

中子共振参数的面积分析

何锦昌 李冕丰

(物理学系)

摘 要

用单能级布赖特——维格纳 (SLBW) 公式的迭加表示由单一元素的多种同位素产生的具有多个共振的中子总截面。应用复几率积分计算截面的多卜勒展宽。在给定共振能量和共振总宽度估计值的情况下,通过对共振透射率降落面积实验值的最小二乘法拟合,决定共振的中子宽度。

以ALGOL语言编写了中子共振参数面积分析程序,在国产DJS—21机上对 ^{237}Np 从44到52eV能量范围内、包括八个共振的162个数据点进行试算,所得的结果与W.Kolar的工作一致。

核物理研究和核工程设计中往往不能直接使用精确测量得到的实验共振截面,而是使用由实验共振截面提取出来的共振参数。这是因为:任何实验共振截面都受到多卜勒展宽和仪器分辨展宽以及(除透射数据外)多重散射的影响,提取共振参数的过程可以最有效地修正这些影响;其次,由共振参数产生的截面能保证满足物理上的要求;第三,使用共振参数既易于计算共振的温度展宽,又使我们能用比较少的参数表示可分辨共振区截面随能量急剧变化的详细结构,还便于估算不可分辨共振区的平均参数。

F. H. Fröhner⁽¹⁾曾详细评述各种共振理论计算公式和参数分析程序。使用最早、最广泛的是单能级布赖特——维格纳公式,由这个公式得到的共振参数具有物理意义明确、统计分布函数已熟知、易于计算共振的温度展宽以及拟合技术比较简单等特点,但是它没有考虑共振能级之间的干涉效应,不能用于能量较高的共振和裂变核的情况。在各种中子共振参数的分析方法中,面积分析法是最简单和最常用的方法,它的主要优点是不受仪器分辨函数的影响。60年代以来,随着中子飞行时间谱仪性能的提高,在低能中子核反应中观测到的共振数目越来越多,因而早期的手算和图表面积法已不能适应需要。1963年S.E. Atta和J.A. Harvey报告了一个单能级共振参数电子计算机自动面积分析程序⁽²⁾,这个程序用现已陈旧的FORTRAN II语言编写。在广泛使用中,出现了许多这一程序的变形和改进,由W.Kolar用FORTRAN IV语言编写的程序是近期改进的代表⁽³⁾。这一程序配合大型高速的IBM360或IBM1800电子计算机使用。

我们用ALGOL语言编写了配合国产DJS—21机的面积分析程序。本文将分别叙述透射理论公式及其数值计算方法、面积拟合技术、程序结构以及对 ^{237}Np 从44到55eV能量范围内的透射数据进行分析所得的结果。

一、理论公式及数值计算

对于非裂变核，如果中子能量在1keV以下，共振能级之间的干涉可以忽略，我们可以用SLBW公式描述总截面。对单一同位素，若能量以eV为单位， $4\pi r^2$ 用巴为单位，则SLBW公式可以写为^[3]：

$$\sigma_j(E'') = 4\pi a_j^2 + \frac{6.52 \times 10^5}{\sqrt{E''}} \cdot \frac{\Gamma g \Gamma_n^0}{(E_0 - E'')^2 + (\Gamma/2)^2} - 5.725 \times 10^3 \frac{(E_0 - E'') g \Gamma_n^0 a_j}{(E_0 - E'')^2 + (\Gamma/2)^2}, \quad (1)$$

式中第一项为势散射项，第二项为共振项，第三项为势散射与共振的干涉项。

如果样品(靶)是由同一元素的 j 种同位素组成，则这样品的中子截面由各同位素截面的和表示，求和时各项的权重为各同位素的丰度 f_j ，而 $\sum_j f_j = 1$ 。

又如果在单一同位素中能观测到 λ 个共振，并设 E_λ 、 Γ_λ 、 $\Gamma_{n\lambda}^0$ 和 g_λ 分别为第 λ 个共振的共振能量、共振总宽度、约化中子宽度和统计权因子， r 为各同位素的有效核半径， a 为出现共振的各同位素的势散射振幅，那末总截面可以写为：

$$\sigma(E'') = 4\pi r^2 + \frac{6.52 \times 10^5}{\sqrt{E''}} \sum_\lambda \frac{\Gamma_\lambda (fg \Gamma_n^0)_\lambda}{(E_\lambda - E'')^2 + (\Gamma_\lambda/2)^2} - 5.725 \times 10^3 \sum_\lambda \frac{(E_\lambda - E'') (fg \Gamma_n^0)_\lambda a}{(E_\lambda - E'')^2 + (\Gamma_\lambda/2)^2}. \quad (2)$$

假设多卜勒展宽可以用高斯函数表示，那末经多卜勒展宽后的截面为：

$$\sigma_\Delta(E') = \frac{1}{\Delta \sqrt{\pi}} \int_0^\infty \sigma(E'') \exp\left[-\left(\frac{E' - E''}{\Delta}\right)^2\right] dE'', \quad (3)$$

其中 Δ 为多卜勒宽度。

仪器分辨率的不够理想引起共振截面的分辨展宽，设它也能用高斯函数表示，则透射率可写为：

$$T_c(E_i) = \frac{1}{R(E_i) \sqrt{\pi}} \int_0^\infty \exp[-N \sigma_\Delta(E')] \exp\left\{-\left[\frac{E_i - E'}{R(E_i)}\right]^2\right\} dE', \quad (4)$$

$R(E_i)$ 为仪器的分辨宽度。

通常情况下，从测量获得的数据还受到一些其他因素的影响，例如分析能区外的巨共振和中子束随中子能量变化而出现的起伏等。我们用一基线多项式 $P(E_i)$ 表示这些影响， $P(E_i)$ 为：

$$P(E_i) = K_0 + K_1/\sqrt{E_i} + K_2/E_i. \quad (5)$$

因此，透射率的理论计算公式可写为：

$$T_c(E_i) = P(E_i) \frac{1}{R(E_i)\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \exp[-N\sigma_{\Delta}(E')] \exp\left\{-\left[\frac{E_i - E'}{R(E_i)}\right]^2\right\} dE'. \quad (6)$$

多卜勒展宽截面的表式(3)包含了多个重积分, 这对电子计算机来说仍是一种冗长的计算. 曾出现了许多计算这种截面的方法⁽⁴⁾, 我们采用的是复几率积分法⁽⁵⁾. 设有复变量 $z = \xi + i\eta$, 则复几率积分为:

$$W(z) = \frac{i}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-s^2}}{z-s} ds, \quad (7)$$

或
$$W(z) = U(\xi, \eta) + iV(\xi, \eta),$$

其中
$$U(\xi, \eta) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\eta}{(\xi-s)^2 + \eta^2} e^{-s^2} ds, \quad (8)$$

$$V(\xi, \eta) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\xi-s}{(\xi-s)^2 + \eta^2} e^{-s^2} ds. \quad (9)$$

用复几率积分的实部和虚部表示多卜勒展宽截面, 可在保证精度的情况下缩短计算时间.

把(2)式代入(3)式并令:

$$s = \frac{E'' - E'}{\Delta}, \quad \xi_{\lambda} = \frac{E_{\lambda} - E'}{\Delta}, \quad \eta_{\lambda} = \frac{\Gamma_{\lambda}/2}{\Delta}.$$

对我们所讨论的问题来说, 允许做如下假设:

$$(1) \quad (s\Delta)^2 < E'^2, \quad \text{则} \quad \frac{1}{\sqrt{E'} + s\Delta} \simeq \frac{1}{\sqrt{E'}} \left(1 - \frac{s\Delta}{2E'}\right);$$

$$(2) \quad \Gamma_{\lambda}/2E_{\lambda} \ll 1.$$

$$\begin{aligned} \text{则} \quad \sigma_{\Delta}(E') = & 4\pi r^2 + \frac{2\sqrt{\pi}}{\Delta} \sum_{\lambda} (fg\Gamma_{\lambda}^0)_{\lambda} \left\{ 6.52 \times 10^5 \left[\frac{1}{\sqrt{E'}} - \frac{\Delta\xi_{\lambda}}{2(E')^{3/2}} \right] U(\xi_{\lambda}, \eta_{\lambda}) \right. \\ & \left. + \left[6.52 \times 10^5 \frac{\Delta\eta_{\lambda}}{2(E')^{3/2}} - 2.8625 \times 10^3 a \right] V(\xi_{\lambda}, \eta_{\lambda}) \right\}. \end{aligned} \quad (10)$$

为进一步简化, 再令:

$$\sigma_p = 4\pi r^2, \quad S = \frac{2\sqrt{\pi}}{\Delta}, \quad G = \frac{6.52 \times 10^5}{\sqrt{E'}}$$

$$H = \frac{6.52 \times 10^5 \Delta}{2(E')^{3/2}}, \quad K = 2.8625 \times 10^3 a.$$

并把(10)式代入(6)式, 即得:

$$\begin{aligned} T_c(E_i) = & \exp(-N\sigma_p) \frac{P(E_i)}{R(E_i)\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \exp\left\{-NS \sum_{\lambda} (fg\Gamma_{\lambda}^0)_{\lambda} \right. \\ & \left. \cdot \left[(G - H\xi_{\lambda})U(\xi_{\lambda}, \eta_{\lambda}) + (H\eta_{\lambda} - K)V(\xi_{\lambda}, \eta_{\lambda}) \right] \right\} \exp\left\{-\left[\frac{E_i - E'}{R(E_i)}\right]^2\right\} dE'. \end{aligned} \quad (11)$$

用类似的方法也可得到 $\frac{\partial T_c(E_i)}{\partial (fg\Gamma_n^0)_\lambda}$ 的表式。

我们编写了专门的程序计算复几率积分的实部和虚部，并用常见的复化梯形法^[9]计算 $T_c(E_i)$ 和 $\frac{\partial T_c(E_i)}{\partial (fg\Gamma_n^0)_\lambda}$ 。若用 b 表示积分的低限，用 h 表示间隔的宽度， j 表示间隔的

数目 ($j=1, 2, \dots, n$)，那末(11)式中的指数函数可写为：

$$\begin{aligned} \exp\left\{-\left[\frac{E_i - E'}{R(E_i)}\right]^2\right\} &= \exp\left\{-\left[\frac{E_i - (b + jh)}{R(E_i)}\right]^2\right\} \\ &= \exp\left\{-\left[\frac{E_i - b}{R(E_i)}\right]^2\right\} \exp\left\{\frac{2(E_i - b)jh}{R^2(E_i)} - \left[\frac{jh}{R(E_i)}\right]^2\right\}. \end{aligned} \quad (12)$$

这样，在程序中可以使用循环语句。此时，要求在积分的下限处指数值不为零，这可以用缩小积分区间的方法来保证。我们取 $E_i + 4R(E_i)$ 和 $E_i - 4R(E_i)$ 作为积分的上下限，计算表明，取这样的积分限已能达到99.99%的精度。还有，在程序设计中需要仔细地考虑，使由此决定的 E' 值与前面计算多卜勒展宽时所用的 E' 值相同。

积分区间内所划分的间隔数目近似地等于积分限内所包含的道数。为了提高计算精度，这个数目还可以通过倍乘因子来加以扩大。

二、面积拟合法

应用曲线最小二乘原理^[1]作面积拟合时，被拟合量是共振区域中透射率降落的面积。考虑到如果各共振接近，在分析中引入分辨展宽修正可以提高分析的精度，而只增加少量的计算时间。因此，我们仍用(4)式来计算透射率降落的面积（即各道透射率之和）。在表式中出现 E_λ 、 Γ_λ 和 $(fg\Gamma_n^0)_\lambda$ 三组参量，面积分析是在给定 E_λ 和 Γ_λ 值的条件下，对 $(fg\Gamma_n^0)_\lambda$ 的初值，用最小二乘法拟合确定最佳的 $(fg\Gamma_n^0)_\lambda$ 值。假设 $(fg\Gamma_n^0)_\lambda$ 的初值仍以 $(fg\Gamma_n^0)_\lambda$ 表示，以 $i_{\lambda-m}$ 表示第 m 个共振所包含的道，则作截断泰勒展开有：

$$\begin{aligned} &\sum_{i_{\lambda-m}} T_c[E_i; \Gamma_\lambda; E_\lambda; (fg\Gamma_n^0)_\lambda + \delta(fg\Gamma_n^0)_\lambda] \\ &= \sum_{i_{\lambda-m}} T_c[E_i; \Gamma_\lambda; E_\lambda; (fg\Gamma_n^0)_\lambda] + \sum_{\lambda} \frac{i_{\lambda-m}}{\lambda} \frac{\partial \sum T_c[E_i; \Gamma_\lambda; E_\lambda; (fg\Gamma_n^0)_\lambda]}{\partial (fg\Gamma_n^0)_\lambda} \delta(fg\Gamma_n^0)_\lambda. \end{aligned} \quad (13)$$

假设共有 M 个共振，而且对第 m 个共振只有相邻的两个共振对它的透射率降落作出有意义的影响，并取 $\delta(fg\Gamma_n^0)_0 = \delta(fg\Gamma_n^0)_\lambda = 0$ ，则由最小二乘原理有：

$$\sum_{\lambda' = m-1}^{m+1} \frac{\partial \sum T_c[E_i; \Gamma_\lambda; E_\lambda; (fg\Gamma_n^0)_\lambda]}{i_{\lambda-m} \partial (fg\Gamma_n^0)_{\lambda'}} \delta (fg\Gamma_n^0)_{\lambda'}$$

$$= \sum_{i_{\lambda-m}} T_e(E_i) - \sum_{i_{\lambda-m}} T_c(E_i) \quad (14)$$

右边表示第 m 个共振透射率降落面积实验值与理论计算值之差, m 取 $1, 2, \dots, M$ 。由此联立方程, 可解得 $\delta (fg\Gamma_n^0)_\lambda$ 。然后用 $(fg\Gamma_n^0)_\lambda + \delta (fg\Gamma_n^0)_\lambda$ 作为新的初值进行下一次迭代, 直至满足收敛标准为止。我们所取的收敛标准是:

$$\sum_{i_\lambda} T_c(E_i) - \sum_{i_\lambda} T_e(E_i) \leq 0.001 PSA \sqrt{N_\lambda} T_\lambda \quad (15)$$

PSA 为透射率实验观测值的百分统计误差, T_λ 为共振 λ 的初道和末道透射率中的较大者, N_λ 为共振 λ 所包含的道数。

由拟合获得的 $(fg\Gamma_n^0)_\lambda$ 值的标准误差为:

$$\left| PSA \cdot T_\lambda \cdot \sqrt{N_\lambda} / \frac{\partial \sum T_c(E_i)}{i_\lambda \partial (fg\Gamma_n^0)_\lambda} \right| \quad (16)$$

$(fg\Gamma_n^0)_\lambda$ 的初值可由下式作近似估算:

$$(fg\Gamma_n^0)_\lambda = \frac{-\sqrt{E_\lambda} \Gamma_\lambda [\ln T_e(E_\lambda) - \ln T_e(E_w)]}{N(2.608 \times 10^6)} \cdot C_F \quad (17)$$

式中 $T_e(E_\lambda)$ 是能量为 E_λ 时的透射率, $T_e(E_w)$ 为共振初道和末道实验透射率中的较大者,

$$C_F \approx 0.62 + \frac{1.66 \sqrt{D^2(E_\lambda) + R^2(E_\lambda)}}{\Gamma_\lambda} \quad (18)$$

它是为提高估算值精度而引入的多卜勒展宽和仪器分辨展宽的修正。

为了估算基线多项式(5)的系数 K_0 、 K_1 和 K_2 的初值, 我们设 $T_e(E_i)$ 为平滑区实验透射率, $\sigma(E_i)$ 为由(2)式计算的相应的截面值, 则有:

$$T_e(E_i) = P_e(E_i) \exp[-N\sigma(E_i)] \quad (19)$$

用基线多项式(5)拟合由(19)决定的 $P_e(E_i)$, 便可得基线多项式的系数 K_0 、 K_1 和 K_2 。以它们为初值计算 $T_e(E_i)$ 并在迭代中继续提高 K_0 、 K_1 和 K_2 的精度。

三、程序结构

我们以ALGOL语言编写了基于上述原理的面积分析程序。图1为这程序的示意框图。

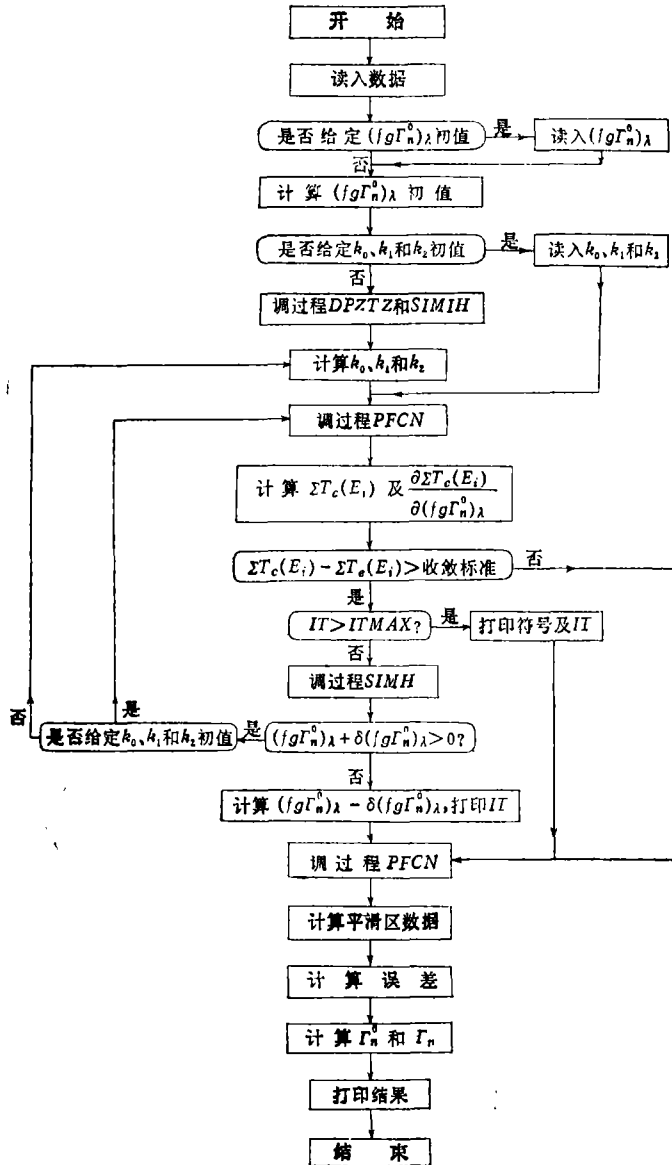


图 1 程序框图

在程序的说明部分，我们安排了四个过程：

(1) **DPZTZ过程**：它的功能是构成求解基线多项式系数 K_0 、 K_1 和 K_2 的方程组的系数矩阵ZTZ。

(2) **SIMIH过程**：用迭代法计算上述的ZTZ的逆矩阵以及核对矩阵CHEC。在正常情况下，CHEC为单位矩阵，需要时可用快速打印机印出。

(3) **SIMH过程**：用逆矩阵法求解正规方程组(14)并计算解的相对精度。

(4) **PFCN过程**：计算复几率积分的实部和虚部。方法是对不同的变数范围以不同的多项式逼近U和V。

从图 1 可知， $(fg\Gamma_n^0)_\lambda$ 的初值可以由使用者直接给出，也可以由程序从实验数据估

计, 如属后者, 使用者应在数据区置 $(fg\Gamma_n^0)_\lambda$ 为零。

使用者可以通过置选择因子 IC 于不同的值而实现对 K_0 、 K_1 和 K_2 的不同处理方法:

- (1) $IC = 0$, 在数据区提供系数 K_0 、 K_1 和 K_2 ;
- (2) $IC = 1$, 估算 K_0 , 置 $K_1 = K_2 = 0$;
- (3) $IC = 2$, 估算 K_0 和 K_1 , 置 $K_2 = 0$;
- (4) $IC = 3$, 估算 K_0 、 K_1 和 K_2 。

当计算出现异常时, 程序将作出反应。例如: 当迭代次数已超过允许的最大迭代数时, 机器停止迭代, 宽行打印记号 “MAXIT” 及迭代次数, 然后用 $(fg\Gamma_n^0)_\lambda$ 的当前值继续往下计算。又如当经 $\delta(fg\Gamma_n^0)_\lambda$ 修正后的 $(fg\Gamma_n^0)_\lambda$ 为负值时, 机器也停止迭代, 宽行打印记号 “NEG FGGNO IT” 及前一次的迭代次数, 并用前一次迭代获得的 $(fg\Gamma_n^0)_\lambda$ 值往下计算。

程序有两种输出功能:

(1) 如开始计算时按下控制台上的按钮 K_3 , 则开关跳 JUMP(K_3, L) 起作用, 在运算过程中窄行快速打印 E_λ 和 $(fg\Gamma_n^0)_\lambda$ 初值, 矩阵 ZTZ, ATI, CHEC 以及各次迭代的次数 IT 和迭代结果 $\delta(fg\Gamma_n^0)_\lambda$ 、 $(fg\Gamma_n^0)_\lambda$ 、 K_0 、 K_1 和 K_2 。

(2) 计算完毕后宽行打印下列信息:

字符 AREA ANALYSIS OF TRANSMISSION DATA

ELEMENT (供使用者在其后填上分析的元素名称);

共振能级的位置 E_λ ;

共振能级的总宽度 Γ_λ ;

迭代次数 IT;

列表给出各共振的 $(fg\Gamma_n^0)_\lambda$ 、 Γ_n^0 、百分误差和 $\Gamma_{n\lambda}$;

线性方程组解的相对精度;

列表给出各道透射率的实验观测值、计算值以及本底值。

四、应用例子

我们曾在国产 DJS—21 机上用这程序分析了 ^{237}Np 从 44 到 52 eV 范围内包括 162 个透射数据的八个共振, 经两次迭代获得结果, 计算时间接近 40 分钟。

输入的全部实验数据以及与实验条件有关的数据均取自 W. Kolar 的报告⁽³⁾。下表给出分析的结果及与 W. Kolar 工作的比较, 可以看出, 两个结果是相当一致的。

表 分析的主要结果及与W.Kolar工作的比较

共振能量 $\Gamma_\lambda(\text{ev})$		约化中子宽度因子 $(fg\Gamma_n^\circ)_\lambda(\text{ev})$		百分误差 (%)	
本工作	W.Kolar工作	本工作	W.Kolar工作	本工作	W.Kolar工作
0.50422×10^2	0.50423×10^2	0.4670×10^{-3}	0.4666×10^{-3}	2.2	2.2
0.49831×10^2	0.49830×10^2	0.2885×10^{-3}	0.2884×10^{-3}	2.1	2.1
0.48727×10^2	0.48728×10^2	0.4060×10^{-4}	0.4055×10^{-4}	10	10
0.48398×10^2	0.48399×10^2	0.1240×10^{-5}	0.1242×10^{-5}	280	280
0.47296×10^2	0.47297×10^2	0.1344×10^{-3}	0.1343×10^{-3}	3.7	3.7
0.46319×10^2	0.46319×10^2	0.1824×10^{-3}	0.1822×10^{-3}	2.4	2.4
0.46014×10^2	0.46015×10^2	0.4296×10^{-4}	0.4302×10^{-4}	7.3	7.3
0.45669×10^2	0.45670×10^2	0.2073×10^{-5}	0.2075×10^{-5}	15	15

基线多项式系数(IC = 2)

$\delta(fg\Gamma_n^\circ)_\lambda$ 的相对精度

$K_0 = 0.87546527$	$-0.86936758 \times 10^{-8}$	$0.19858130 \times 10^{-7}$
$K_1 = 0.84298992$	0.	$0.66724048 \times 10^{-7}$
$K_2 = 0$	0.	$0.10533215 \times 10^{-7}$
	$-0.70840150 \times 10^{-8}$	$0.67902690 \times 10^{-8}$

参 考 文 献

- [1] F.H.Frohner, Applied Neutron Resonance Theory, KFK 2669, (1978).
- [2] S.E.Atta and J.A.Harvey, Report ORNL-3205,(1963).
- [3] W.Kolar, Report EUR 4760e, (1972).
- [4] 钟友琴, 国外核技术, (1979), 1, 19.
- [5] В.Н. ФАДДЕЕВА и Н.М. ТЕРЕНТЬЕВ, ТАБЛИЦЫ ЗНАЧЕНИЙ ИНТЕГРАЛА ВЕРОЯТНОСТЕЙ ОТ КОМПЛЕКСНОГО АРГУМЕНТА, (1954).
- [6] 李岳生、黄友谦, 数值逼近, (1978), 153.

Area Analysis of Neutron Resonance Paramters

He Jinchang Li Mianfeng

Abstract

It is assumed that the neutron total cross section of resonance for an element containing several isotopes can be represented as a sum of single-level Breit-Wigner formulas. Doppler-broadened cross sections are calculated by means of the complex probability integral. This method, which fits the theoretical value to the experimental value of area under a resonance transmission dip by the least squares, determines the best estimates of neutron widths of the resonance for assumed energies and total widths of resonance.

We wrote the program for area analysis of neutron resonance parameters in ALGOL-60 for the DJS-21 computer. With this program we tried to calculate 162 transmission data containing 8 resonances for ^{237}Np in the neutron energy range from 44 ev to 52 ev. The results are found to be consistent with the same work of W.Kolar.