

裂变核光学模型自动调参程序 ASOP 及 ^{235}U 和 ^{239}Pu 的最佳光学模型参数

蔡崇海

(南开大学, 天津, 300071)

介绍裂变核光学模型参数自动调节程序 ASOP 以及用它寻求 ^{235}U 和 ^{239}Pu 两个核的最佳光学势参数所得到的结果。计算表明由 ASOP 得到的最佳光学势参数优于申庆彪给出的最佳光学势参数。尤其是在 10 keV 至 3 MeV 能段, 由 ASOP 算出的裂变截面、辐射俘获截面、去弹截面和全截面与实验值的符合程度都明显地好于由申氏参数算得的结果。

关键词 光学模型, 自动调参, 裂变核, WHF 理论。

一、引言

在利用 FUP1 程序^[1]计算裂变核的全套快中子数据之前, 我们必须先确定光学势参数和裂变参数(裂变位垒参数和鞍点态能级密度参数)。光学势参数可以取申庆彪给出的值^[2], 也可以由 ASOP 程序重新得到; 而裂变参数则应由 ASFP 程序^[3]来确定。在开始进行裂变核计算时, 考虑到铀、钚同位素的全截面、去弹截面和弹性散射角分布的实验数据并未明显改变, 本不打算重新调节光学模型参数而直接使用申庆彪给出的值。但是在试算过程中发现对于 ^{235}U 和 ^{239}Pu , 在低能段(2 MeV 以下)用申庆彪给的参数算得的 σ_{non} 明显大于实验的 σ_{nl} , σ_{ny} 和 σ_{in} 之和, 不能自治, 于是才在中重核光学模型自动调参程序 AUJP^[4]的基础上, 对其中的 WHF(带宽度涨落修正的豪泽、费许巴赫公式)子段进行修改, 使之适合于裂变核的光学模型调参, 编制出 ASOP 程序。

二、ASOP 程序梗概

在 ASOP 的光学模型计算中, 我们取 Woods-Saxon 形式的唯象光学势

$$V(r) = -Uf(r) - iWg(r) + 4ia_1W_s \frac{dg(r)}{dr} + \lambda_2^2 \frac{V_{\text{so}}}{r} \frac{df(r)}{dr} \vec{\sigma} \cdot \vec{l} \quad (1)$$

这里, $\lambda_2^2 = 2fm^2$, 为 π 介子约化波长的平方。

$$\left\{ \begin{array}{l} U = U_0 + U_1 E + U_2 E^2 + U_3 \frac{N-Z}{A} \\ W = W_0 + W_1 E (W < 0 \text{ 时令 } W = 0) \\ W_s = S_0 + S_1 E + S_2 \frac{N-Z}{A} (W_s < 0 \text{ 时令 } W_s = 0) \\ f(r) = \left\{ 1 + \exp \left[\frac{r - r_R A^{1/3}}{a_R} \right] \right\}^{-1} \\ g(r) = \left\{ 1 + \exp \left[\frac{r - r_1 A^{1/3}}{a_1} \right] \right\}^{-1} \end{array} \right. \quad (2)$$

实际计算中取 $V_{s_0} = 6.2, U_3 = -24.0, S_2 = -12.0$ 。应当注意文献[2]中不含 U_3 和 S_2 的项, 因而其中的 U_0 和 S_0 的含义与 ASOP 中的不同。如果以带撇的量表示文献[2]中的量, 以不带撇的字母表示 ASOP 中的相应量, 则有

$$\left\{ \begin{array}{l} U'_0 = U_0 + U_3 \frac{N-Z}{A} \\ S'_0 = S_0 + S_2 \frac{N-Z}{A} \end{array} \right. \quad (3)$$

对于一个给定的裂变同位素, χ^2 代表计算的核数据与相应实验值的偏差, 它定义为

$$\left\{ \begin{array}{l} \chi_{\sigma_t}^2 = \frac{1}{N_t} \sum_{j=1}^{N_t} \left(\frac{\sigma_t^T - \sigma_t^E(j)}{\Delta \sigma_t^E(j)} \right)^2 \\ \chi_{\sigma_{\text{non}}}^2 = \frac{1}{N_{\text{non}}} \sum_{j=1}^{N_{\text{non}}} \left(\frac{\sigma_{\text{non}}^T(j) - \sigma_{\text{non}}^E(j)}{\Delta \sigma_{\text{non}}^E(j)} \right)^2 \\ \chi_{\sigma_{\text{el}}(\theta)}^2 = \frac{1}{N_{\text{el}}} \sum_{j=1}^{N_{\text{el}}} \frac{1}{n_{j,i}} \left(\frac{\sigma_{\text{el}}^T(\theta_{ji}) - \sigma_{\text{el}}^E(\theta_{ji})}{\Delta \sigma_{\text{el}}^E(\theta_{ji})} \right)^2 \end{array} \right. \quad (4)$$

这里上标 T 和 E 分别代表计算值和实验值, N_t, N_{non} 和 N_{el} 分别是与全截面 σ_t 、去弹截面 σ_{non} 和弹性散射角分布 $\sigma_{\text{el}}(\theta_{ji})$ 相对应的实验能点数, 而 $n_{j,i}$ 则是与第 j 个能点相对应的实验弹性散射微分截面的角度数, θ_{ji} 是第 j 个能点第 i 个角度的角度值。一个同位素的总 χ^2 值定义为

$$\chi^2 = [W_t \chi_{\sigma_t}^2 + W_{\text{non}} \chi_{\sigma_{\text{non}}}^2 + W_{\text{el}} \chi_{\sigma_{\text{el}}(\theta)}^2] / (W_t + W_{\text{non}} + W_{\text{el}}) \quad (5)$$

这里 W_t, W_{non} 和 W_{el} 是由用户对 $\sigma_t, \sigma_{\text{non}}$ 和 $\sigma_{\text{el}}(\theta)$ 给定的人为权重因子。用户希望某种截面与实验值符合得更好, 可以把相应的权重因子取大些。

与 AUJP 类似, 在 ASOP 程序中包含有作 WHF 理论计算的程序子段, 用以计算复合核弹性散射截面及其角分布(当 $E_n \leq 3$ MeV 时)。但二者的计算对象不同, AUJP 用于中重核, ASOP 用于裂变核。低能段(1 keV 至 3 MeV)裂变核的 σ_{ce} 相当大, 与之相竞争的截面主要有 σ_{nf} (一般数值较大), σ_{ny} 和 σ_{in} 相对而言, 中重核光学模型调参的起始能量要高些(一般大于 100 keV), σ_{ce} 的值要小些, 参与竞争的截面没有 σ_{nf} , 而有出射荷电粒子的反应截面(一般数值很小)。因此, 在光学模型调参过程中正确计算 σ_{ce} 对于裂变核很重要, 而 σ_{ce} 的正确计算又依赖于合适的裂变参数。所以 ASOP 与 AUJP 的主要区别在 WHF 子段, ASOP 在用 WHF 子段计算 σ_{ce} 的同时也计算输出 $\sigma_{\text{nf}}, \sigma_{\text{ny}}$ 和 σ_{in} 。ASOP 程序计算截面的公式比较繁杂, 读者可以参考《FUPI 的计算公式》^[5]。与 AUJP 相同, ASOP 程序采用复形法^[4]自动寻找最佳光学势参数。参加自动调节的光学势参数共有 11 个($U_0, U_1, U_2, S_0, S_1, a_R, a_1, r_R, r_1, W_0$ 和 W_1), 初始出发时共取 22 组参数作为初值, 其中第一组是由用户给定的“最佳”初值, 其余 21 组初值由程序根据每个被调参数的上、下界(由用户给定)自动随机产生。对每一组光学势参数, ASOP 都计算 $\sigma_t, \sigma_{\text{non}}$ 和 $\sigma_{\text{el}}(\theta)$, 然

后按(4)、(5)式计算相应的 χ^2 。按照复形法规则,ASOP 每次淘汰掉 χ^2 最大的一组参数而代之以一组新参数,直到新获得的 χ^2 小于用户事先给定的收敛标准或者所有各组 χ^2 值彼此都接近到用户事先指定的水平时为止。关于 ASOP 程序的使用方法,可以参考文献[6]。其优点是使用方便、运行效率高。例如 ^{235}U ,自动调参 366 次得到最佳光学势参数,在 M340S 计算机上仅用 40 min。

三、计算示例: ^{235}U 和 ^{239}Pu 的最佳光学势参数

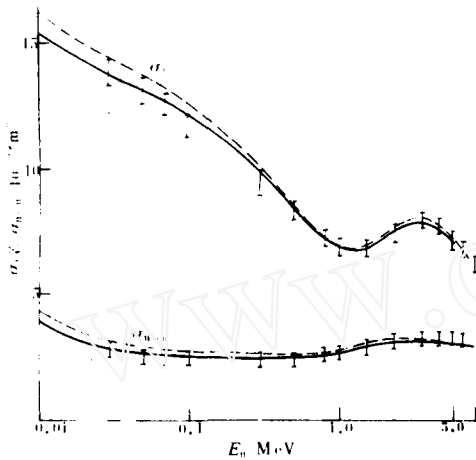


图 1 $n+^{235}\text{U}$ 的全截面 σ_t 和去弹截面 σ_{non}

Fig. 1 σ_t and σ_{non} of reaction $n+^{235}\text{U}$

-----申庆彪的计算结果; ——ASOP 的调参结果。

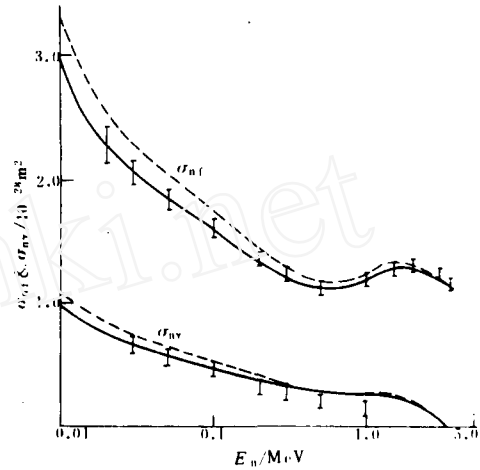


图 2 $n+^{235}\text{U}$ 的裂变截面 σ_{nf} 和辐射俘获截面 σ_{ny}

Fig. 2 σ_{nf} and σ_{ny} of reaction $n+^{235}\text{U}$

图 1 给出了 $n+^{235}\text{U}$ 的 σ_t 和 σ_{non} 的两组计算值和实验值,图 2 则是 $n+^{235}\text{U}$ 的 σ_{nf} 和 σ_{ny} 的计算值和实验值。竖直线段代表实验值,实线是 ASOP 找到的最佳光学势参数的计算结果,虚线是申氏光学势参数的计算结果。显然,由 ASOP 获得的最佳光学势参数算出的四种截面与实验值的符合程度都明显优于申氏光学势参数。

图 3 为 $n+^{235}\text{U}$ 在 5.5 MeV 的弹性散射角分布,显然也是 ASOP 得到的最佳光学势参数的计算结果略优于申氏光学势参数的结果。其它能量的弹性散射角分布的情形也大致如此。

关于 $n+^{239}\text{Pu}$ 的 $\sigma_t, \sigma_{\text{non}}, \sigma_{\text{nf}}$ 和 σ_{ny} 四种截面以及弹性散射角分布,计算值与实验值的比较也得到类似的结果:对四种截面而言,ASOP 获得的最佳光学势参数明显优于申氏光学势参数,对弹性散射角分

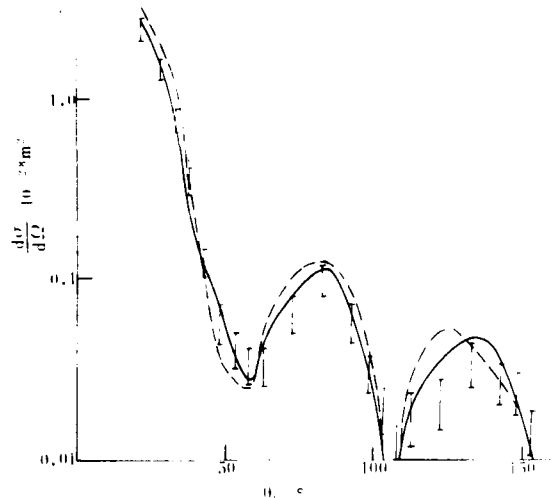


图 3 $n+^{235}\text{U}$ 5.5 MeV 弹性散射角分布

Fig. 3 Angular distribution of elastic scattering of reaction $n+^{235}\text{U}$ at 5.5 MeV

布而言,前者略优于后者,至少前者不比后者更差。

对于 ^{238}U 和 ^{240}Pu ,用ASOP程序找不到使 σ_t , σ_{non} 和 $\sigma_{\text{el}}(\theta)$ 的计算值与实验值的符合程度均优于申氏参数的一组最佳光学势参数了。因此在裂变核快中子成套数据计算中,对 ^{238}U 和 ^{240}Pu 就用申氏参数,而对 ^{235}U 和 ^{239}Pu ,则采用ASOP找到的最佳光学势参数。

计算结果表明:原先申庆彪的工作是做得很细致的。对于 ^{238}U 和 ^{240}Pu 这类核,裂变反应是有阈的,即在 σ_{ce} 很大时 $\sigma_{\text{nf}} = 0$,随着能量的上升, σ_{nf} 也逐渐增大,当 σ_{nf} 较大时, σ_{ce} 又变得相当小了,即对于 σ_{ce} 的计算, σ_{nf} 的竞争很不重要,所以申庆彪得到了很好的光学势参数。然而,对于 ^{235}U 和 ^{239}Pu 这类核,裂变反应是无阈的,即在 σ_{ce} 的计算中, σ_{nf} 的竞争是很关键的,在缺乏适当的裂变参数的条件下无法算准 σ_{nf} ,进而也就不易得到正确的 σ_{ce} ,所以申庆彪当时难以获得最佳光学势参数。现在,我们对裂变核作计算时,则先以申氏光学势参数为基础,用ASFP程序^[3]初步调节出适当的一组裂变参数,再将其送入ASOP去寻找最佳的光学势参数。经过一、二次反复,我们就能找到最佳的光学势参数和最佳的裂变参数。

表1 ^{235}U 和 ^{239}Pu 的最佳光学势参数及由它们算出的 χ^2

Table 1 Optimal optical potential parameters of U-235 and Pu-239 and the χ^2 values calculated from them

最佳光学势参数	^{235}U		^{239}Pu	
	申氏参数	本工作	申氏参数	本工作
r_R	1.2647	1.268839	1.2601	1.248072
r_I	1.3501	1.345913	1.3736	1.419659
a_R	0.5666	0.514744	0.5628	0.419681
a_I	0.6415	0.597684	0.6025	0.530673
U_0	48.867905	49.171188	48.9937	51.215775
U_1	-0.4650	-0.530054	-0.3983	-0.305256
U_2	0.02349	0.028683	0.01925	-0.017306
S_0	6.3882	6.929219	5.9998	5.881548
S_1	0.1283	0.183853	0.1161	0.157761
W_0	0.2911	0.202800	0.8459	0.529984
W_1	0.005886	0.043471	0.01029	0.061853
$\chi^2\sigma_t$	1.3439	0.4939	10.5118	3.9823
$\chi^2\sigma_{\text{non}}$	1.7001	0.9845	15.5837	2.2936
$\chi^2\sigma_{\text{el}}(\theta)$	19.3622	15.3352	12.0455	10.0577
χ^2	2.3716	1.4343	13.0000	3.4673

表1中给出了 ^{235}U 和 ^{239}Pu 的最佳光学势参数和申氏光学势参数的值,以及由它们算得的 χ^2 值。应当注意,表1中给出的申氏光学势参数的含义已转换为与本文(1),(2)式一致了,与文献[2]给出的值有些不同。

参 考 文 献

- [1] 蔡崇海, FUP1 程序用户指南, 中国核数据中心资料, 1990 年。
- [2] 申庆彪等, 核反应理论方法及其应用文集, 原子能出版社, 北京, 1980 年, p. 202。
- [3] 蔡崇海, ASFP 程序用户指南, 中国核数据中心资料, 1990 年。
- [4] 周洪模等, 最优化方法在光学模型自动调参中的应用, 第四次核数据会议论文选编, 中国核数据中心, 1986 年, p. 138。
- [5] 蔡崇海等, FUP1 的计算公式, 中国核数据中心资料, 1990 年。
- [6] 蔡崇海, ASOP 程序用户指南, 中国核数据中心资料, 1990 年。

(编辑部收到日期: 1990 年 4 月 16 日)

A PROGRAM (ASOP) FOR SEARCHING AUTOMATICALLY FOR OPTIMAL OPTICAL POTENTIAL PARAMETERS OF FISSILE NUCLEUS AND THE OPTIMAL OPTICAL POTENTIAL PARAMETERS OF U-235 AND Pu-239

CAI CHONGHAI

(Nankai University, Tianjin, 300071)

ABSTRACT

In the paper, author outline the program ASOP and give the optimal optical potential parameters of U-235 and Pu-239 obtained by ASOP as well as the calculated results from them. The optimal optical potential parameters obtained by ASOP are better than Shen's. The calculated σ_{nf} , σ_{ny} , σ_{non} and σ_t from our parameters are all obviously better than those from Shen's parameters, especially in 10 keV—3 MeV energy region.

Key words Optical model, Automatically searching for an optimum set of optical potential parameters, Fissile nucleus, WHF theory.