

České vysoké učení technické v Praze

Fakulta elektrotechnická

Katedra fyziky



Databáze nukleárních dat v numerických simulacích fúzního plazmatu

Bakalářská práce

Jiří Svojtka

Vedoucí práce: Ing. Karel Řezáč, Ph.D.

Praha, Květen 2014

Prohlášení

Prohlašuji, že jsem předloženou práci vypracoval samostatně, a že jsem uvedl veškeré použité informační zdroje v souladu s Metodickým pokynem o dodržování etických principů při přípravě vysokoškolských závěrečných prací.

Praha, Květen 2014

.....

Jiří Svojtka

České vysoké učení technické v Praze
Fakulta elektrotechnická

katedra počítačů

ZADÁNÍ BAKALÁŘSKÉ PRÁCE

Student: Jiří Svojtka

Studijní program: Otevřená informatika (bakalářský)
Obor: Softwarové systémy

Název tématu: **Databáze nukleárních dat v numerických simulacích fúzního plazmatu**

Pokyny pro vypracování:

Cíl práce je osvojit si používání nukleárních dat (totálního a diferenciálního účinného průřezu) fúzních reakcí s izotopy vodíku. Tyto reakce jsou v současné době nejvíce prozkoumávány jak v tokamakovém, tak laserovém i Z-pinčovém fúzním plazmatu.


Konkrétní částečné cíle práce jsou: (i) Osvojit si způsob tabelování nukleárních dat [3]. (ii) Vybrat vhodnou a dostupnou databázi s uloženými daty i pro malé energie nalétávajících částic [1,4,5]. (iii) Osvojit si práci s nukleárními daty natolik, aby je bylo možno použít v numerických simulacích. (iv) Vytvoření programového kódu (v libovolném jazyce), který dokáže nukleární data načíst a používat. (v) Optimalizovat rychlost výpočtu nukleárních dat.

Seznam odborné literatury:

- [1] B. Chadwick, P. Obložinský, M. Herman, et al. ENDF/B-VII.0: Next generation evaluated nuclear data library for nuclear science and technology. Nuclear Data Sheets, 107(12):2931–3118, DEC 2006.
- [2] K. Řezáč: Reconstruction of Neutron Energy Spectra in Z-pinch Fusion Experiments, disertační práce FEL ČVUT v Praze, 2011.
- [3] B. Wolle. Tokamak plasma diagnostics based on measured neutron signals. PHYSICS REPORTS-REVIEW SECTION OF PHYSICS LETTERS, 312(1-2):1–86, MAY 1999.
- [4] M. Drosog. Handbook on Nuclear Activation Data. Technical reports series no. 273, International Atomic Energy Agency, Vienna, APR 1987.
- [5] M. Drosog. DROSG-2000, codes and database for 59 neutron source reactions, documented in the IAEA report IAEA-NDS-87 Rev. 9. IAEA Nuclear Data Section, International Atomic Energy Agency, P.O. Box 100, A-1400 Vienna, Austria, MAY 2005.

Vedoucí: Ing. Karel Řezáč, Ph.D.

Platnost zadání: do konce zimního semestru 2014/2015


doc. Ing. Filip Železný, Ph.D.
vedoucí katedry




prof. Ing. Pavel Ripka, CSc.
děkan

V Praze dne 16. 9. 2013

Poděkování

Rád bych na tomto místě poděkoval vedoucímu mé práce, Ing. Karlu Řezáčovi, Ph.D, za poskytnuté konzultace, věnovaný čas a jeho ochotu s čímkoliv pomoci. Dále bych rád poděkoval své rodině za podporu a pomoc s prací.

Abstrakt

Cílem této bakalářské práce je seznámení se s principy termojaderné fúze, nukleárními daty a jejich použití v numerických simulacích fúzního plazmatu. V práci je vysvětleno, co je termojaderná fúze, jak se uskutečňuje, její výhody a dnešní přístupy k ní. Dále práce seznamuje s teoretickými základy, které popisují tyto reakce, a to kinematikou fúzního binárního systému, totálním účinným průřezem a diferenciálním účinným průřezem. Následuje část o nukleárních datech, kde je přehled zdrojů, druhů a formátů nukleárních dat a doporučení, jaké formáty dat používat ve výzkumu na Katedře fyziky ČVUT FEL v Praze. Hlavní část práce popisuje formát ENDF, který je konkrétně použit pro numerické simulace fúzního plazmatu. Tento formát je podrobněji popsán a je zde také vysvětleno, jak vypočítat konkrétní hodnoty účinných průřezů z těchto dat.

Klíčová slova: nukleární data, fúze, účinný průřez, diferenciální účinný průřez, Z -pinč, ENDF, fúzní reakce, $D(n,d)^3\text{He}$, D-D reakce, DD reakce

Abstract

The goal of this bachelor thesis is to learn about principles of thermonuclear fusion, nuclear data and their use in numerical simulations of fusion plasma. Thesis explain what thermonuclear fusion is, how is it implemented, its advantages and current approaches to it. Next part learns of thesis about theoretical bases, which describing these reactions, namely kinematics of fusion binary system, total cross-section and differential cross-section. Next part is about nuclear data, there is a summary of sources, types and formats of nuclear data and the recommendation, which formats can be used in simulations the Department of Physics CTU FEL in Prague. The main part of this thesis describes ENDF format, which is specifically used for numerical simulations of fusion plasma. This format is described in-depth. There is explained how it calculates specific values of cross-sections from these data, too.

Keywords: nuclear data, fusion, total cross-section, differential cross-section, Z -pinch, ENDF, fusion reactions, $D(n,d)^3\text{He}$, D-D reaction, DD reaction

Seznam použitých symbolů

V této práci jsou použity následující symboly, konstanty a zkratky.

Seznam symbolů a konstant

Symbol	Fyzikální význam	Jednotka
a	nalétávající jádro atomu v reakci $A(a,n)B$	
a_1, a_2, a_3, a_4, a_5	koeficienty	
A	terčové jádro atomu v reakci $A(a,n)B$	
A_l, A_0, A_2, A_4	koeficienty expanze	
B	produkt reakce $A(a,n)B$	
c	rychlost světla ($c = 2.99792458 \times 10^8 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$)	$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
D, d	deuterium – izotop vodíku s jedním neutronem	
E_a	kinetická energie nalétávající částice (v LS)	J, keV
\tilde{E}_a	kinetická energie nalétávající částice (v CMS)	J, keV
E_B	kinetická energie zbytkového jádra (v LS)	J, MeV
\tilde{E}_B	kinetická energie zbytkového jádra (v CMS)	J, MeV
E_d	kinetická energie deuteronu (v LS)	J, keV
\tilde{E}_d	kinetická energie deuteronu (v CMS)	J, keV
E_n	kinetická energie neutronu (v LS)	J, MeV
\tilde{E}_n	kinetická energie neutronu (v CMS)	J, MeV
^{56}Fe	izotop železa	
^3_1H	tritium – izotop vodíku s dvěma neutrony	

Symbol	Fyzikální význam	Jednotka
${}^3\text{He}, {}^3_2\text{He}$	izotop helia s jedním neutronem	
${}^4\text{He}, {}^4_2\text{He}$	izotop helia s dvěma neutrony	
l	řád Legendrova polynomu	
${}^6_3\text{Li}$	izotop lithia	
${}^7_3\text{Li}$	izotop lithia	
m_a	hmotnost nalétávající částice	kg
m_A	hmotnost terčové částice	kg
m_B	hmotnost zbytkového jádra	kg
m_d	hmotnost deuteronu ($m_d = 3.34358335 \times 10^{-27}$ kg)	kg
m_{He}	hmotnost ${}^3\text{He}$ isotopu ($m_{\text{He}} = 5.00641214 \times 10^{-27}$ kg)	kg
m_n	hmotnost neutronu ($m_n = 1.67492728 \times 10^{-27}$ kg)	kg
n	neutron	
p, p^+	proton	
\mathbf{p}_a	vektor hybnosti nalétávající částice (v LS)	$\text{kg}\cdot\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
p_a	hybnost nalétávající částice (v LS)	$\text{kg}\cdot\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
$\tilde{\mathbf{p}}_a$	vektor hybnosti nalétávající částice (v CMS)	$\text{kg}\cdot\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
\tilde{p}_a	hybnost nalétávající částice (v CMS)	$\text{kg}\cdot\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
\mathbf{p}_B	vektor hybnosti zbytkového jádra (v LS)	$\text{kg}\cdot\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
p_B	hybnost zbytkového jádra (in the LS)	$\text{kg}\cdot\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
$\tilde{\mathbf{p}}_B$	vektor hybnosti zbytkového jádra (v CMS)	$\text{kg}\cdot\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
\tilde{p}_B	hybnost zbytkového jádra (v CMS)	$\text{kg}\cdot\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
\mathbf{p}_n	vektor hybnosti neutronu (v LS)	$\text{kg}\cdot\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
p_n	hybnost neutronu (v LS)	$\text{kg}\cdot\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
$\tilde{\mathbf{p}}_n$	vektor hybnosti neutronu (v CMS)	$\text{kg}\cdot\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
\tilde{p}_n	hybnost neutronu (v CMS)	$\text{kg}\cdot\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$

Symbol	Fyzikální význam	Jednotka
P_l, P_0, P_2, P_4	Legendovy polynomy	
Q	uvolněná energie fúzní reakce	J, MeV
v	rychlost neutronu (v LS)	$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
\mathbf{v}_a	vektor rychlosti nalétávající částice (ve LS)	$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
v_a	rychlost nalétávající částice (v LS)	$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
$\tilde{\mathbf{v}}_a$	vektor rychlosti nalétávající částice (v CMS)	$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
\tilde{v}_a	rychlost nalétávající částice (v CMS)	$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
\mathbf{v}_B	vektor rychlosti zbytkového jádra (v LS)	$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
v_B	rychlost zbytkového jádra (v LS)	$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
$\tilde{\mathbf{v}}_B$	vektor rychlosti zbytkového jádra (v CMS)	$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
\tilde{v}_B	rychlost zbytkového jádra (v CMS)	$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
\mathbf{v}_n	vektor rychlosti neutronu (v LS)	$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
v_n	rychlost neutronu (v LS)	$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
$\tilde{\mathbf{v}}_n$	vektor rychlosti neutronu (v CMS)	$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
\tilde{v}_n	rychlost neutronu (v CMS)	$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
V_{CMS}	rychlost těžiště (v CMS)	$\text{m}\cdot\text{s}$
ϑ	úhel (v LS) mezi projektilem a vyletující částicí v reakci $A(a,n)B$	
$\tilde{\vartheta}$	úhel (v CMS) mezi projektilem a vyletující částicí v reakci $A(a,n)B$	
π	Ludolfovo číslo ($\pi = 3.141592654$)	
σ_0	diferenciální účinný průřez pro úhel $\tilde{\vartheta} = 0^\circ$	m^2, b
σ_t	totální účinný průřez	m^2, b
$d\sigma/d\vartheta$	diferenciální účinný průřez (v LS)	m^2, b
$d\sigma/d\tilde{\vartheta}$	diferenciální účinný průřez (v CMS)	m^2, b
ζ	substituce	

Seznam použitých zkratek

CMS	těžišťová soustava
LS	laboratorní soustava
TOF	metoda měření času letu částic

Obsah

Seznam použitých symbolů a zkratek	iii
Seznam obrázků	x
Seznam tabulek	xi
1 Úvod	1
1.1 Jaderná fúze	1
1.1.1 Izotopy vodíku	1
1.1.2 Fúze a štěpení	2
1.1.3 Proč fúze?	3
1.2 Různé přístupy k vytvoření fúzního reaktoru	4
1.2.1 Tokamaky	5
1.2.2 Laserové systémy	5
1.2.3 Z-pinčové aparatury	6
1.3 Numerické simulace ve fúzním výzkumu	7
1.4 Zadání práce	8
1.5 Rozvržení práce	9
2 Teoretický úvod	10
2.1 Kinematika fúzního binárního systému	10
2.1.1 Laboratorní a těžišťová soustava	10
2.1.2 Energie neutronu z $D(d,n)^3\text{He}$ reakce	11
2.2 Účinný průřez	13

2.2.1	Totální účinný průřez $D(d,n)^3\text{He}$ reakce	13
2.2.2	Diferenciální účinný průřez $D(d,n)^3\text{He}$ reakce	15
2.2.3	Legendrovy polynomy	16
2.3	Hornerův algoritmus	16
3	Nukleární data	21
3.1	Zdroje dat	21
3.2	Rozdělení nukleárních dat	21
3.3	Typy nukleárních dat	22
3.3.1	Numerická data	22
3.3.2	Experimentální data	22
3.3.3	Evalovaná data	23
3.3.4	Bibliografická data	23
3.4	Formáty dat	23
3.4.1	CINDA (Computer Index of Nuclear Reaction Data) a NSR (Nuclear Science References)	23
3.4.2	EXFOR (Experimental Nuclear Reaction Dat)	24
3.4.3	ENDF (Evaluated Nuclear Data Files)	24
3.4.4	JEFF (Joint Evaluated Fission and Fusion Data Library)	25
3.4.5	ENSDF (Evaluated Nuclear Structure Data Files)	25
3.4.6	NUDAT (Nuclear Database)	25
3.4.7	RNAL (Reference Neutron Activation Library)	26
3.4.8	FISPACT	26
3.5	Program JANIS	27
3.6	Nukleární data pro fúzní Z -pinčový výzkum	28
3.6.1	Starší zdroje dat používané v Z -pinčovém výzkumu na FEL ČVUT	28
3.6.2	Doporučení nukleárních dat pro budoucí výzkum na FEL ČVUT	29
4	ENDF	30
4.1	Představení ENDF-6	30

4.2	Filozofie ENDF formátu	30
4.3	Podrobnější popis ENDF	31
4.3.1	Knihovna	31
4.3.2	Podknihovny, nalétávající částice a datové typy	31
4.4	Obsah a struktura ENDF	32
4.4.1	Material (<i>MAT</i>)	33
4.4.2	Soubor (<i>MF</i>)	33
4.4.3	Sekce (<i>MT</i>)	34
4.5	Reprezentace dat	34
4.6	Popis konkrétního záznamu	35
4.7	Diferenciální účinný průřez pro $D(d,n)^3\text{He}$, $D(d,p)\text{T}$ a $D(d,n)^4\text{He}$ v ENDF	37
4.7.1	Totální účinný průřez	37
4.7.2	Diferenciální účinný průřez	38
4.8	Programový výstup práce	39
4.9	Popis podprogramu	39
4.10	Použití podprogramu pro práci s nukleárními daty v programu RODES	41
5	Shrnutí a závěry práce	43
	Použitá literatura	45
A	How to start with ENDF	49
B	Zdrojové kódy	52

Seznam obrázků

1.1	Závislost vazebné energie na počtu nukleonů v jádře.	4
1.2	Pohled do tokamaku JET mimo provoz a za provozu.	6
1.3	Experimentální komora laseru NIF.	7
1.4	Z-machine.	8
2.1	Laboratorní (LS) a těžišťová soustava (CMS).	11
2.2	Závislost energie vyletujícího neutronu $D(d,n)^3H$ reakce na energii nalétávajícího deuteronu a úhlu ϑ v LS.	12
2.3	Totální účinný průřez $\sigma(E_d)$ (v LS) reakcí s izotopy vodíku.	13
2.4	Diferenciální účinný průřez $D(d,n)^3He$ reakce (v CMS) pro různé energie deuteronu E_d v rozsahu od 20 keV do 1 MeV.	18
2.5	Diferenciální účinný průřez $D(d,n)^3He$ reakce (v LS) pro různé energie deuteronu E_d v rozsahu od 20 keV do 1 MeV.	19
3.1	Hlavička nukleárních dat v databázi FISPACT.	27
3.2	Program JANIS.	28
4.1	Struktura ENDF formátu.	34
4.2	Popis ENDF formátu.	36
4.3	Výpis reakce v ENDF ze stránek NDC.	36
4.4	Příklad totálního účinného průřezu v ENDF.	37
4.5	Příklad diferenciálního účinného průřezu v ENDF.	39
4.6	Vývojový diagram programu RODES s vyznačenými částmi mého podprogramu.	42

Seznam tabulek

2.1	Koeficienty A_n účinného průřezu σ_0 a σ	14
2.2	Legendrovy polynomy do 15. řádu.	20
4.1	<i>NLIB</i> čísla a odpovídající knihovny.	32
4.2	<i>NSUB</i> čísla a odpovídající podknihovny.	33
4.3	<i>MF</i> čísla a odpovídající soubory.	35
4.4	<i>MT</i> čísla a odpovídající emetované částice.	35
4.5	Popis HEAD a TAB1 záznamu pro zjištění totálního účinného průřezu.	38
4.6	Popis HEAD, TAB1 a LIST záznamu pro zjištění diferenciálního účinného průřezu.	40

Kapitola 1

Úvod

V této kapitole budou popsány izotopy vodíku, druhy jaderných reakcí a zdůvodnění, proč je právě jaderná energie důležitá. Dále zde nalezneme popis dnes nejužívanějších metod, jak dosáhnout termonukleární fúze. V této části jsem čerpal z knihy Řízená termojaderná syntéza pro každého [1].

1.1 Jaderná fúze

V našem chápání budeme za fúzi považovat proces, při kterém se lehčí atomová jádra slučují na atomová jádra těžší a zároveň dochází k uvolnění velkého množství energie¹. Fúzní reakce, při kterých se uvolňuje nejvíce energie jsou reakce s izotopy vodíku.

1.1.1 Izotopy vodíku

Izotopy jsou nukleony, které mají stejný počet protonů, ale různý počet neutronů v jádře atomu. Mají tedy různou atomovou hmotnost, což je u vodíku jako nejlehčího prvku nejvýraznější. U těžších prvků není rozdíl atomových hmotností prvků tak výrazný. Izotopy vodíku jsou tři.

¹Toto je jedna z definic termojaderné fúze. Je mnoho dalších definic, např. Termojaderná fúze je exotermická nukleární reakce s prvky do izotopu železa ⁵⁶Fe.

Protium (běžný vodík): Jádro je tvořeno jedním protonem. Tvoří většinu všeho vodíku na zemi a je nejjednodušším izotopem ve vesmíru. Protium je stabilní izotop.

Deuterium (D): Jádro tvoří jeden proton a jeden neutron. Má přibližně dvojnásobnou atomovou hmotnost než obyčejný vodík. Na zemi tvoří asi $\frac{1}{6000}$ všeho vodíku a nachází se v jakékoliv sloučenině obsahující vodík, např. v mořské vodě. Vyrábí se elektrolýzou vody a dále separací od běžného vodíku s jedním protonem v jádře. Deutérium je stabilní izotop.

Tritium (T): Jádro tvoří jeden proton, dva neutrony. Má přibližně trojnásobnou hmotnost než obyčejný vodík. Jedná se o nestabilní izotop, tj. radionuklid, s poločasem rozpadu 12,32 roku. V přírodních podmínkách se tedy tritium objevuje velmi vzácně, např. v horních vrstvách atmosféry. Uměle se získává při reakcích lithia².

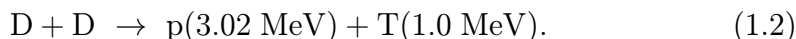
1.1.2 Fúze a štěpení

Jadernou energii lze uvolnit pouze dvěma způsoby, a to slučováním některých lehkých jader (fúze) nebo štěpením jader těžkých atomů.

Termojaderná fúze je proces, při kterém dochází ke slučování jader atomů v plazmatu, které je zahřáté na termonukleární teplotu. Během této reakce je uvolněno obrovské množství energie, která odpovídá úbytku hmotnosti slučovaných atomů. Za běžných podmínek jsou odpudivé síly působící mezi atomy tak veliké, že nemůže dojít k přiblížení dvou kladných jader natolik, aby začaly působit jaderné síly a došlo ke sloučení. Abychom dosáhli podmínek potřebných ke slučování, musíme dosáhnout buď vysoké teploty nebo vysokého tlaku. Tyto teploty a tlaky potřebné ke stabilní fúzi jsou zatím dosahovány jen uvnitř hvězd. Nejvýhodnější z hlediska množství získané energie je slučování jader vodíku. Existují čtyři následující reakce s izotopy vodíku. Nejnižší zápalnou teplotu a nejvyšší produkovanou energii má reakce $T(d,n)^3\text{He}$ nebo zkráceně zapsáno D-T reakce.

²Tritium lze získat při reakcích: ${}^6_3\text{Li} + n \rightarrow {}^4_2\text{He} + T$
a ${}^7_3\text{Li} + n \rightarrow {}^4_2\text{He} + T + n$

Reakce s izotopy vodíku:

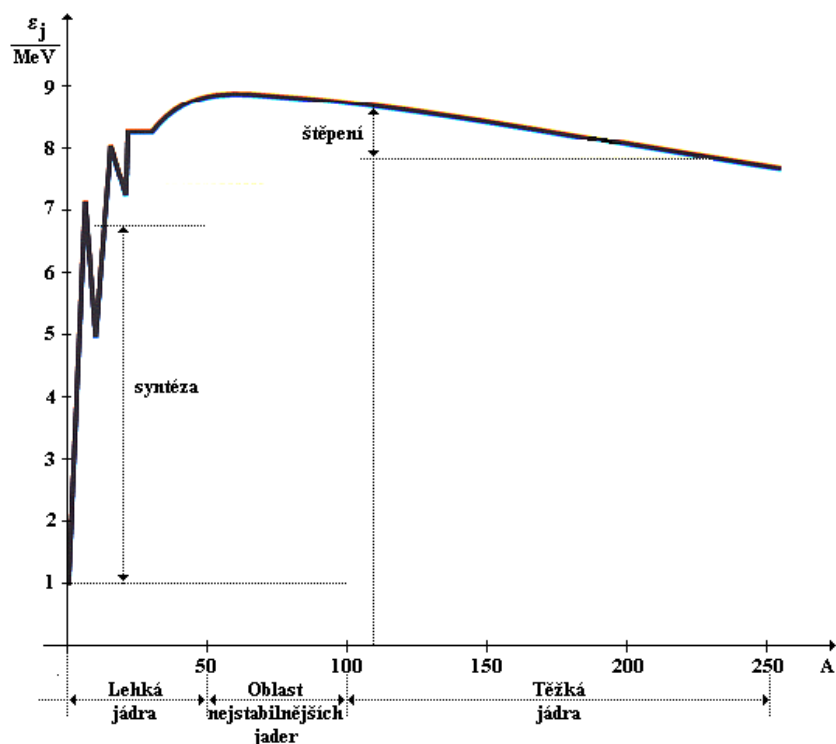


Opakem termojaderné fúze je štěpení. Nedochozí ke slučování, ale naopak rozbíjení jader těžkých atomů například vniknutím cizí částice jako je neutron. Každé jádro atomu určitého izotopu má jinou vazebnou energii. Nejvyšší vazebnou energii má izotop železa ${}^{56}\text{Fe}$. Dodal bych, že syntéza může probíhat i s prvky těžšími než železo a štěpení naopak s prvky lehčími než železo. U těchto procesů žádnou energii nezískáme, ale naopak ji musíme dodat. Tyto procesy jsou tedy pro výrobu energie nepoužitelné. Vazebná energie prvků je znázorněna na Obr. 1.1.

1.1.3 Proč fúze?

Účinnost využití paliva při termojaderné fúzi je $10\,000\,000\times$ větší než u všech chemických reakcí (např. hoření). Pokud bychom chtěli fúzi srovnat s různými druhy paliv pak na 1 GW energie by bylo třeba spálit 2,5 milionu tun uhlí nebo zastavět plochu 20 km^2 solárními panely, či vztyčit 2 000 větrných elektráren. Stejnou energii bychom získali pomocí fúze jen z 500 kg vodíku. Z jednoho litru vody můžeme fúzí vyrobit tolik energie jako spálením 300 litrů benzínu [1]. Odpadá zde závislost na palivu jako u fosilní energie. Vody je na zemi dost. Co se týče ekologického hlediska, tak fúze neprodukuje žádné skleníkové plyny. Stačí dodávat jenom palivo v podobě deuteria nebo tricia. Termojaderný reaktor nepotřebuje kromě paliva během provozu dodávat ani odvádět žádný spotřební radioaktivní materiál³. Je takzvaně vnitřně bezpečný. Při poruše je možno palivo rychle ochladit a zabránit tím dalšímu slučování. Výbuch je tedy vyloučen. Dále odpadá skladování nebezpečného

³Za předpokladu, že nepovažujeme za odpad použité stěny fúzního reaktoru



Obrázek 1.1: Závislost vazebné energie na počtu nukleonů v jádře [2].

jaderného odpadu, který vzniká ve štěpných elektrárnách a musí být skladován tisíce let.

1.2 Různé přístupy k vytvoření fúzního reaktoru

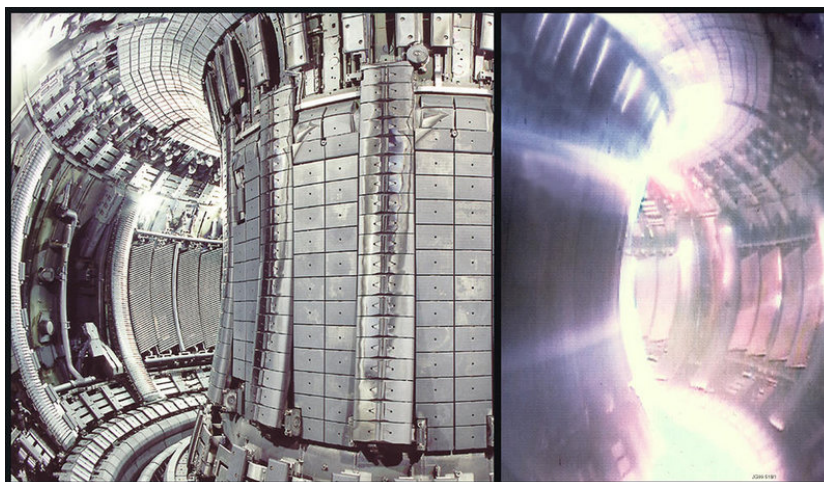
Aby došlo k působení jaderných sil a následné jaderné syntéze, je potřeba překonat elektrostatickou odpudivou sílu jader, která jsou souhlasně nabitá. To je možné pouze tak, že jádra srážíme dostatečně velikou rychlostí, tj. v urychlovači nebo zahřátím na fúzní zápalnou teplotu.

1.2.1 Tokamaky

TOKAMAK (TOrodalnaja KAmera i MAgnitnyje Kатуški – torodiální komora a magnetické cívky) je zařízením pro uskutečnění řízené termojaderné fúze pomocí magnetického udržení. Koncepce tohoto zařízení vznikla v Sovětském svazu v letech 1950-1952. Tokamak je dutá prstencová komora naplněná vodíkovým plazmatem, kterou obklopují magnetické cívky a transformátorové jádro (viz Obr. 1.2). Tokamak udržuje jaderné palivo magnetickým polem, které je vytvářeno magnetickými cívkami a elektrickým proudem procházejícím plazmatem uvnitř komory. Plazma se nesmí dostat do kontaktu s vnitřní stěnou, protože se dosahuje takových teplot, že by se okamžitě odpařila nebo naopak se plazma ochladilo a výboj uhasl. Tokamak využívá princip transformátoru s jedním sekundárním závitem, který tvoří prstenec zahřátého plazmatu. Puštěním elektrického proudu do primárního vinutí se elektromagnetickou indukcí vybudí proud v sekundárním vinutí. Díky elektrickému odporu plynu je plyn zahříván na velmi vysoké teploty a mění se v plazma. Jakmile se dosáhne termojaderných teplot, začne slučování jader vodíku. Největším současným tokamakem v provozu je JET (Joint European Tourist), který se nachází v Anglii poblíž Oxfordu. Je to první termojaderné zařízení schopné produkce energie ve velkém. Aktuálně se staví ještě větší tokamak ITER (International Thermonuclear Experimental Reactor), který by měl přinést nové poznatky o termonukleární fúzi.

1.2.2 Laserové systémy

Nejintenzivnějším dostupným zdrojem energie v laboratořích je dnes laser. Jeho schopností je dodání velkého množství energie do velmi malého objemu za krátký čas. Proto nápad použití laserů v termojaderných reakcích s inerciálním udržením přišel ihned po sestavení prvního laseru. Laser vystřelí do terčíku s jaderným palivem, které ohřeje na teplotu reakce. Bohužel účinnost dnešních nejvýkonnějších laserů se pohybuje maximálně v řádu jednotek %. Aby byly lasery použitelné, musely by mít účinnost 10 % a zvládat několik



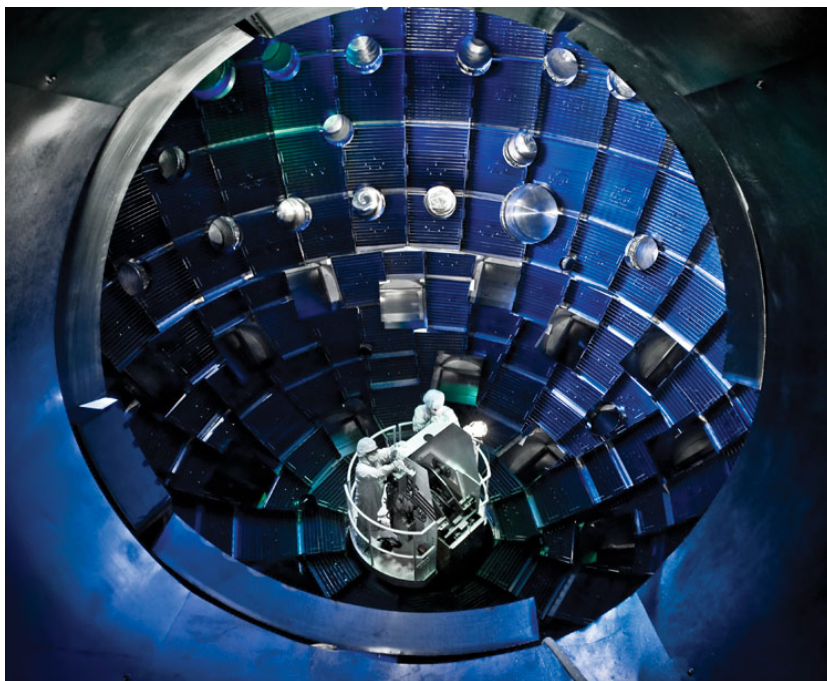
Obrázek 1.2: Pohled do tokamaku JET mimo provoz a za provozu [3].

výstřelů za sekundu. Jeden z největších laserů na světě je National Ignition Facility (NIF). Dosahuje výkonu až 360 TW [1] (viz Obr. 1.3).

1.2.3 Z -pinčové aparatury

Pinč je typ udržení plazmatu, který udržuje plazma válcovitého tvaru pomocí magnetického pole vygenerovaného za pomoci elektrického proudu procházejícího tímto plazmatem [5]. Proud protékající v Z -pinčovém výboji vytvoří magnetický tlak na plazma. Důsledkem je, že stlačováním plazmatu roste teplota až na hodnoty použitelné k fúzi. Současně ale roste i tlak kinetický, který v určitém bodě překoná tlak magnetický a výboj se rozpadne. Tento pinčový jev se vyskytuje i v přírodě například v podobě blesků.

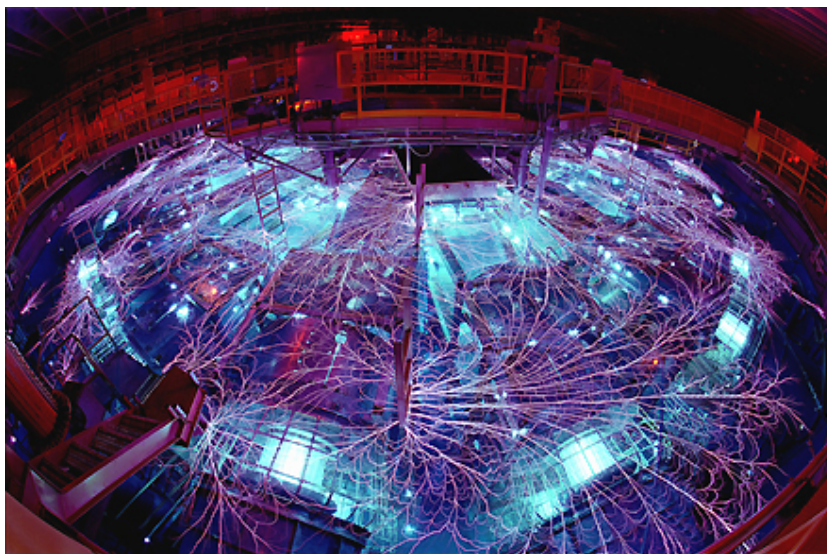
Největším zařízením na světě, které dokáže vytvořit Z -pinčový výboj, je Z -machine (viz Obr. 1.4) v Novém Mexiku v USA. V roce 2006 (po vylepšení a přejmenování na ZR) bylo v tomto zařízení dosaženo rekordní teploty plazmatu, a to až 2 biliony kelvinů. Zařízení dosahuje proudů až 26 MA [6]. Jsou plánována nová zařízení, v Číně pro 40 MA, v Rusku pro 50 MA a v USA až pro 60-70 MA [7].



Obrázek 1.3: Experimentální komora laseru NIF [4].

1.3 Numerické simulace ve fúzním výzkumu

Současný vědecký výzkum obsahuje tři vzájemně provázané přístupy: teoretický, experimentální a numerické simulace. Pro fúzní výzkum jsou numerické simulace velmi podstatné, a to z toho důvodu, že lidstvo nemá stále k dispozici dostatečně velká zařízení pro fúzní experimenty. Numerické simulace ve fúzním výzkumu plazmatu bychom mohli rozdělit například na: (i) simulace fyzikálních procesů v plazmatu a (ii) simulace pro diagnostiku plazmatu. Jednou z takovýchto diagnostických metod je metoda měření času letu částic (z anglického time-of-flight, zkráceně TOF) [5] a následná rekonstrukce energetického spektra neutronů. Neutronová TOF metoda je úspěšně používána na FEL ČVUT v Praze. K jejímu dalšímu rozvoji je třeba použít nová nukleární data.



Obrázek 1.4: Pohled na největší aparaturu pro generaci Z -pinčových výbojů – Z -machine [8].

1.4 Zadání práce

Cílem práce je osvojení nukleárních dat ve fúzních reakcích s izotopy vodíku a jejich používání. V současné době jsou tyto reakce nejvíce prozkoumávány jak v tokamakovém, laserovém tak i Z -pinčovém fúzním plazmatu. Konkrétním cílem práce je: 1. Osvojit si způsob tabelování nukleárních dat. 2. Vybrat vhodnou a dostupnou databázi s uloženými daty i pro malé energie nalétávajících částic jak pro totální tak též pro diferenciální účinný průřez.

Cílem práce tedy bude vypracovat rešerši k pochopení základních termínů používaných při popisu fyzikálních jaderných reakcí a získání přehledu mezi nukleárními daty. Dále pak pro vybranou databázi, kterou bude pravděpodobně ENDF a vytvořit podprogram v jazyce FORTRAN pro načítání těchto nukleárních dat.

1.5 Rozvržení práce

Rozvržení práce je následující: Úvodní kapitola práce seznámila čtenáře s jadernou fúzí, reakcemi, štěpením, klady fúze a přístupy k ní (tokamak, laser a z -pinč). V závěru první kapitoly byly popsány numerické simulace ve fúzním výzkumu a konkrétní zadání této práce. V druhé kapitole jsou vysvětleny teoretické a matematické základy, a to kinematika fúzního binárního systému, do které spadají pojmy jako laboratorní a těžišťová soustava, energie neutronu a kinematika $D(d,n)^3\text{He}$ reakce. Následně jsou vysvětleny totální a diferenciální účinné průřezy pro $D(d,n)^3\text{He}$ reakci. Třetí kapitola probírá nukleární data, a to zdroje, typy a formáty těchto dat. Ke konci této kapitoly jsou vybrána vhodná nukleární data pro fúzní z -pinčový výzkum na FEL ČVUT. Nejdůležitější z celé práce je čtvrtá kapitola, kde je podrobné seznámení s ENDF formátem a jeho použití v numerických simulacích fúzního výzkumu. Poslední kapitola obsahuje shrnutí a závěry práce. Součástí této práce jsou také dvě přílohy. První příloha obsahuje krátký návod v angličtině, jak se zorientovat v ENDF formátu. Druhá příloha obsahuje zdrojové kódy podprogramu.

Kapitola 2

Teoretický úvod

V této části se čtenář seznámí se základními pojmy, které budeme používat pro popis nukleárních dat. Popsány budou vztažné soustavy a různé druhy účinných průřezů. V této části práce jsem čerpal hlavně z doktorské práce Ing. Karla Řezáce, Ph.D [5].

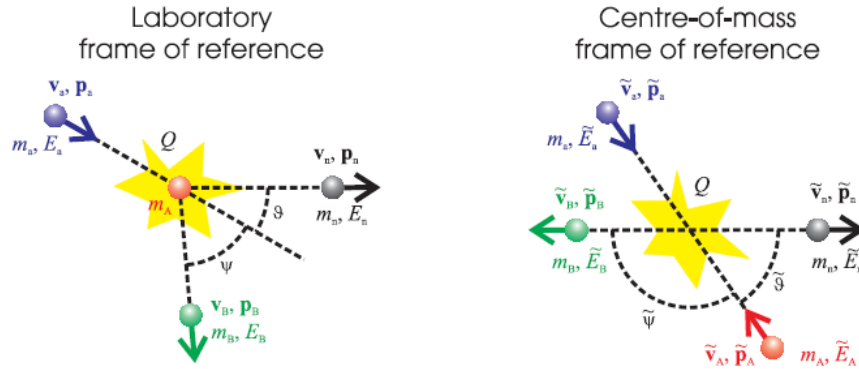
2.1 Kinematika fúzního binárního systému

Při výpočtu energie fúzních neutronů zavádíme fúzní binární systém. Částice, které do sebe v rámci reakce $A(a,n)B$ narazí, budeme označovat jako: A – cílový nukleon, a - nalétávající částice, první reakční produkt, v našem případě n - neutron, B - zbytkový (druhý) nukleon. Hmotnost, rychlost, hybnost, kinetickou energii a úhel mezi nalétávající částicí a produktem (neutronem) budeme značit: m , \mathbf{v} , \mathbf{p} , E_{kin} , ϑ .

2.1.1 Laboratorní a těžišťová soustava

Těžišťová soustava (CMS z angl. centre-of-mass system) je vztažná soustava, kde je výpočet jednodušší než v laboratorní soustavě (LS). Veličiny uváděné v CMS značíme vlnovkou. CMS je soustava, kde se těžiště pohybuje rovnoměrnou rychlostí a součet všech hybností částic je roven 0. Je vhodná pro pozorování relativního pohybu částic a ne celé soustavy jako celku. Laboratorní

soustava je soustava, ve které probíhá celý experiment. V našem zjednodušeném případě budeme uvažovat, že terčová částice je v klidu. Následující Obr. 2.1 znázorňuje tyto dvě používané soustavy i označení jednotlivých veličin.



Obrázek 2.1: Laboratorní (LS) a těžišťová soustava (CMS) [5].

2.1.2 Energie neutronu z $D(d,n)^3\text{He}$ reakce

Existuje několik způsobů výpočtu energie neutronu, který vznikne při fúzi dvou atomových jader, kde jedno z nich je v klidu. Ze zákona zachování energie vyplývá:

$$E_a + Q = E_n + E_B \quad (2.1)$$

Kde E_a je energie nalétávající částice, Q je energie uvolněná fúzní reakcí, E_n je energie neutronů a E_B je energie vyprodukované částice. Vyjádřením energie E_B pomocí hybnosti p_B a hmotnosti m_B dostaneme:

$$E_n + \frac{p_B^2}{2m_B} - E_a - Q = 0. \quad (2.2)$$

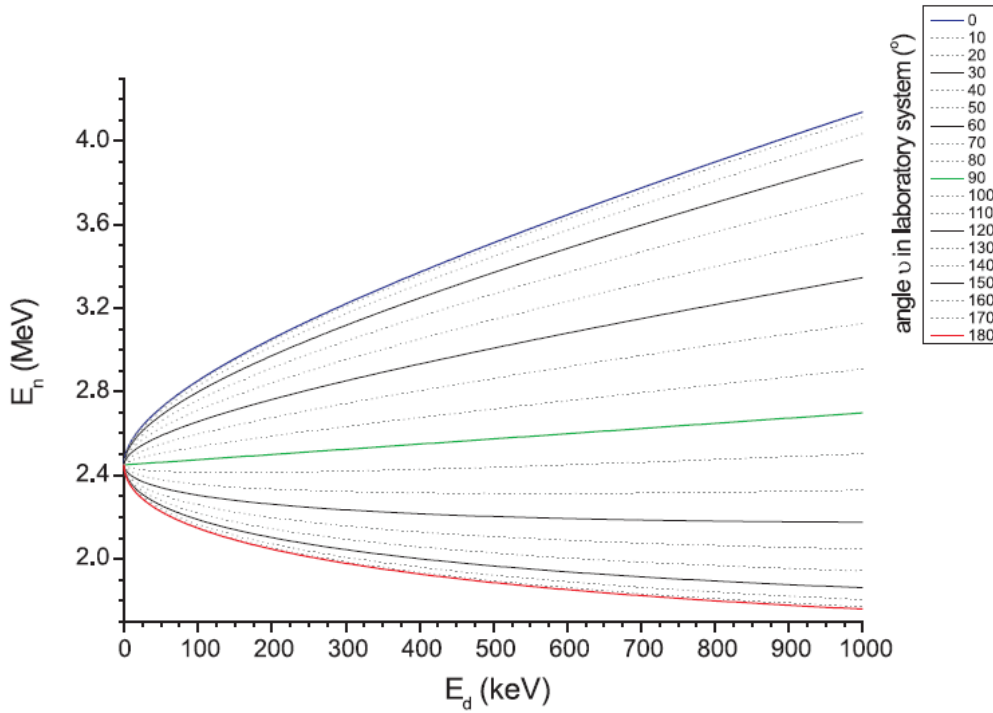
Po aplikaci zákona zachování hybnosti

$$p_B^2 = p_n^2 + p_a^2 - 2p_n p_a \cos \vartheta \quad (2.3)$$

a po dalších úpravách dojdeme ke vztahu¹

$$[E_n(E_d, \vartheta)]_{1,2} = \frac{E_a m_a m_n}{(m_B + m_n)^2} \cdot \left[\cos \vartheta \pm \sqrt{\frac{m_B E_a (m_n + m_B - m_a) + Q m_B (m_B + m_n)}{E_a m_a m_n} - \sin^2 \vartheta} \right]^2, \quad (2.4)$$

kde E_a je energie nalétávajícího deuteronu, ϑ je úhel vylétujícího neutronu a Q je energie reakce. Z tohoto vztahu je evidentní, že energie neutronů budou pro různé úhly různé. Na Obr. 2.2 je vyjádření této rovnice.



Obrázek 2.2: Závislost energie vylétujícího neutronu $D(d,n)^3H$ reakce na energii nalétávajícího deuteronu a úhlu ϑ v LS [5].

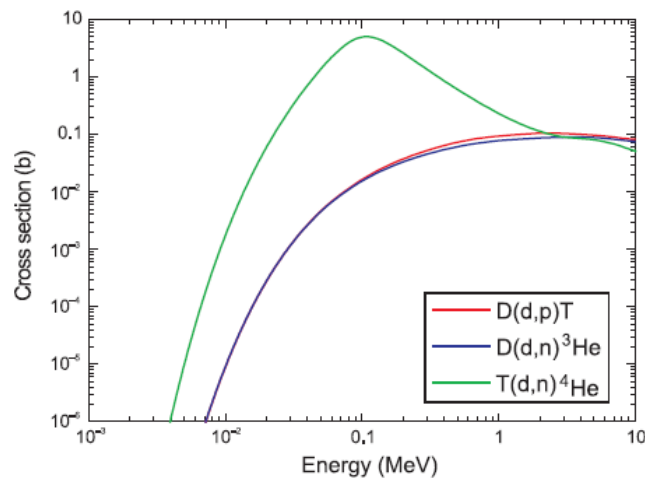
¹Použité rovnice (2.1), (2.2), (2.3) a (2.4) jsou z [5].

2.2 Účinný průřez

Pro kvantitativní popis interakcí atomových jader se používají účinné průřezy. Účinný průřez určité reakce vztažený na jedno jádro vyjadřuje pravděpodobnost, že dojde k interakci mezi dvěma jádry, z nichž se jedno nachází v terčové ploše o velikosti 1 m^2 a druhým, které dopadá kolmo na tuto plochu [9]. Jednotkou účinného průřezu je 1 m^2 nebo $(1 \text{ b})^2$. Budou zde popsány dva typy, a to totální a diferenciální účinný průřez.

2.2.1 Totální účinný průřez $\text{D}(\text{d},\text{n})^3\text{He}$ reakce

Totální účinný průřez odpovídá celkové pravděpodobnosti reakce. Tedy, že nalétávající částice bude interagovat s částicí terčovou. Značí se $\sigma_t(E_d)$. Hodnoty totálních účinných průřezů lze nalézt v tabulkách. Je také známo množství aproximací, ale ty zde nejsou uvedeny. Hodnoty totálních účinných průřezů $\text{D}(\text{d},\text{n})^3\text{He}$ v LS vidíme v grafu 2.3 a v tabulce 2.1.



Obrázek 2.3: Totalní účinný průřez $\sigma(E_d)$ (v LS) reakcí s izotopy vodíku [5].

²¹ $1 \text{ b} = 10^{-28} \text{ m}^2$

E_d (MeV)	σ_0 ($\times 10^{-31}$ m ² /sr)	A_0	A_2	A_4	σ ($\times 10^{-31}$ m ²)
0.02	0.027	0.819	0.181		0.28
0.03	0.119	0.785	0.215		1.17
0.04	0.282	0.758	0.241	0.001	2.69
0.05	0.50	0.737	0.261	0.002	4.63
0.06	0.76	0.719	0.279	0.002	6.85
0.07	1.04	0.705	0.292	0.003	9.19
0.08	1.34	0.692	0.304	0.004	11.65
0.09	1.65	0.681	0.314	0.005	14.1
0.10	1.95	0.671	0.323	0.006	16.5
0.15	3.39	0.633	0.356	0.011	27.0
0.20	4.68	0.605	0.379	0.016	35.6
0.25	5.91	0.583	0.395	0.022	43.3
0.30	7.10	0.564	0.408	0.028	50.3
0.35	8.25	0.547	0.418	0.035	56.7
0.40	9.40	0.532	0.426	0.042	63.0
0.45	10.4	0.518	0.433	0.049	67.7
0.50	11.4	0.506	0.437	0.057	72.5
0.55	12.4	0.494	0.440	0.066	77.0
0.60	13.4	0.483	0.443	0.074	81.3
0.65	14.3	0.474	0.444	0.082	85.2
0.70	15.1	0.465	0.445	0.090	88.2
0.75	15.8	0.456	0.446	0.098	90.5
0.80	16.5	0.447	0.445	0.108	92.7
0.85	17.2	0.439	0.444	0.117	94.9
0.90	17.8	0.432	0.443	0.125	96.9
0.95	18.4	0.425	0.441	0.134	98.3
1.00	19.0	0.418	0.439	0.142	99.8

Tabulka 2.1: Koeficienty A_n , σ_0 pro výpočet diferenciálního účinného průřezu a totální účinný průřez σ D(d,n)³He reakce pro energii deuteronu E_d (v LS) menší než 1 MeV[10].

2.2.2 Diferenciální účinný průřez $D(d,n)^3\text{He}$ reakce

Diferenciální účinný průřez je pravděpodobnost, že se jedna dopadající částice po interakci s terčovou částicí rozptýlí do určitého úhlu. Tento účinný průřez se zjišťuje experimentálně a výsledky se ukládají v rozumném formátu do databází nukleárních dat.

Diferenciální účinný průřez $d\sigma(E_d, \tilde{\vartheta})/d\tilde{\vartheta}$ (v CMS) se dříve vyjadřoval pomocí rozvoje do kulových funkcí (např. [11]), v dnešní době se nejčastěji vyjadřuje pomocí Legendrových polynomů P_n jako

$$\frac{d\sigma(E_d, \tilde{\vartheta})}{d\tilde{\vartheta}} = \sigma_0(A_0P_0 + A_2P_2(\cos \tilde{\vartheta}) + A_4P_4(\cos \tilde{\vartheta}) + \dots), \quad (2.5)$$

kde σ_0 je diferenciální účinný průřez pro úhel $\tilde{\vartheta} = 0^\circ$. Koeficienty $A_n(E_d)$ závisí na energii deuteronu E_d (v LS) a jsou například v tabulkách DROSG1987 [10]. $P_n(\cos \tilde{\vartheta})$ označuje Legendrovy polynomy n -tého řádu.

Dalším způsobem výpočtu diferenciálního účinného průřezu, který je použit ve formátu ENDF je následující [12]:

$$\frac{d\sigma(E_d, \tilde{\vartheta})}{d\tilde{\vartheta}} = \frac{\sigma_t(E_d)}{2\pi} \sum_{l=0}^{NL} \frac{2l+1}{2} A_l(E_d) P_l(\cos \tilde{\vartheta}), \quad (2.6)$$

kde $\sigma_t(E_d)$ je totální účinný průřez pro energii E_d a l je řád Legendrova polynomu. Celá suma zde představuje diferenciální účinný průřez normovaný na jedničku. To znamená, že pokud zintegrujeme diferenciální účinný průřez přes proměnou ϑ od 0° do 180° , dostaneme jedničku.

Při kontrole výsledků jsem ale zjistil, že je tato rovnice pravděpodobně chybná. Normovaný diferenciální účinný průřez (tj. suma v předchozí rovnici) je v pořádku, ale po vynásobení $\frac{\sigma_t(E_d)}{2\pi}$ jsou již výsledky chybné. Správná rovnice by tedy měla být

$$\frac{d\sigma(E_d, \tilde{\vartheta})}{d\tilde{\vartheta}} = \frac{\sigma_t(E_d)\pi}{2} \sum_{l=0}^{NL} \frac{2l+1}{2} A_l(E_d) P_l(\cos \tilde{\vartheta}). \quad (2.7)$$

Převod diferenciálního účinného průřezu z CMS do LS může být popsán

vztahem [5]:

$$\frac{d\sigma(E_d)}{d\vartheta} = \frac{d\sigma(E_d)}{d\tilde{\vartheta}} \cdot \frac{(1 + 2\zeta \cos \tilde{\vartheta} + \zeta^2)^{3/2}}{1 + \zeta \cos \tilde{\vartheta}}, \quad (2.8)$$

kde ζ je definováno jako $\zeta = V_{\text{CMS}}/\tilde{v}_n$. V_{CMS} je rychlost těžiště a \tilde{v}_n rychlost neutronu v CMS. Transformace úhlů mezi CMS a LS spočítáme jako:

$$\cos \vartheta = \frac{\cos \tilde{\vartheta}}{\sqrt{1 + 2\zeta \cos \tilde{\vartheta} + \zeta^2}}. \quad (2.9)$$

V grafech 2.4 a 2.5 vidíme rozdíl mezi hodnotami účinného průřezu v CMS a LS.

2.2.3 Legendrovy polynomy

Legendrovy polynomy jsou řešením Legendrovy diferenciální rovnice [13]

$$(1 - x^2) \frac{d^2y}{dx^2} - 2x \frac{dy}{dx} + n(n+1)y = 0, \quad (2.10)$$

kde n je celé nezáporné číslo a $x \in [-1,1]$. Používají se pro aproximaci funkcí, v našem příkladě pro aproximaci diferenciálních účinných průřezů. Legendrův polynom stupně n lze je definovat jako [13]

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n} \sum_{m=0}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} (-1)^m \binom{n}{m} \binom{2n-2m}{n} x^{n-2m}. \quad (2.11)$$

Polynomy do 15. řádu jsou uvedeny v tabulce 2.2.

2.3 Hornerův algoritmus

Hornerův algoritmus je efektivní metoda používaná pro vyhodnocování polynomů. Vychází z úpravy polynomu do tvaru

$$p(x) = ((\dots((A_n x + A_{n-1})x + A_{n-2})x + \dots + A_1)x + A_0 \quad (2.12)$$

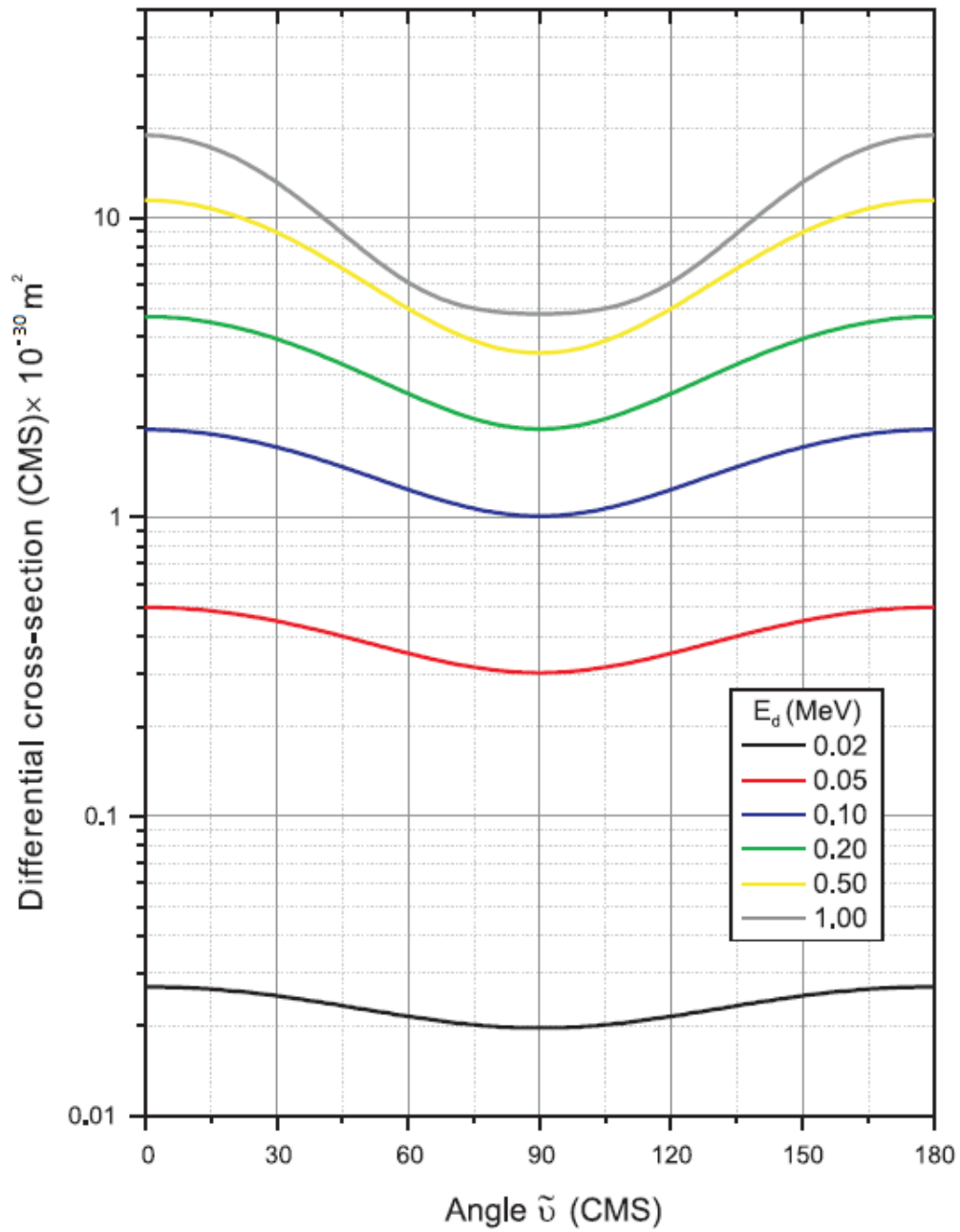
a výpočtu hodnoty pro dané x od vnitřku polynomu v tomto tvaru.

$$A_n x + A_{n-1} = B_{n-1}; \quad (2.13)$$

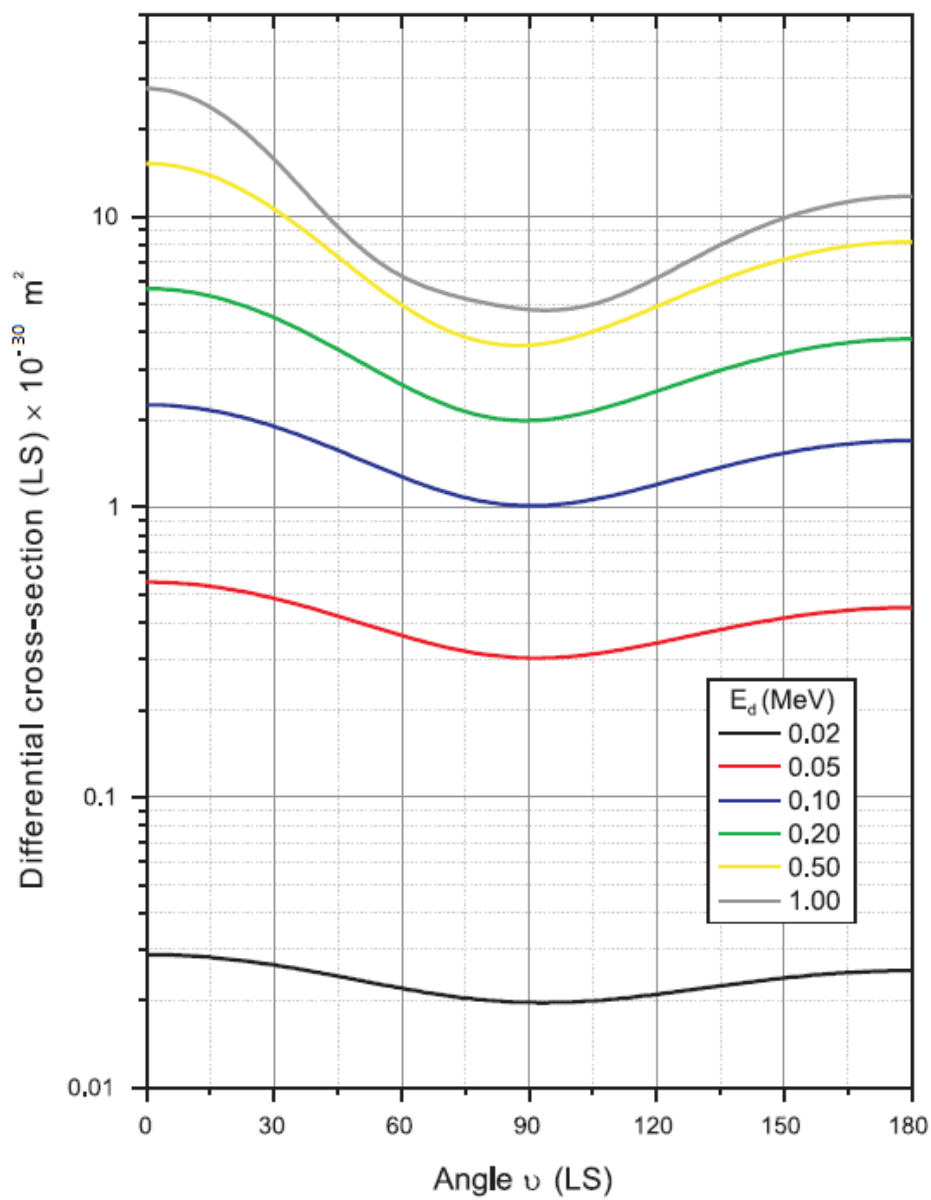
$$B_{n-1} x + A_{n-2} = B_{n-2}; \dots \quad (2.14)$$

$$\dots = B_0 x + A_0 = X. \quad (2.15)$$

Tento algoritmus je mnohem efektivnější než klasická metoda (dosazení za x). Výpočet jednotlivých členů polynomu samostatně a jejich následné sečtení. Tato klasická metoda potřebuje v nejhorším případě n sečtení a $\frac{n^2+n}{n}$ násobení k dosažení výsledku. Hornerův algoritmus využije v nejhorším případě jen n násobení a n sčítání, je tedy pro práci s polynomy mnohem výhodnější, dokonce nejlepší možný [14]. Další výhodou Hornerova algoritmu je i zachování přesnosti ve výpočtech prováděných v počítačích. Sčítá se vždy mezi-výsledek s koeficientem o stejném základu. V této práci používám Hornerův algoritmus pro vyčíslení Legendrových polynomů pro účinné průřezy.



Obrázek 2.4: Diferenciální účinný průřez $D(d,n)^3\text{He}$ reakce (v CMS) pro různé energie deuteronu E_d v rozsahu od 20 keV do 1 MeV [5].



Obrázek 2.5: Diferenciální účinný průřez $D(d,n)^3\text{He}$ reakce (ν LS) pro různé energie deuteronu E_d v rozsahu od 20 keV do 1 MeV [5].

n	$P_n(\cos \tilde{\vartheta})$
0	1
1	$\cos \tilde{\vartheta}$
2	$\frac{1}{2}(3 \cos^2 \tilde{\vartheta} - 1)$
3	$\frac{1}{2}(5 \cos^3 \tilde{\vartheta} - 3 \cos \tilde{\vartheta})$
4	$\frac{1}{8}(35 \cos^4 \tilde{\vartheta} - 30 \cos^2 \tilde{\vartheta} + 3)$
5	$\frac{1}{8}(63 \cos^5 \tilde{\vartheta} - 70 \cos^3 \tilde{\vartheta} + 15 \cos \tilde{\vartheta})$
6	$\frac{1}{16}(231 \cos^6 \tilde{\vartheta} - 315 \cos^4 \tilde{\vartheta} + 105 \cos^2 \tilde{\vartheta} - 5)$
7	$\frac{1}{16}(429 \cos^7 \tilde{\vartheta} - 693 \cos^5 \tilde{\vartheta} + 315 \cos^3 \tilde{\vartheta} - 35 \cos \tilde{\vartheta})$
8	$\frac{1}{128}(6435 \cos^8 \tilde{\vartheta} - 12012 \cos^6 \tilde{\vartheta} + 6930 \cos^4 \tilde{\vartheta} - 1260 \cos^2 \tilde{\vartheta} + 35)$
9	$\frac{1}{128}(12155 \cos^9 \tilde{\vartheta} - 25740 \cos^7 \tilde{\vartheta} + 18018 \cos^5 \tilde{\vartheta} - 4620 \cos^3 \tilde{\vartheta} + 315 \cos \tilde{\vartheta})$
10	$\frac{1}{256}(46189 \cos^{10} \tilde{\vartheta} - 109395 \cos^8 \tilde{\vartheta} + 90090 \cos^6 \tilde{\vartheta} - 30030 \cos^4 \tilde{\vartheta} + 3465 \cos^2 \tilde{\vartheta} - 63)$
11	$\frac{1}{256}(176358 \cos^{11} \tilde{\vartheta} - 461890 \cos^9 \tilde{\vartheta} + 437580 \cos^7 \tilde{\vartheta} - 180180 \cos^5 \tilde{\vartheta} + 30030 \cos^3 \tilde{\vartheta} - 1386 \cos \tilde{\vartheta})$
12	$\frac{1}{2048}(1352078 \cos^{12} \tilde{\vartheta} - 3879876 \cos^{10} \tilde{\vartheta} + 4157010 \cos^8 \tilde{\vartheta} - 2042040 \cos^6 \tilde{\vartheta} + 450450 \cos^4 \tilde{\vartheta} - 36036 \cos^2 \tilde{\vartheta} + 462)$
13	$\frac{1}{2048}(2600150 \cos^{13} \tilde{\vartheta} - 8112468 \cos^{11} \tilde{\vartheta} + 9699690 \cos^9 \tilde{\vartheta} - 5542680 \cos^7 \tilde{\vartheta} + 1531530 \cos^5 \tilde{\vartheta} - 180180 \cos^3 \tilde{\vartheta} + 6006 \cos \tilde{\vartheta})$
14	$\frac{1}{8192}(20058300 \cos^{14} \tilde{\vartheta} - 67603900 \cos^{12} \tilde{\vartheta} + 89237148 \cos^{10} \tilde{\vartheta} - 58198140 \cos^8 \tilde{\vartheta} + 19399380 \cos^6 \tilde{\vartheta} - 3063060 \cos^4 \tilde{\vartheta} + 180180 \cos^2 \tilde{\vartheta} - 1716)$
15	$\frac{1}{8192}(38779380 \cos^{15} \tilde{\vartheta} - 140408100 \cos^{13} \tilde{\vartheta} + 202811700 \cos^{11} \tilde{\vartheta} - 148728580 \cos^9 \tilde{\vartheta} + 58198140 \cos^7 \tilde{\vartheta} - 11639628 \cos^5 \tilde{\vartheta} + 1021020 \cos^3 \tilde{\vartheta} - 25740 \cos \tilde{\vartheta})$

Tabulka 2.2: Legendrovny polynomy do 15. řádu.

Kapitola 3

Nukleární data

V této kapitole bude čtenář seznámen s nukleárními daty pro fúzní Z -pinčový výzkum, druhy těchto dat a odkud tato data pochází. Vycházel jsem zde hlavně z diplomové práce Ing. Martina Suchopára [15].

3.1 Zdroje dat

Nukleární data popisují atomová jádra, jejich vlastnosti, interakce a fyzikální vztahy probíhající mezi nimi. Tato data obsahují účinné průřezy, poločasy rozpadu, vlastnosti částic, které jsou po reakci emitované a způsoby přeměny reagujících částic. Dnes jsou nukleární data dostupná především v internetových databázích, například v [16]. Tyto databáze popisují reakce 290 stabilních izotopů a až 2900 radionuklidů.

3.2 Rozdělení nukleárních dat

Nukleární data se dělí do dvou základních skupin:

První skupina se zabývá jadernými reakcemi, které vznikají po interakci různých dopadajících částic s terčovými jádry. Dopadající částice jsou například protony, neutrony, fotony a deuterony. Tato data zahrnují účinné průřezy, energetická a úhlová rozdělení emitovaných částic a další informace

o těchto jaderných reakcích. Databáze těchto dat typicky obsahují kompletní popis reakcí s nalétávajícími částicemi do energie 20 MeV. U vyšších energií nejsou hodnoty pokryty úplně. Knihovny obsahující tato data jsou např. EXFOR, ENDF či CINDA.

Druhá skupina se zabývá strukturou samotných jader, jejich jadernými přeměnami, poločasů těchto přeměn, přeměnami energetických hladin v jádrech a emitovanými částicemi po reakci. Tato data dále obsahují atomové hmotnosti, schémata rozpadu jednotlivých jader a další informace o struktuře jader. Knihovny obsahující tato data jsou např. ENSDF, NSR a NUDAT.

Obě skupiny nukleárních dat mohou být dostupné jako numerická, experimentální, evaluovaná nebo bibliografická data.

3.3 Typy nukleárních dat

3.3.1 Numerická data

Obrovské množství nukleárních dat je v praxi velmi těžko měřitelné. Řešením je tato data získávat pomocí teoretického modelování experimentu a výpočtů. Mezi data patří informace o srážkách atomových jader, atomů, molekul a strukturální charakteristiky těchto částic. Vstupní parametry a hodnoty pro tyto výpočty jsou k dispozici v databázi nukleárních dat RIPL (Reference Input Parameter Libraries for nuclear model calculations of nuclear reactions).

3.3.2 Experimentální data

Konkrétní experimentální data, která pochází z výsledků jednotlivých experimentů. Např. EXFOR – Experimental Nuclear Reaction Data, také známo jako CSISRS (Cross Section Storage and Retrieval System).

3.3.3 Evaluovaná data

Hodnoty těchto nukleárních dat jsou určovány evaluací, tj. důkladným vyhodnocením všech konkrétních dat, která jsme získali z praktických experimentů, teoretických výpočtů, analýz experimentálních dat nebo provedením interpolací a extrapolací. Hodnoty těchto nukleárních dat jsou uloženy do databází a knihoven ve formátech, které jsou přesně definovány. Např. ENDF-6 – international format for Evaluated Nuclear Reaction Data nebo ENSDF (format for Evaluated Nuclear Structure Data File).

3.3.4 Bibliografická data

Odkazy k nukleárním datům s popisem jejich obsahu. Neobsahují žádná konkrétní numerická data. Např. CIAMDA – Computer Index of Atomic and Molecular Data, CINDA – Computer Index of Neutron Data, NSR – Nuclear Science References.

3.4 Formáty dat

V této části uvedeme různé formáty pro uložení různých typů nukleárních dat. Pro různé potřeby se hodí různé formáty a databáze dat.

3.4.1 CINDA (Computer Index of Nuclear Reaction Data) a NSR (Nuclear Science References)

CINDA je bibliografická databáze měření, výpočtů, evaluovaných účinných průřezů reakcí a dalších souvisejících dat, která obsahují informace o neutronech, fotonech a dalších částicích v reakcích [17]. Obsahuje dále odkazy na knihovny numerických dat, která jsou dostupná ze čtyř zdrojů, a to:

IAEA NDS (International Atomic Energy Agency Nuclear Data Section), Vídeň, Rakousko.

OECD NEA DB (Nuclear Energy Agency Data Bank), Paříž, Francie.

US NNDC (National Nuclear Data Centre), Brookhaven, USA.

Russian Federation Nuclear Data Centre, Obninsk, Rusko.

Data v databázi CINDA jsou strukturována podle terčového nuklidu, druhu reakce a laboratoře, kde k tomuto měření došlo. Regionální datová centra (Nuclear reaction data centres) mají za úkol shromažďovat nová data do databází CINDA a EXFOR. Tato data musí následně udržovat a poskytovat. Další bibliografickou databází, která se používá pro jadernou fyziku, je databáze NSR [18].

3.4.2 EXFOR (Experimental Nuclear Reaction Dat)

EXFOR je rozsáhlá knihovna obsahující experimentální data. Tato data se týkají reakcí, které byly zaznamenány v regionálních centrech jaderných dat koordinovaných NSD. Tato knihovna obsahuje data, která se týkají reakcí indukovaných neutrony, fotony a nabitými částicemi. Dále obsahuje účinné průřezy, úhlová rozdělení a spektra sekundárních částic, parametry rezonancí a mnoho dalších souvisejících dat [19].

EXFOR vychází z více než šestnácti tisíc experimentů a obsahuje přes šedesát tisíc souborů dat rozdělených podle typů reakcí, a proto je to v současné době nejdůležitější knihovna experimentálních dat. Obsahuje i strukturované abstrakty s informacemi o experimentu, numerická data a je také propojena s bibliografickou databází CINDA.

3.4.3 ENDF (Evaluated Nuclear Data Files)

Tato databáze nukleárních dat obsahuje evaluované účinné průřezy, spektra částic a jejich úhlová rozdělení, rezonance a jejich parametry, produkty štěpení a další informace. Klade se zde velký důraz na reakce, které byly indukovány neutrony. Mezinárodně přijatý formát pro ukládání nukleárních dat je aktuálně ENDF-6, ale existuje i ENDF-7, který zatím není ve finální verzi [20].

Poslední verze knihoven nukleárních dat:

1. ENDF/B-VII.1 (USA, 2011)

2. JENDL-4.0 (Japonsko, 2010)
3. ROSFOND (Rusko, 2010)
4. CENDL-3.1 (Čína, 2009)
5. JEFF-3.1 (Evropa - NEA, 2005)

3.4.4 JEFF (Joint Evaluated Fission and Fusion Data Library)

JEFF je knihovna obsahující evaluovaná jaderná data. Knihovna obsahuje data, která se týkají interakcí neutronů a protonů, radioaktivních přeměn, aktivačních a foto-jaderných reakcí, rozptylů štěpení a dalších dat. Tato knihovna se používá především v oblastech jaderného štěpení a slučování [21].

3.4.5 ENSDF (Evaluated Nuclear Structure Data Files)

Hlavní knihovnou pro data týkající se struktury jader a jejich přeměny, evaluovaná experimentální data pro téměř všechny známé nuklidy. Je to mezinárodně používaná databáze s velkým počtem přispěvatelů. Tato databáze je velmi často aktualizovaná a nejnovější data jsou pravidelně publikována [22].

3.4.6 NUDAT (Nuclear Database)

NUDAT je knihovna obsahující výtah nejdůležitějších dat z knihovny ENDF a data týkající se tepelných neutronů (např. účinné průřezy a rezonanční integrály). Obsahuje také informace o radionuklidech a poločasy rozpadu. Tato databáze je velmi dobře dostupná na internetu [23].

3.4.7 RNAL (Reference Neutron Activation Library)

RNAL je knihovna, která obsahuje pro 255 vybraných reakcí, které jsou indukovány neutrony, evaluované účinné průřezy a další data. Používá se pro aktivační analýzu a další aplikace [24].

3.4.8 FISPACT

FISPACT je databáze nukleárních dat, která je částí EASY (European Activation System) a je používána ve fúzním výzkumu pro počítání vlivu protonů, neutronů a deuteronů na různé materiály. Obsahuje veliký rozsah podrobných dat pro mnoho energií. Tato databáze je hlavně používána v tokamakovém výzkumu, kde dochází ke značné interakci mezi plazmatem a okolními materiály. Mimo jiné obsahuje účinné průřezy reakcí, které nás zajímají.

Existuje sedm struktur pro uložení dat v této databázi, a to: WIMS(69), GAM-II(100), XMAS(172), VITAMIN-J(175) a TRIPOLI(315). Toto rozdělení říká, kolik má každá struktura záznamů a v jakých hodnotách energií je tabelován totální účinný průřez (krok energií není equidistantní). Existují i rozšíření některých skupin o data pro vysoké energie. Jsou to struktury VITAMIN-J+(211) a TRIPOLI+(351). Je doporučeno používat právě tyto dvě struktury. Rozsah hodnot energií v těchto rozšířených strukturách je od 50 μeV do 55 MeV. Energie nalétávající částice jsou řazené sestupně. Například pro VITAMIN-J+ máme 211 hodnot energií nalétávající částice (osa x), kterým odpovídá 211 za sebou jdoucích hodnot totálních účinných průřezů [25].

Data jsou uložena podle jednotlivých reakcí jako řada za sebou jdoucích čísel, reprezentující hodnoty totálního účinného průřezu. Nejdříve je však v hlavičce uvedena struktura, počet hodnot a název reakce. Například pro DD reakci je to vše patrné z Obr. 3.1.

```

*****
*   EAF-2007D(0)211Gp THE EUROPEAN ACTIVATION FILE VERSION 2007D(0) AUG 2006*
*****
ACTIVATION AND TRANSMUTATION CROSS SECTION FILE WITH ENERGIES UP TO 55 MEV
FOR USE BY THE EUROPEAN ACTIVATION SYSTEM (EASY) >>> DEUTERON LIBRARY <<<
-----
EASY DOCUMENTATION SERIES UKAEA FUS 536
THE EUROPEAN ACTIVATION FILE: EAF-2007 DEUTERON- AND PROTON-INDUCED CROSS
SECTION LIBRARIES, RA FORREST
EURATOM / UKAEA FUSION ASSOCIATION
CULHAM SCIENCE CENTRE
ABINGDON, OXFORDSHIRE, OX14 3DB
UNITED KINGDOM
THESE GROUP CROSS SECTIONS HAVE BEEN CALCULATED AT CULHAM IN THE 211-GROUP
VITAMIN-J+ STRUCTURE AND A FLAT MICRO FLUX WEIGHTING FUNCTION.
#####
10020  40  211  H  2  (D,N  )HE  3  1.0000+00*  <0>
FENDL-2C

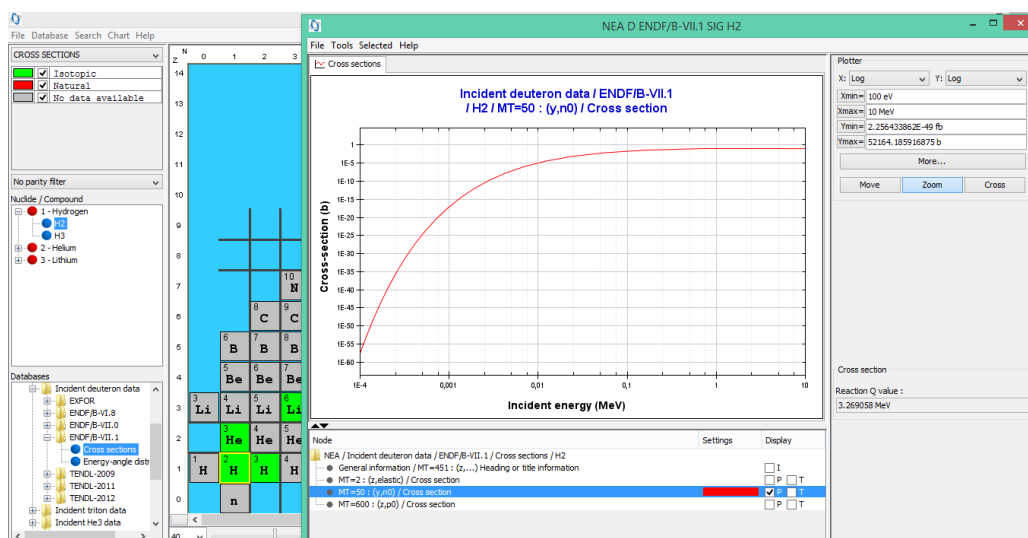
2.07677E-02  2.14190E-02  2.20905E-02  2.27833E-02  2.34975E-02  2.42345E-02
2.49942E-02  2.57780E-02  2.65861E-02  2.74199E-02  2.82794E-02  2.91664E-02
.....
.....

```

Obrázek 3.1: Hlavička nukleárních dat v databázi FISPACT.

3.5 Program JANIS

JANIS (Java-based Nuclear Information Software) je program, který usnadňuje vizualizaci a manipulaci s nukleárními daty a jejich srovnávání. Cílem tohoto programu je zprostředkování numerických a grafických hodnot nukleárních dat uživateli, který nemá předchozí znalosti o formátech, ve kterých jsou data uložena. Obsahuje data bibliografická, evaluovaná a experimentální jaderná data, týkající se účinných průřezů, radioaktivní přeměny, jaderné přeměny a dalších důležitých parametrů [26]. Ukázka tohoto programu je na Obr. 3.2.



Obrázek 3.2: Program JANIS.

3.6 Nukleární data pro fúzní Z -pinčový výzkum

V této části bude vybrána databáze, která je nejvíce vhodná pro použití v Z -pinčovém výzkumu na FEL ČVUT v Praze. Pro tento výzkum potřebujeme hlavně totální a diferenciální účinné průřezy.

3.6.1 Starší zdroje dat používané v Z -pinčovém výzkumu na FEL ČVUT

Až do současné doby byla používaná data z [10], kde byla k dispozici data pro totální účinné průřezy od 0.02 MeV do 15 MeV a pro výpočet diferenciálního účinného průřezu ve stejném rozsahu energií (viz Tab. 2.1). Vzhledem k plánovanému rozšíření simulací se tato data ukázala jako nedostatečná. Nedostatky byly v nedostupnosti dat pro nízké energie a různé reakce, či složitost načítání dat.

3.6.2 Doporučení nukleárních dat pro budoucí výzkum na FEL ČVUT

Vzhledem k tomu, že na FEL ČVUT jsou třeba pro výzkum hlavně totální účinné průřezy a diferenciální účinné průřezy, musíme používat takové databáze nukleárních dat, které potřebná data obsahují. Takovými databázemi jsou ENDF a EXFOR. Doporučuji tedy pro budoucí fúzní výzkum na FEL ČVUT použít právě tyto dvě databáze. Jedním z hlavních cílů této bakalářské práce bylo též osvojit si způsob načítání dat, tj. vytvořit podprogram v jazyce FORTRAN, který tato data dokáže načíst. Proto jsem se musel rozhodnout pro jednu konkrétní databázi. Na základě doporučení jsem se rozhodl použít databázi evaluovaných nukleárních dat ENDF.

Kapitola 4

ENDF

Celá následující kapitola se zabývá podrobným popisem, obsahem a strukturou formátu ENDF verze 6 a konkrétním použitím v numerických simulacích.

4.1 Představení ENDF-6

ENFD formát a knihovny dat byly vytvořeny skupinou CSEWG (Cross Section Evaluation Working Group), do které patří univerzity a spolupracující národní a průmyslové laboratoře ve Spojených státech amerických a Kanadě. Dřívější verze ENDF obsahovaly účinné průřezy a úhlová rozdělení, produkci fotonů z reakcí neutronů, foto-atomické interakce, termální rozdělení neutronů a radionuklidovou produkci. Verze ENDF-6 obsahuje data pro vyšší energie a podrobnější popis dat rozdělením ENDF knihovny na podknihovny.

4.2 Filozofie ENDF formátu

ENDF byl vytvořen pro ukládání a hledání evaluovaných nukleárních dat pro aplikace v nukleárních technologiích. Tyto aplikace mají mnoho požadavků na data, formát, ve kterém jsou uložena a mnoho dalších. Důležité je, aby každá evauace byla kompletní pro danou aplikaci. Systém ENDF je rozdě-

lený na formáty a procedury. Formáty nám popisují, jak jsou data uložena v knihovnách a říkají, jak rekonstruovat veličiny jako účinné průřezy a úhlová rozdělení podle parametrů v knihovně. Procedury jsou pravidla, která určují jaký to musí být typ dat a jaký formát můžeme použít. Procedury jsou produkovány jednotlivými organizacemi. Knihovna od CSEWG se nazývá ENDF/B.

4.3 Podrobnější popis ENDF

ENDF knihovny jsou kolekce evaluovaných dat uložených ve formátu, který je snadno čitelný. Používá se textový soubor s příponou .endf, kde má každý záznam 80 znaků. Jeden řádek je jeden záznam. Každou evaluaci určuje množina hierarchicky organizovaných parametrů. Z historických důvodů jsou jednotlivé parametry nazvány jako proměnné programu vytvořeného v jazyce FORTRAN.

4.3.1 Knihovna

Knihovna je kolekce materiálových evaluací. Každá z těchto kolekcí je identifikována číslem knihovny *NLIB*. Knihovna se dělí na podknihovny *NSUB* a má ještě další parametry a to verzi *NVER*, vydání *NREL* a formát *NFOR*. Některé knihovny jsou vidět v Tab. 4.1. Pro potřeby této práce použijeme knihovnu ENDF/B (*NLIB*=0).

4.3.2 Podknihovny, nalétávající částice a datové typy

Podknihovny rozlišují mezi různými nalétávajícími částicemi a datovými typy. Číslo podknihovny (*NSUB*) je výsledek výrazu

$$NSUB = 10 * IPART + ITYPE, \quad (4.1)$$

kde *IPART* definuje nalétávající částici a *ITYPE* její typ. Podknihovna, kterou potřebujeme, je *NSUB* = 10020 (10 * 1002 + 0). Některá čísla podknihoven lze vidět v Tab. 4.2.

<i>NLIB</i>	<i>Knihovna</i>
0	ENDF/B - Evaluated Nuclear Data File
1	ENDF/A - Evaluated Nuclear Data File
2	JEFF - NEA Joint Evaluated Fission and Fusion File
3	EFF - European Fusion File
4	ENDF/B High Energy File
5	CENDL - China Evaluated Nuclear Data Library
6	JENDL - Japan Evaluated Nuclear Data Library
21	SG-23 - WPEC-SG23
31	INDL/V - IAEA Evaluated Neutron Data Library
32	INDL/A - IAEA Nuclear Data Activation Library
33	FENDL - IAEA Fusion Evaluated Nuclear Data Library
34	IRDF - IAEA International Reactor Dosimetry File
35	BROND - Russian Evaluated Nuclear Data File
36	INGDB-90 - Geophysics Data
37	FENDL/A - FENDL activation evaluations
41	BROND - Russian Evaluated Nuclear Data File

Tabulka 4.1: *NLIB* čísla a odpovídající knihovny [12].

4.4 Obsah a struktura ENDF

Konkrétní ENDF soubor se dělí podle čísel *MAT*, *MF* a *MT*. Cílová částice je specifikována číslem *MAT* (material). Evaluace pro tento materiál je dále rozdělena na bloky dat, identifikované pomocí čísla *MF* na soubory (file). Číslo *MF* popisuje určitý datový typ. Tyto soubory jsou dále děleny na sekce podle čísla *MT* (section), které určuje typ reakce. V každé této sekci už jsou jednotlivé záznamy MR (record). Vše je náhorně ukázáno na Obr. 4.1.

NSUB	IPART	ITYPE	Jméno podknihovny
0	0	0	Photo-Nuclear Data
1	0	1	Photo-Induced Fission Product Yields
3	0	3	Photo-Atomic Interaction Data
...
10010	1001	0	Incident-Proton Data
10020	1002	0	Incident-Deuteron Data
...
20040	2004	0	Incident-Alpha data
...

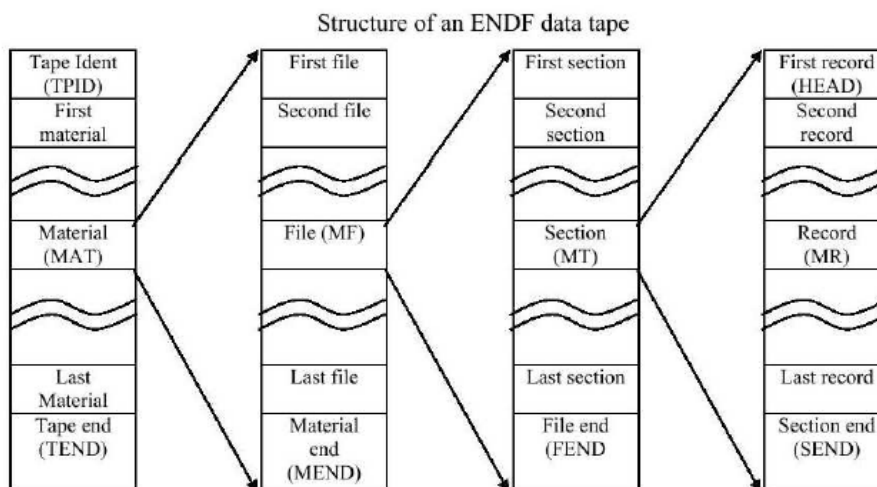
Tabulka 4.2: *NSUB* čísla a odpovídající podknihovny [12].

4.4.1 Material (*MAT*)

Materiál může být nuklid, přírodní prvek obsahující několik izotopů nebo kombinace několika prvků (např. sloučenina nebo molekula). Každému materiálu v ENDF knihovně je přiřazeno unikátní identifikační číslo *MAT* v rozsahu od 1 do 9999. Materiál má stejné *MAT* číslo ve všech podknihovnách. Při určování čísla *MAT* platí následující pravidlo: $MAT = 100xZ + I$, kde Z je atomové číslo izotopu a I je unikátní číslo pro izotop a jeho isomerický stav. Toto unikátní číslo nabývá hodnot od 25 (nejlehčí stabilní izotop) a pokračuje přičtením 3 pro každý další stabilní izotop. Například pro tritium je to $MAT = 100 * 1 + (25 + 3 + 3) = 131$. Pokud je v materiálu více než jeden izotop, pak $MAT = 100 * Z$. Pro potřeby práce využijeme $MAT = 128$ a $MAT = 131$. Podrobně je vše popsáno v ENDF manuálu [12].

4.4.2 Soubor (*MF*)

Soubor (file) je blok dat, který popisuje určitý datový typ. Může nabývat hodnot 1 až 40 s výjimkou 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 24, a 25. (například $MF = 1$ obecné informace, $MF = 3$ totální účinný průřez). V práci využijeme



Obrázek 4.1: Struktura ENDF formátu [12].

$MF = 3$ a $MF = 6$. Náhled pro prvních 6 hodnot MF je v Tab. 4.3.

4.4.3 Sekce (MT)

MT určuje typ reakce a může nabývat hodnot 1 až 999. Například pro $MT = 50$ je to reakce produkující neutron. Pro práci potřebujeme $MT = 50$ a $MT = 600$. Podrobněji v Tab. 4.4.

4.5 Reprezentace dat

První záznam každé sekce obsahuje číslo ZA , které identifikuje specifický materiál. $ZA = 1000.0 * Z + A$, kde je Z atomové číslo a A nukleonové číslo. Například pro deuterium je $ZA = 1002$. Pokud materiál obsahuje více izotopů, pak je $A = 0$. Další hodnotou, kterou obsahuje každý první záznam sekce, je číslo AWR , které vyjadřuje poměr hmotnosti nalétávající částice a neutronu. Toto je vidět na Obr. 4.2. Výše uvedené parametry lze nalézt v každém databázovém souboru (.endf). Tyto parametry lze najít i ve výpisu

MF	Popis
1	Základní informace
2	Rezonanční parametry
3	Totální účinné průřezy
4	Úhlové rozdělení pro emitované částice
5	Energetické rozdělení pro emitované částice
6	Energie-úhel rozdělení pro emitované částice
...	...

Tabulka 4.3: MF čísla a odpovídající soubory [12].

MT	Emitovaná částice
50-90	n
600-648	p
650-698	d
700-748	t
750-798	3He
800-848	α

Tabulka 4.4: MT čísla a odpovídající emitované částice [12].

konkrétní reakce dostupné na internetových stránkách NDC (viz Obr. 4.3) [16].

4.6 Popis konkrétního záznamu

Samotný databázový soubor .endf je textový soubor, který má na každém řádku 80 znaků. Každý řádek je rozdělen na většinou na 10 sektorů kde jsou uložena data.

V prvním řádku každého .endf souboru je číslo souboru (Tape id). Od druhého řádku začíná první sekce tohoto souboru, kde jsou informace, co a kde

ZA		AWR				MAT MF MT					
1.002000+3	1.996256+0	0	0	0	0	128	3	50	1	HEAD	
3.269058+6	3.269058+6	0	0	0	2	67	128	3	50	2	TAB1
	15	6	67	5			128	3	50	3	
1.000000+2	1.12310-58	1.000000+3	5.59880-18	1.000000+4	8.821600-6	128	3	50	4		

Obrázek 4.2: Popis ENDF formátu.

The screenshot shows the 'ENDF Data Selection' window. At the top, there are buttons for 'Retrieve', 'Plot', 'Selected' (selected), 'Unselected', 'All', and 'Reset'. Below that are 'Plotting options' with radio buttons for 'Quick plot (cross-sections only: σ)', 'MF3-Plot', and 'Universal plot ($\sigma \pm \Delta\sigma$, $d\sigma/d\Omega$, $d\sigma/dE$, $d^2\sigma/dE/d\Omega$) beta version'. The main area shows a list of data entries. The first entry is '1) Info Summary MAT PEN Inter 1-H-2 MAT=128 NSUB=10020 (D) 10MeV ENDF/B-VII.1 LANL'. Below this, there are two sections: 'MAT=128 MF3 [SIG] Cross sections' and 'MAT=128 MF6 [DA/DE] Product energy-angle distributions'. Each entry in these sections has a checkbox, a 'Summary' button, an 'ENDF-6' button, a 'Plot' button, and a description of the reaction and its parameters.

Obrázek 4.3: Výpis reakce v ENDF ze stránek NDC.

tento souboru obsahuje. První sekce má vždy číslo 451 a obsahuje i textový popis. Na začátku každé sekce je hlavička (*HEAD*) záznamu, která obsahuje základní informace. Podle konkrétního souboru (*MF*) a sekce (*MT*) následují další záznamy. Pro naše hledání totálních účinných průřezů to je už jen záznam *TAB1* a pro diferenciálních účinné průřezů jsou to *TAB1*, *TAB2* a *LIST*.

4.7 Diferenciální účinný průřez pro $D(d,n)^3\text{He}$, $D(d,p)\text{T}$ a $D(d,n)^4\text{He}$ v ENDF

Pro spočítání diferenciálního účinného průřezu pro naše reakce potřebujeme pracovat s dvěma materiály, a to 128 (deuterium) a 131 (tritium). Pro tyto materiály budeme potřebovat soubory 3 (totální účinný průřez) a 6 (rozdělení v úhlech pro různé energie pro emitovanou částici). V těchto souborech nás zajímají pouze sekce 50 (popisuje reakci s vylétávajícím neutronem) a 600 (popisuje reakci s vylétávajícím protonem).

4.7.1 Totální účinný průřez

Totální účinné průřezy pro danou reakci získáme tak, že najdeme první řádek, kde je $MF = 3$ a $MT = 50$ nebo 600 . Na tomto řádku je HEAD záznam obsahující ZA a AWR . Následuje $TAB1$ záznam s hodnotami QM , QI , LR , NR , NP . Další řádek obsahuje interpolační informace. Samotná data začínají až na 4. řádku sekce. Jsou zde páry hodnot energie-totální účinný průřez řazené od nejnižší energie po tu nejvyšší. Počet párů udává číslo NP . Na jednom řádku jsou vždy maximálně 3 páry hodnot. Významy jednotlivých částí záznamů jsou v tabulce 4.5. Ukázka části dat v ENDF s totálními účinnými průřezy je na obrázku 4.4.

```

1.002000+3 1.996256+0      0      0      0      0 128 3 50 1
3.269058+6 3.269058+6      0      0      2      67 128 3 50 2
      15      6      67      5      128 3 50 3
1.000000+2 1.12310-58 1.000000+3 5.59880-18 1.000000+4 8.821600-6 128 3 50 4
2.000000+4 2.773400-4 3.000000+4 1.174700-3 4.000000+4 2.678500-3 128 3 50 5
5.000000+4 4.610500-3 6.000000+4 6.805000-3 7.000000+4 9.141800-3 128 3 50 6
8.000000+4 1.154100-2 9.000000+4 1.395000-2 1.000000+5 1.633900-2 128 3 50 7

```

Obrázek 4.4: Příklad totálního účinného průřezu v ENDF.

Záznam	Označení	Pozice	Význam
HEAD	ZA	1/6	identifikuje cílový nukleon
HEAD	AWR	2/6	hmotnostní poměr materiálu a neutronu
TAB1	QM	1/6	energie hmotnostního úbytku reakce
TAB1	QI	2/6	energie reakce
TAB1	LR	4/6	příznak emitování nespecifické částice
TAB1	NR	5/6	počet interpolačních rozsahů
TAB1	NP	6/6	počet párů hodnot

Tabulka 4.5: Popis HEAD a TAB1 záznamu pro zjištění totálního účinného průřezu.

4.7.2 Diferenciální účinný průřez

Rozdělení energie-úhel pro emitovanou částici získáme nalezením prvního řádku s $MF = 6$ a $MT = 50$ nebo $MT = 600$. Tento řádek je *HEAD* záznam. Zde obsahuje opět hodnoty *ZA* a *AWR*, a navíc i *LCT*, *NK*. Následuje *TAB1* záznam, který pro tento případ obsahuje hodnoty *ZAP*, *AWP*, *LIP*, *LAW*, *NR* a *NP*. Zde je nejdůležitější hodnota *LAW*, protože udává způsob, jak získat účinné průřezy. Pro náš případ je $LAW = 2$, a to znamená použití two-body úhlového rozdělení. Následují interpolační záznam, záznam popisující rozsah energií a *TAB2* záznam pro $LAW=2$, který obsahuje hodnoty *NR* a *NE*. Na dalším řádku jsou poslední interpolační rozsahy a od 7. řádku začínají samotná data. Na tomto řádku je *LIST* záznam pro nejnižší energii. Obsahuje hodnoty E_1 , *LANG*, *NW* a *NL*. *NW* udává počet Legendrových koeficientů pro tuto energii, tudíž následuje $NW/6$ (zaokrouhleno nahoru) řádků s těmito koeficienty. Koeficienty jdou za sebou od A_1 až po A_{NW} . Toto se opakuje pro všechny energie. Významy jednotlivých částí záznamů jsou uvedeny v tabulce 4.6. Ukázka části ENDF včetně hodnot pro koeficienty Legendrových polynomů je na obrázku 4.5.

1.002000+3	1.996256+0	0	2	2	0	128	6	50	1
1.000000+0	1.000000+0	0	2	1	2	128	6	50	2
		2	2						3
1.000000+2	1.000000+0	1.000000+7	1.000000+0						4
0.000000+0	0.000000+0	0	0	1					5
		67	2						6
0.000000+0	1.000000+2	0	0	6	6				7
0.000000+0	3.779300-2	0.000000+0	1.616600-5	0.000000+0	6.09700-10				8
0.000000+0	1.000000+3	0	0	6	6				9
0.000000+0	3.865800-2	0.000000+0	2.368100-5	0.000000+0	7.70920-10				10
0.000000+0	1.000000+4	0	0	6	6				11
0.000000+0	4.542600-2	0.000000+0	7.097100-5	0.000000+0	3.531600-9				12
0.000000+0	2.000000+4	0	0	6	6				13
0.000000+0	5.211900-2	0.000000+0	1.252100-4	0.000000+0	9.552700-9				14
									⋮

Obrázek 4.5: Příklad diferenciálního účinného průřezu v ENDF.

Výpočet diferenciálních účinných průřezů

Pro výpočet diferenciálních účinných průřezů použijeme získané totální účinné průřezy, koeficienty diferenciálních účinných průřezů a Legendrovy polynomy. Samotný výpočet ukazuje rovnice (2.7) v druhé kapitole.

4.8 Programový výstup práce

Všechny výše uvedené znalosti byly použity pro vývoj podprogramu v jazyce FORTRAN, který má za úkol načíst z dodaných .endf souborů pro $D(d,n)^3\text{He}$, $D(d,p)\text{T}$ a $D(d,n)^4\text{He}$ reakci totální účinné průřezy, koeficienty Legendrových polynomů a následně provést výpočet diferenciálního účinného průřezu pro danou energii a úhel.

4.9 Popis podprogramu

Podprogram obsahuje 5 zdrojových souborů s příponou .f95. Main.f95 a 4 moduly (TotalCS, DifferentialCS, Polynomy a CountDifferentialCS). Main je hlavní program, který volá příslušné moduly a plní výstupní pole pro ener-

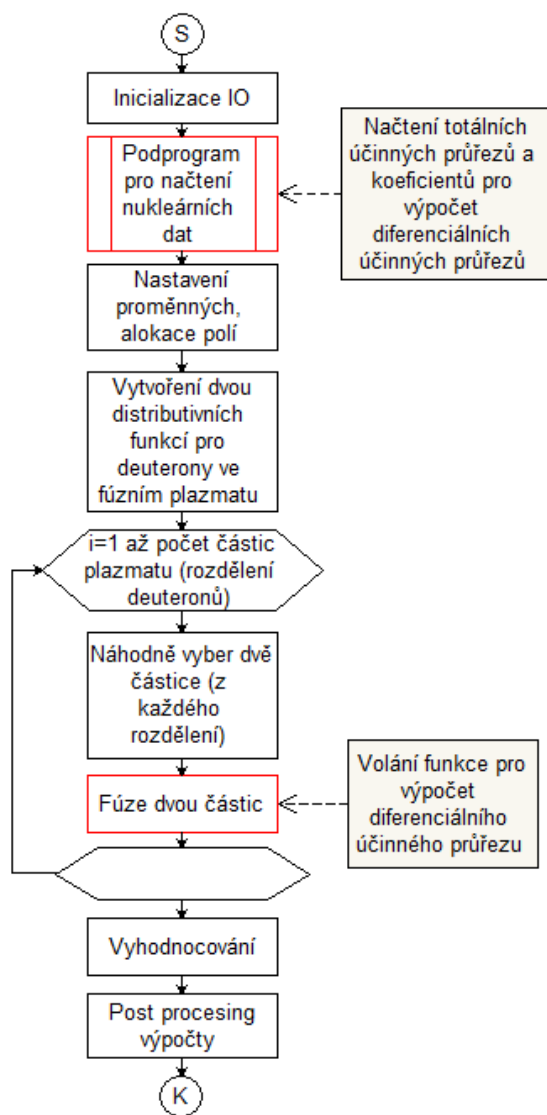
Hodnota	V záznamu	Pozice	Význam
ZA	HEAD	1/6	identifikuje cílový nukleon
AWR	HEAD	2/6	hmotnostní poměr materiálu a neutronu
LCT	HEAD	4/6	určení soustavy (CMS, LS)
NK	HEAD	5/6	počet subsekcí v MT
ZAP	TAB1	1/6	identifikuje produkt
AWP	TAB1	2/6	hmotnostní poměr produktu a neutronu
LIP	TAB1	3/6	určuje isomerický stav produktu
LAW	TAB1	4/6	určuje jak reprezentovat data
NR	TAB1,TAB2	5/6	počet interpolačních rozsahů
NP	TAB1	6/6	počet párů hodnot
NE	TAB2	6/6	počet energií a odpovídajících skupin koeficientů
E_1	LIST	6/6	energie nalétávající částice
LANG	LIST	3/6	reprezentace dat
NW	LIST	5/6	počet koeficientů
NL	LIST	6/6	nejvyšší řád koeficientu

Tabulka 4.6: Popis HEAD, TAB1 a LIST záznamu pro zjištění diferenciálního účinného průřezu.

gie (CSEd), totální účinné průřezy (TotCS), počty koeficientů pro výpočet diferenciálního účinného průřezu (diffCSq) a tyto koeficienty (diffCScoef). Na konci je možné pro kontrolu zavolat funkci pro výpočet konkrétního diferenciálního účinného průřezu pro danou energii a úhel. Moduly TotalCS a DifferentialCS provádějí načtení párů hodnot energie-totální účinný průřez v prvním případě a ve druhém načítají počty koeficientů a koeficienty samotné pro výpočet diferenciálního účinného průřezu z .endf souboru. Modul Polynomy vrací hodnotu Legendrova polynomu l -tého řádu. Poslední modul CountDifferentialCS počítá konkrétní hodnotu diferenciálního účinného průřezu pro danou energii a úhel.

4.10 Použití podprogramu pro práci s nukleárními daty v programu RODES

Mnou vytvořený podprogram bude součástí programu RODES-3Dn-TOF (Reconstruction of Deuteron Energy Spectra from 3D Neutron Time-of-flight diagnostic) Ing. Karla Řezáče, Ph.D. Tento program se používá pro simulace ve fúzním výzkumu na katedře Fyziky FEL ČVUT. Na následujícím obrázku, 4.6, je uveden program RODES s vyznačenými částmi mého podprogramu. Zdrojové kódy podprogramu jsou uvedeny v příloze této práce.



Obrázek 4.6: Vývojový diagram programu RODES s vyznačenými částmi mého podprogramu.

Kapitola 5

Shrnutí a závěry práce

V úvodní, tj. rešeršní části práce jsme se seznámili s jadernou fúzí a pojmy, které s tímto tématem souvisí. Jednalo se o izotopy vodíku, rozdíl mezi fúzí a štěpením a proč je právě fúze perspektivní pro výrobu energie. Následně byly popsány aktuální přístupy, jak realizovat nukleární reaktor pro produkci energie, a to tokamaky, lasery nebo Z -pinči. V následující části práce byl vysvětlen teoretický základ k popisu fúzních reakcí s izotopy vodíku, kde byl nastíněn výpočet energie neutronu a vysvětleny pojmy, jako je účinný průřez a diferenciální účinný průřez.

Následovala kapitola o nukleárních datech, kde byly popsány zdroje, typy a formáty nukleárních dat. Na základě rešerše dostupných dat bylo doporučeno, v jaké databázi se budou nalézat nukleární data, která budou v budoucnu využívána v numerických simulacích na Katedře fyziky FEL ČVUT v Praze. Doporučeny jsou databáze ENDF a EXFOR, protože obsahují data pro totální a diferenciální účinné průřezy. Stěžejní část této práce se nalézá v kapitole o ENDF, kde je vysvětleno jak potřebná data ze souboru .endf získat a jak s nimi dále pracovat, abychom zjistili totální účinné průřezy a koeficienty pro výpočet diferenciálních účinných průřezů. Konec práce seznamuje s podprogramem vytvořeným na základě všech nabytých znalostí. Je zde jeho popis a vývojový diagram programu RODES s vyznačenými částmi, kde pracuje tento podprogram.

Totální účinné průřezy získáme z části .endf souboru, kde je $MF = 3$ a $MT = 50$ (pro vylétavající neutron) nebo $MT = 600$ (pro vylétavající proton). Jsou zde uloženy jako páry hodnot energie-úhel. Koeficienty pro výpočet diferenciálních účinných průřezů získáme z části, kde je $MF = 6$ a $MT = 50$ nebo $MT = 600$. Tyto koeficienty jsou pro každou energii uloženy jako řada za sebou jdoucích čísel. K výpočtu potřebujeme ještě Legendrovy polynomy do 15. řádu. Tato data použijeme pro konečný výpočet diferenciálních účinných průřezů.

Hlavní rozdíl mezi výpočtem diferenciálního účinného průřezu z [10] a [12] je ten, že v prvním případě potřebujeme pro výpočet diferenciální účinný průřez pro úhel $\tilde{\vartheta} = 0^\circ$, sudé Legendrovy polynomy a příslušné koeficienty. V druhém případě jsou k výpočtu použity sudé i liché Legendrovy polynomy a příslušné koeficienty. Tento výsledek je normovaný na jedničku. Abychom zjistili konečný diferenciální účinný průřez, musíme tento výsledek vynásobit příslušným totálním účinným průřezem.

Při kontrole a porovnávání výsledků z napsaného podprogramu s hodnotami z programu JANIS jsem zjistil, že výsledky nevychází. Po důkladných kontrolách a opakovaných výpočtech jsem zjistil, že je v ENDF manuálu [12] chyba. Výpočet normovaného diferenciálního průřezu je v pořádku, ale výpočet absolutního diferenciálního průřezu je chybný. V manuálu se normovaný diferenciální účinný průřez násobí $\frac{\sigma_t(E_d)}{2\pi}$, což je špatně. Dělí se π , ale mělo by se násobit. Správný vzorec pro výpočet absolutního diferenciálního účinného průřezu by měl být podle rovnice (2.7). Při použití tohoto vzorce jsou všechny výsledky v porovnání s hodnotami z programu JANIS správné.

Cílem práce bylo získání základního přehledu ve fúzních reakcích s izotopy vodíku. Dále osvojení způsobu tabletování nukleárních dat a navrhnutí vhodné databáze pro získávání nukleárních dat. Dalším cílem bylo podrobné porozumění formátu ENDF, zjištění způsobu uložení potřebných nukleárních dat a napsání programu, který je umí načíst a vypočítat. Všechny tyto cíle byly splněny. Hlavní výstup celé práce je podprogram samotný, který bude používán v současných i budoucích numerických simulacích.

Literatura

- [1] ŘÍPA, M., et al. *Řízená termojaderná syntéza pro každého*. 3. vyd. Praha: Ústav fyziky plazmatu AV ČR, 2004. ISBN 80-902-7247-9.
- [2] REICHL, J., VŠETIČKA, M. Vazebná energie jádra. *Encyklopedie fyziky* [online]. 2014 [cit. 2014-05-11]. Dostupné z: <<http://fyzika.jreichl.com/main.article/view/799-vazebna-energie-jadra>>
- [3] WILLIAMS, L. Nuclear Fusion Reactors - Tokamaks. *Liliya L. R. Williams web* [online]. 2005 [cit. 2014-05-11]. Dostupné z: <<http://homepages.spa.umn.edu/~llrw/a1001/tokamak.html>>
- [4] Co se vlastně povedlo fúzním vědcům v inerciálním zařízení NIF?. *Atom info* [online]. 2014 [cit. 2014-05-11]. Dostupné z: <<http://atominfo.cz/2014/02/co-se-vlastne-povedlo-fuznim-vedcum--z-inercialniho-zarizeni-nif/>>
- [5] ŘEZÁČ, K. *Reconstruction of Neutron Energy Spectra in Z-pinch Fusion Experiments*. Praha, 2011. Doktorská práce. České vysoké učení technické v Praze, Fakulta elektrotechnická, Katedra fyziky.
- [6] About Z. *Sandia national laboratories* [online]. 2013 [cit. 2014-05-11]. Dostupné z: <http://www.sandia.gov/z-machine/about_z/index.html>
- [7] Z machine. *Wikipedie* [online]. 2014 [cit. 2014-05-11]. Dostupné z: <http://en.wikipedia.org/wiki/Z_machine>

- [8] This Machine Melts Diamonds For Fun. *GIZMODO* [online]. 2012 [cit. 2014-05-11]. Dostupné z: <<http://gizmodo.com/5932053/this-machine-melts-diamonds-for-fun>>
- [9] Neutronové účinné průřezy. *Reaktorová fyzika I.* [online]. 2006 [cit. 2014-05-11]. Dostupné z: <http://www.fjfi.cvut.cz/reaktorova_fyzika1/>
- [10] DROSG, M. INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY. *Handbook on nuclear activation data.* Vienna: IAEA, 1987. ISBN 92-013-5087-2.
- [11] VLASOV, N. *Neutrony.* 1. vyd. Praha: NČAV, 1962, 480 s.
- [12] HERMAN, M. a A. TRKOV. BROOKHAVEN NATIONAL LABORATORY. *ENDF-6 Formats Manual: Data Formats and Procedures for the Evaluated Nuclear Data File ENDF/B-VI and ENDF/B-VII.* Upton, NY: Brookhaven National Laboratory, 2009.
- [13] UNZEITIG, L. *Ortogonalní polynomy.* Olomouc, 2008. Bakalářská práce. Univerzita Palackého v Olomouci, Přírodovědská fakulta, Katedra matematické analýzy a informatiky. Vedoucí práce RNDr. Jitka Machalová, Ph.D.
- [14] OLŠÁK, Petr. *Úvod do algebry, zejména lineární.* Vyd. 1. Praha: FEL ČVUT v Praze, 2007, 188 s. ISBN 978-80-01-03775-1.
- [15] SUCHOPÁR, M. *Příprava měření vlastností neutronového pole v okolí solného kanálu umístěného v aktivní zóně reaktoru LR-0 pomocí neutronové aktivační analýzy.* Praha, 2010. Diplomová práce. České vysoké učení technické v Praze, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, Katedra jaderných reaktorů. Vedoucí práce RNDr. Vladimír Wagner, CSc.
- [16] Evaluated Nuclear Data File (ENDF). *National nuclear data center* [online]. 2011 [cit. 2014-05-11]. Dostupné z: <<http://www.nndc.bnl.gov/exfor/endl00.jsp>>

- [17] Computer Index of Nuclear Reaction Data (CINDA). *Nuclear Data Services* [online]. 2014 [cit. 2014-05-11]. Dostupné z: <https://www-nds.iaea.org/exfor/cinda.htm>
- [18] Nuclear Science References (NSR). *National Nuclear Data Center* [online]. 2014 [cit. 2014-05-11]. Dostupné z: <http://www.nndc.bnl.gov/nsr/>
- [19] Experimental Nuclear Reaction Data (EXFOR). *National Nuclear Data Center* [online]. 2014 [cit. 2014-05-11]. Dostupné z: <https://www-nds.iaea.org/exfor/exfor.htm>
- [20] Evaluated Nuclear Data File (ENDF). *National Nuclear Data Center* [online]. 2014 [cit. 2014-05-11]. Dostupné z: <https://www-nds.iaea.org/exfor/endl.htm>
- [21] JEFF and EFF projects. *Nuclear Energy Agency* [online]. 2014 [cit. 2014-05-11]. Dostupné z: <http://www.oecd-nea.org/dbdata/jeff/>
- [22] Evaluated Nuclear Structure Data File (ENSDF) Retrieval. *National Nuclear Data Center* [online]. 2014 [cit. 2014-05-11]. Dostupné z: <http://www.nndc.bnl.gov/ensdf/>
- [23] NuDat 2.6. *National Nuclear Data Center* [online]. 2014 [cit. 2014-05-11]. Dostupné z: <http://www.nndc.bnl.gov/nudat2/>
- [24] Reference Neutron Activation Library. *Nuclear Data Services* [online]. 2014 [cit. 2014-05-11]. Dostupné z: <https://www-nds.iaea.org/public/rnal/www/>
- [25] EASY-II European Activation SYstem. *Culham Centre for Fusion Energy* [online]. 2012 [cit. 2014-05-11]. Dostupné z: <http://www.ccfec.ac.uk/EASY.aspx>

- [26] Java-based Nuclear Data Information System. *Nuclear Energy Agency* [online]. 2013 [cit. 2014-05-11]. Dostupné z: <<http://www.oecd-nea.org/janis/>>

Příloha A

How to start with ENDF

In this short instructions the basics of ENDF for finding total cross-sections and differential cross-sections of $D(d,n)^3\text{He}$ and $D(d,p)\text{T}$ reactions are going to be explained. I will link directly on ENDF-6 Formats Manual [12]. In this manual the ENDF format is described in more details.

The ENDF libraries are sets of the evaluated data. These data are stored in text file format. The text file with suffix `.endf` is used, where it is one record on each line (line has 80 characters). Each ENDF evaluation is described by hierarchical sequence of key parameters in section 0.3. of ENDF-6 Formats Manual.

A library is a collection of material evaluations, which is identified by an *NLIB* number. Every library of ENDF has sublibraries (subsection 0.3.1). Sublibraries (*NSUB*) define incident particles (*IPART*) and types of data (*ITYPE*) (subsection 0.3.2). Every sublibrary is hierarchically subdivided by *MAT* (material) number which determines target material for evaluation. Next step of division evaluation is split into blocks by *MF* (file) number. This number describes specific data type. These blocks are again divided into parts by *MT* (section) number, which describes reaction type in section 0.4. of ENDF-6 Formats Manual. The scheme of dividing is on picture on page 28 of manual.

Specific ENDF tape has 80 characters in line, which are mostly divided to

ten fields, where seventh is MAT number, eighth is MF number and ninth is MT number. Tenth number is only index of line in section. From first to sixth field there are data.

In this thesis we are finding total cross-sections and differential cross-sections of $D(d,n)^3\text{He}$ and $D(d,p)\text{T}$ reactions, so we use ENDF/B-VII library ($NLIB = 0$) and sublibrary for Incident-Deuteron Data ($NSUB = 10020$). At first we start with finding total cross-sections. We need deuterium material ($MAT = 128$), file for reaction cross sections ($MF = 3$) and section for emitted neutron and proton ($MT = 50$ and $MT = 600$). So we find in relevant ENDF tape first line with $MAT = 128$, $MF = 3$ and $MT = 50$ or $MT = 600$. Sixth number on second line of section determines number of energy-total cross-section pairs. These pairs start on fourth line of section. For differential cross-sections we need file for energy-angle distributions for emitted particles ($MF = 6$). Others numbers are the same. So we find first line in endf tape with relevant MAT , MF a MT number. First and third number of fourth line determines range of energy. Sixth number of fifth line determines number of energy and corresponding groups of coefficients for calculation differential cross-section. Data start on seventh line. Second number of this line is energy of incident particle and fifth and sixth number of this line determines quantity and the highest degree of coefficients. On the next lines these coefficients are from a_1 to a_n . This is repeated for all energies.

For full understanding of types of records in ENDF tape it is necessary to study appropriate subsection 0.6.3. of ENDF-6 Formats Manual. About total cross-sections there is chapter three of manual, especially section 3.2. About differential cross-sections there is chapter six, especially section 6.2.

Main difference between differential cross-section definition in [10] and [12] is that, in first case we use to calculation differential cross-section for angle $\tilde{\vartheta} = 0^\circ$ and in second case we use total cross-section.

Finally, for the calculation of differential cross-sections we use obtained total cross-sections, coefficients for differential cross-section and Legendre polynomials. Final formula for this calculation is equation (4.4) in the manual

on page 103, but there is a mistake. I found this mistake when i check my results. In final formula in manual is $\frac{\sigma_t(E_d)}{2\pi}$, but it should be $\frac{\sigma_t(E_d)\pi}{2}$. Correct equation is

$$\frac{d\sigma(E_d, \tilde{\vartheta})}{d\tilde{\vartheta}} = \frac{\sigma_t(E_d)\pi}{2} \sum_{l=0}^{NL} \frac{2l+1}{2} A_l(E_d) P_l(\cos \tilde{\vartheta}). \quad (\text{A.1})$$

Příloha B

Zdrojové kódy

```
!  
! File:   main.f95  
! Author: Jiri Svojtka  
!  
! Created on 27. listopad 2013, 14:26  
!  
program Program  
  
USE LegendrePolynomials  
USE TotalCS  
USE DifferentialCS  
USE CountiDifferentialCS  
USE poleCMSLS  
  
IMPLICIT NONE  
real*8 :: angle, E, DiffCS  
real*8, parameter :: PI = 3.141592653589879d0  
integer :: i, j, k, velikost, dal  
  
real*8, dimension(:,:), allocatable :: array, array2, diffCScoef  
real*8, dimension(:), allocatable :: CSEd, totCS  
integer, dimension(:), allocatable :: diffCSq  
  
!nacteni paru hodnot energie-totalni ucinnny purez z .endf souboru  
array = Total("C:/Users/Jiri/Documents/NetBeansProjects/UcinnePurezy/d-001_H_0&  
02.endf",50)  
!array = Total("C:/Users/Jiri/Documents/NetBeansProjects/UcinnePurezy/d-001_H_&  
003.endf", 50)  
  
!alokace  
ALLOCATE (CSEd((SIZE(array)/2) - 1))  
ALLOCATE (TotCS((SIZE(array)/2) - 1))  
  
do i = 1, (SIZE(CSEd))  
    CSEd(i) = array(i, 1) !pole energií  
    totCS(i) = array(i, 2) !pole totálních ucinných purezu  
end do  
  
!nacteni koeficientů pro vypocet diff ucinných purezu pro dane energie z  
!.endf souboru  
array2 = Diff("C:/Users/Jiri/Documents/NetBeansProjects/UcinnePurezy/d-001_H_0&  
02.endf",50)  
!array2 = Diff("C:/Users/Jiri/Documents/NetBeansProjects/UcinnePurezy/d-001_H_&  
003.endf", 50)  
  
!maximalni pocet koeficientu  
velikost = array2(SIZE(array2)/17, 1)  
! alokace pole pocet energii z totCS x max pocet koeficientů  
ALLOCATE (diffCScoef(SIZE(array)/2 - 1, velikost))  
!alokace pole pro pocty koeficientu k prislusne energii  
ALLOCATE (diffCSq((SIZE(array)/2) - 1))  
  
!naplneni pole diffCScoef  
do j = 1, (SIZE(array)/2 - 1) ! od 1 do poctu energiitotCS  
    i = 0  
    diffCSq(j) = 0  
    do  
        i = i + 1  
        !pokud se energie shoduji  
        if (array2(i, 1) < CSEd(j)+1 .AND. array2(i, 1) > CSEd(j)-1) then  
            diffCSq(j) = array2(i, 2)  
            k = 1  
        end if  
    end do
```

```
do
  diffCScoef(j,k)=array2(i, 2+k)
  k = k + 1
  if (k == velikost+1) then
    exit
  end if
end do
end do
exit
else if (i == SIZE(array2)/17 - 1) then
  exit
end if
end do
end do

!výpočet diferencialniho účinného průřezu (pro kontrolu)
PRINT*, 'Zadej energii v MeV'
read*, E
PRINT*, 'Zadej uhel ve stupních'
read*, angle
DiffCS=CountDiff(angle,E,totCS,CSEd,diffCSq,diffCScoef)
PRINT*, 'Diferencionalni ucinny prurez je: ',DiffCS

end program Program
```

```
!  
! File: TotalCS.f95  
! Author: Jiri Svojtka  
!  
! Created on 27. listopad 2013, 15:31  
!
```

MODULE TotalCS

```
integer :: MTM  
character*71 :: path
```

CONTAINS

```
FUNCTION Total(path, MTM) result(pole)  
IMPLICIT NONE  
INTEGER, INTENT(IN) :: MTM  
character*71, INTENT(IN) :: path  
real*8, dimension(:,:), allocatable :: pole  
integer :: i  
character*80 :: line, interpol  
character*5 :: substr  
real*8 :: C1, C2, ZA, AWR, QM, QI, L1r, L2r, N1r, N2r  
integer :: L1, L2, N1, N2, MAT, MF, MT, NS, NR, NP, LR  
integer :: flag1, flag2
```

```
flag1 = 0;
```

```
flag2 = 0;
```

```
i = 1;
```

```
open(unit = 10, file = path)
```

```
read (10, '(A)') line
```

```
do
```

```
  read (10, '(A)') line
```

```
  !zjisteni cisel NS, MF a MT
```

```
  substr = line(76:80)
```

```
  READ(substr, 20) NS
```

```
  20 FORMAT(I5)
```

```
  close(20)
```

```
  substr = line(71:72)
```

```
  READ(substr, 21) MF
```

```
  21 FORMAT(I5)
```

```
  close(21)
```

```
  substr = line(73:75)
```

```
  READ(substr, 22) MT
```

```
  22 FORMAT(I5)
```

```
  close(22)
```

```
!file 3 => totalni ucinne purezy
```

```
if (MF == 3 .AND. MT == MTM) then
```

```
  flag1 = 1
```

```
  !HEAD zaznam
```

```
  if (NS == 1) then
```

```
    READ(line, 11) C1, C2, L1, L2, N1, N2, MAT, MF, MT, NS
```

```
    11 FORMAT(2E11.0, 4I11, I4, I2, I3, I5)
```

```
    ZA = C1
```

```
    AWR = C2
```

```
    close(11)
```

```
  !TAB1 zaznam
```

```
  else if (NS == 2) then
```

```
    READ(line, 12) C1, C2, L1, L2, N1, N2, MAT, MF, MT, NS
```

```
    12 FORMAT(2E11.0, 4I11, I4, I2, I3, I5)
```

```
    LR = L2
```

```
    NR = N1
```

```
NP = N2
QM = C1
QI = C2
close(12)
!interpolační info
else if (NS == 3) then
  interpol = line
!samotne nacistani
else
  if (flag2 == 0) then
    !alokace pole
    ALLOCATE (pole(NP+1, 2))
    flag2 = 1
  end if
  !nacteni radku
  READ(line, 13) C1, C2, L1r, L2r, N1r, N2r, MAT, MF, MT, NS
  13 FORMAT(6E11.0, I4, I2, I3, I5)
  close(13)

  !plneni pole
  if (i <= NP) then
    pole(i, 1) = C1
    pole(i, 2) = C2
    i = i + 1
  end if
  if (i <= NP) then
    pole(i, 1) = L1r
    pole(i, 2) = L2r
    i = i + 1
  end if
  if (i <= NP) then
    pole(i, 1) = N1r
    pole(i, 2) = N2r
    i = i + 1
  end if
end if
!konec
else if (flag1 == 1 .AND. NS == 99999) then
  exit
end if

enddo
pole(NP+1, 1) = QM
close(10)

END FUNCTION Total
END MODULE TotalCS
```

```
!  
! File:   DifferentialCS.f95  
! Author: Jiri Svojtka  
!  
! Created on 27. listopad 2013, 23:00  
!
```

```
MODULE DifferentialCS
```

```
integer :: MTM  
character*71 :: path  
CONTAINS
```

```
FUNCTION Diff(path, MTM) result(pole)
```

```
IMPLICIT NONE  
INTEGER, INTENT(IN) :: MTM  
real*8, dimension(:, :), allocatable :: pole  
integer :: i, j, k  
character*80 :: line, interpol, interpol2, rozsah  
character*80, dimension(:), allocatable :: Spole  
character*71, INTENT(IN) :: path  
character*5 :: substr  
real*8 :: C1, C2, ZA, AWR, ZAP, AWP, L1r, L2r, N1r, N2r, E  
integer :: L1, L2, N1, N2, MAT, MF, MT, NS, NR, NP, LR, LCT, NK, LAW, LIP, NW, NL, NE,  
LANG, maxNW  
integer :: flag1, flag2
```

```
flag1 = 0;  
flag2 = 0;  
j = 1;  
i = 1;  
k = 0  
NW = -1  
maxNW = 0
```

```
open(unit = 10, file = path)  
read (10, '(A)') line
```

```
do  
read (10, '(A)') line  
!zjisteni cisel NS, MF a MT  
substr = line(76:80)  
READ(substr, 20) NS  
20 FORMAT(I5)  
close(20)  
substr = line(71:72)  
READ(substr, 21) MF  
21 FORMAT(I5)  
close(21)  
substr = line(73:75)  
READ(substr, 22) MT  
22 FORMAT(I5)  
close(22)
```

```
if (MF == 6 .AND. MT == MTM) then  
flag1 = 1  
!HEAD zaznam  
if (NS == 1) then  
READ(line, 11) C1, C2, L1, L2, N1, N2, MAT, MF, MT, NS  
11 FORMAT(2E11.0, 4I11, I4, I2, I3, I5)  
ZA = C1  
AWR = C2
```



```
LCT = L2
NK = N1
close(11)
!TAB1 zaznam
else if (NS == 2) then
  READ(line, 12) C1, C2, L1, L2, N1, N2, MAT, MF, MT, NS
  12 FORMAT(2E11.0, 4I11, I4, I2, I3, I5)
  LIP = L1
  LAW = L2
  NR = N1
  NP = N2
  ZAP = C1
  AWP = C2
  close(12)
!interpolační info
else if (NS == 3) then
  interpol = line
!rozsah
else if (NS == 4) then
  rozsah = line
!TAB2 zaznam
else if (NS == 5 .AND. LAW == 2) then
  READ(line, 14) C1, C2, L1, L2, N1, N2, MAT, MF, MT, NS
  14 FORMAT(2E11.0, 4I11, I4, I2, I3, I5)
  NR = N1
  NE = N2
  !alokace
  ALLOCATE (pole(NE+1, 17))

else if (NS == 6 .AND. LAW == 2) then
  interpol2 = line
else
  ! necteni energie
  READ(line, 15) C1, C2, L1, L2, N1, N2, MAT, MF, MT, NS
  15 FORMAT(2E11.0, 4I11, I4, I2, I3, I5)
  LANG = L1
  NW = N1
  NL = N2
  E = C2
  if (maxNW < N1) then
    maxNW = NW
  end if
  pole(j, 1) = E
  pole(j, 2) = NW
  k = 0
  do while (NW > 0)
    read(10, '(A)') line
    READ(line, 16) C1, C2, L1r, L2r, N1r, N2r, MAT, MF, MT, NS
    16 FORMAT(6E11.0, I4, I2, I3, I5)
    if (NW >= 6) then
      pole(j, k * 6 + 3) = C1
      pole(j, k * 6 + 4) = C2
      pole(j, k * 6 + 5) = L1r
      pole(j, k * 6 + 6) = L2r
      pole(j, k * 6 + 7) = N1r
      pole(j, k * 6 + 8) = N2r
    else
      if (NW == 5) then
        pole(j, k * 6 + 3) = C1
        pole(j, k * 6 + 4) = C2
        pole(j, k * 6 + 5) = L1r
        pole(j, k * 6 + 6) = L2r
        pole(j, k * 6 + 7) = N1r
      end if
    end if
  end while
end if
```

```
      if (NW == 4) then
        pole(j, k * 6 + 3) = C1
        pole(j, k * 6 + 4) = C2
        pole(j, k * 6 + 5) = L1r
        pole(j, k * 6 + 6) = L2r
      end if
      if (NW == 3) then
        pole(j, k * 6 + 3) = C1
        pole(j, k * 6 + 4) = C2
        pole(j, k * 6 + 5) = L1r
      end if
      if (NW == 2) then
        pole(j, k * 6 + 3) = C1
        pole(j, k * 6 + 4) = C2
      end if
      if (NW == 1) then
        pole(j, k * 6 + 3) = C1
      end if
    end if
    k = k + 1
    NW = NW - 6
  enddo
  j = j + 1
end if
end if

!konec
if (j == NE + 1) then
  exit
else if (flag1 == 1 .AND. NS == 99999) then
  exit
end if

end do
pole(NE+1,1)=maxNW
close(10)

end function Diff
END MODULE DifferencialCS
```

```

!  

! File: LegendrePolynomials.f95  

! Author: Jiri Svojtka  

!  

! Created on 28. říjen 2013, 12:20  

!  

MODULE LegendrePolynomials

real*8 :: x
integer :: degree

CONTAINS

real*8 FUNCTION LegPo(x, degree)

IMPLICIT NONE
INTEGER, INTENT(IN) :: degree
real*8, INTENT(IN) :: x
real*8 :: result

!Legendreovy polynomy stupně 0-15.
if (degree == 0) then
    result = 1
else if (degree == 1) then
    result = x
else if (degree == 2) then
    result = (3*x*x-1)/2
else if (degree == 3) then
    result = ((10*x*x-6)*x)/4
else if (degree == 4) then
    result = (((35*x*x-30)*x*x)+3)/8
else if (degree == 5) then
    result = (((126*x*x-140)*x*x+30)*x)/16
else if (degree == 6) then
    result = (((462*x*x-630)*x*x+210)*x*x-10)/32
else if (degree == 7) then
    result = (((1716*x*x-2772)*x*x+1260)*x*x-140)*x)/64
else if (degree == 8) then
    result = (((6435*x*x-12012)*x*x+6930)*x*x-1260)*x*x+35)/128
else if (degree == 9) then
    result = ((((((24310*x*x-51480)*x*x+36036)*x*x)-9240)*x*x)+630)*x)/256
else if (degree == 10) then
    result = (((((92378*x*x-218790)*x*x+180180)*x*x-60060)*x*x+6930)*x*x-126)/512
else if (degree == 11) then
    result = ((((((352716*x*x-923780)*x*x+875160)*x*x-360360)*x*x+60060)*x*x-2772&
    )*x)/1024
else if (degree == 12) then
    result = (((((((1352078*x*x-3879876)*x*x+4157010)*x*x-2042040)*x*x+450450)*x*x&
    -36036)*x*x+462)/2048
else if (degree == 13) then
    result = (((((((5200300*x*x-16224936)*x*x+19399380)*x*x-11085360)*x*x+3063060&
    )*x*x-360360)*x*x+12012)*x)/4096
else if (degree == 14) then
    result = (((((((20058300*x*x-67603900)*x*x+89237148)*x*x-58198140)*x*x+193993&
    80)*x*x-3063060)*x*x+180180)*x*x-1716)/8196
else if (degree == 15) then
    result = (((((((77558760*x*x-280816200)*x*x+405623400)*x*x-297457160)*x*x+11&
    6396280)*x*x-23279256)*x*x+2042040)*x*x-51480)*x)/16384
else if (degree == 16) then
    result = (((((((300540195*x*x-1163381400)*x*x+1825305300)*x*x-1487285800)*x*&
    x+669278610)*x*x-162954792)*x*x+19399380)*x*x-875160)*x*x+6435)/32768
else
    WRITE(*,*) 'Chybny stupen polynomu (pouze sude od 0. do 16 stupne)'
    result = 0.

```

end if

LegPo = result

END FUNCTION LegPo

END MODULE LegendrePolynomials

```
!  
! File:   CountiDiferencialCS.f95  
! Author: Jiri Svojtka  
!  
! Created on 2. prosinec 2013, 10:46  
!  
  
MODULE CountiDiferencialCS  
USE TotalCS  
USE DifferentialCS  
USE LegendrePolynomials  
  
CONTAINS  
  
FUNCTION CountDiff(angle, Ein, totCS,CSEd,diffCSq,diffCScoef) result(x)  
  
IMPLICIT NONE  
real*8, INTENT(IN) :: angle  
real*8, INTENT(IN) :: Ein  
real*8, dimension(:),INTENT(IN) :: totCS, CSEd  
integer, dimension(:),INTENT(IN) :: diffCSq  
real*8, dimension(:,:),INTENT(IN) :: diffCScoef  
real*8 :: x  
real*8, parameter :: PI = 3.141592653589879d0  
integer :: i, j  
  
! nalezeni prislusne energie a radku na kterem je  
do i = 1, SIZE(CSEd)  
  if (CSEd(i) > Ein*1000000-1 .AND. CSEd(i) < Ein*1000000+1) then  
    exit  
  end if  
end do  
  
! vypocet diferencialniho ucinneho prurezu  
x = 0.5  
do j = 1, diffCSq(i), 1  
  x = x + ((2.0 * j + 1.0)/2.0) * diffCScoef(i,j) * LegPo(COS(angle * PI/180),j)  
end do  
x=totCS(i)*(PI/2)*x  
  
end function CountDiff  
END MODULE CountiDiferencialCS
```