

复概率积分法计算单能级多普勒展宽截面

钟文发

庄友祥

(清华大学核能技术研究所)(中国原子能科学研究院)

本文介绍由单能级 Breit-Wigner 共振参数并应用复概率积分法对多普勒展宽截面进行计算的步骤。并以 ^{239}Pu 为实例作了说明。与其他数值方法比较,在同样精度下, PDP11/70 计算机上用复概率积分的计算时间比用其他方法约少50倍。

关键词: 复概率积分 中子共振参数 多普勒展宽截面

一、引 言

在原子能反应堆物理设计与计算中,常常需要用中子共振参数来计算各种温度下的多普勒(Doppler)展宽截面;同时,评价推荐中子共振参数也需要计算各种反应截面,以便与实验测量数据进行分析比较。所以多普勒展宽截面的计算是一个重要的研究课题,需要考虑计算的精度和时间。

单能级 Breit-Wigner 共振参数是现有各种类型参数中应用较广泛的一种,国内外现有的计算程序普遍采用一般的数值积分方法(如高斯积分或龙贝格积分法)来计算单能级 BW共振参数的多普勒展宽截面,这些方法带来的主要问题是计算速度慢、花费机时多,尤其是在中小型计算机上,用机时间之长,往往使核工程设计者和共振参数评价者难以接受,甚至无法完成计算任务。

然而,我们曾经将复概率积分法成功地应用于 Adler-Adler 共振参数的多普勒展宽截面的计算^[1],既加快了计算速度,又提高了结果的准确性。能否将复概率积分法推广用来计算单能级 BW 共振参数的多普勒展宽截面呢?近几年我们作了这方面的研究,取得了较大的进展,其计算结果是令人满意的,目前已用于实际的核数据编评中。

二、计算公式

如果对 R 矩阵理论作最简单的假设,仅存在一个能级,或假定共振间距远大于共振宽度时,近似地可认为共振是孤立的,各能级之间的影响可不予考虑。在这种情况下,容易得到单能级的 BW 公式^[2]

$$\sigma_{n,x}^j(E) = \pi \lambda_n^2 \sum_{\lambda=1}^N g^j \frac{\Gamma_{\lambda n} \Gamma_{\lambda x}}{(E - E_{\lambda}')^2 + \frac{1}{4} \Gamma_{\lambda}^2} \quad (1)$$

$$\sigma_{n,n}^j(E) = (2l+1) \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \phi_l + \frac{\pi}{k^2} g^j \cdot \sum_{\lambda=1}^N \left[\frac{\Gamma_{\lambda n}^2 \cos 2\phi_l - 2\Gamma_{\lambda n}(\Gamma_{\lambda r} + \Gamma_{\lambda f}) \sin^2 \phi_l}{(E - E_{\lambda}')^2 + \frac{1}{4} \Gamma_{\lambda}^2} + \frac{2(E - E_{\lambda}') \Gamma_{\lambda n} \sin 2\phi_l}{(E - E_{\lambda}')^2 + \frac{1}{4} \Gamma_{\lambda}^2} \right] \quad (2)$$

$$\sigma_t^J(E) = (2l+1) \frac{4\pi}{k^2} \sin^2\phi_l + \frac{\pi}{k^2} g^J \cdot \sum_{i=1}^N \frac{\Gamma_{\lambda} \Gamma_{\lambda n} \cos 2\phi_l + 2\Gamma_{\lambda n} (E - E'_\lambda) \sin 2\phi_l}{(E - E'_\lambda) + \frac{1}{4} \Gamma_{\lambda}^2} \quad (3)$$

式中, N 为所考虑的共振能级数; $E'_\lambda = E_\lambda + \Delta_\lambda$, 而 $\Delta_\lambda = \{[S_l(|E_\lambda|) - S_l(E)]/[2P_l(|E_\lambda|)]\} \Gamma_{\lambda n} \cdot (|E_\lambda|)$; $\Gamma_\lambda = \Gamma_{\lambda n} + \Gamma_{\lambda r} + \Gamma_{\lambda f}$ 为总宽度, 即中子宽度、辐射和裂变宽度之和; $g^J = (2J+1)/[2 \cdot (2l+1)]$ 称为自旋统计权重因子, I, J 分别为靶核及复合核的自旋; l 为入射中子与靶核相对运动轨道角动量; $k = 2.19677/[(AWRI)/(AWRI+1)] \times 10^{-3} \sqrt{E} (\times 10^{12} \text{cm}^{-1})$, 为中子波数, E 是入射中子能量, $AWRI$ 是靶核的质量(以中子质量为单位); S_l 为位移因子; P_l 是穿透因子; ϕ_l 是相移。

对于(1)式作多普勒展宽, 并利用复概率积分的如下结果^[3-5]:

$$U(\xi, \eta) = \left(\frac{h}{\pi}\right) \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \left\{ \frac{\exp(-n^2 h^2 \eta^2)}{(\xi - nh)^2 + \eta^2} + 2P(h) \exp(\eta^2 - \xi^2) [\cos 2\xi\eta - \exp(2\pi\eta/h) \cos\left(\frac{2\pi\xi}{h} - 2\xi\eta\right)] / D \right\} \quad (4)$$

$$V(\xi, \eta) = \left(\frac{h}{\pi}\right) \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \left\{ \frac{\exp(-n^2/h^2) (\xi - nh)}{(\xi - nh)^2 + \eta^2} - 2P(h) \exp(\eta^2 - \xi^2) [\sin 2\xi\eta + \exp(2\pi\eta/h) \sin\left(\frac{2\pi\xi}{h} - 2\xi\eta\right)] / D \right\} \quad (5)$$

式中, $D = 1 - 2\exp(2\pi\eta/h) \cos(2\pi\xi/h) + \exp(4\pi\eta/h)$; $h, P(h)$ 为常数。我们得到

$$\sigma_{n,x}^{\Delta}(E) = \pi \sqrt{\pi} \left(\frac{\lambda_n}{\Delta}\right)^2 \sum_{\lambda=1}^N g^J \Gamma_{\lambda n} \Gamma_{\lambda x} \cdot \frac{1}{\eta} U(\xi, \eta) \quad (6)$$

式中, $\xi = \frac{E' - E'_\lambda}{\Delta}$, $E'_\lambda = E_\lambda + \frac{S_l(|E_\lambda|) - S_l(E')}{2P_l(|E_\lambda|)} \cdot \Gamma_{n,n}(|E_\lambda|)$; $\eta = \frac{\Gamma_\lambda}{2\Delta}$; Δ 为多普勒展宽。

对于(2)式中的势散射项, 由于它是缓慢变化的函数, 并且受多普勒展宽的影响甚微, 因此可不考虑其展宽, (2)式的展宽可写为

$$\sigma_{n,n}^{J,\Delta}(E) = (2l+1) \frac{4\pi}{k^2} \sin^2\phi_l + \frac{\pi}{k^2} g^J \sigma_{n,n}^{II,\Delta}(E), \quad (7)$$

只需对上式右端的第二项作展宽。利用(4), (5)式可得

$$\sigma_{n,n}^{II,\Delta}(E) = (2l+1) \frac{4\pi}{k^2} \sin^2\phi_l + \frac{\pi \sqrt{\pi}}{k^2} g^J \frac{1}{\Delta^2} \sum_{\lambda=1}^N \{ [\Gamma_{\lambda n}^2 \cos 2\phi_l - 2\Gamma_{\lambda n} (\Gamma_{\lambda r} + \Gamma_{\lambda f}) \sin 2\phi_l] \frac{1}{\eta} U(\xi, \eta) + 2\Gamma_{\lambda n} \sin 2\phi_l V(\xi, \eta) \Delta \} \quad (8)$$

总截面的展宽可类似地得到

$$\sigma_t^{J,\Delta}(E) = (2l+1) \frac{4\pi}{k^2} \sin^2\phi_l + \frac{\pi \sqrt{\pi}}{\Delta^2 k^2} g^J \sum_{\lambda=1}^N \left\{ \Gamma_{\lambda} \Gamma_{\lambda n} \cos 2\phi_l \frac{1}{\eta} U(\xi, \eta) + 2\Gamma_{\lambda n} \sin 2\phi_l V(\xi, \eta) \Delta \right\} \quad (9)$$

三、结果分析

为了与通常使用的数值积分在计算时间和结果精度上进行比较, 我们用同一套 ENDF/B

-4 库的 $n + {}^{239}\text{Pu}$ 共振参数计算单能级的多普勒展宽截面, 其结果列于表1。表中 E_n 、 σ_n 、 σ_r 、 σ_f 和 σ_t 分别为中子能量、散射截面、辐射俘获截面、裂变截面和总截面。

表1 $T=300\text{K}$ 时计算的 ${}^{239}\text{Pu}$ 多普勒展宽截面

Table 1 Calculated Doppler broadening cross section of ${}^{239}\text{Pu}$ at 300K

计算方法 Calculation methods	$E_n(\text{eV})$	$\sigma(\times 10^{-16}\text{cm}^2)$			
		σ_n	σ_r	σ_f	σ_t
龙贝格方法	17.105	7.0160	7.5003	12.582	27.98
Romberg	17.650	37.900	657.20	576.37	1271.48
复概率积分法	17.105	7.0152	7.4949	12.572	27.082
Complex probability integral	17.650	37.902	657.22	576.39	1271.51

从表1可见, 复概率积分法计算的结果与龙贝格方法的最精确值^[6]几乎一致。而且在 PDP11/70 计算机上, 用复概率积分法只需龙贝格法计算时间的2%, 也就是说计算时间少50倍左右。这对于核数据编评工作者在计算成千上万的能点数据时, 具有极重要的使用价值和经济价值。

我们知道, 截面作多普勒展宽时, 需要作一次无穷积分, 而且截面的共振峰曲线性态随核素、截面的种类、能量而异, 因而采用一般的数值求积方法不易满足要求, 通常采用高阶的高斯法或龙贝格方法。即使高价的高斯法, 对于不同的共振峰计算的误差也各不相同。而采用龙贝格积分法时, 实际上它是在计算梯形和序列的基础上进行线性外插加速构成一种具有超线性收敛速度的自动积分方法, 在某种意义上说是按照区间逐次分半法使它达到一定的精度要求的, 理论上可无限逼近, 但这必然要花费大量的计算时间。

然而复概率积分

$$W(Z) = \frac{i}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-\tau^2)/(Z-\tau) d\tau = U(\xi, \eta) + iV(\xi, \eta)$$

式中, $Z = \xi + i\eta$; ξ 、 η 为实数; $i = \sqrt{-1}$; $U(\xi, \eta)$ 和 $V(\xi, \eta)$ 分别如(4)、(5)式所示, 它们是一个无穷级数和一个普通函数之和, 而无穷级数是随着 n^2h^2 的指数衰减的, 因而一般只需取少数几项就可满足要求, 我们在文献[5]中曾利用复概率积分法计算了多普勒形状函数 ψ 、 χ , 无穷级数一般只取4—5项就足以与其他方法的计算结果比较; 与96阶高斯求积结果比较, 两种结果符合相当好。

综上所述, 复概率积分方法具有计算时间短、占用机器内存少, 精度高及便于在实际中应用等特点。

参 考 文 献

- [1] 钟文发, 中子共振理论和共振参数, 原子能出版社, 1981年, 第104页。
- [2] 丘国春等, 中子共振理论和共振参数, 原子能出版社, 1981年, 第1页。
- [3] D. M. O'shea et al., *Trans. Am. Nucl. Soc.*, 6(1963), 1:36.
- [4] M. R. Bhat and G. E. Lee-Whiting, *Nucl. Instr. Meth.*, 47(1967), 277.
- [5] 钟文发, 原子能科学技术, 3(1983), 306.
- [6] 刘德顺, 中子共振理论和共振参数, 原子能出版社, 1981年, 第87页。

Calculation of single-level Doppler broadening cross-sections by the complex probability integral method

Zhong Wenfa

(Institute of Nuclear Energy Technology, Tsinghua University)

Zhuang Youxiang

(China Institute of Atomic Energy)

Abstract

Calculation of Doppler broadening cross-sections from the single-level Breit-Wigner resonance parameters is presented by using the complex probability integral method. An example for ^{239}Pu is given. The calculation time using this method at PDP 11/70 computer is about 50 times less than that using other numerical methods with the same accuracy.

Keywords: Complex probability integral Neutron resonance parameter
Doppler broadening cross-section

(1989年1月9日收到)