

ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ
ЛАБОРАТОРИЯ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ТЕХНИКИ И АВТОМАТИЗАЦИИ

14 840.1
Ш-642

10 - 5075

Н.Ю. Ширикова

МЕТОДЫ МАТЕМАТИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ
В ФИЗИКЕ АТОМНОГО ЯДРА

Специальность 041 - теоретическая
и математическая физика

Автореферат диссертации на соискание ученой
степени кандидата физико-математических наук

Дубна 1970

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники
и автоматизации Объединенного института ядерных исследований.

Научный руководитель -
кандидат физико-математических наук

В.Н. Ефимов

Официальные оппоненты -
доктор физико-математических наук

Б.Н. Калинин,

кандидат физико-математических наук

П.Н. Заикин

Ведущее научно-исследовательское учреждение:
Институт атомной энергии имени И.В. Курчатова

Автореферат разослан	" "	1970 г.
Защита диссертации состоится	" "	1970 г.

на заседании Ученого совета Лаборатории вычислительной техники и автоматизации.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ОИЯИ.

Ученый секретарь Совета

Ю.В. Катышев

10 - 5075

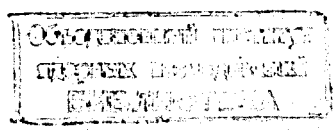
Н.Ю. Ширикова

6919 бр.
6169

МЕТОДЫ МАТЕМАТИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ
В ФИЗИКЕ АТОМНОГО ЯДРА

Специальность 041 - теоретическая
и математическая физика

Автореферат диссертации на соискание ученой
степени кандидата физико-математических наук



Настоящая диссертация посвящена созданию методов расчетов для обработки экспериментальных данных Лаборатории нейтронной физики, для вычисления одночастичных уровней и волновых функций среднего поля сферических и деформированных ядер, а также созданию математического обеспечения этих расчетов на электронно-вычислительных машинах (ЭВМ).

Большое место в исследовании свойств атомных ядер занимает изучение нейтронных резонансов - нейтронная спектроскопия. Классической задачей ее является определение параметров нейтронных резонансов - энергии резонансного уровня E_0 , полной ширины уровня Γ и парциальных ширин - нейтронной Γ_n и радиационной Γ_γ . Эти параметры определяются путем анализа энергетической зависимости сечений взаимодействия нейтронов (с энергией от нескольких эв до нескольких тысяч эв) с атомными ядрами. В настоящее время накоплен обширный материал по параметрам нейтронных резонансов почти всех ядер периодической системы ^{1/}. Определение с хорошей точностью параметров нейтронных резонансов для большого числа ядер может служить экспериментальной основой проверки применимости статистической модели ядра и построения других его моделей, которые могли бы описывать свойства высоковозбужденных уровней конкретных ядер. Указанные обстоятельства продолжают стимулировать дальнейшее развитие нейтронной спектроскопии.

В экспериментах по нейтронной спектроскопии энергетическая зависимость нейтронных сечений измеряется с помощью нейтронных спектрометров, основанных на методе времени про-

лета. В ЛНФ ОИЯИ в 1960 г. на базе импульсного быстрого реактора (ИБР) ^{/2/} был введен в строй такой нейтронный спектрометр, который преобразовывал энергетический спектр нейтронов, испущенных в каждом импульсе, во временные спектры отсчетов детектора, регистрируемые: помощью многоканальных временных анализаторов.

В первых работах по нейтронной спектроскопии, выполненных на ИБРе, обработка экспериментальных данных с целью получения параметров нейтронных резонансов проводилась вручную, что являлось крайне трудоемким делом. Поэтому для широкого развития исследований по нейтронной спектроскопии было необходимо создать и ввести в действие эффективную систему автоматической обработки экспериментальных данных с использованием имеющихся к 1960 г. в ОИЯИ ЭВМ "Киев" и М-20.

Так как ЭВМ "Киев" и М-20 обладают небольшой оперативной памятью и малой скоростью счета, то при разработке методов расчетов основное внимание уделялось созданию алгоритмов, обеспечивающих максимально возможную экономию времени при расчете на ЭВМ.

Обработка результатов нейтронных измерений естественным образом делится на два этапа: первичная обработка спектров, получаемых непосредственно с выходов временных анализаторов, и окончательная обработка экспериментальных кривых с целью получения параметров нейтронных резонансов. На первом этапе приходится иметь дело с большими массивами чисел, над которыми необходимо производить элементарные арифметические операции. Второй этап обработки связан с относительно небольшими массивами чисел, но требует сложных расчетов для определения параметров нейтронных резонансов из экспериментальных кривых, получаемых на первом этапе. Из-за отсутствия опыта в использовании ЭВМ для обработки результатов нейтронных измерений, малой оперативной памяти и небольшой скорости имевшихся ЭВМ, встретились трудности в

создании системы программ обработки, удобной в эксплуатации и экономной по времени. Доступная информация ^{/3-5/} не могла оказать существенной помощи, так как там для обработки экспериментальных данных использовались ЭВМ бухгалтерского типа и быстродействующие ЭВМ серии IBM.

Изучение свойств атомных ядер при помощи экспериментальных данных неразрывно связано с сопоставлением их с существующими моделями ядра. Современные теории, в которых ядро рассматривается как система многих тел, опираются на два основных одинаково важных факта: 1) производится выбор уровней среднего поля и соответствующих волновых функций в качестве базиса, 2) вводятся коррелятивные силы между нуклонами. Даже при корректном введении коррелятивных сил точность анализа свойств ядер зависит от того, насколько удовлетворительно выбран одночастичный базис.

Уровни среднего поля и соответствующие волновые функции являются решением уравнения Шредингера с потенциалом среднего поля. В общем случае невозможно решить уравнение Шредингера в аналитическом виде. Можно провести расчеты энергий и волновых функций численно. Основной недостаток заключается в том, что волновые функции получаются в виде громоздких таблиц, пользоваться которыми в многочисленных приложениях весьма неудобно, и для их расчета требуется большое количество времени на ЭВМ.

До сих пор наиболее удобными для приложений были одночастичные состояния, рассчитанные в работе Нильссона ^{/6/}, где в качестве среднего поля выбран анизотропный осцилляторный потенциал бесконечной глубины. Однако осцилляторные волновые функции обладают искаженной асимптотикой в области резкого перепада плотности ядерного вещества.

Калинкиным, Гареевым и Ивановой предложен приближенный метод решения уравнения Шредингера с потенциалом Саксона-Вудса конечной глубины с размытым краем для сферически симметричных и деформированных ядер ^{/7-9/}. Решение урав-

нения Шредингера разыскивается в аналитическом виде, удобным для приложений.

В первой главе диссертации описывается способ первичной обработки нейтронных спектров, получаемых в различных измерениях, проводимых в ЛНФ. Несмотря на малую оперативную емкость ЭВМ "Киев" и М-20, была создана система программ первичной обработки, требующая небольшого количества машинного времени /10/. Для передачи нейтронных спектров из измерительного центра ЛНФ в ЭВМ использовалась кабельная связь /11-13/, с помощью которой информация о нейтронных спектрах, накапливаемая в памяти анализаторов в двоичном виде, непосредственно передавалась в оперативную память ЭВМ, где спектры записывались на магнитную ленту для хранения и дальнейшей обработки. Все это позволило накапливать информацию и проводить дальнейшую обработку экспериментальных данных без каких-либо операций ввода, путем непосредственного обращения ЭВМ к магнитной ленте.

Временные анализаторы накапливали массивы экспериментальных данных, которые представляли собой 16-разрядные двоичные числа. Для экономии магнитной ленты и уменьшения количества перфокарт при аварийном вводе было принята специальная запись (сдвоенные числа).

Чтобы отличать нейтронные спектры, соответствующие различным экспериментам и различным типам измерений в данном эксперименте, был введен признак спектра - четырехзначное десятичное число, которое передавалось вместе со спектром. В признаке нейтронного спектра закодированным образом передавалась информация о номере группы физиков, проводящей эксперимент, количестве чисел в спектре и номере измерения.

Была разработана методика записи нейтронных спектров на магнитную ленту, требующая малого времени при поиске необходимой информации для обработки. На каждой магнитной ленте, кроме нейтронных спектров, дополнительно записывался паспорт ленты. В этом паспорте указывались признаки записан-

ных спектров и номера зон магнитной ленты, в которых находятся эти спектры. Поэтому при совместной обработке нескольких массивов сначала считывались паспорта лент и составлялся общий паспорт, затем отыскивались требуемые признаки, устанавливалось местонахождение соответствующих им спектров на магнитной ленте, после чего спектры считывались с ленты. Наличие паспорта давало еще одну возможность обработки. Для исключения каких-либо спектров достаточно было только уничтожить их признаки в паспорте.

Программы системы первичной обработки осуществляли поиск нейтронных спектров, соответствующих указанным признакам, производили выборку требуемых каналов из спектра и представление чисел спектра в виде, требуемом для ЭВМ типа М-20. Эта система являлась основой при написании программ обработки спектров для разных экспериментов. В частности, были созданы две программы вычисления кривых пропускания по экспериментальным данным.

Полное сечение взаимодействия нейтронов с ядрами измеряется в экспериментах по пропусканию нейтронов через образцы определенной толщины. Непосредственно измеряемой величиной в опытах по пропусканию является отношение интенсивности потока нейтронов после прохождения ими образца к интенсивности потока нейтронов без образца. Это отношение называется пропусканием образца.

Для вычисления пропускания из экспериментальных спектров, прошедших через образец, было использовано два различных метода /14,15/.

При вычислении пропускания в первом методе использовались два типа серий измерений временных распределений отсчетов детектора нейтронов продолжительностью t часов с образцом и без образца и периодически измеряемый фон для серии обоих типов. В программу вычисления пропускания входило усреднение отсчетов канала анализатора по многим однотипным сериям, учет поправок на фон, на мертвое время

анализатора и на показания мониторов, учитывающих изменение потока нейтронов от серии к серии. Производилось вычисление пропускания для каждого канала и вычисление среднеквадратичных ошибок пропускания. При усреднении по однотипным сериям производилась выбраковка плохих отсчетов канала.

Для автоматического исключения систематической ошибки, вызываемой нестабильностью работы аппаратуры или неточностью определения интенсивности нейтронного пучка, был применен метод вычисления пропускания, не требующий использования данных, получаемых из измерений без образца. Как и в первом методе вычисления пропускания, учитывались поправки на фон. Уровень фона определялся по отсчетам каналов в области "черного" резонанса. Фильтр, дающий "черный" резонанс, находился в пучке в течение всех измерений. По отсчетам каналов, относящихся к "черным" резонансам, методом наименьших квадратов /16,17/ находились параметры полинома, аппроксимирующего фон. Далее по отсчетам каналов, находящихся вдали от резонансов, с учетом поправки на фон, находились параметры полинома, аппроксимирующего спектр нейтронов, искаженный сечением потенциального рассеяния. Затем вычислялась резонансная часть пропускания в каждом канале как отношение отсчета канала (с учетом поправки на фон) к вычисленному спектру нейтронов, искаженному сечением потенциального рассеяния.

С использованием разработанных методик вычисления кривых пропускания были обработаны измерения полных сечений Rh, Tb, Pr, Ho, Er, Cl, Yb, Nd, Ru, Ga.

Наблюдаемые провалы на кривых пропускания связаны с полным эффективным сечением взаимодействия нейтронов с ядрами мишени, параметры которого и требуется определить.

Вторая глава посвящена определению параметров нейтронных резонансов из кривых пропускания. Для этого обычно используют два метода - метод площадей и метод формы /3-5/. При первом из кривых пропускания определяются площади резонансов, которые являются функцией параметров резонансов.

Площадь резонанса не зависит от разрешающей способности спектрометра, но при ее вычислении всегда имеется неопределенность вследствие влияния близких резонансов. Стремление корректно учесть эту неопределенность, а также интерференцию между потенциальным и резонансным рассеянием и влияние функции разрешения на форму крыльев перекрывающихся резонансов неизбежно приводит к необходимости использовать метод формы для определения параметров нейтронных резонансов. В этом методе параметры нейтронных резонансов определяются с использованием метода наименьших квадратов /16,17/ таким образом, чтобы наблюдалось хорошее согласие экспериментальных кривых пропускания для разных толщин образцов с теоретическими кривыми. При вычислении теоретической кривой пропускания нужно учитывать разрешающую способность спектрометра и эффект теплового движения ядер мишени (эффект Доплера), что приводит к сложной функциональной зависимости теоретической кривой от параметров нейтронных резонансов и требует значительного машинного времени при расчете. Использование метода формы на ЭВМ типа М-20 является трудной задачей из-за малой оперативной памяти и небольшой скорости счета.

Описывается метод приближенного вычисления теоретической кривой пропускания, требующий малого количества времени на ЭВМ при его реализации. Дается описание двух программ, использующих разработанный метод вычисления теоретической кривой пропускания, - "Вычисление кривой пропускания с учетом функции разрешения" и "Метод формы для определения параметров нейтронных резонансов" /18,19/. Обе программы вошли в систему программ обработки, эксплуатируемую в ЛНФ.

Методом формы были получены параметры нейтронных резонансов для ^{165}Ho /20/.

Были использованы кривые пропускания для образцов четырех толщин ($1.24-2.51-7.51-15.0 \cdot 10^{21}$ яд/см²) в области 18-106 эв. В таблице 1 приведены параметры резонансов от

Таблица 1

№	E_p (эв)	Метод площадей			Метод формы $\theta = 39,4$		Метод формы $\theta = 39,4$		Метод формы $\theta = 30$		
		n	χ^2	Γ (мэв)	σ_{Γ} (мэв)	Γ (мэв)	σ_{Γ} (мэв)	при фиксированном Γ	σ_{Γ} (мэв)	Γ (мэв)	σ_{Γ} (мэв)
1.	18,1	7	12	70±5	0,54±0,02	68±2	0,59±0,03				
2.	21,0	7	2,4	85±5	0,33±0,01	84±3	0,36±0,02				
3.	35,3	6	3,7	82±5	3,13±0,09	83±3	3,16±0,14			98±2	2,7±0,2
4.	37,7				0,28±0,02	220±20	0,30±0,03			233±18	0,27±0,03
5.	39,4	6	11	83±7	14±1,4	86±2	13,2±0,6			104±2	10,5±0,6
6.	47,3	6	4,4	90±4	12,9±0,7	110±3	11,1±0,6			131±3	8,9±0,6
7.	51,2	4	3	105±10	23±3	113±3	26,2±1,7			144±3	20±2
8.	54,0	3	0,5	69±8	1,8±0,1	34±7	1,5±0,5			168±10	1,1±0,5
9.	64,7	6	6,6	83±6	11,5±0,4	90±3	10,6±0,7				
10.	68,2	4	2,9	66±12	0,54±0,03	70±60	0,5±0,5	$\Gamma = \bar{\Gamma}$	0,50±0,05		
11.	71,4	6	1,9	93±3	11,4±0,2	94±4	10,8±0,8				
12.	79,4	3	0,1	54±16	0,64±0,04	7±110	0,4±0,8	$\Gamma = \bar{\Gamma}$	0,70±0,07		
13.	93,6	5	1,6	185±10	40±2	185±7	36±3				
14.	101,9	5	0,7	86±4	10,6±0,2	89±10	9,5±1,4				
15.	106,3	5	7,8	72±13	4,4±0,2	40±20	4,5±2,3	$\Gamma = \bar{\Gamma}$	4,1±0,4		

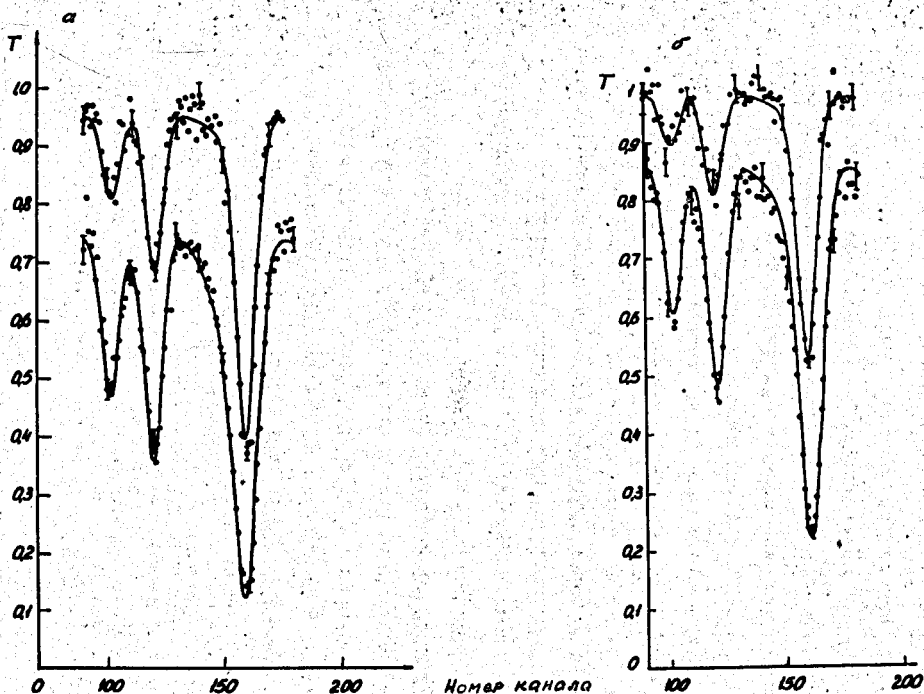


Рис. 1. Участки расчетных кривых пропускания (сплошные кривые) для резонансов 106,3; 101,9; 93,8 эв. Образцы имеют следующие толщины: а - $1,24 \cdot 10^{21}$ и $7,51 \cdot 10^{21}$ атом/см²; б - $2,51 \cdot 10^{21}$ и $15,0 \cdot 10^{21}$ атом/см². Точки - экспериментальные значения пропускания.

18 до 106 эв, найденные как методом площадей ^{/21/}, так и методом формы. На рис. 1 изображен участок расчетных кривых пропускания ¹⁶⁵ По для образцов четырех толщин (сплошные кривые).

Использование метода формы для определения параметров нейтронных резонансов в области плохого разрешения дает ряд преимуществ по сравнению с использованием метода площадей.

Во-первых, при хорошем знании функции разрешения метод формы дает лучшую точность в определении параметров (см. таблицу 1), во-вторых, позволяет механизировать всю обработку экспериментальных данных, в-третьих, дает возможность объективно вычислить параметры перекрывающихся резонансов, в-четвертых, позволяет определять радиус потенциального рассеяния. Однако следует заметить, что совместное использование двух этих методов для определения параметров нейтронных резонансов позволяет достоверно определять значения параметров.

Созданная система программ обработки широко использовалась экспериментаторами ЛНФ в течение 1961-1968 гг. Эксплуатация показала, что эта система удобна и требует малого количества времени на ЭВМ.

Третья глава диссертации посвящена применению метода ^{/7-9/} при создании системы программ для расчетов уровней и волновых функций среднего поля сферических и деформированных ядер. Описываются программы на алгоритмических языках Алгол (для транслятора ТА-1М ЭВМ БЭСМ-4) и Фортран-Черн (для ЭВМ БЭСМ-6) вычисления уровней и волновых функций среднего поля сферического ядра ^{/22/}. Так как эти функции служат основой в многочисленных теоретических расчетах свойств конкретных ядер, то при создании программы преследовались две цели: 1) удобство в эксплуатации. 2) небольшое количество времени при счете. Решение уравнения Шредингера для среднего поля деформированного ядра разыскивается в виде ряда по ортогональным волновым функциям среднего поля

сферического ядра. Используя ортогональность волновых функций сферического ядра и применяя интегрирование уравнения Шредингера по радиальной переменной, получают систему линейных алгебраических уравнений для определения коэффициентов разложения. Так как для получения этой системы приходится вычислять много интегралов, были разработаны (с целью экономии времени при интегрировании) специальные подпрограммы вычисления определенного интеграла с автоматическим выбором шага интегрирования и группового вычисления нескольких определенных интегралов.

Описывается программа, на языке Фортран-Черн (для ЭВМ БЭСМ-6) для вычисления уровней и волновых функций среднего поля деформированного ядра. Волновые функции среднего поля сферического ядра, требуемые для программы, могут быть рассчитаны заранее или вычисляются самой программой. Программа имеет два способа выдачи рассчитанных уровней и волновых функций деформированного ядра. Один из них дает возможность печати готовых таблиц уровней и волновых функций для набора параметров деформаций. Эти таблицы могут быть в любом печатном формате.

Созданные программы вошли в систему программ расчетов в теории ядра, эксплуатируемую в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

З а к л ю ч е н и е

1. Предложен способ записи большого количества экспериментальных данных на магнитные ленты ЭВМ и методика поиска требуемого спектра при обработке, требующая малого количества времени на ЭВМ. Разработана методика вычисления кривых пропускания из экспериментальных спектров, прошедших через исследуемый образец ^{/14,15/}.

2. Разработан способ приближенного вычисления теоретической кривой пропускания, требующий существенно малого ко-

личества времени при расчете на ЭВМ среднего класса, имеющих небольшую скорость выполнения расчетов. Использование предложенного способа вычисления теоретической кривой пропускания дало возможность применить метод формы для определения параметров нейтронных резонансов, проявляющихся на кривых пропускания /18-20/.

3. Создана система программ обработки нейтронных спектров на ЭВМ с небольшой оперативной памятью /10,19/. Этот комплекс программ хорошо зарекомендовал себя в эксплуатации в течение 1961-1968 г.г.

4. Описаны программы, на алгоритмических языках АЛГОЛ и ФОРТРАН вычисления уровней и волновых функций среднего поля сферического ядра /22/, которые служат основой в многочисленных теоретических расчетах свойств конкретных ядер.

5. Создан комплекс программ на языке ФОРТРАН для нахождения волновых функций одночастичных состояний деформированного ядра /23/. Данный комплекс программ эксплуатируется в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Основные результаты диссертации представлены в работах /10,14,18-20,22,23/ и доложены на совещаниях по математическим методам решения задач ядерной физики, проводимых в ОИЯИ в 1964 и 1966 г.

Л и т е р а т у р а

1. Neutron Cross Section. BNL-325, Sp 1, 1958.
2. Г.Е. Блохин, и др. АЭ 10, 437 (1961).
3. Э. Мелконян. Материалы международной конференции в Женеве, авг. 1955, т. 4, стр. 400-409.
4. C.R. Corge. Rapport CEA-1998 (1961), R-2780 (1965).
5. J.A. Harvey and S.E. Atta. Symposium Saclay. Brussels, 1961, p.555-561, Rapport ORNL 3205.

6. S.C. Nilsson. Kgl. Danske Vidensk. Selsk. Mat.Fys. Medd., 29, N16 (1955).
7. Б.Н. Калинин, Я. Грабовский, Ф.А. Гареев. Препринт ОИЯИ Р-2682, 1966.
8. Ф.А. Гареев, С.П. Иванова, Б.Н. Калинин. Препринт ОИЯИ Р4-2976, Дубна, 1966.
9. Ф.А. Гареев, С.П. Иванова, Б.Н. Калинин. Известия АН СССР, серия физическая, т.32, №10, 1690 (1968).
10. И.И. Шелонцев, Н.Ю. Ширикова. Препринт ОИЯИ Б2-10-4091, Дубна, 1968.
11. Г.И. Забиякин. Препринт ОИЯИ, 956, стр. 96-100, Дубна, 1961.
12. Л.С. Нефедьева и др. Препринт ОИЯИ, 5-3263, Дубна, 1967.
13. А.Я. Астахов и др. Препринт ОИЯИ, 2914, Дубна, 1966.
14. Ван Най-янь, И. Визи, В.Н. Ефимов, Э.Н. Каржавина, Ким Хи Сэн, А.Б. Попов, Л.Б. Пикельнер, М.И. Пштула, Т. Стадников, Чен Лин-Янь, Э.И. Шарапов, И.И. Шелонцев, Н.Ю. Ширикова, Ю.С. Язвицкий. ЖЭТФ 45, 1745 (1963).
15. Э.Н. Каржавина и др. ЯФ, т. 7, 225, 1968.
16. С.Н. Соколов, И.Н. Силин. Препринт ОИЯИ Д-810, Дубна, 1961.
17. И.Н. Силин. Препринт ОИЯИ 11-3362, Дубна, 1967.
18. В.Н. Ефимов, Н.Ю. Ширикова, Препринт ОИЯИ Б2-10-4089, 1968.
19. И.И. Шелонцев, Н.Ю. Ширикова. Материалы совещания по математическим методам решения задач ядерной физики. Препринт ОИЯИ, 5-3263, стр. 123-125, Дубна, 1967.
20. Э.Н. Каржавина, А.Б. Попов, Ю.С. Язвицкий, В.Н. Ефимов, Н.Ю. Ширикова. ЯФ, т.5, в. 3, стр. 471-482 (1967).
21. И.И. Шелонцев. Препринт ОИЯИ Б2-10-4090, Дубна, 1968.
22. Н.Ю. Ширикова. Препринт ОИЯИ Р5-3712, Дубна, 1968.
23. Ф.А. Гареев, С.П. Иванова, Н.Ю. Ширикова. Препринт ОИЯИ Р4-4259, Дубна, 1969.

Рукопись поступила в издательский отдел
27 апреля 1970 года.