlásnak a végtelenben lecsengése van, ezért nem lehetséges a targetmag sebességének maximális értékét egzaktul meghatározni, ezért közelítést kell alkalmazni. Ha túl nagynak választjuk a maximumot, akkor nem lesz hatékony a mintavételezés, ha pedig túl kicsinek, akkor hibásan mintavételezhetünk. Ennek érdekében konvencionálisan a Maxwell-Boltzmann-eloszlást

$$V_t = \frac{4}{\gamma(T, A_n)} \quad (33)$$

sebességnél szokás levágni, ezt vehetjük V_t maximális értékének. Ez a levágás az eloszlás $5 \cdot 10^{-7}$ -ed részét vágja le, tehát nem vétünk nagy hibát a levágás alkalmazásakor.

Ezen a ponton érdemes megjegyezni, hogy a 19. egyenletben szereplő hőmérsékletet úgy kell megválasztani, hogy az inhomogén hőmérsékleteloszlású közeg esetén a közegben található maximális hőmérséklet T_{max} legyen. Ez lehetőséget ad inhomogén hőmérsékleteloszlással rendelkező közegek vizsgálatára is.

4.3. Targetmag sebességének mintavételezése

A módszer a targetmag sebességének mintavételezésével folytatódik. Ha a szabadúthosszat mintavételeztük, akkor a kölcsönhatás helyén a $P(V_t, \mu)$ eloszlásnak megfelelően mintavételezhetjük a neutron E' energiáját a tömegközépponti rendszerben. Azért, hogy konzisztens eredményt kapjunk, $P(V_t, \mu)$ -re teljesülnie kell a következő összefüggésnek:

$$\iint \Sigma_i^0(v', x) P(V_t, \mu) dV_t d\mu = \Sigma_{\text{eff}}(v, x, T), \quad (34)$$

ahol $\Sigma_{\text{eff}}(v, x, T)$ a 16. egyenletben definiált effektív hatáskeresztmetszet. A két összefüggésből következik, hogy

$$P(V_t, \mu) = \frac{v'}{2v} P_{\text{MB}}(V_t). \quad (35)$$

Az egyenletben szereplő v' faktor miatt az egyenlet közvetlen mintavételezése

nehézkés, ezért azt a következő alakba írhatjuk:

$$P(V_t, \mu) = C\gamma \frac{v'}{v + V_t} \left(2\gamma^3 V_t^3 e^{-\gamma^2 V_t^2} + B \frac{4\gamma^2}{\sqrt{\pi}} V_t^2 e^{-\gamma^2 V_t^2} \right), \quad (36)$$

ahol C konstans,

$$B = \frac{\gamma v \sqrt{\pi}}{2}, \quad (37)$$

mindkettő független V_t -től. A targetmag sebességét

$$Q = \frac{1}{1 + B} \quad (38)$$

valószínűséggel mintavételezzük a

$$P_1(V_t) = 2\gamma^3 V_t^3 e^{-\gamma^2 V_t^2} \quad (39)$$

eloszlásnak megfelelően, $1 - Q$ valószínűséggel mintavételezzük a

$$P_2(V_t) = \frac{4\gamma^2}{\sqrt{\pi}} V_t^2 e^{-\gamma^2 V_t^2} \quad (40)$$

eloszlásnak megfelelően. A sorsolt sebességet

$$P_{\text{elfogad}} = \frac{\sqrt{v^2 + V_t^2 - 2vV_t\mu}}{v + V_t} \quad (41)$$

valószínűséggel fogadjuk el, ahol μ egy egyenletes eloszlású véletlen szám a $[-1, 1]$ intervallumon. Ha nem fogadjuk el a sebességet és az iránykoszinust, akkor a mintavételezést előlről kezdjük és addig folytatjuk, amíg el nem fogadjuk azokat.

A $P_1(V_t)$ és $P_2(V_t)$ eloszlásokat a [7]. hivatkozásban található C49-es és C61 szabály segítségével mintavételezhetjük. A C49-es szabály alapján mintavételezett

$$x' = \frac{\sqrt{-\log(\xi_1 \xi_2)}}{\gamma(T, A_n)} \quad (42)$$

a $P_1(V_t)$ eloszlást követi, ahol ξ_1, ξ_2 egyenletes eloszlású véletlen számok a $[0, 1)$ intervallumon. A C67-es szabály alapján mintavételezett

$$x' = \frac{\sqrt{-\log(\xi_1) - \log(\xi_2) \cos^2(\frac{\pi}{2}\xi_3)}}{\gamma(T, A_n)} \quad (43)$$

a $P_2(V_t)$ eloszlást követi, ahol ξ_1, ξ_2, ξ_3 egyenletes eloszlású véletlen számok a $[0, 1)$

intervallumon.

4.4. A reakció helyének mintavételezése rejekció segítségével

A következő lépésben a mintavételezett v' sebességnek megfelelő E' energián rejekciót végzünk a 0 K-en vett és a majoráns hatáskeresztmetszetek segítségével. A reakció helyének, x -nek, az elfogadási valószínűsége:

$$P = \frac{\Sigma_{\text{tot}}^0(E', x)}{\Sigma_{\text{maj}}^0(E)}. \quad (44)$$

Ha a reakció helyét nem fogadjuk el, akkor a mintavételezést előlről kezdjük az x pontból. Ha a reakció helyét elfogadjuk, akkor a 0 K-en vett hatáskeresztmetszetek segítségével sorsolhatunk reakciót:

$$P_i = \frac{\Sigma_i^0(E', x)}{\Sigma_{\text{tot}}^0(E', x)}, \quad (45)$$

ahol P_i az i reakció valószínűsége.

4.5. Normálási faktor alacsony energiákon

A hőmérsékletfüggő mintavételezés a fejezetben eddig bemutatott formában nem veszi figyelembe az effektív hatáskeresztmetszet viselkedését alacsony energiákon ($E \ll k_B T$). Az energia csökkenésével a targetmagok hőmozgása egyre jelentősebb részben felel a reakciók kiváltásáért, ezért alacsony energiákon egy normálási faktort kell bevezetni. A matematikai magyarázat a 35. összefüggésben keresendő, hiszen az egyenlet alacsony energiákon nem normált V_t és μ szerint. Ha az integrálást elvégezzük, akkor a következő normálási faktort kapjuk:

$$g(v, T, A_n) = \iint P_{\text{MB}}(V_t) d\mu dV_t = \left(1 + \frac{1}{2\gamma^2 v^2}\right) \text{erf}(\gamma v) + \frac{e^{-\gamma^2 v^2}}{\sqrt{\pi}\gamma v}, \quad (46)$$

ahol $\text{erf}()$ a Gauss-féle hibafüggvény. Az effektív hatáskeresztmetszetet így a következő alakba írhatjuk:

$$\iint g(v, T, A_n) \Sigma_i^0(v', x) P_1(V_t, \mu) dV_t d\mu = \Sigma_{\text{eff}}(v, x, T), \quad (47)$$

ahol

$$P_1(V_t, \mu) = \frac{1}{g(v, T, A_n)} \frac{v'}{2v} P_{\text{MB}}(V_t). \quad (48)$$

A 47. egyenlet alapján láthatjuk, hogy a hőmozgás helyes figyelembevételéhez a 0 K-en vett hatáskeresztmetszeteket meg kell szorozni a $g(v, T, A_n)$ normálási faktoral. A majoránst is meg kell szorozni a $g(v, T, A_n)$ faktoral, mégpedig $T = T_{\max}$ hőmérsékleten, ha az anyag hőmérséklete inhomogén:

$$\Sigma_{\text{maj,korr}}(E) = g(v, T_{\max}, A_n) \Sigma_{\text{maj}}(E), \quad (49)$$

ahol $\Sigma_{\text{maj}}(E)$ -t a 4.2. fejezet alapján határozhatjuk meg.

4.6. Több izotópot tartalmazó anyagok

A több izotópot tartalmazó anyagokat az anyagra definiált majoráns hatáskeresztmetszet segítségével vizsgálhatunk.

$$\Sigma_{\text{maj,korr}}(E) = \sum_n \Sigma_{\text{maj,korr},n}(E) \cdot a_n = \sum_n g(E, T_{\max}, A_n) \Sigma_{\text{maj},n}(E) \cdot a_n. \quad (50)$$

Ezután szabadúthosszat sorsolunk $\Sigma_{\text{maj,korr}}(E)$ segítségével. A szabadúthossz megtevése után kiválasztjuk a target izotópot:

$$P_n = \frac{\Sigma_{\text{maj,korr},n}(E)}{\Sigma_{\text{maj,korr}}(E)}. \quad (51)$$

Ezután mintavételezzük az E' energiát a tömegközépponti rendszerben, melyet

$$P_{\text{elfogad}} = \frac{g(E, T(x), A_n) \Sigma_{\text{tot},n}^0(E', x)}{g(E, T_{\max}, A_n) \Sigma_{\text{maj},n}(E)} \quad (52)$$

valószínűséggel fogadjuk el. Ha nem fogadjuk el, akkor előlről kezdjük a szabadúthossz mintavételezésével x pontból. Végül pedig reakciót sorsolunk a

$$P_i = \frac{\Sigma_{i,n}^0(E', x)}{\Sigma_{\text{tot},n}^0(E', x)} \quad (53)$$

összefüggés segítségével, ahol P_i az i reakció valószínűsége.

4.7. Koordináta-rendszer transzformáció

Ez a fejezet a [6]. hivatkozás alapján készült.

A mintavételezett μ és E' a tömegközépponti rendszerben vett iránykoszinuszoknak, valamint energiának felel meg. Ha ezekből a neutron rugalmas szórás utáni energiáját, valamint a szórási szög koszinuszát akarjuk meghatározni a laboratóriu-

mi rendszerben, akkor koordináta transzformációt kell végeznünk. A szórás után a neutron energiáját a laboratóriumi rendszerben a következő összefüggés segítségével kapjuk:

$$E'_{\text{labor}} = E'_{\text{tkp}} + \frac{E + 2\mu_{\text{tkp}}(A_n + 1)\sqrt{E'_{\text{tkp}}E}}{(A_n + 1)^2}, \quad (54)$$

ahol E a neutron energiája a szórás előtt a laboratóriumi rendszerben. A szórás szögének koszinuszát a laboratóriumi rendszerben a következő összefüggés segítségével kapjuk:

$$\mu_{\text{labor}} = \mu_{\text{tkp}}\sqrt{\frac{E'_{\text{tkp}}}{E}} + \frac{1}{A_n + 1}\sqrt{\frac{E}{E'_{\text{labor}}}}. \quad (55)$$

5. Demonstráció

A hőmérsékletfüggő mintavételezés módszer helyességének ellenőrzésére különböző tesztprogramokat hoztam létre MATLAB fejlesztői környezetben. A tesztprogramok processzoron futnak és a csak módszer helyességét ellenőrzik, a módszer hatékonyságát grafikus kártyán futtatott tesztprogramokkal lenne érdemes megvizsgálni, azonban ez a jelen szakdolgozatnak nem tárgya. A tesztprogramok különböző szempontok alapján megvizsgálják és összehasonlítják a 0 K-en vett hatáskeresztmetszetekből, a 4. fejezetben ismertetett módszer alapján mintavételezett adatokat, az adott hőmérsékleten vett hatáskeresztmetszetekből számítottakkal.

A tesztprogramok számára előre rendelkezésre álltak az ACE (A Compact ENDF) formátumú ENDF ENDF/B-VII.1 hatáskeresztmetszet-könyvtárakból ([8]. hivatkozás) kinyert hatáskeresztmetszet adatok. A kapott fájlok az ^{235}U és az ^{16}O izotópok, rugalmas szóráshoz tartozó, valamint totális mikroszkopikus hatáskeresztmetszet adatait tartalmazzák 0 K, 294 K, 600 K, 900 K, 1200 K, 2500 K hőmérsékleteken, $10^{-11} - 20$ MeV energiatartományon. A kapott fájlokban található hatáskeresztmetszet adatokból a következő módon kaphatunk makroszkopikus hatáskeresztmetszetet:

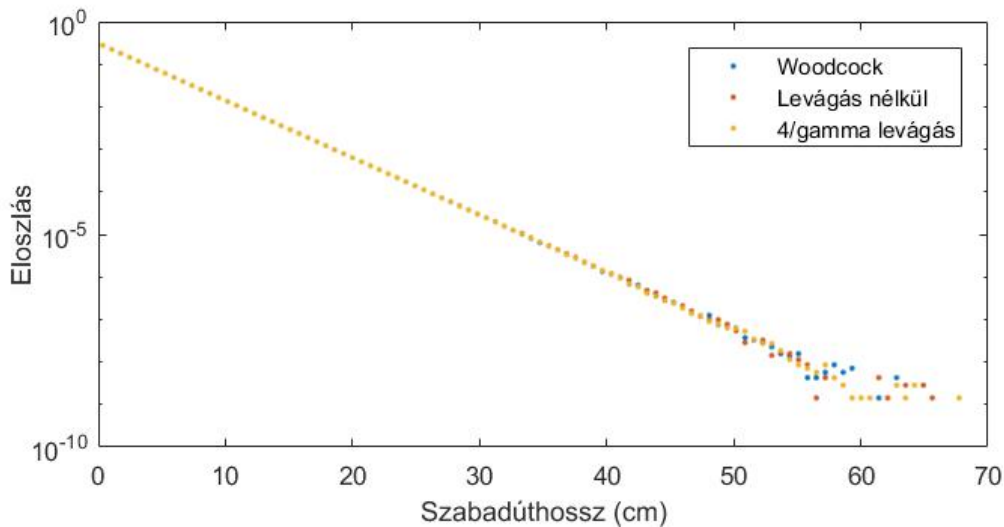
$$\Sigma(E, T, A_n) = \frac{\sigma(E, T, A_n)\rho N_A}{A_n}, \quad (56)$$

ahol $\sigma(E, T, A_n)$ a fájlban található hatáskeresztmetszet adatokat, ρ az anyag sűrűségét (g/cm^3 egységben), A_n a relatív atomtömegét, $N_A = 0.59703109$ pedig az Avogadro-számot (neutron tömegegységre átszámítva) jelöli. Az így kapott makroszkopikus hatáskeresztmetszet: $\Sigma(E, T, A_n)$ dimenziója cm^{-1} -nek adódik. Valójában az 56. egyenletben szereplő faktorok csak konstansok, vagyis a sorsolt eloszlásokra nincsen semmiféle hatásuk, emiatt az egyszerűség kedvéért a szimulációk során az oxigén sűrűségét $1 \text{ g}/\text{cm}^3$ -nek, az urán sűrűségét pedig $10 \text{ g}/\text{cm}^3$ -nek vettem minden esetben. Érdemes megjegyezni továbbá, hogy a szimulációk során az urán minden esetben 100%-os dúsítású volt, azaz 100%-ban ^{235}U -t tartalmaz.

5.1. A szabadúthosszak eloszlásának vizsgálata

A targetmagok hőmozgásának figyelembevételének következtében a szabadúthossz adott hőmérsékleten nem konkrét érték, hanem egy eloszlással rendelkező mennyiség. A Beer-Lambert-törvény értelmében, homogén közegben két ütközés között a neutronok szabadúthosszáinak eloszlása exponenciális, azaz a szabadúthosszakokat a 21. egyenlet (továbbiakban Woodcock-módszer) szerint sorsolhatjuk, ahol a nevezőben most az adott hőmérsékleten vett hatáskeresztmetszet szerepel. Az exponenciális eloszlás átlaga (várható értéke) pedig az adott hőmérsékleten vett hatáskeresztmetszet reciproka.

A tesztprogram a 0 K-en vett hatáskeresztmetszet adatokból hőmérsékletfüggő módon mintavételezett szabadúthosszak eloszlását hasonlítja össze, az adott hőmérsékleten, a Woodcock-módszernek megfelelő módon sorolt szabadúthosszak eloszlásával, a 4.2. fejezetben ismertetett $4/\gamma(T, A_n)$ levágás esetén, valamint a levágás nélküli esetben. Az összehasonlítás célja a Maxwell-Boltzmann-eloszlás levágásának a szabadúthossz eloszlására gyakorolt hatásának vizsgálata. A tesztprogram egy egydimenziós, végtelen hosszú, homogén rendszert vizsgál, melyben 600 K hőmérsékletű urán található.



2. ábra. Egyenként 10^9 sorolt szabadúthossz eloszlása ^{235}U esetén, 600 K-en, 0,0883 MeV energián, Woodcock-módszerrel, $4/\gamma(T, A_n)$ levágással, levágás nélkül sorsolt esetben. Látható, hogy a sorsolt szabadúthosszak eloszlása exponenciális (hiszen az y tengely logaritmikus beosztású), a három eloszlás nagyon jó egyezést mutat.

A 2. ábrán látható, hogy a várakozásainknak megfelelően a hőmérsékletfüggő módon mintavételezett szabadúthosszak a levágástól függetlenül exponenciális eloszlásúak, akárcsak a Woodcock-módszer esetén. Látható, hogy a három eloszlás nagyon jó egyezést mutat (50 és 70 cm között minimális eltérést tapasztalhatunk, ennek az az oka, hogy ebben a tartományba nagyon kevés szabadúthossz esik), ez

abban is megnyilvánul, hogy az eloszlások átlaga megegyezik: levágás nélküli esetben 3,2307 cm-nek, levágás esetén szintén 3,2307 cm-nek, Woodcock módszer esetén 3,231 cm-nek adódik az átlagos szabadúthossz (egyenként 10^9 sorsolt szabadúthossz esetén), míg az adott hőmérsékleten vett hatáskeresztmetszet reciproka, azaz a pontos érték 3.2309 cm. Látható, hogy a hőmérsékletfüggő mintavételezés esetén kevesebb, mint 0,1%-os relatív hibát kapunk (0,083 MeV energiájú neutronok esetén), ami kifejezetten pontosnak mondható.

A tesztprogram megmutatta, hogy az alkalmazott levágás nem okoz jelentős statisztikai eltérés a hőmérsékletfüggő módon mintavételezett szabadúthosszak esetében, vagyis a további tesztprogramok ennek megfelelően a levágást alkalmazva mintavételezik a Maxwell-Boltzmann eloszlást. Érdekes megjegyezni, hogy a levágás a tesztprogram futásidejét csökkenti, hiszen az processzoron fut, azonban a levágást egy rejekcióval lehet elvégezni, amely nem előnyös grafikus kártyán futtatott kódok esetén, azonban ez az összehasonlítás jelen szakdolgozatnak nem tárgya.

5.2. A hatáskeresztmetszetek összehasonlítása hőmérsékletfüggő mintavételezés, valamint hőmérséklet szerinti interpoláció esetén

Az 5.1. fejezetben láthattuk, hogy a hőmérsékletfüggő módon mintavételezett szabadúthossz várható értéke megegyezik az adott hőmérsékleten vett hatáskeresztmetszet reciprokával. Ebben a fejezetben bemutatott tesztprogram az átlagos szabadúthossz reciprokaként adódó hatáskeresztmetszetet hasonlítja össze az adott hőmérséklethez tartozó valós adattal, továbbá különböző hőmérséklet szerinti interpolációból adódó hatáskeresztmetszet adatokkal, mindezt különböző energiákon. Az interpolációra az ad lehetőséget, hogy különböző hőmérsékletű hatáskeresztmetszet adatok is rendelkezésre állnak, a tesztprogram célja megvizsgálni, hogy melyik módszer tudja a legpontosabban reprodukálni az adott hőmérséklethez tartozó hatáskeresztmetszet adatokat.

A tesztprogram ismét egy egydimenziós, végtelen kiterjedésű, homogén ^{235}U közeget vizsgál, amely ezúttal 900 K hőmérsékletű, így a hőmérséklet szerinti interpolációt könnyedén el lehet végezni a 600 K-hez és az 1200 K-hez tartozó hatáskeresztmetszet adatok segítségével. Adott energián a lineárisan (a 3. ábrán linear) interpolált hatáskeresztmetszet a másik két hatáskeresztmetszet átlaga:

$$S_{900}(E) = \frac{\Sigma_{600}(E) + \Sigma_{1200}(E)}{2},$$

ahol most S jelöli az interpolált hatáskeresztmetszetet, az indexek pedig az egyes hőmérsékleteket. Azonos jelöléssel, hasonlóan kapjuk log-log (a 3. ábrán loglog) interpoláció esetén:

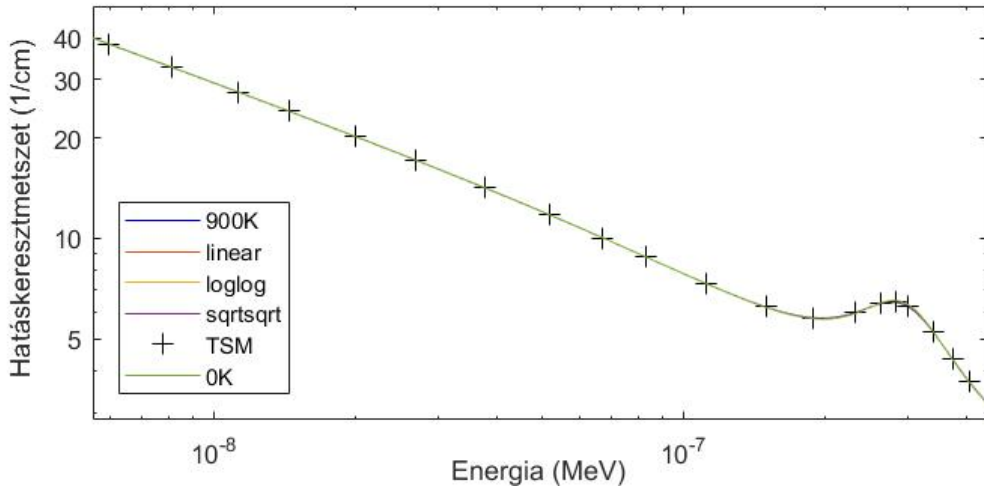
$$\log(S_{900}(E)) = \frac{\log(\Sigma_{1200}(E)) - \log(\Sigma_{600}(E))}{\log(1200) - \log(600)} \cdot (\log(900) - \log(600)) + \log(\Sigma_{600}(E)),$$

$$S_{900}(E) = \Sigma_{600}(E) \cdot \left(\frac{\Sigma_{1200}(E)}{\Sigma_{600}(E)} \right)^{\log_2(\frac{3}{2})}$$

Végül pedig gyök-gyök (a 3. ábrán sqrtsqrt) interpoláció esetén:

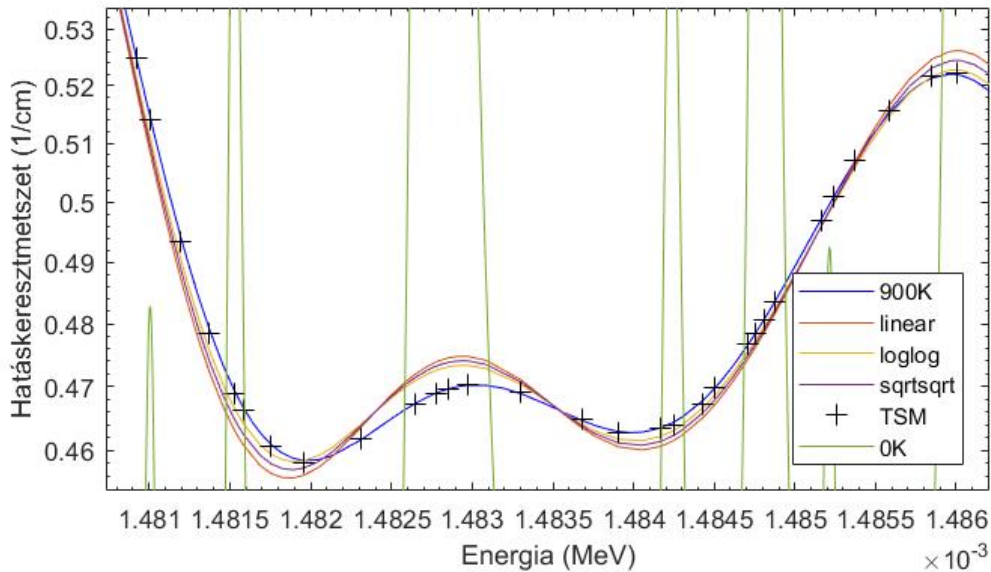
$$\sqrt{S_{900}(E)} = \frac{\sqrt{\Sigma_{1200}(E)} - \sqrt{\Sigma_{600}(E)}}{\sqrt{1200} - \sqrt{600}} \cdot (\sqrt{900} - \sqrt{600}) + \sqrt{\Sigma_{600}(E)},$$

$$S_{900}(E) = \left(\left(\sqrt{\Sigma_{1200}(E)} - \sqrt{\Sigma_{600}(E)} \right) \cdot \left(\sqrt{3} + \sqrt{\frac{3}{2}} - \sqrt{2} - 1 \right) + \sqrt{\Sigma_{600}(E)} \right)^2$$



3. ábra. A hatáskeresztmetszetek összehasonlítása hőmérsékletfüggő mintavételezés, valamint hőmérséklet szerinti interpoláció esetén, termikus tartományban, pontosként 10^7 sorsolt szabadúthossz esetén. Látható, hogy a sorsolt és a valódi hatáske- resztmetszet jó egyezést mutat.

A 3. ábrán látható, hogy termikus tartományban a hőmérsékletfüggő minta- vételezés nagyon pontosan reprodukálja az adott hőmérsékletre tartozó hatáske- resztmetszeteket. Az ábrába belenagyítva kiderül, hogy ebben a tartományban a hőmérsékletfüggő mintavételezés kevésbé pontosan reprodukálja a hatáskeresztmet- szetet, mint bármely hőmérséklet szerinti interpoláció, azonban mégis azt mond- hatjuk, hogy a módszer kellően kicsi relatív eltéréssel reprodukálja a hatáskereszt-



4. ábra. A hatáskeresztmetszetek összehasonlítása hőmérsékletfüggő mintavételezés, valamint hőmérséklet szerinti interpoláció esetén, feloldatlan rezonanciák tartományában, pontonként 10^7 sorsolt szabadúthossz esetén. Látható, hogy a sorsolt hatáskeresztmetszet pontosabban reprodukálja a valódi hatáskeresztmetszetet, mint bármelyik hőmérséklet szerinti interpoláció.

metszeteket. Megfigyelhető továbbá az is, hogy ebben a tartományban a legpontosabb hőmérséklet szerinti interpoláció a lineáris interpoláció, a legkevésbé pontos pedig a log-log interpoláció. A 4. ábrán látható, hogy a rezonanciatartományban a hőmérsékletfüggő mintavételezés pontosabb, mint bármely hőmérséklet szerinti interpoláció. Az ábráról leolvasható, hogy ebben a tartományban a legpontosabb hőmérséklet szerinti interpoláció a log-log interpoláció, a legkevésbé pontos pedig a lineáris interpoláció.

A tesztprogram megmutatta, hogy a módszer teljes mértékben alkalmas az adott hőmérsékleten vett hatáskeresztmetszet reprodukálására, a termikus tartományban kellő pontossággal reprodukálja a hatáskeresztmetszeteket, a rezonanciatartományban pedig még a hőmérséklet szerinti interpolációs módszereknél is pontosabb.

5.3. Relatív eltérés és mintavételezési hatékonyság a teljes energiatartományon

Az ebben a fejezetben bemutatott tesztprogram azt vizsgálja meg, hogy a hőmérsékletfüggő módon mintavételezett hatáskeresztmetszeteknek mekkora a relatív eltérése az adott hőmérsékleten vett hatáskeresztmetszetektől, emellett a mintavételezés hatékonyságát is megvizsgálja, mindezt a teljes energiatartományon.

A tesztprogram ismét egy egydimenziós, végtelen kiterjedésű, homogén, 900 K hőmérsékletű ^{235}U közeget, majd egy 600 K hőmérsékletű ^{16}O vizsgál, a teljes energiatartományon logaritmikusan elosztva 123 pontban, azaz nagyságrendenként körülbelül 10 pontban. A relatív eltérést az alábbi összefüggés szerint kapjuk:

$$\frac{\Delta\Sigma}{\Sigma} = \frac{\Sigma_{sorsolt}(E, T, A_n) - \Sigma(E, T, A_n)}{\Sigma(E, T, A_n)},$$

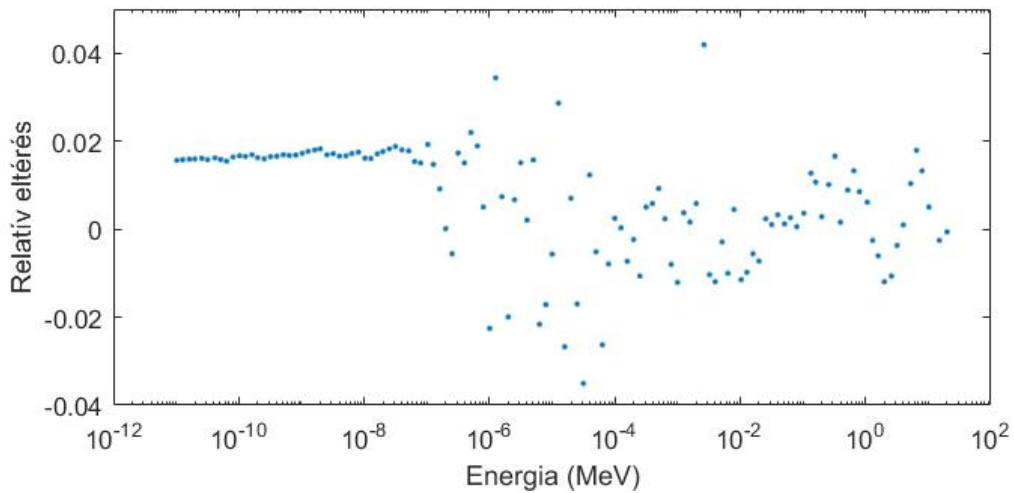
ahol a baloldalon álló kifejezés a relatív eltérést, $\Sigma_{sorsolt}(E, T, A_n)$ a hőmérsékletfüggő módon mintavételezett hatáskeresztmetszetet, $\Sigma(E, T, A_n)$ pedig az adott hőmérsékleten vett hatáskeresztmetszetet jelöli.

A módszer hatékonyságát leginkább a 44. összefüggésben látható rejekció mintavételezési hatékonyságával lehet jellemezni. A tesztprogram a hatékonyságot a rejekció elfogadási valószínűségével jellemzi. Fontos megjegyezni, hogy a 4.2. fejezetben említett $4/\gamma$ levágást egy rejekcióval lehet elvégezni és a tesztprogram az ebből adódó járulékot is beleszámítja a mintavételezés hatékonyságába, azonban, ahogy az említett fejezetben láthattuk ez a sorsolt szabadúthosszak $5 \cdot 10^{-7}$ -ed részénél egy plusz rejekciót jelent, a hatékonyság pedig minden energián nagyobb, mint 10^{-2} , így a levágásból adódó hiba ismét elhanyagolható.

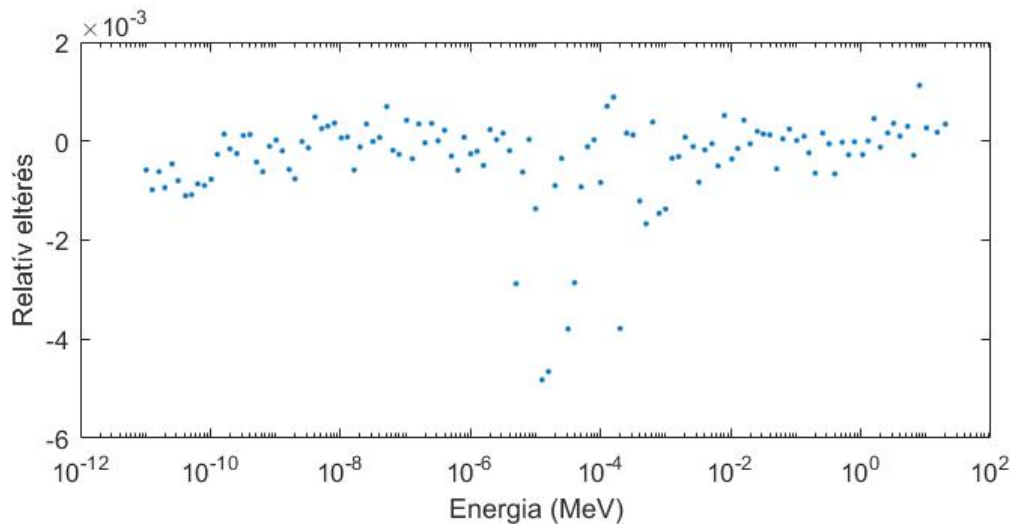
Az 5. ábrán látható a mintavételezett hatáskeresztmetszetek relatív eltérése 900 K hőmérsékletű ^{235}U közeg esetén, pontonként 10^7 sorsolt szabadúthossz esetén. Látható, hogy egyes energiákon (főként a feloldatlan rezonanciák tartományában, $10^{-6} - 10^{-2}$ MeV között) a relatív eltérés eléri a 4%-ot, amely nem mondható igazán pontosnak. A pontatlanság oka a 44. összefüggésben látható $\Sigma_{tot}^0(E', x)$ kifejezés mintavételezéséből adódik. A problémát az okozza, hogy a hatáskeresztmetszet adatok energia szerint sűrűek, azonban nem folytonosak, ezért energia szerint interpolálni kell a hatáskeresztmetszeteket. Az 5. ábrán látható relatív eltérés energia szerinti lineáris interpoláció segítségével lett mintavételezve. Sokkal kisebb relatív eltérést kapunk a mintavételezett hatáskeresztmetszetekre, ha a lineáris helyett log-log interpolációt használunk, ezt a 6. ábrán láthatjuk (szintén 900 K hőmérsékletű ^{235}U esetén). Az ábrán láthatjuk, hogy a legnagyobb relatív eltérés ismét a feloldatlan rezonanciák tartományában található, értéke körülbelül 0,5%, az átlagos relatív eltérés pedig kevesebb, mint 0,2%. A 7. ábrán látható a mintavételezett hatáskeresztmetszetek relatív eltérése 600 K hőmérsékletű ^{16}O közeg, energia szerinti log-log interpoláció (pontonként 10^7 sorsolt szabadúthossz) esetén. Látható, hogy az átlagos relatív eltérés ezúttal még kisebb, mint az urán esetén, körülbelül 0,1%, továbbá megfigyelhető, hogy a legnagyobb relatív eltérést a termikus tartományban lehet tapasztalni, értéke ismét körülbelül 0,5%.

A mintavételezés hatékonysága mindkét interpoláció esetén ugyanolyannak bizonyult. Az urán esetében hatékonyság minimuma körülbelül 32 eV-n (tehát a feloldatlan rezonanciák tartományában) volt, a hatékonyság itt 2,6%-nak adódott. A maximális hatékonyság 100% volt a feloldott rezonanciák tartományában több energián is. Az átlagos mintavételezési hatékonyság 52,7%-nak adódott 123 pont

5. Demonstráció



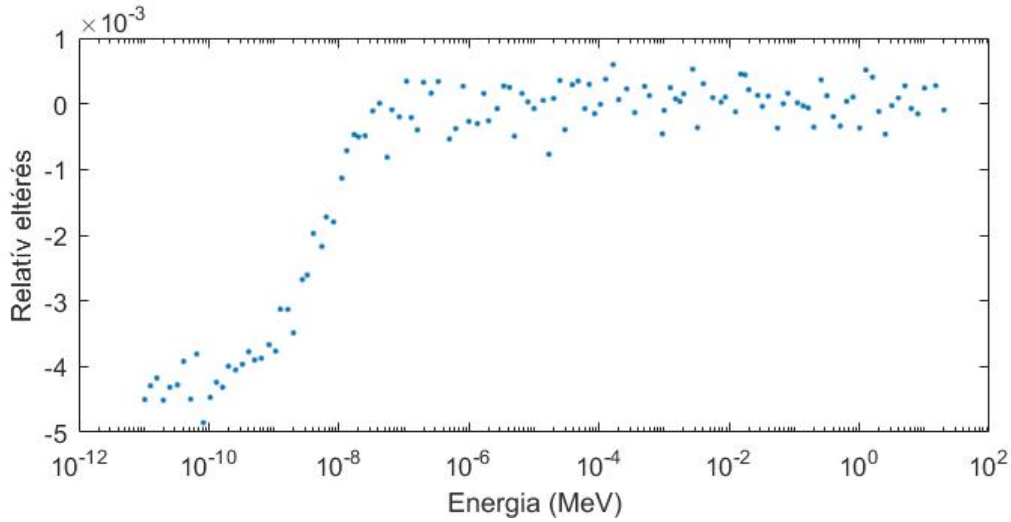
5. ábra. A hatáskeresztmetszetek relatív eltérése, 900 K hőmérsékletű ^{235}U közeg, energia szerinti lineáris interpoláció esetén. Látható, hogy az relatív eltérés viszonylag nagy, ezért nem célszerű ezt az interpolációt alkalmazni.



6. ábra. A hatáskeresztmetszetek relatív eltérése, 900 K hőmérsékletű ^{235}U közeg, energia szerinti log-log interpoláció esetén. Látható, hogy az relatív eltérés sokkal kisebb, mint lineáris interpoláció esetén.

esetén. Az oxigén esetében a minimális hatékonyság 87,8%-nak adódott, 0,4 MeV energián. A legtöbb energián a hatékonyság 100%-nak, az átlagos hatékonyság pedig 97,3%-nak adódott 123 pont esetén.

A tesztprogram megmutatta, hogy ha igazán pontosan szeretnénk mintavételezni a hatáskeresztmetszetet, akkor az energia szerint lineáris interpoláció helyett log-log interpolációt kell alkalmaznunk. Fontos megjegyezni, hogy bár a mintavételezési



7. ábra. A hatáskeresztmetszetek relatív eltérése, 600 K hőmérsékletű ^{16}O közeg, energia szerinti log-log interpoláció esetén. Látható, hogy a hőmérsékletfüggő mintavételezés oxigén esetén is kis relatív eltéréssel reprodukálja a való hatáskeresztmetszetet.

hatékonyság nem függ az interpolációtól, futási időben mégis megjelenik a különbség, hiszen egy log-log interpolációt a tesztprogramok alapján átlagosan háromszor több ideig tart elvégezni, mint egy lineáris interpolációt. Ennek megfelelően az előzőekben ismertetett tesztprogramok, akárcsak az ezután következők mind energia szerinti log-log interpolációt használnak.

5.4. Hőmérsékletfüggő mintavételezés transzportfolyamatokban

Az eddigiekben bemutatott tesztprogramok megmutatták, hogy a hőmérsékletfüggő módon mintavételezett szabadúthosszak eloszlása megegyezik az adott hőmérsékleten vett hatáskeresztmetszetből számítottakkal, továbbá láthattuk azt is, hogy a hatáskeresztmetszeteket is kicsi relatív hibával (átlagosan 0,2%) tudjuk reprodukálni az átlagos szabadúthossz reciprokaként. Az ebben a fejezetben bemutatott tesztprogram a kis relatív eltérés hatását vizsgálja meg egy transzportfolyamat során.

Az utolsó tesztprogramban ezúttal egy háromdimenziós, 600 K hőmérsékletű, végtelen kiterjedésű ^{16}O közeget vizsgálunk, melyben felvesszünk egy origó középpontú gömböt, amelynek a sugara:

$$R = \frac{3}{\Sigma_{tot}(E, T, A_n)},$$

ahol $\Sigma_{tot}(E, T, A_n)$ az adott hőmérsékleten vett totális hatáskeresztmetszet. A gömb sugarát azért célszerű ekkorának választani, hogy a neutronok ki tudjanak szökni a gömbből, de ne azonnal (szóródás nélkül). Természetesen, mivel a szabadúthosszak eloszlása exponenciális ezért mindig lesz olyan neutron, amely az első sorsolt szabadúthossz megtétele közben kiszökik a gömbből, ezért a kapott spektrumból a szimuláció végén ki kell venni a forrásenergiával rendelkező neutronokat. Az oxigénre azért esett a választás, ugyanis rugalmas szórás esetén akkor lehet a legnagyobb energiát átadni, ha a két ütköző test tömege minél közelebb esik egymáshoz, a rendelkezésre álló adatok alapján erre az oxigén a legalkalmasabb. Továbbá célszerű kis energiájú neutronokkal vizsgálni, hiszen minél kisebb a neutron energiája, annál fontosabb a targetmagok hőmozgásának hatása, valamint annál szélesebb energiaspektrumot kapunk.

A tesztprogram célja az origóból indított monoenergiás neutronok energiaspektrumának a vizsgálata a gömb határán, hőmérsékletfüggő módon mintavételezett szabadúthosszak és reakció valószínűségek esetén, valamint az adott hőmérsékleten vett hatáskeresztmetszetekből mintavételezett esetben. Mivel csak rugalmas szórás és totális hatáskeresztmetszet adatok állnak rendelkezésre, ezért a tesztprogram a következő egyszerűsítést teszi:

$$\Sigma_{tot}(E, T, A_n) - \Sigma_{r.sz.}(E, T, A_n) = \Sigma_{abszorpcio}(E, T, A_n), \quad (57)$$

azaz, ha nem szóródik adott helyen a neutron, akkor elnyelődik, nem ad járulékot a spektrumba. Oxigén esetén kis energián a rugalmas szórás dominál, hiszen a 4. fejezetben láthattuk a rugalmas szórás hatáskeresztmetszetének energiafüggését, ennek következtében a részecskék kevesebb, mint 0,01%-a fog elnyelődni, ami valójában előnyös a tesztprogram szempontjából hiszen a szórt neutronok energiaspektrumára vagyunk kíváncsiak.

A hőmérsékletfüggő mintavételezés esetében egyértelmű a mintavételezés menete (4. fejezet), azonban a referencia esetben nem teljesen egyértelmű. Referencia alatt az adott hőmérsékleten vett hatáskeresztmetszetek segítségével mintavételezett spektrumot értjük és a mintavételezés folyamata a 4. fejezetben ismertetett konstans hatáskeresztmetszet modell alapján történik. Hasonlóan a hőmérsékletfüggő mintavételezéshez először mintavételezzük a targetmag sebességét, majd a szórás iránykoszinuszát és a szórás utáni energiát, majd ha ezek megfelelnek a rejekeciós feltételnek, akkor elfogadjuk őket, ha nem akkor előlről kezdjük a mintavételezésüket. A szabadúthosszakat pedig rejekeció nélkül az exponenciális eloszlásnak megfelelően sorsoljuk, a totális hatáskeresztmetszet segítségével:

$$x = \frac{-1}{\Sigma_{tot}(E, T, A_n)} \log(1 - \xi),$$

ahol ξ egy egyenletes eloszlású véletlen szám a $[0, 1)$ intervallumon.

A neutronok izotróp irányeloszlás szerint indulnak az origóból, az energiájuknak

megfelelő sebességgel és a mintavételezett szabadúthossznak megfelelő távolságot tesz meg. A szabadúthossz megtétele után a neutronok szóródnak (vagy elnyelődnek) a sorolt iránykoszinusznak megfelelően, továbbá megváltozik az energiájuk és így a sebességük is. Azok a neutronok, amelyek nagy energiára tettek szert gyorsabbak a többinél, ezért ezek a neutronok előbb érnek a gömb széléhez, így egy jellegzetes kiszökési idő–kiszökési energia karakterisztikát kapunk. Fontos azonban, hogy a kiszökött neutron kiszökési ideje pontosan az az idő, amely alatt elérte a gömb határát, tehát ha egy neutron kiszökik azt vissza kell vezetni a gömb felületére, erre azért van szükség hiszen a szabadúthosszak mintavételezésére Woodcock-módszert alkalmazunk. Ehhez ismerni kell egy gömb és egy a gömböt metsző félegyenes metszéspontjának a helyét, melyet origó középpontú gömb esetén a következő módon határozhatunk meg:

$$d = -\mathbf{r} \cdot \mathbf{v} - \sqrt{(\mathbf{r} \cdot \mathbf{v})^2 - (|\mathbf{r}|^2 - R^2)},$$

ahol \mathbf{v} a félegyenes irányába mutató egységvektor, \mathbf{r} az egyenes egy tetszőleges pontja (esetünkben a neutron kiszökés előtti helyzete), R pedig a gömb sugara.

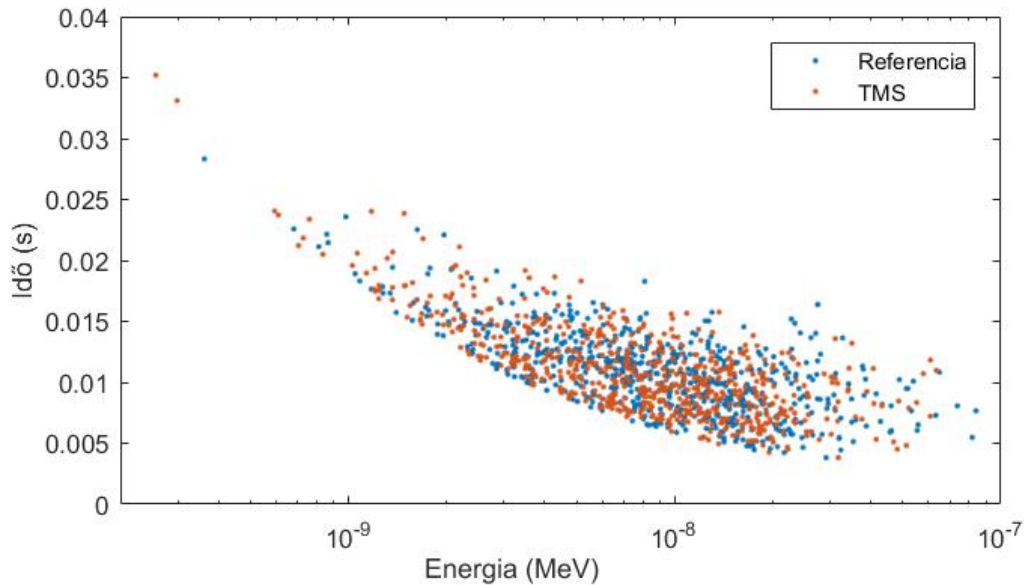
A mintavételezett iránykoszinusz és energia, hőmérsékletfüggő mintavételezés és a referencia esetén egyaránt a tömegközépponti rendszerben vett iránykoszinuszt és energiát jelenti, amelyet először át kell transzformálni a laboratóriumi rendszerbe, amelyet az 54. illetve az 55. egyenletek segítségével tehetünk meg. Az így kapott iránykoszinuszból izotróp módon sorsolhatjuk az eltérülés irányát, a z tengely körül:

$$\mathbf{v} = (\sin(\arccos \mu) \cos \varphi, \sin(\arccos \mu) \sin \varphi, \mu),$$

ahol φ egy egyenletes eloszlású véletlen szám a $[0, 2\pi)$ intervallumon. Ezt az irányt ezután átranszformálhatjuk a beérkező neutron $\mathbf{e} = (e_1, e_2, e_3)$ irányába, a következő \mathbf{T} transzformációs mátrix segítségével: $\mathbf{v}' = \mathbf{T} \cdot \mathbf{v}$, ahol

$$\mathbf{T} = \begin{bmatrix} \frac{e_2}{\sqrt{e_1^2 + e_2^2}} & \frac{e_1 \cdot e_3}{\sqrt{e_1^2 + e_2^2}} & e_1 \\ \frac{e_1}{\sqrt{e_1^2 + e_2^2}} & \frac{e_2 \cdot e_3}{\sqrt{e_1^2 + e_2^2}} & e_2 \\ 0 & -\sqrt{e_1^2 + e_2^2} & e_3 \end{bmatrix}.$$

A 8. ábrán a neutronok kiszökési idő–kiszökési energia karakterisztikája látható hőmérsékleti mintavételezés esetén, valamint a referencia esetben. Látható, hogy a két karakterisztika hasonlít egymásra, de a spektrális tulajdonságok vizsgálata nélkül nem tudjuk megállapítani a hasonlóság mértékét. A karakterisztika jellegzetességét az adja, hogy a gömb határára adott energiával érkező neutronoknak legalább az energiától függő küszöbideig tart eljutni a gömb szélére, valamint minél nagyobb a neutron energiája, általában annál hamarabb ér a gömb határára. Az ábrán a szórás nélkül, egyből kiszökő neutronok mind egy pontban vannak, hiszen közülük valamennyi forrásenergiával rendelkezik, ennek a pontnak a helyét pontosan

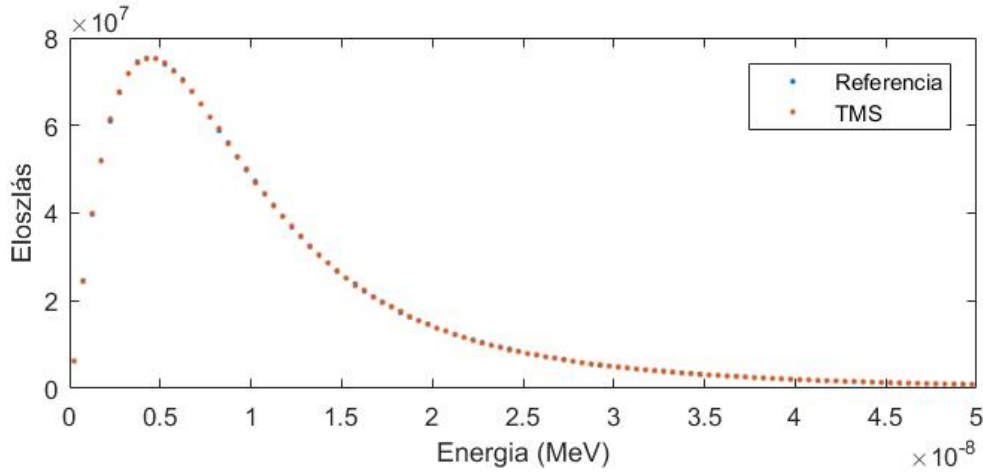


8. ábra. A kiszökő neutronok kiszökési idő–kiszökési energia karakterisztikája hőmérsékletfüggő mintavételezés esetén, valamint a referencia esetben, 1000-1000 neutron esetén a jobb átláthatóság érdekében. Látható, hogy a két karakterisztika megegyezik.

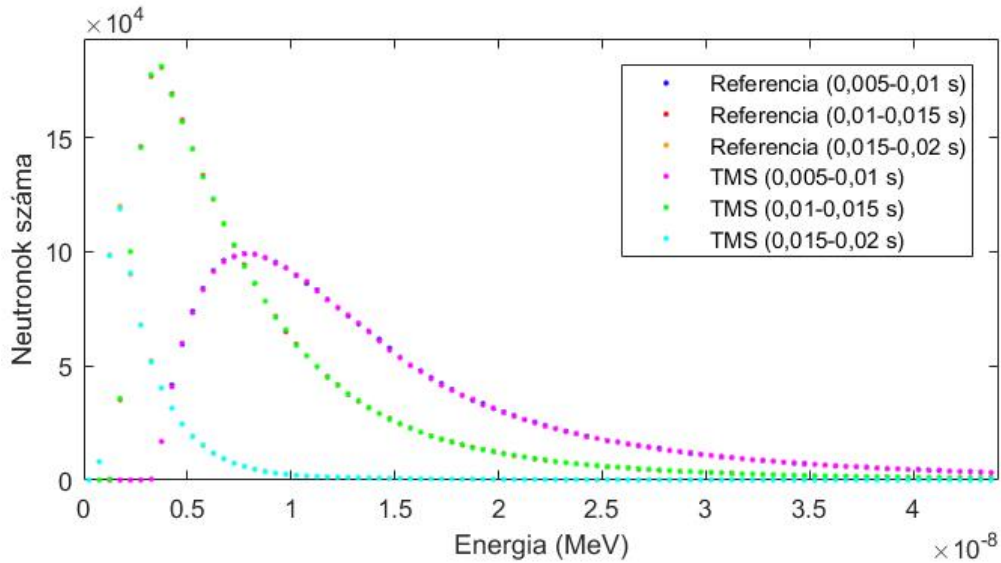
megkaphatjuk. A forrásenergia a szimuláció során $7,273 \cdot 10^{-10}$ MeV volt, ez alapján a forrásenergiával rendelkező neutronok sebessége 373,01 m/s volt. A forrásenergián az ^{16}O totális hatáskeresztmetszete $0,3684 \text{ cm}^{-1}$, így a gömb sugara az 57. összefüggés alapján 8,14 cm volt, ezek alapján pedig a neutronok kiszökési ideje 0,0218 s.

A 9. ábrán láthatjuk a határra érkező neutronok energiaspektrumát, hőmérsékletfüggő mintavételezés esetén, valamint a referencia esetben, látható, hogy a két spektrum megegyezik. A sorsolt 10^7 neutron közül hőmérsékletfüggő mintavételezés esetén 1021, a referencia esetben 996 neutron nyelődött el a gömb belsejében, ami a neutronok 0,01%-át jelenti, ilyen kis valószínűség mellett ekkora eltérés nem számottevő. A spektrumokból levágott forrásenergiával rendelkező neutronok száma hőmérsékletfüggő mintavételezés esetén 3506676, a referencia esetben pedig 3504060 volt, azaz a neutronok körülbelül 35%-a szökött ki, az relatív eltérés a referenciához képest pedig 0,07%.

A két karakterisztika még pontosabb összehasonlításához érdemes megvizsgálni a határra érkező neutronok energiaspektrumát különböző kiszökési időintervallumok esetén, valamint a határra érkező neutronok kiszökési időspektrumát különböző kiszökési energiaintervallumokban. A 10. ábrán a kiszökő neutronok energiaspektrumát láthatjuk, három különböző időintervallumban: 0,005–0,01 s, 0,01–0,015 s, 0,015–0,02 s. Az eloszlások ebben az esetben nem normáltak, hogy a neutronok számát az egyes intervallumok között is össze lehessen hasonlítani. Látható, hogy az

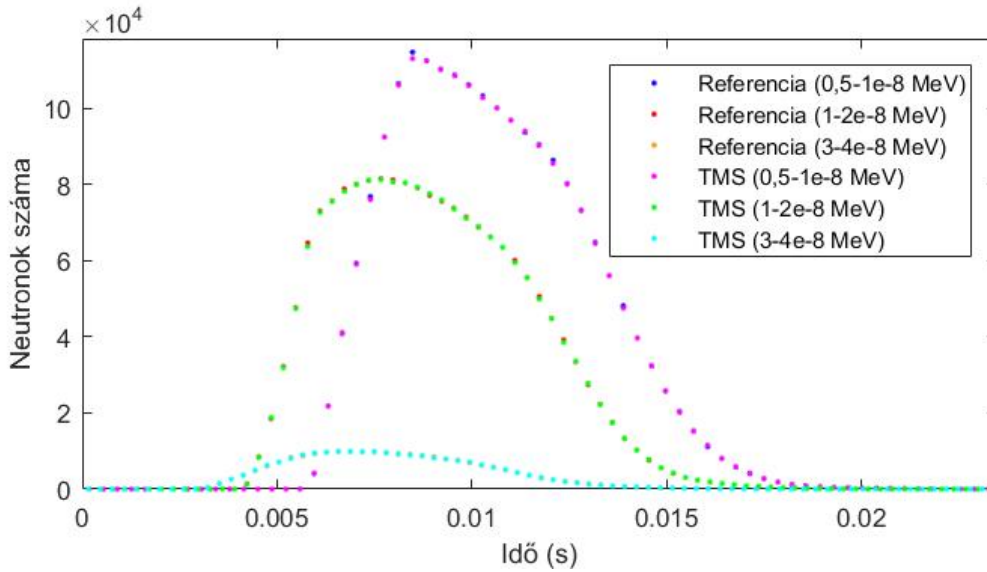


9. ábra. A kiszőkő neutronok energiaspektruma a gömb határán, az egyből kiszőkő neutronok nélkül, hőmérsékletfüggő mintavételezés esetén, valamint a referencia esetben, egyenként 10^7 neutron esetén. Látható, hogy a két spektrum teljesen megegyezik.



10. ábra. A kiszőkő neutronok energiaspektruma hőmérsékletfüggő mintavételezés esetén, valamint a referencia esetben, egyenként 10^7 neutron esetén, különböző kiszőkési időintervallumok esetén. Látható, hogy az energiaspektrumok minden időintervallumon belül teljesen megegyeznek.

energiaspektrumok mindhárom időintervallumon belül megegyeznek. A 11. ábrán a kiszőkő neutronok időspektrumát láthatjuk három különböző energiaintervallum esetén: $(0, 5 - 1) \cdot 10^{-8}$ MeV, $(1 - 2) \cdot 10^{-8}$ MeV, $(3 - 4) \cdot 10^{-8}$ MeV. Az eloszlások ezúttal sem normáltak. Látható, hogy a spektrumok ismét mindhárom intervallumon



11. ábra. A kiszökő neutronok kiszökési időspektruma hőmérsékletfüggő mintavételezés esetén, valamint a referencia esetben, egyenként 10^7 neutron esetén, különböző kiszökési energiaintervallumok esetén. Látható, hogy a spektrumok minden intervallumon belül jó egyezést mutatnak.

belül megegyeznek.

A tesztprogram megmutatta, hogy a hőmérsékleti mintavételezés különösen pontosan reprodukálja a referencia transzportfolyamatot, a szabadúthossz mintavételezés kicsi relatív eltérése nincs hatással a transzportfolyamatra.

6. Összefoglalás és kitekintés

A szakdolgozatom keretein belül megismerkedtem a neutron transzport kódok, valamint a hőmérsékletfüggő mintavételezés elméleti hátterével. A szakdolgozat készítése közben először felülvizsgáltam a Maxwell-Boltzmann eloszlás mintavételezését, azonban ez nem került bele a szakdolgozatba. Megvalósítottam a hőmérsékletfüggő mintavételezést MATLAB fejlesztői környezetben és az 5. fejezetben bemutatott tesztprogramok segítségével összehasonlítottam azt a tradicionális konstans hatáskeresztmetszet modellnek megfelelő mintavételezéssel, különböző egyszerű esetekben. A módszer a várakozásaimat felülmúlva teljesített, meglepően pontosan reprodukálta a szabadúthosságokat, a hatáskeresztmetszetek és a reakcióvalószínűségeket is. A módszert mindig csak homogén hőmérsékleteloszlású, valamint egyetlen izotópot tartalmazó anyagon vizsgáltam, azonban a módszer képes inhomogén hőmérsékleteloszlások, valamint többatomos anyagok szimulációjára is.

A módszer implementását az egyetemen fejlesztett GUARDYAN kódba mindenképpen javaslom a kód fejlesztőinek, hiszen a módszer alkalmazásával a hatáske-

resztmetszet adatok memóriaigénye nagymértékben csökkenthető, továbbá láthatuk, hogy a módszer pontosabb, mint a hőmérséklet szerinti interpoláció. Mivel a tesztprogramokat processzoron futtattam és nem grafikus kártyán, ezért nem tudom pontosan, hogy a módszer melyik változata (például: Maxwell-Boltzman-eloszlás levágásának kérdése) legalkalmasabb a grafikus kártyán való futtatáshoz, ennek vizsgálata egy érdekes feladat lehet. A módszer jelenlegi formájában lassabb, mint a tradicionális módszerek, de a módszeren még nagyon sokat lehet optimalizálni. Egy ilyen lehetséges optimalizációs módszer lehet, hogy a 0 K-en vett hatáskeresztmetszetek helyett, nullánál magasabb hőmérsékleten vett hatáskeresztmetszetekkel végezzük a szimulációkat, azonban ezt a lehetőséget még tanulmányozzák ([3]. hivatkozás).

Irodalomjegyzék

- [1] <http://awing.reak.bme.hu/GUARDYAN>
- [2] Molnar B., *A GPU based direct Monte Carlo Simulation*, 2018.
- [3] T. Viitanen, *Development of a stochastic temperature treatment technique for Monte Carlo neutron tracking*, 2015.
- [4] E. Woodcock, et al., *Techniques used in the GEM code for Monte Carlo neutronics calculations in reactors and other systems of complex geometry*, 1965.
- [5] J. F. Briesmeister, et al., *MCNP-A general Monte Carlo N-particle transport code*, 2000.
- [6] Tolnai G., *GUARDYAN fejlesztési segédlet*, 45-46, 2018.
- [7] Everett, C.J., and Cashwell, E.D., *Third Monte Carlo sampler. Revision and extension of samplers I and II.*, 1983.
- [8] <https://www.nndc.bnl.gov/endl/b7.1/acefiles.html>