



РФЯЦ-ВНИИТФ  
РОСАТОМ

# Потребности в ядерно- физических расчетах при уточнении библиотек ядерных данных

В.А.Адарченко, ФГУП «РФЯЦ – ВНИИТФ им. академ. Е.И.Забабахина»  
О.Н.Андрианова, ВНИИАЭС

Сессия-конференция «Физика фундаментальных  
взаимодействий»,  
Секция ЯФ ОФН РАН, г. Москва,  
17-21 февраля 2025 года

# Основная проблема

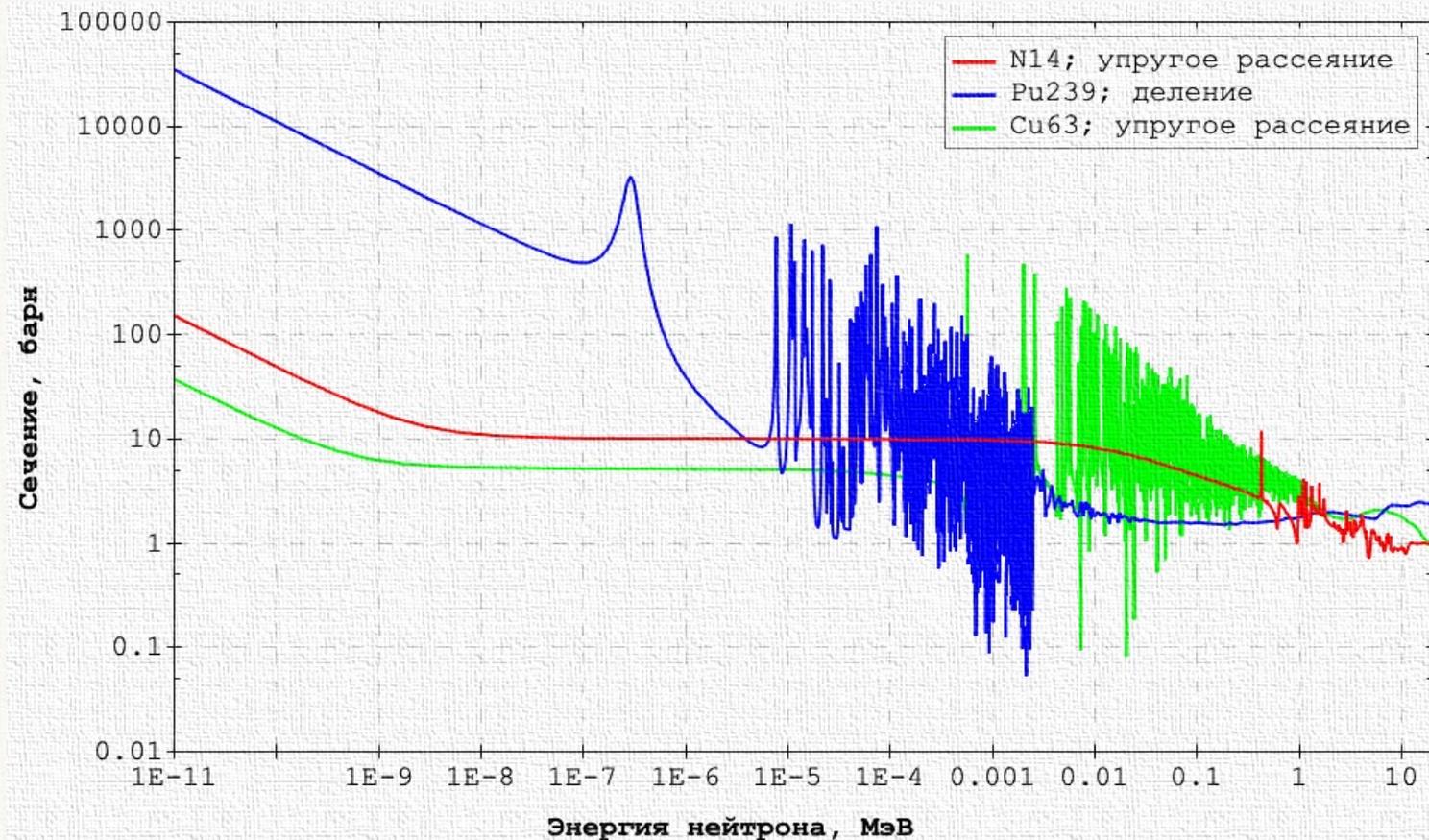
**Уточнение данных** о нейтронно-ядерных реакциях для ряда изотопов с целью **достижения требуемого уровня точности расчетных предсказаний** нейтронно-физических характеристик ядерных энергетических установок.

## В докладе:

- Проблема рассмотрена на примере  $^{239}\text{Pu}$ ,
- Отмечена роль ядерно-физических расчетов в решении проблемы.

# Предмет исследования

Данные о нейтронно-ядерных реакциях на легких, средних и тяжелых ядрах. Энергия нейтронов: от  $10^{-5}$  эВ до 20 МэВ



# Что есть в наличии



Есть база национальных ENDF-библиотек\*)

## «нейтронные константы»

ENDF/B-VIII.0 (США) [1]

JEFF-3.3 (ЕС) [2]

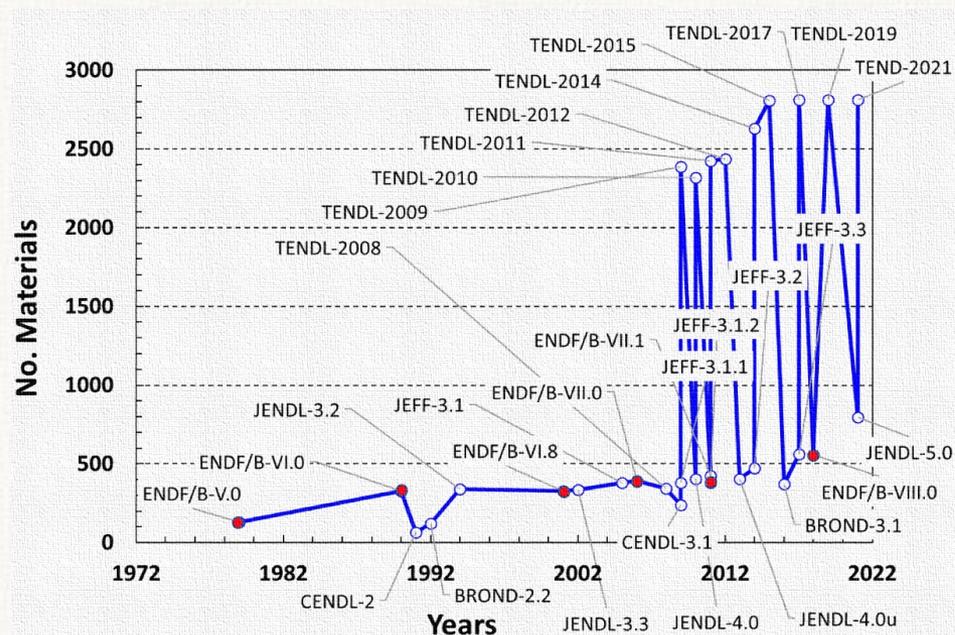
JENDL-5.0 (Япония) [3]

РОСФОНД-2010 (Россия) [4]

CENDL-3.1 (Китай) [5]

TENDL-2019 (---) [6]

**Существующие данные для  $^{239}\text{Pu}$  не позволяют удовлетворить требуемому уровню точности в расчетах**



\*) Evaluated Nuclear Data Files. Report BNL-90365-2009, BNL (2012).

[1] <https://doi.org/10.1016/j.nds.2018.02.001> ,

[2] <https://doi.org/10.1140/epja/s10050-020-00141-9>

[3] DOI: 10.1080/00223131.2022.2141903

[4] Забродская С.В., и др. РОСФОНД ... // ВАИТ. Серия: Ядерные константы. - 2007. - №1-2. - С. 3-21. <https://www.ippe.ru/reactors/reactor-constants-database/rosfond-neutron-database>

[5] Z.G.Xe et al. J. of the Korean Phys. Soc. (2023), V.59, No.2, pp.1052-1056

[6] A.J.Koning et al. TENDL: Complete Nuclear Data Library for Innovative Nuclear Science and Technology, Nuclear Data Sheets 155 (2019)



# Проверка точности ядерных данных в интегральных экспериментах

Максимальные собственные значения уравнения переноса нейтронов для проверки точности ядерных данных

- $k$  - эффективный коэффициент размножения нейтронов ( $K_{эфф}$ ),
- $\alpha$  - асимптотическая постоянная спада нейтронов.

Время генерации (жизни) нейтронов  $\tau = \frac{k-1}{\alpha}$  [1, 2]

## Требования к точности расчетов

- для значения  $K_{эфф}$  систем в критическом состоянии погрешность не более **0.1%**
- для времени жизни погрешность не более **1%**



[1] Бесов С.С., Ершова Л.С., Костенко И.И., Лукин А.В., Соколов Ю.А., Хатунцев К.Е., Хмельницкий Д.В., «Оценка погрешности расчётов времени жизни мгновенных нейтронов в системе из металлического плутония», Атомная Энергия, 2013, 114, №3, с.165-168

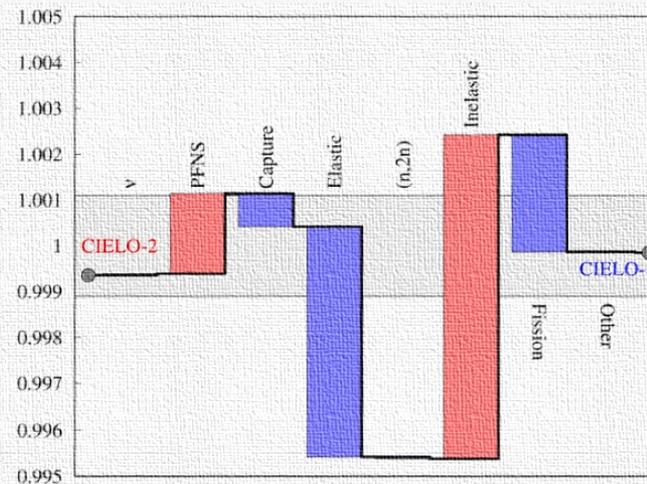
[2] Бесов С.С., Ершова Л.С., Костенко И.И., Лукин А.В., Самойлова Л.Ю., Соколов Ю.А., Хмельницкий Д.В. Верификация нейтронных констант по результатам нестационарных экспериментов с размножающими системами // Атомная энергия, 2011, 110, №4, с. 231-236

# Оценка точности данных $^{239}\text{Pu}$ в интегральных экспериментах



- Большая «константная» неопределенность в  $k_{эфф}$  [1]
- Компенсирующие друг друга погрешности в ядерных данных [2]
- Значимые расхождения  $\tau$  между расчетом и экспериментом [3]

Расчетная и экспериментальная неопределенность в $k$ , %		
	ENDF/B-VIII	JEFF-3.3
(n,f)	0.90	0.31
$\nu_{fiss}$	0.24	0.41
СМНД	0.19	0.44
(n,n)	0.46	0.09
(n,n')	0.80	0.15
(n, $\gamma$ )	0.07	0.03
сумма	1.03	0.65
Эксп. погр	0.11	



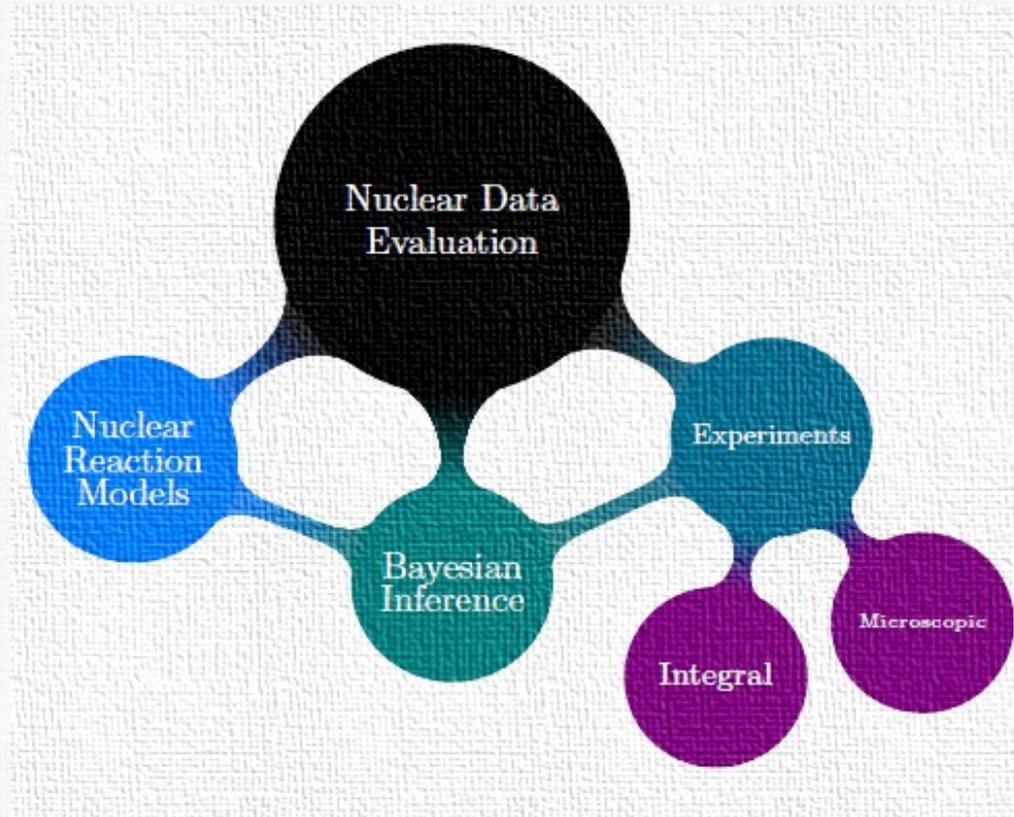
Время жизни в расчете и эксперименте, нс		
	сред.	отл.
ENDF/B-VII	3.03	-6%
JEFF-3.2	3.02	-6%
JENDL-4.0	2.95	-9%
БРОНД-3.1	3.04	-6%
	знач.	погр.
Эксперимент	3.23	1%

[1] D.A.Brown et al NDS **148** (2018) 1-142, <https://doi.org/10.1016/j.nds.2018.02.001>

[2] M.V.Chadwick et al NDS **148** (2018) 189-213

[3] Адарченко В.А., Андреев С.А., Бесов С.С., Вайвод А. А., Ершова Л.С., Хмельницкий Д.В., Юдов А.А. Интегральные эксперименты с размножающими системами из металлического плутония в  $\alpha$  и  $\delta$ -фазе. Всероссийская конференция «Нейтроника-2024», АО «ГНЦ РФ - ФЭИ», г. Обнинск

# Что нужно для корректировки. ENDF/V на пути к новым оценкам!



1. Микроскопические эксперименты
2. Модели ядерных реакций, реализованные в кодах
3. Метод настройки параметров модели и оценки их погрешности
4. Интегральные опыты для проверки качества и достоверности оценок
- ~~5. Обратная связь 4 $\leftrightarrow$ 3~~

Иллюстрация из C. De Saint Jean et al. Evaluation of Neutron-induced Cross Sections and their Related Covariances with Physical Constraints // Nuclear Data Sheets 148 (2018) 383-419, <https://doi.org/10.1016/j.nds.2018.02.010>



# Микроскопические эксперименты

Большая часть - в библиотеке EXFOR [www-nds.iaea.org/exfor](http://www-nds.iaea.org/exfor)

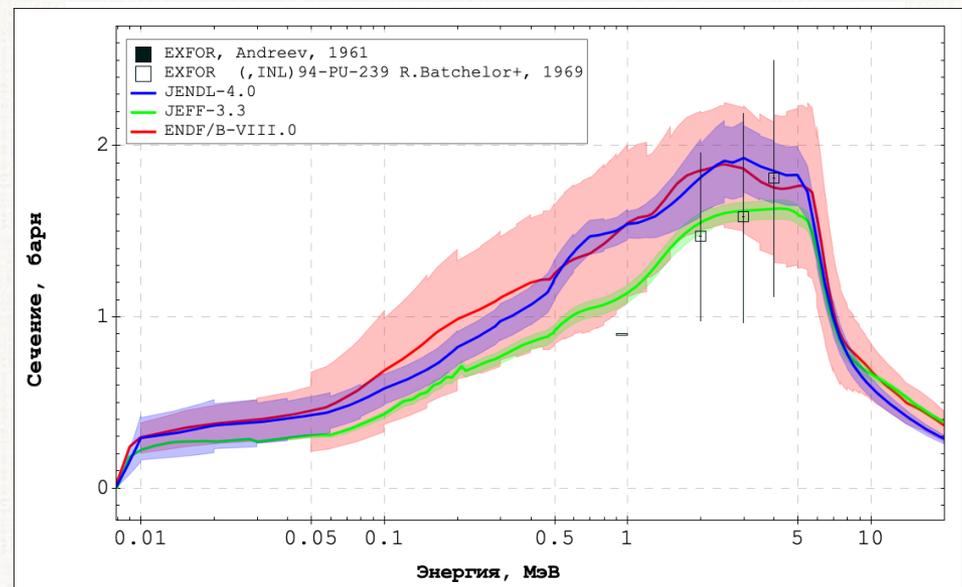
Случай  $^{239}\text{Pu}$ . Работы  $\approx 2018$ -н.в.

Основные усилия экспериментаторов

были направлены на **уточнение**

- сечения  $(n, \gamma)$  [1]
- сечения  $(n, f)$  [2]
- сечения  $(n, 2n)$  [3]
- спектра  $\nu_{fiss}$  [4-6]

**Пробел: сечение  $(n, n')$**



[1] S.Mosby Nucl. Data Sh. **148**, 312 (2018)

<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0090375218300267>.

[2] L.A.Snyder LLNL-TR-788566 (2019) <https://doi.org/10.2172/1560975>

[3] V.Meot Phys. Rev. C103, 054609 (2021) <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.103.054609>

[4] K.Kely et.al Nucl. Data Sh **173**, 42 (2021)

<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0090375221000132>.

[5] P.Marini et.al Phys. Rev. **C101**, 044614 (2020) at

<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.101.044614>.

[6] K.Kely et.al Phys. Rev **C102**, 034615 (2020) <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.102.034615>.



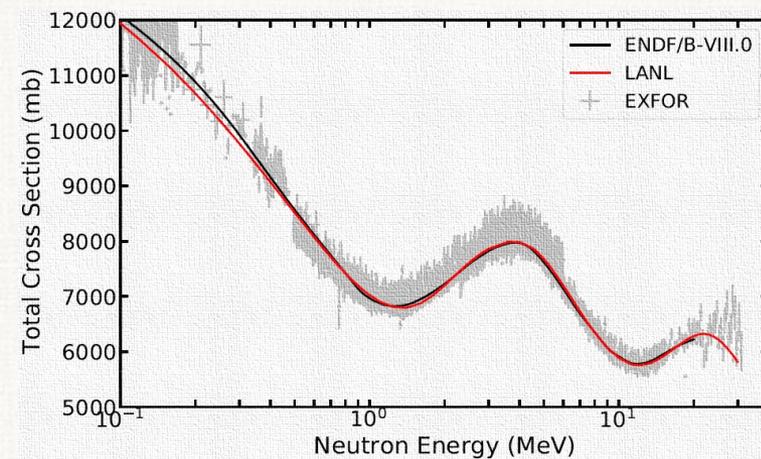
# Модели ядерных реакций

Набор феноменологических моделей разработан и реализован в кодах, часть из которых общедоступна (SAMMY [1], EMPIRE [2], TALYS [3], GNASH [4], CCONE [5], CoH [6])

## Случай $^{239}\text{Pu}$ . Работы $\approx 2018$ -н.в.

Основные усилия теоретиков [7,8] были направлены на **уточнение** сечений в быстрой области по новым экспериментальным данным.

**Основная проблема:**  
**все модели феноменологические,**  
**требуют настройки параметров**  
**и оценки погрешности расчетов**



Пример оценки полного сечения  $^{239}\text{Pu}$  [7]

- 
- [1] N.Larson, Updated Users Guide for SAMMY
  - [2] M.Herman, NDS 108, 2655-2715 (2007)
  - [3] A.Koning, NDS 113, 2841-2934 (2014) <https://doi.org/10.1016/j.nds.2018.02.001>
  - [4] P.G.Young, LANL Rep. LA-12343-MS, 1992
  - [5] O.Iwamoto, NDS 131, 259-288 (2016)
  - [6] T.Kawano, Phys. Rev. C80, 024611 (2009)
  - [7] M.Mumpower, LA-UR-22-24121 arXiv:2302.03129v1
  - [8] T.Kawano, Eur.Phys.J. **A57**,16(2021) <https://doi.org/10.1140/epja/s10050-020-00311-9>.



# Настройка параметров моделей и оценка погрешности

Основа – теорема Байеса

$$p(x | y) = \frac{p(y | x) \cdot p(x)}{p(y)}$$

$x$  – вектор варьируемых параметров модели,

$y = y_e - y_c$  – «невязка» между экспериментом и расчетом  $y_e = F(x)$ .

В предположении нормальности априорного распределения и правдоподобия

$$p(x) \sim N(x_0, M_x), \quad p(y|x) \sim N(y_e^0 - F(x), M_y)$$

получается оптимизационная задача на поиск «наилучших параметров»

$$\chi_{\text{МНК}}^2 = (y_e^0 - F(x))^T M_y^{-1} (y_e^0 - F(x)) + (x - x_0)^T M_x^{-1} (x - x_0).$$

Апостериорное распределение  $p(x|y)$  позволяет оценить получить **наилучший вектор  $y = F(x)$  расчетных значений ядерных данных и оценить его погрешность [1-4]**

[1] D.W.Muir, et.al The Global Assessment of Nuclear Data, GANDR <http://nds.iaea.org/gandr/>.

[2] M.Herman, et.al NDS **108**, 2655 (2007). <https://doi.org/10.1016/j.nds.2007.11.003>

[3] A.Trkov, et.al NDS **112**, 3098 (2011)

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0090375211001189>.

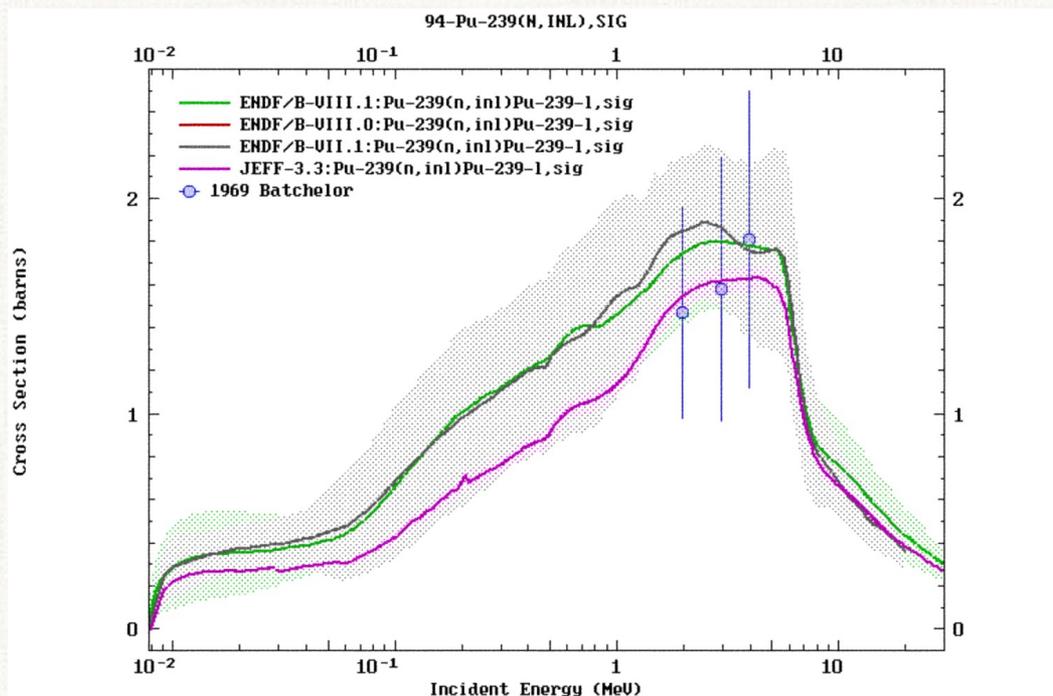
[4] M.Mumpower, LA-UR-22-24121 arXiv:2302.03129v1



# ENDF/B-VIII.1

Результаты проделанной работы включены в очередной релиз библиотеки ENDF/B-VIII.1

<https://www.nndc.bnl.gov/endl-releases/?version=B-VIII.1>



Но оценки принципиально не изменились



# Корректировка ядерных данных по интегральным экспериментам

## Снова теорема Байеса

$y$  – вектор варьируемых ядерных данных

$z = z_e - z_c$  – невязка между экспериментом и расчетом  $z_c = G(y)$

В предположении нормальности априорного распределения и

правдоподобия  $p(y) \sim N(y_0, M_y)$ ,  $p(z|y) \sim N(z_e^0 - G(y), M_z)$

( $y_0$  и  $M_y$  – вектор и ков. матрица наилучших ядерных данных с первого шага с учетом только микро экспериментов)

получаем оптимизационную задачу

$$\chi_{\text{МНК}}^2 = (z_e^0 - G(y))^T M_z^{-1} (z_e^0 - G(y)) + (y - y_0)^T M_y^{-1} (y - y_0)$$

**Представительный набор интегральных опытов позволяет заметно снизить константную погрешность и создать проблемно-ориентированную оценку <sup>1)</sup>**

**Проблема: подход ориентирован на ядерные данные в групповом представлении.**

---

[1] Усачев Л.Н., Бобков Ю.Г. Последовательное планирование интегральных экспериментов ... в сб. «Ядерные константы». – М.: Атомиздат, 1972. – Вып.10.



# Корректировка ядерных данных по интегральным экспериментам

Проблема: подход [1] ориентирован на ядерные данные в групповом представлении.

## Пути решения:

- подбор параметров ядерно-физических моделей  $\mathbf{x}$  по скорректированным сечениям в энергетических группах.
- учет интегральных экспериментов уже на этапе подбора  $\mathbf{x}$  [2-4]

$$p(x) \sim N(x_0, M_x), \quad p(y|x) \sim N(y_e^0 - F(x), M_y), \quad p(z|x) \sim N(z_e^0 - G \circ F(x), M_z)$$

$$\chi_{\text{МНК}}^2 = (z_e^0 - G \circ F(x))^T M_z^{-1} (z_e^0 - G \circ F(x)) + (y_e^0 - F(x))^T M_y^{-1} (y_e^0 - F(x)) + (x - x_0)^T M_x^{-1} (x - x_0)$$

[1] Усачев Л.Н., Бобков Ю.Г. Последовательное планирование интегральных экспериментов ... в сб. «Ядерные константы». - М.: Атомиздат, 1972. - Вып.10.

[2] D. Neudecker et al Enhancing nuclear data validation analysis by using machine learning // Nuclear Data Sheets 167 (2020) 36-60

[3] C. De Saint Jean et al. Evaluation of Neutron-induced Cross Sections and their Related Covariances with Physical Constraints // Nuclear Data Sheets 148 (2018) 383-419, <https://doi.org/10.1016/j.nds.2018.02.010>

[4] J. Hutchinson, EUCLID: A New Approach to Constrain Nuclear Data via Optimized Validation Experiments using Machine Learning <https://doi.org/10.1051/epjconf/202328415006>

# Вместо заключения

При решении практических задач **ядерные данные** общего назначения (оценки **без учета интегральных опытов**) **не вполне удовлетворительны.**

Требуется проблемно-ориентированная библиотека

Для её создания необходима работа коллектива с распределенными зонами ответственности

- Постановка задачи, интегральные эксперименты, верификация ядерных данных (РФЯЦ)
- Ядерно-физические расчеты ...

# Спасибо за внимание

**Адарченко Владимир Анатольевич**  
СНС РФЯЦ-ВНИИТФ

Тел.: +7 (351-46) 56560  
E-mail: [v.a.adarchenko@vniitf.ru](mailto:v.a.adarchenko@vniitf.ru)