

сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

3-84-848

А.А.Ваньков*, С.А.Тошков, В.Ф.Украинцев*,
Н.Б.Янева

МЕТОД АНАЛИЗА ФУНКЦИЙ ПРОПУСКАНИЯ
И НЕЙТРОННЫХ СЕЧЕНИЙ
В ОБЛАСТИ НЕРАЗРЕШЕННЫХ РЕЗОНАНСОВ
ТЯЖЕЛЫХ НУКЛИДОВ

* Физико-энергетический институт, Обнинск

В настоящее время все шире находят применение последовательные многоуровневые формализмы расчета нейтронных сечений в резонансной области энергий нейтронов. Это вызвано существенными эффектами межрезонансной интерференции. Особенно велики эти эффекты для делящихся ядер.

В области неразрешенных резонансов возникают дополнительные трудности, связанные с тем, что необходимо знать законы распределения резонансных параметров. Например, для параметров S -матричного формализма /Адлер-Адлер/ законы статистического распределения неизвестны; поэтому этот достаточно строгий и простой формализм трудно использовать для расчета средних величин. Стоит отметить, что когда речь идет о расчетах средних сечений, в которых проявление межрезонансной интерференции слабо из-за усреднения знакопеременных членов, описывающих вклады в результирующее сечение, задача решается в рамках приближенных статистических подходов типа Хаузера-Фешбаха.

Проблема оценки средних резонансных параметров для тяжелых, особенно, делящихся ядер в области неразрешенных резонансов обостряется, если мы хотим к анализу привлечь средние, нелинейные по отношению к сечениям функционалы, такие, как функции пропускания и самоиндикации, факторы резонансного самоэкранирования, функции плотности вероятности сечений и др.

Подход численного интегрирования является проблематичным из-за большой трудоемкости машинных расчетов, особенно на стадии расчета доплеровского уширения /в многоуровневых формализмах/. Остается подход прямого моделирования резонансной структуры нейтронных сечений /метод Монте-Карло/ на основе многоуровневого формализма. Однако и здесь имеется трудность учета доплеровского эффекта, так как простая техника Ψ , χ -функций, разработанная в рамках одноуровневого или S -матричного формализмов, в общем случае не может быть реализована.

Актуальность исследования резонансной структуры нейтронных сечений тяжелых /в особенности, делящихся/ ядер и возникающие при этом проблемы анализа изложены в ^{1/}. Там же предложен новый способ учета доплеровского эффекта методом статистических испытаний.

Ниже излагаются следующие развитые авторами методики анализа нейтронных сечений:

а/ Методика статистической генерации нейтронных сечений в рамках многоуровневого формализма Райха-Мура, включая упомянутый способ Монте-Карло учета доплеровского эффекта.

б/ Методика оценки нелинейных функционалов на статистической выборке резонансных сечений для заданного энергетического интервала, включая оценку дисперсии функционалов.

в/ Методика расчета возмущений для оценки коэффициентов чувствительности функционалов к средним резонансным параметрам.

г/ Методика оптимизации /байесовский подход/ для оценки средних резонансных параметров и их ковариационных матриц, исходя из анализа экспериментальных данных.

МЕТОД МОНТЕ-КАРЛО В ФОРМАЛИЗМЕ РАЙХА-МУРА

Нами было принято известное приближение Райха-Мура, в котором элементы R-матрицы для выделенного состояния по моменту и четности выражаются в виде ^{12/}:

$$R_{cc'}(E) = \sum_{\lambda} \frac{\gamma_{\lambda c} \gamma_{\lambda c'}}{E_{\lambda} - E - i\bar{\Gamma}_{\lambda} / 2}, \quad /1/$$

где $\gamma_{\lambda c}$ - амплитуда приведенной ширины в канале с набором квантовых чисел c, E_{λ} - энергия резонанса, $\bar{\Gamma}_{\lambda}$ - средняя резонансная ширина.

Величина $\beta_{\lambda c} = \gamma_{\lambda c} / \bar{\Gamma}_{\lambda}$ подчиняется нормальному распределению /что соответствует распределению Портера-Томаса для соответствующих ширин реакций/. Вводится также величина \bar{D} - среднее расстояние между резонансами выделенного состояния. Удобнее работать с K-матрицей, содержащей парциальные ширины $\Gamma_{\lambda c}$:

$$K_{cc'} = \frac{\bar{\Gamma}_{\lambda c}^{-1/2} \bar{\Gamma}_{\lambda c'}^{-1/2}}{2\bar{D}} \sum_{\lambda} \frac{\beta_{\lambda c} \beta_{\lambda c'}}{E_{\lambda} - E - i\bar{\Gamma}_{\lambda} / 2}. \quad /2/$$

Матрица столкновений S связана с K-матрицей:

$$S = \Omega [(1 + iK)(1 - iK)^{-1}] \Omega. \quad /3/$$

Нейтронные сечения выражаются через S-матрицу:

$$\sigma_t = 2\pi\lambda^2 \sum_{J^{\pi}} g(J) \sum_{\ell_s, \ell'_s} (1 - \text{Re } S_{n\ell_s, n\ell'_s}^{J^{\pi}}), \quad /4/$$

$$\sigma_f = \pi\lambda^2 \sum_{J^{\pi}} g(J) \sum_{\ell_j, \ell'_j} |S_{n\ell_j, n\ell'_j}^{J^{\pi}}|^2, \quad /5/$$

$$\sigma_{\ell} = \pi\lambda^2 \sum_{J^{\pi}} g(J) \sum_{\ell_j, \ell'_j} |1 - S_{n\ell_j, n\ell'_j}^{J^{\pi}}|^2, \quad /6/$$

где Ω - диагональная матрица с элементами $\Omega_c = \exp(-i\phi_c)$.

Сечение радиационного захвата определялось как разность полного сечения и сечений рассеяния и деления.

В расчетах учитывались вклады в нейтронные сечения s и p нейтронов. При необходимости можно учесть вклады парциальных волн с $\ell > 1$. Зависящие от ℓ параметры Γ_n и Γ_{ℓ} выражаются в обычном виде:

$$\phi_0 = kR_0, \quad /7/$$

$$\phi_1 = kR_1 - \text{arctg}(kR_1), \quad /8/$$

$$\Gamma_n(\ell=0) = \Gamma_{n0}^0 \sqrt{E} v_0, \quad /9/$$

$$\Gamma_n(\ell=1) = \Gamma_{n1}^0 \sqrt{E} v_1, \quad /10/$$

где v_0, v_1 - коэффициенты проницаемости для s- и p-нейтронов, R_0, R_1 - радиусы рассеяния s- и p-нейтронов.

Новизна развитого нами метода расчета средних функционалов /функций пропускания, моментов сечений, в частности, средних сечений/ заключается в идее стохастического моделирования резонансной структуры нейтронных сечений делящихся ядер на основе изложенного многоуровневого формализма. В ранних работах аналогичное моделирование делалось в рамках более простых моделей, допускающих применение методики Ψ, χ функций /например, двухуровневая формула Брайта-Вигнера с приближенным учетом их резонансной интерференции^{13/}/. Правомерность таких приближений для делящихся ядер типа ²³⁵U и ²³⁹Pu сомнительна. Вместо метода моделирования использовалось также численное интегрирование многократных интегралов по распределениям статистики ядерных уровней^{13, 4/} /расстояний и ширин/ для каждой системы уровней /например, ^{13, 4/}/. Однако это делается в рамках тех же приближенных формализмов. Кроме того, на этом пути возникают проблемы оптимального выбора узлов расчетной сетки и квадратурных формул /в зависимости от функционала/, а также способа свертки интегралов для разных систем уровней /при переходе к функционалам наблюдаемых сечений/.

В нашем подходе эти трудности преодолеваются благодаря применению метода статистических испытаний в форме многократных "испусканий" нейтронов в точках равномерной латергической сетки /обычно 200 испытаний в точке/ с шагом ~ 20 мэВ в широком интервале ΔU . В каждом испытании разыгрывается доплеровское смещение по энергии для нескольких температур. Под одним "прогоном" понимается набор статистики случайных испытаний во всем интервале ΔU , на котором определена случайная картина /реализация/ нейтронных сечений со множеством резонансов всех требуемых состояний. Эта картина задается набором случайных чисел от "задатчиков" положения и ширины уровня данной системы в 10-уровневом

приближении со случайным выбором знака интерференции. Формулы для сечений представляют собой выражения, использующие обратную матрицу K /в нашем случае 3-го ранга - по числу каналов, один нейтронный и два делительных/ для десяти взаимодействующих случайных резонансов данной системы. Поэтому данный метод можно назвать методом случайной K -матрицы. Реализация картины резонансов на широком интервале ΔU осуществляется последовательным добавлением нового случайного резонанса справа с одновременным отбрасыванием крайнего резонанса слева. Вся информация по данной реализации сохраняется в оперативной памяти ЭВМ.

Процедура испытаний заключается в следующем. "Испущенный" из точки u' нейтрон в результате доплеровского смещения переводится в положение u'' , в котором значения сечений данной реализации точно определены. Доплеровское смещение разыгрывается на заданной сетке узлов с шагом Δu , малым по сравнению с доплеровской шириной. Испытания проводятся внутри интервала ΔU , отступив от концов на 5 доплеровских ширин. Таким образом, в одном типичном "прогоне" осуществляется по 200 испытаний примерно в $5 \cdot 10^3$ точках, что обеспечивает хорошее усреднение по доплеровской функции /погрешность не хуже 1% в моментах сечений/ и усреднение по выборке резонансов. В качестве накопителей информации используются оценки функций распределения полного сечения $P(\sigma_t)$ и парциальных сечений $\sigma_x(\sigma_t)$ с разбиением шкалы σ_t на большое число интервалов /250 или 500/, равномерных в логарифмическом масштабе. Это дает возможность получить оценку произвольного функционала $F(\sigma_t, \sigma_x)$:

$$\langle F \rangle = \int F(\sigma_t, \sigma_x) P(\sigma_t) d\sigma_t \quad /11/$$

с оценкой дисперсии

$$D_F = \langle F^2 \rangle - \langle F \rangle^2. \quad /12/$$

Очевидно, оценка любого функционала может производиться и непосредственно, минуя операцию свертки через функцию $P(\sigma_t)$. Однако хранение информации в виде $P(\sigma_t)$, $\sigma_x(\sigma_t)$ представляет практический интерес, так как дает возможность последующего точного усреднения функционалов по изотопной смеси /задача подготовки макроскопических констант/.

КОЭФФИЦИЕНТЫ ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТИ И МЕТОДИКА ОПТИМИЗАЦИИ

Для оценки параметров модели x на основе экспериментальных данных y по средним сечениям и функции пропускания нами использовался байесовский подход ^{/5/}. В рамках этого подхода получены следующие формулы:

$$\hat{x} = x^{анр} + D(x^{анр}) K^T [KD(x^{анр}) K^T + D(\hat{y})]^{-1} (\hat{y} - Kx^{анр}), \quad /13/$$

$$D(\hat{x}) = D(x^{анр}) - D(x^{анр}) K^T [KD(x^{анр}) K^T + D(\hat{y})]^{-1} KD(x^{анр}), \quad /14/$$

где D - ковариационная матрица, K - коэффициенты чувствительности, \hat{y} - расчетные значения экспериментально получаемых величин.

Таким образом, для использования формул оптимизации необходимо иметь коэффициенты чувствительности функционалов к искомым параметрам

$$K_{ij} = \frac{\partial F_i}{\partial P_j} \Big|_{P_j}, \quad /15/$$

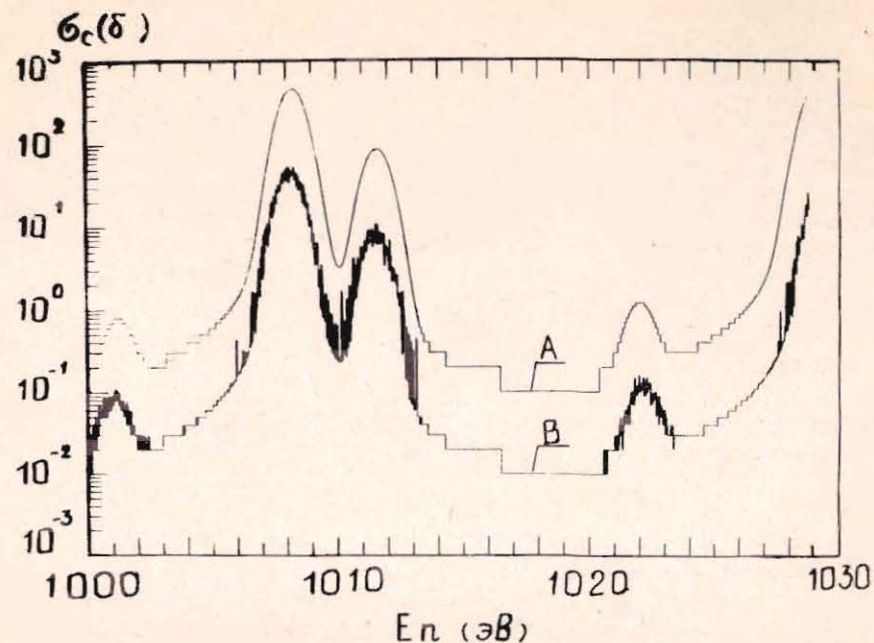
F_i - функционал типа среднее сечение, функция пропускания или другой, P_j - параметр теоретической модели /силовая функция, радиус рассеяния, ширина уровня и т.д./.

Коэффициенты чувствительности вычислялись в расчетах Монте-Карло методом возмущений параметров на коррелированной статистической выборке. Это означает следующее. Сгенерированная резонансная картина нейтронных сечений на интервале используется для расчета всех нужных функционалов для начального /базового/ набора параметров. Далее делается цикл расчетов на этой же статистической выборке, но при последовательном изменении каждого параметра /например, на +10%/. Как отмечалось, аналогично проводится расчет функционалов для ряда значений температур. Таким образом, базовый и возмущенные расчеты являются коррелированными, т.е. выполненными на одной и той же статистической выборке. Тем самым осуществляется конечно-разностная оценка коэффициентов чувствительности без потери точности за счет вычисления разности близких чисел.

Описанный метод анализа экспериментальных данных, основанный на многоуровневом приближении Райха-Мура, был реализован в программе MONTIRM. Структура программы /за исключением блоков монте-карловского учета доплер-эффекта и вычисления коэффициентов чувствительности/ подобна той, которая включена в систему СОС ОИЯИ ^{/6/}. Новый метод анализа, использующий более простое приближение Брейта-Вигнера, также реализован в отдельной программе MONTBW.

С физической точки зрения, равно как и с точки зрения прикладной математики, было интересно сравнить результаты расчетов нейтронных сечений и их функционалов, получаемые в одноуровневом приближении Брейта-Вигнера и многоуровневом - Райха-Мура. Это сравнение было проведено для сечений ²³⁸U в области энергии 1-1,1 кэВ.

Были рассчитаны детальные энергетические зависимости сечений σ_t, σ_c , а также набор усредненных функционалов сечений: $\langle \sigma_t \rangle, \langle \sigma_c \rangle$,



Сечение радиационного захвата ^{238}U , рассчитанное в приближениях Брейта-Вигнера /кривая А/ и Райха-Мура /кривая В/. Значения сечений кривой А умножены на 10.

Таблица

Сравнение моментов сечения ^{238}U , рассчитанных в приближениях Брейта-Вигнера и Райха-Мура

Вид функции Приближение	σ_c δ	σ_c δ	$\langle 1/(\sigma_c + \sigma_0) \rangle 10^{-2}$			$\langle 1/(\sigma_c + \sigma_0)^2 \rangle 10^{-5}$			$\langle \sigma_c / (\sigma_c + \sigma_0) \rangle 10^{-2}$			$f_c(\sigma_0)$			$f_c(\sigma_0)$		
			0	10	100	0	10	100	0	10	100	0	10	100	0	10	100
R-M	17,84	2,61	8,947	4,580	,8788	871,1	220,5	7,804	5,296	3,830	1,382	4,576	4,604	4,707	4,227	4,320	4,602
B-W	17,84	2,59	9,048	4,571	,8735	911,8	222,3	7,745	5,340	3,932	1,372	4,556	4,592	4,717	4,228	4,322	4,607

R-M - результаты, полученные в приближении Райха-Мура;

B-W - результаты, полученные в приближении Брейта-Вигнера.

$\langle (\sigma_c + \sigma_0)^{-1} \rangle$, $\langle (\sigma_c + \sigma_0)^{-2} \rangle$, $\langle \sigma_c / (\sigma_c + \sigma_0) \rangle$, где σ_0 - некоторый параметр, называемый сечением разбавления. Сравнение позволяет выявить возможное влияние межрезонансной интерференции на характеристики сечений в четно-четном ядре. Программа, использующая приближение Брейта-Вигнера MONTBW, ранее тестировалась по результатам работы де Соссюра для ^{238}U , и было получено очень хорошее согласие расчетов.

В качестве примера на рисунке показаны рассчитанные сечения захвата ^{238}U в интервале энергий 1,-1,1 кэВ. Кривые умышленно разнесены на один порядок, так как при наложении они зрительно совпадают. Однако моменты сечений и факторы самоэкранирования, представленные в таблице, обнаруживают различие, которое уменьшается с ростом σ_0 . Это говорит о различии в описании хода сечений вблизи минимумов, которое вызвано разным учетом эффектов резонансно-потенциальной и межрезонансной интерференции.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Совокупность описанных методик расчетов Монте-Карло в рамках многоуровневого формализма дает возможность решения следующих практически важных задач:

- 1/ анализ экспериментальных данных по средним сечениям, функциям пропускания и самоиндикации;
- 2/ получение оценки средних резонансных параметров и их ковариационной матрицы;
- 3/ получение функций плотности распределения полного сечения $P(\sigma_t)$ и функций корреляции парциальных сечений с полным $\sigma_x(\sigma_t)$ при любых температурах;
- 4/ расчеты /на основе статистической оценки средних резонансных параметров/ любых средних функционалов сечений и их ковариационных матриц.

Последовательный многоуровневый формализм параметризации сечений в области неразрешенных резонансов тяжелых ядер для решения перечисленных задач применяется впервые.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ваньков А.А. В сб.: Вопросы атомной науки и техники, сер. "Ядерные константы", 1983, №4/53/, с.3.
2. Reich C.W. Moore. Phys.Rev., 1958, vol. 111, p. 929.
3. Haturagi S., Ishiguro Y., Takano H. JAERI Fast Reactor Group Constants Systems. Part II-1, JAERI-1199, 1970.
4. Кошечев В.Н., Сеница В.В. АЭ, 1979, т. 47, №2, с. 94.
5. Ваньков А.А. В кн.: "Ядерные константы", Атомиздат, М., 1974, вып. 16, с. 11-19.
6. Нефедьева Л.С., Украинцев В.Ф., Янева Н. ОИЯИ, 10-83-659, Дубна, 1983.
7. Munoz Cobos J.L., de Sanssure G., Perez R.V. Nucl.Sci.Eng., 1982, vol.81, No 1, p. 55-65.

Рукопись поступила в издательский отдел
26 декабря 1984 года.

**ТЕМАТИЧЕСКИЕ КАТЕГОРИИ ПУБЛИКАЦИЙ
ОБЪЕДИНЕННОГО ИНСТИТУТА ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ**

Индекс	Тематика
1.	Экспериментальная физика высоких энергий
2.	Теоретическая физика высоких энергий
3.	Экспериментальная нейтронная физика
4.	Теоретическая физика низких энергий
5.	Математика
6.	Ядерная спектроскопия и радиохимия
7.	Физика тяжелых ионов
8.	Криогеника
9.	Ускорители
10.	Автоматизация обработки экспериментальных данных
11.	Вычислительная математика и техника
12.	Химия
13.	Техника физического эксперимента
14.	Исследования твердых тел и жидкостей ядерными методами
15.	Экспериментальная физика ядерных реакций при низких энергиях
16.	Дозиметрия и физика защиты
17.	Теория конденсированного состояния
18.	Использование результатов и методов фундаментальных физических исследований в смежных областях науки и техники
19.	Биофизика

Ваньков А.А. и др.

3-84-848

Метод анализа функций пропускания и нейтронных сечений в области неразрешенных резонансов тяжелых нуклидов

Дано описание метода определения средних нейтронных резонансных параметров на основе анализа как средних нейтронных сечений, так и функций пропускания нейтронов, что позволяет существенно улучшить точность оценок параметров. Метод анализа основан на моделировании резонансов в нейтронных сечениях методом Монте-Карло с помощью многоуровневых формул Райха-Мура. Новизна алгоритма расчета заключается в применении метода Монте-Карло не только для генерирования статистической выборки интерферирующих резонансов, но и для их доплеровского уширения. Одновременно рассчитываются коэффициенты чувствительности функционалов сечений по отношению к средним резонансным параметрам. Это делается методом возмущения параметров на одной и той же последовательности /выборке/ резонансов. Для определения значения функционалов используется численное интегрирование по функции распределения полного сечения $P(\sigma_t)$ и функциям корреляции полного и парциальных сечений $\sigma_x(\sigma_t)$ которые находятся в расчете Монте-Карло при генерировании сечений.

Работа выполнена в Лаборатории нейтронной физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1984

Перевод О.С.Виноградской

Vankov A.A. et al.

3-84-848

Method for Analysing Transmission Functions and Neutron Cross Sections of Heavy Nuclides in the Unresolved Resonance Region

A method for estimating mean neutron resonance parameters by analysis of both average neutron cross sections and neutron transmission data is given. It allows one to refine essentially the accuracy of parameter estimates. The method is based on the Monte Carlo modelling of the neutron resonance cross sections using multilevel Reich-Moore formulae. A novelty of calculational algorithm is not only a stochastical generation of the interfering resonance ladder, but a stochastical Doppler broadening as well. Simultaneously the sensitivity coefficients of the functionals in relation to the mean resonance parameters are calculated. For this purpose a method of parameter perturbation for the same statistical resonance sample is used. The Monte-Carlo calculation has resulted in the total cross-section probability distribution, $P(\sigma_t)$, and the correlation functions of partial cross-sections, $\sigma_x(\sigma_t)$, which are to be used for the calculations of cross-section functionals by means of numerical integration.

The investigation has been performed at the Laboratory of Neutron Physics, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1984