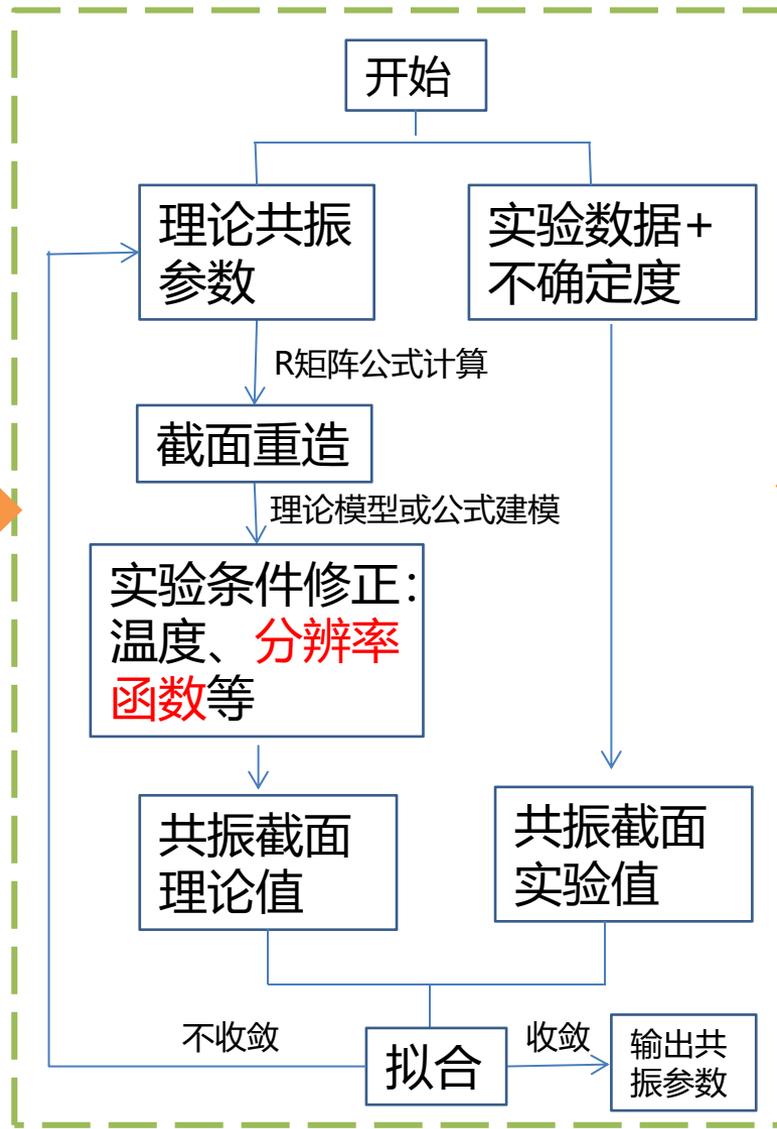


# SAMMY介绍

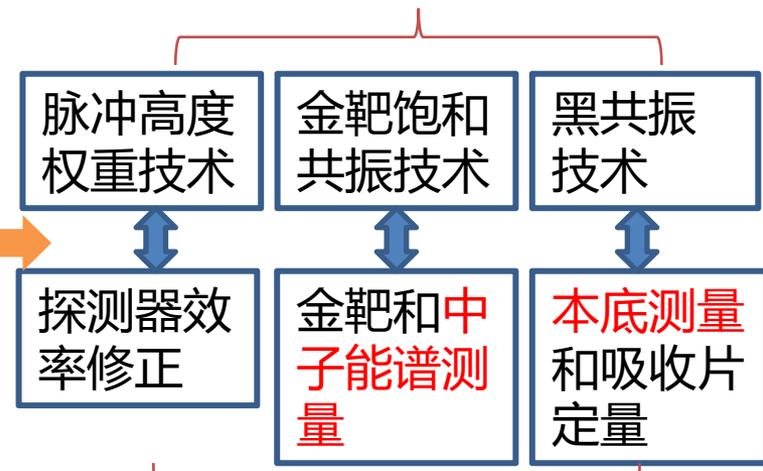
汇报人：姜炳

2024. 12.6

加工(NJOY)  
检验  
堆用



## 实验数据分析



## 实验设计

1、实验 (俘获产额, 裂变产额, 透射率)

3、应用 ↔ 2、评价 (SAMMY, REFIT) ↔

1、一套利用**贝叶斯方程的多能级R矩阵**中子反应数据拟合和分析的程序系统，于1984年由美国橡树岭国家实验室在使用最小二乘法的程序基础上开发出来。主要用来分析ORELA上测量得到的中子数据。

2、该程序在1985、1989、1996、1998、2000、2003和2006年分别发布了改进版本，目前最新版本是2008年发布的。

3、程序的主要功能是分析中子飞行时间方法测得的中子截面数据，同时具有对实验条件的修正，主要包括样品厚度、温度的多普勒展宽和实验装置的分辨率展宽等。

4、随着版本的提高，SAMMY的功能也越来越强大，该程序可以用于分析带电粒子的入射和出射数据，数据类型也从开始的透射率、总截面、弹性散射、裂变、非弹性散射、俘获和吸收截面到现在的  $(\alpha, n)$  和  $(n, \alpha)$  截面。

5、SAMMY的结构化程度很高，由51个模块组成，共有100000多行Fortran代码，各个模块的功能也相对独立，除了主程序用来实现共振参数拟合功能外，还有22个辅助程序，实现共振参数评价相关的功能。

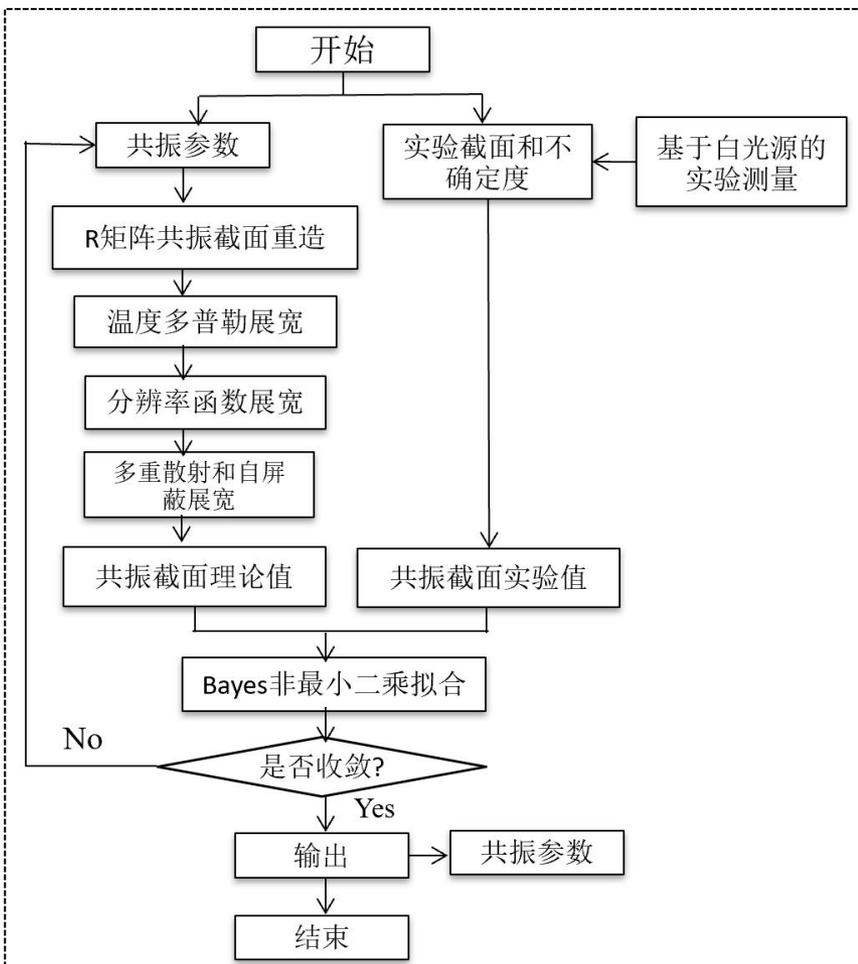
6、在中国最早的SAMMY程序是2000年Charles Dunford访问中国原子能研究院的国家核数据中心时带过来的，但是没有调试成功（时差）。后来在2005年，清华大学工物系王文明博士从程序作者手中获得了SAMMY6-beta版本，并进行初步应用研究，分别作了硕士和博士论文。

7、SAMMY程序在世界范围内应用非常广泛，而中国的研究机构很少得到授权和相应的开发。总的来看，我国对共振参数评价的处理方法和程序也缺乏系统性的研究，严重依赖SAMMY程序，而美国对SAMMY实行出口管制，导致我国在核数据评价领域的研究时造成了诸多不便。

参考文献：余健开《堆用重要核数据评价处理及应用的关键方法与软件开发》  
王记民《大型共振参数分析程序SAMMY的开发和应用》

- ✓ 利用贝叶斯方程的多能级R矩阵中子反应数据拟合和分析的程序系统，兼具理论截面计算与数据拟合的功能

## 评价流程：



□ 数据评价目的：确定或者更新共振参数

□ 数据评价输入：

- ✓ 共振参数
- ✓ R矩阵计算理论截面所需的核结构信息
- ✓ 与实验相关的各种条件修正
- ✓ 实验数据（评价过程保持不变）

□ 数据评价步骤：

- ① 理论截面计算：利用共振参数初值通过多能级R矩阵理论截面计算公式计算出理论值
- ② 实验条件修正：理论模型或公式模拟各种实验条件，如温度多普勒展宽、能量分辨率函数展宽、多重散射与自屏蔽效应
- ③ 拟合：用贝叶斯方法对理论数据和实验数据进行拟合分析得到共振参数

**获得不包含任何实验展宽，绝对零度下的截面值**

R矩阵理论截面计算：用一组参数（共振参数）描述中子共振反应的特征  
具有总角动量为J的c反应道入射且从c'反应道出射的反应截面为

截面

$$\sigma_{cc'} = \frac{\pi}{k_\alpha^2} g_{J\alpha} \left| e^{2i\omega_c} \delta_{cc'} - U_{cc'} \right|^2 \delta_{JJ'}$$

$$k_\alpha = \frac{p}{\hbar}$$

动能  
普朗克常数

$$p = \hbar k_\alpha = \sqrt{\frac{2mM^2}{(m+M)^2} E}$$

$$g_{J\alpha} = \frac{2J+1}{(2i+1)(2I+1)}$$

自旋, 轨道角动量

U矩阵

$$U_{cc'} = \Omega_c W_{cc'} \Omega_{c'}$$

$$\Omega_c = e^{i(\omega_c - \varphi_c)}$$

$$W = P^{1/2} (I - RL)^{-1} (I - RL^*) P^{-1/2}$$

$$L = (S - B) + iP$$

S、B、P分别为能移因子, 边界常数和穿透因子, 均与入射粒子能量E, 轨道角动量L以及道半径相关。

I 单位矩阵

R矩阵

$$R_{cc'} = \sum_\lambda \frac{\gamma_{\lambda c} \gamma_{\lambda c'}}{E_\lambda - E} \delta_{JJ'}$$

$\lambda$ 、 $E_\lambda$ 、 $\gamma$ : 分别代表能级, 共振能量, 共振反应宽度 (共振参数)。  
R矩阵公式中, 所有方程均是通过反应道之间的相互作用体现。因此, 在理论上R矩阵能描述所有反应道, 而且, 能够描述的共振能级数目不存在上限。

为了节约空间, 评价核数据库里存储的是共振参数, 而非能量-截面值

➤ 温度多普勒展宽效应由靶核与中子之间的热运动引起

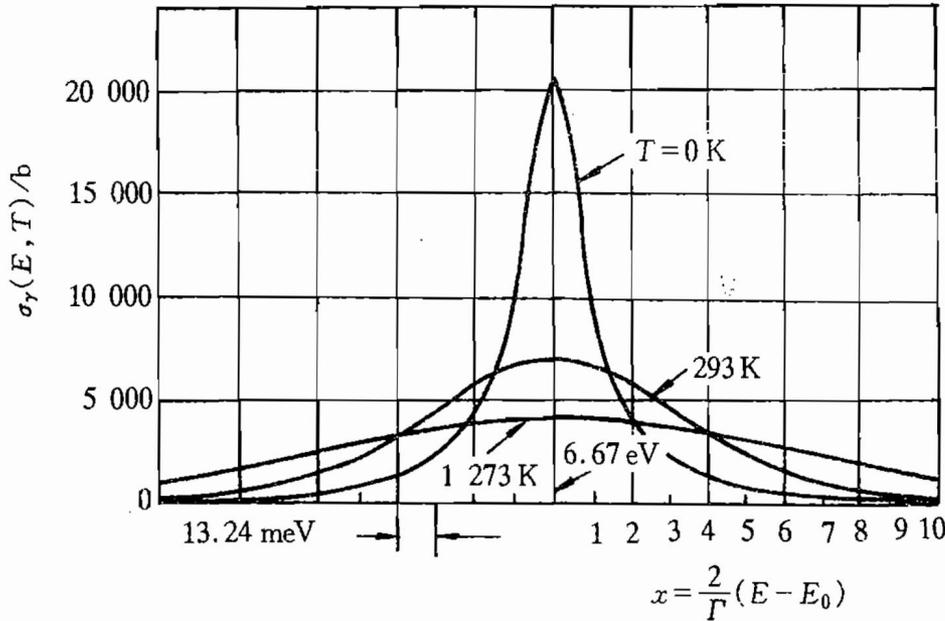


图 1-10  $^{238}\text{U}$  核在 6.67 eV 处共振俘获截面的多普勒展宽

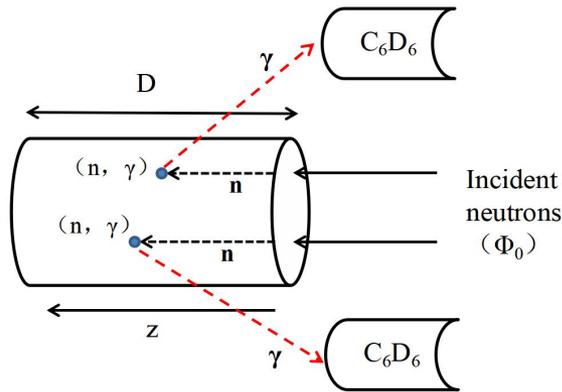
- 由于样品靶核处于不停的热运动之中，因此中子与靶核的相对运动能量与假设靶核绝对静止的情况不完全一致。在这种情况下，中子与原子核的相对能量与中子能量不相等，由于靶核的热运动，导致对于本来具有单一能量的中子，与靶核的相对能量有一个展开范围
- 目前针对多普勒展宽的理论模型可以分为两种，自由气体模型和晶格模型。基于这两种模型，SAMMY 提供四种多普勒展宽效应的修正方法：**FGM多普勒展宽**、Leal-Hwang多普勒展宽、HEGA高能高斯近似多普勒展宽、CLM晶格模型多普勒展宽

➤ 应用SAMMY程序进行多普勒展宽修正时需要在程序中输入温度，并选择合适的理论模型。

实际是针对样品靶厚度的修正：由于实验样品靶都具有一定厚度（非无限薄），必须对样品靶的有限厚度进行修正，其中多重散射和自屏蔽效应都与样品靶的几何相关。

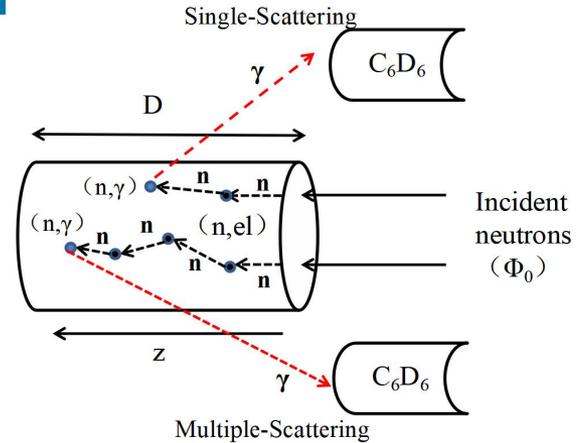
## 自屏蔽效应

中子被样品靶直接俘获



## 多重散射效应

中子散射后再被样品靶俘获



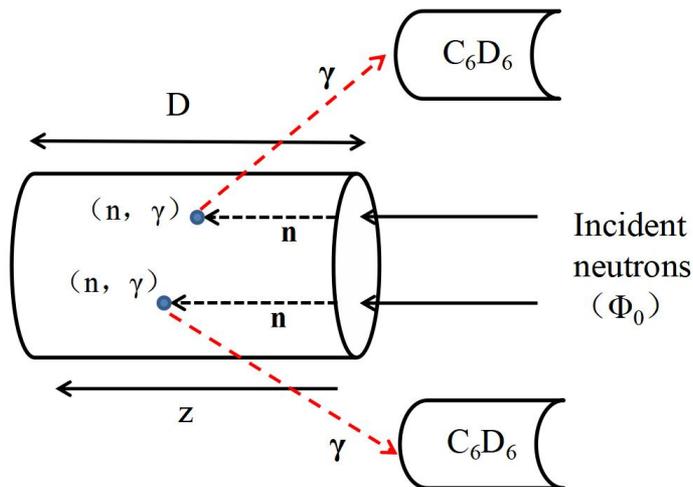
- 设中子一次反应直接被俘获的产额为  $Y_C$ ，中子经弹性散射后继续发生  $(n, \gamma)$  反应并被探测的产额为  $Y_S$ ，则总俘获产额  $Y_t$  应为两者之和

$$Y_t(E) = Y_S(E) + Y_C(E)$$

- 其中  $Y_C$  表示自屏蔽效应引起的俘获产额， $Y_S$  为多重散射效应导致的俘获产额。

# 自屏蔽效应

非无限薄靶



在深度  $z$  处 ( $dz$ ) 发生俘获反应的概率

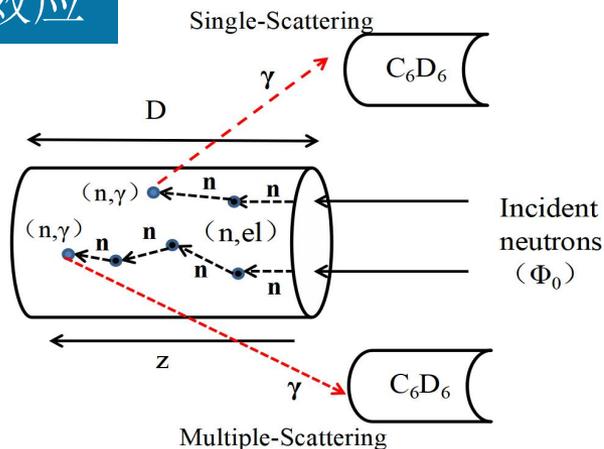
$$dN = \phi(z) \frac{n}{D} \sigma_c dz = \phi_0 e^{-n\sigma_t z / D} \frac{n}{D} \sigma_c dz$$

0到D积分计算整个靶的俘获产额

$$N = \int_0^D dN = \int_0^D \phi_0 e^{-n\sigma_t z / D} \frac{n}{D} \sigma_c dz = \phi_0 (1 - e^{-n\sigma_t}) \frac{\sigma_c}{\sigma_t}$$

$$Y_0 = (1 - e^{-n\sigma_t}) \frac{\sigma_c}{\sigma_t} = (1 - T) \frac{\sigma_c}{\sigma_t}$$

## 多重散射效应



影响因素:

- ❑ 中子入射至样品靶内的位置以及在该位置发生散射反应的概率;
- ❑ 发生散射反应后中子的散射角和中子能量;
- ❑ 散射后中子到达的位置以及在该位置发生俘获反应的概率等

$$Y_1(E) = \frac{1}{S} \int dx \int dy \frac{n}{D} \int dz \exp\left(\frac{-n}{D} \sigma_t z\right) \int d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega} \sigma_c' \frac{n}{D} \int dq \exp\left(\frac{-n}{D} \sigma_t q\right)$$

✓ 在散射的过程中，中子会损失能量，由此导致在某个共振峰中子能量下测量得到的俘获产额会有来自能量更高的共振峰中子贡献

## 总俘获产额计算

$$Y(E) = Y_0(E) + Y_1(E) + Y_2(E) + Y_{ns}(E)$$

自屏蔽

一次散射

二次散射

多次散射

比例系数

$$Y_0 > 10 Y_1$$

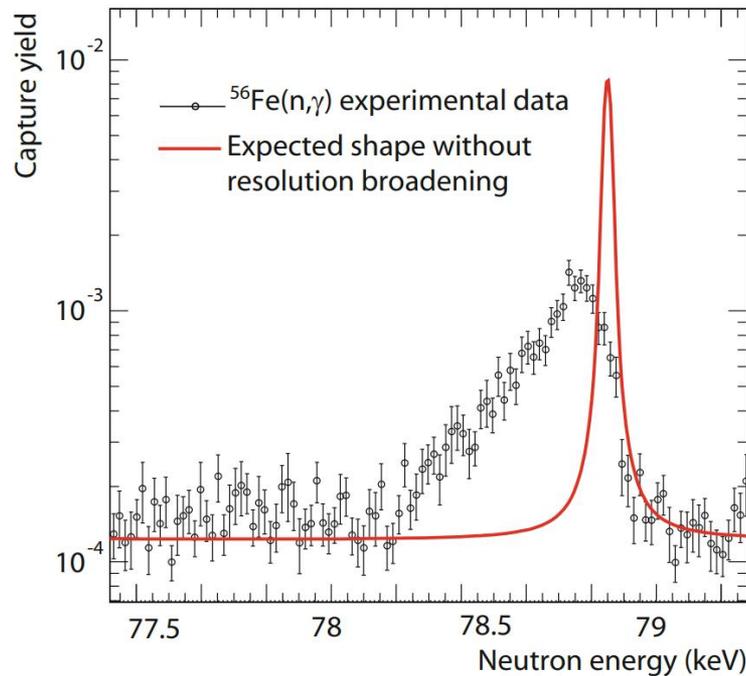
$$Y_1 \gg Y_2 \gg Y_{ns}$$

$$Y(E_n) = (1 - e^{-nt\sigma_T(E_n)}) \frac{\sigma_\gamma(E_n)}{\sigma_T(E_n)} f_c(E_n)$$

➤ 在SAMMY程序中输入样品靶参数完成修正

中子的能量分辨率是中子飞行时间谱仪的重要参数，它表征了谱仪测量实验截面过程中区分共振峰的能力。能量分辨率函数用于中子共振截面测量实验数据分析，对确定共振峰参数十分重要。

## 分辨率函数对理论截面的展宽效应示例



**$^{56}\text{Fe}$  (n,  $\gamma$ ) 理论截面与实验截面的对比 (n\_TOF)**  
 红色实线为理论评价数据，黑色圈点为实验测量截面

研究白光中子源能量分辨率函数的最终目的在于对截面实验数据的分辨率函数展宽效应进行修正

## 分辨率函数展宽表达式

$$\bar{\sigma}(t) = \int I_1(t - t_1) dt_1 \int I_2(t_1 - t_2) dt_2 \int I_3(t_2 - t_3) dt_3 \sigma(t_3)$$



$$\bar{\sigma}(t) = \int I(t - t') \sigma(t') dt'$$

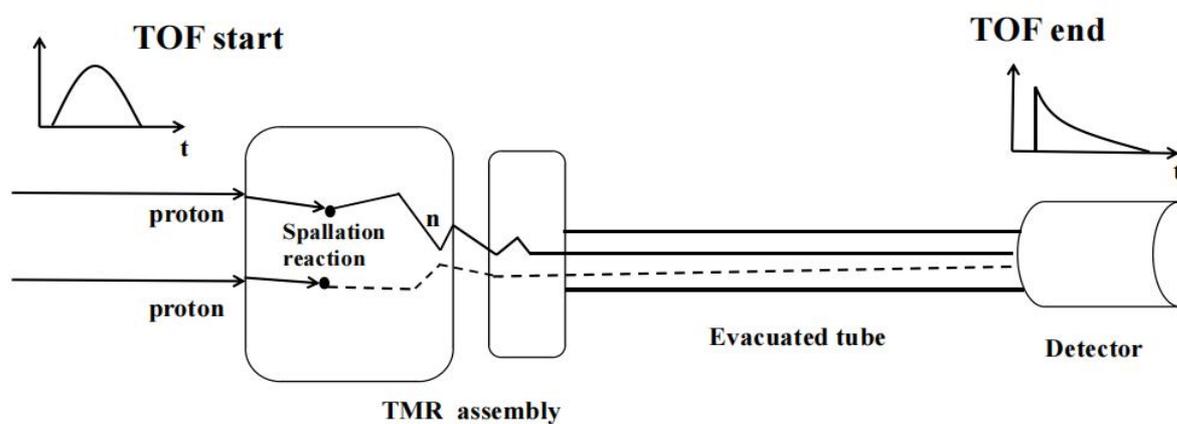
$\bar{\sigma}$  : 分辨率函数展宽后的截面

$\sigma$  : 分辨率函数展宽前的截面

$I(t - t')$  : 分辨率函数

分辨率函数对于白光中子源上截面数据的评价至关重要，需要通过模拟中子源的产生靶系统来计算确定分辨率函数。

## 中子产生、慢化过程及TOF技术原理示意图



$$E = \frac{m L^2}{2 t^2}$$

↓

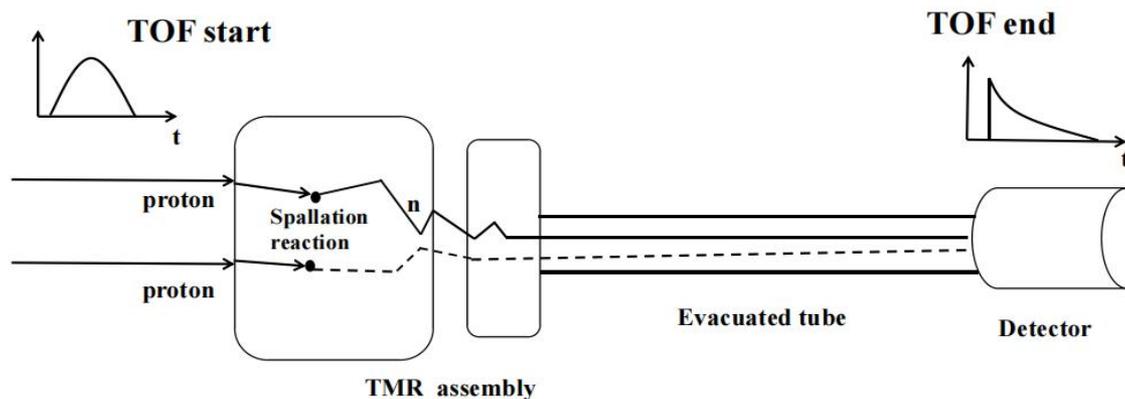
$$\frac{\Delta E}{E} = \frac{-2 \Delta t}{t_{TOF}}$$

### $\Delta t$ 的组成:

- ✓ **飞行时间测量中起始时间的不确定度:** 质子（或电子）束团具有一定的时间宽度和时间结构
- ✓ **中子的实际产生时间及慢化时间的不确定度:** 中子在出射过程中会与散裂靶靶核、慢化体中的原子核发生碰撞而改变速率和方向
- ✓ **中子探测器系统的时间测量不确定度:** 与电子学、数据获取等系统的时间特性相关

- ✓  $I_1(t_1)$ : 起始时间的不确定度, 时间分布的结构和宽度由加速器的设计运行参数决定, **与中子能量无关**;
- ✓  $I_2(t_2)$ : 中子的实际产生时间及慢化时间的不确定度, 与中子的产生、慢化过程相关, **与中子能量相关**;
- ✓  $I_3(t_3)$ : 中子探测器系统的时间测量不确定度, 与实验测量中所使用设备的时间响应特性相关, 一般可以用高斯型、矩形或e指数型分布函数来表征, **与中子能量无关**;

$$\Rightarrow \Phi_E(t) = I_1(t_1) \otimes I_2(t_2) \otimes I_3(t_3)$$



$I_2(t_2)$ 与出射中子能量相关, 时间分布形状较复杂, 而且需通过蒙卡模拟方法获得。因此, 这部分时间分布函数的特性是白光中子源上能量分辨率函数研究的重点工作。

# 程序编译与安装

测试版本：SAMMY-M6 + Ubuntu 18.04

## 流程

### 安装说明

- 已在Ubuntu18.04下调试成功

### 安装准备

- 我已将预编译包上传至百度网盘：  
链接：<https://pan.baidu.com/s/1B3-rcJ3ewKFxAU3cGawmeA> 密码：*ddfi*
- 下载后将看到三个压缩包：*sammy6.zip*(SAMMY源代码)，*samtry.zip*(例子教程)，*tr001.zip*(调试过的例子)

### 配置环境

- 将源代码中*exe*文件夹路径添加至环境变量：  
*export PATH=\$PATH:"/home/lxx/save/sammy6/exe"*

### 运行案例

- 在*tr001*中，运行*lxx.sh*脚本即可运行第一个教程例子；
- 程序输出位于*results*中，上一次的输出将保存于*results/old\_lxx*文件夹中，多次运行将保存最近两次的结果；
- 其他例子的运行需要参考*lxx.sh*编写处理脚本（这不重要）；

1、对各个（51个）模块编译。生成对应可执行程序。以及主程序sammy.exe



2、添加环境变量



3、运行例子。共141个例子，均提供开发者的运行结果，用于对比和检验。

- 📖 输入：3个必要文件（共16个），均以集成卡片的形式进行输入，不同的卡片具有不同的形式和长度
- 📖 1、INPut file：后缀.inp的文件，主要是SAMMY的控制信息，相当于主程序，用来控制其它模块的输入信息

```

TRIAL CASE 1 -- DUMMY PROBLEM TO CONSIDER CORRELATED DATA
      60NI      59.927  150000.0  167852.0  116
PRINT THEORETICAL CROSS SECTIONS
do not use geometrically spaced points in auxiliary grid
use multi-style doppler broadening
DO NOT PRINT INPUT DATA
PRINT PARTIAL DERIVATIVES
PRINT DEBUG INFORMATION
PRINT ALL INPUT PARAMETERS
DO NOT SUPPRESS ANY INTERMEDIATE RESULTS
PRINT WEIGHTED RESIDUALS
CHI SQUARED IS WANTED
DATA HAS OFF-DIAGONAL CONTRIBUTION TO COVARIANCE (LINEAR IN ENERGY)
USE NEW SPIN GROUP FORMAT

      300.      78.2030      0.0200      0.0000      0.0100
      6.0000  0.074400      .20      0.000
ELASTIC CROSS SECTION
      0.0000      0.0000      0      1
      1      1      0  0.5      1.0
      1      1      0      0      0.500
      2      1      0 -0.5      1.0
      1      1      0      1      0.500
    
```

**Card Set1:** 标题，最长80个字符，位于程序第一行

**Card Set2:** 样品名称，质量，能量范围

**Card Set3:** 字符串控制语句。用不同的英文陈述来限定sammy程序计算时的条件

**Card Set5:** 用来描述多普勒和分辨率展宽的效应

**Card Set8:** 数据类型。弹性散射截面

**Card Set10:** 自旋组 (spin group) 信息

2、Parameter file: 后缀.par的文件。包含所有需要更改的参数及参数不确定性。同样以卡片的形式输入。

```

-.20000E+06 .15000E+04 .30000E+08      0 0 0 0 0 1
 .15140E+06 .20000E+04 .18000E+05      1 0 1 0 0 2
 .15440E+06 .20000E+04 .17000E+06      1 0 1 0 0 2
 .15650E+06 .20000E+04 .50000E+06      1 0 1 0 0 1
 .16020E+06 .20000E+04 .17500E+05      1 0 1 0 0 2
 .16200E+06 .20000E+04 .13000E+07      1 0 1 0 0 1
 .20000E+06 .40000E+04 .50000E+07      0 0 0 0 0 1
    
```

1:1	1-11, F	$E_\lambda$	Resonance energy $E_\lambda$ (eV)	
	12-22, F	$\Gamma_\gamma$	Capture width (milli-eV)	
	23-33, F	$\Gamma_{e1}$	Particle width for channel 1 (milli-eV)	If any particle width $\Gamma$ is negative, SAMMY uses $ \Gamma $ for the width and set the associated amplitude $\gamma$ to be negative. That is, SAMMY uses $\gamma = -\alpha\sqrt{ \Gamma }$ , where $\alpha$ is the appropriate factor (see <a href="#">Section III.A.1.b</a> )
	34-44, F	$\Gamma_{e2}$	Particle width for channel 2 (milli-eV)	
	45-55, F	$\Gamma_{e3}$	Particle width for channel 3 (milli-eV)	
	56-57, I	$IS_E$	Vary $E_\lambda$ ?	0 = no, 1 = yes
	58-59, I	$IS_\gamma$	Vary $\Gamma_\gamma$ ?	0 = no, 1 = yes
	60-61, I	$IS_{e1}$	Vary $\Gamma_{e1}$ ?	0 = no, 1 = yes
	62-63, I	$IS_{e2}$	Vary $\Gamma_{e2}$ ?	0 = no, 1 = yes
	64-65, I	$IS_{e3}$	Vary $\Gamma_{e3}$ ?	0 = no, 1 = yes
	66-67, I	IGROUP	Quantum numbers for this resonance are those of group number IGROUP (Card Set <a href="#">10.1</a> or <a href="#">10.2</a> in Table VIA.1)	If IGROUP is negative or greater than 50, this resonance will be omitted from the calculation.  (To use more than 50 spin groups, include the phrase "USE I4 FORMAT TO READ spin group number" in the INPut file Card Set 3. Then use Columns 66-68 for IGROUP, and columns 70-82 for X. The maximum number of spin groups is then 500; values greater than 500 indicate omitted resonances.)

Card Set1: 共振参数。  
.par文件中必须含有这个卡片，以空行表示结束

Card Set2-16: 见说明书

### 3、DATafile: 实验数据。能量+截面 (透射率、产额或其它) +不确定性

ENERGY1	DATA1	UNCERTAINTY1	ENERGY2	DATA2	UNCERTAINTY2	ENERGY3	DATA3	UNCERTAINTY3
167852.60	7.5705647	.05140	167561.00	7.7268302	.05088	167379.20	7.7512475	.05080
167306.50	7.7813070	.05070	167233.90	7.8170076	.05058	167161.40	7.8635455	.05043
167088.80	7.8557944	.05046	167016.40	7.9129777	.05027	166944.00	7.9459873	.05017
166763.10	8.0105363	.04997	166474.40	8.1585770	.04951	166186.40	8.3154668	.04904
165899.20	8.5065538	.04849	165612.70	8.7009951	.04794	165326.90	8.9387033	.04730
165041.90	9.2306720	.04655	164757.60	9.5707152	.04571	164474.00	9.9022443	.04494
164191.20	10.337040	.04399	163909.10	10.873561	.04289	163627.80	11.558351	.04160
163347.10	12.437032	.04010	163125.50	13.271405	.03882	162962.40	13.977783	.03783
162799.60	14.896262	.03664	162637.10	15.805443	.03557	162474.80	16.826560	.03448
162312.70	17.724216	.03359	162150.90	18.360874	.03300	161989.30	18.192951	.03316
161828.00	16.700165	.03461	161666.90	13.845311	.03801	161506.00	10.310933	.04404
161345.40	7.0278986	.05335	161185.00	4.6475240	.06560	161024.90	3.1970257	.07909
160865.00	2.4675454	.09003	160705.30	2.1723537	.09595	160545.90	2.1483338	.09649
160432.20	2.2911388	.09343	160364.00	2.5581670	.08842	160295.80	3.1347310	.07988
160227.80	3.8753450	.07184	160159.70	4.2195749	.06885	160091.70	3.8651229	.07193
160023.70	3.2439773	.07852	159955.80	2.8624437	.08359	159887.90	2.7847402	.08475
159763.60	2.9158506	.08282	159583.00	3.1861105	.07923	159402.70	3.4461370	.07618
159222.80	3.7022419	.07350	159043.10	3.9401536	.07125	158863.70	4.1842445	.06914
158684.70	4.4213045	.06726	158505.90	4.6717350	.06543	158327.50	4.9392968	.06363
158149.30	5.2198684	.06190	157971.50	5.5584776	.05998	157793.90	5.9152734	.05815
157616.70	6.3653869	.05605	157439.70	6.9027290	.05383	157263.00	7.6444079	.05115
157130.70	8.3963591	.04881	157042.60	9.0162830	.04710	156954.60	9.8227535	.04512
156600.70	10.0000000	.04000	156570.00	10.0000000	.04000	156500.00	10.0000000	.04000

除用于对比和检验的141个例子外，SAMMY还提供26个练习，用来熟悉核数据评价流程。开发者在作业中设置了很多错误信息，并引导用户修正这些错误，帮助用户实现数据评价。

做评价之前需解决的问题：评价过程需要通过画图多次比较理论计算数据与实验数据之间的差距。但目前的版本（SAMMY-M6）运行产生的数据为odf二进制数据（ORELA DATA FORMAT），需要专门的辅助程序forodf才能读取（缺）。因此需先将odf二进制文件格式转化为ASCII文件（格式转换的代码：mplt.f, FORTRAN），然后用其它数据分析软件作图(ROOT、Origin等)

① 一个共振峰的评价（ex001，“虚拟”核素）：

第一步：准备三个输入文件：

- .inp: SAMMY的控制信息，相当于主程序，用来控制其它模块的输入信息
- .par: 共振能量和共振参数
- .dat: 实验数据

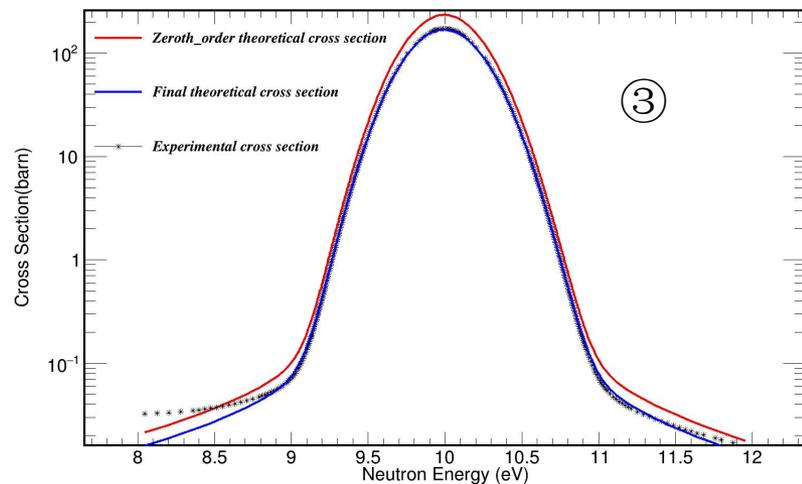
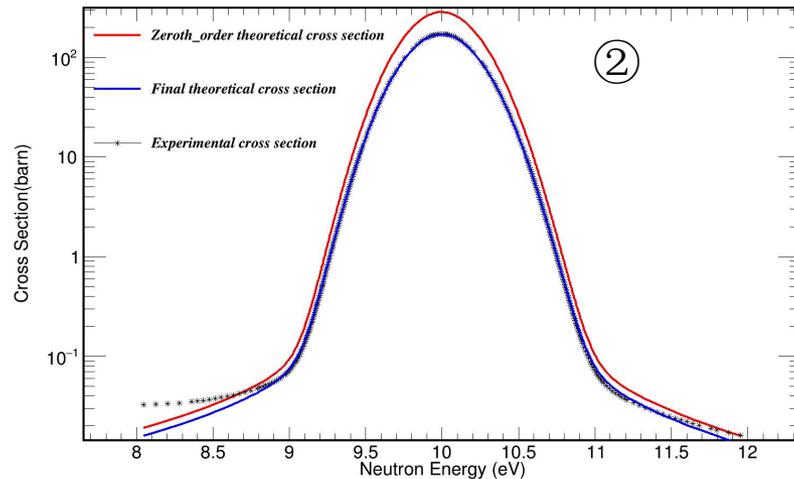
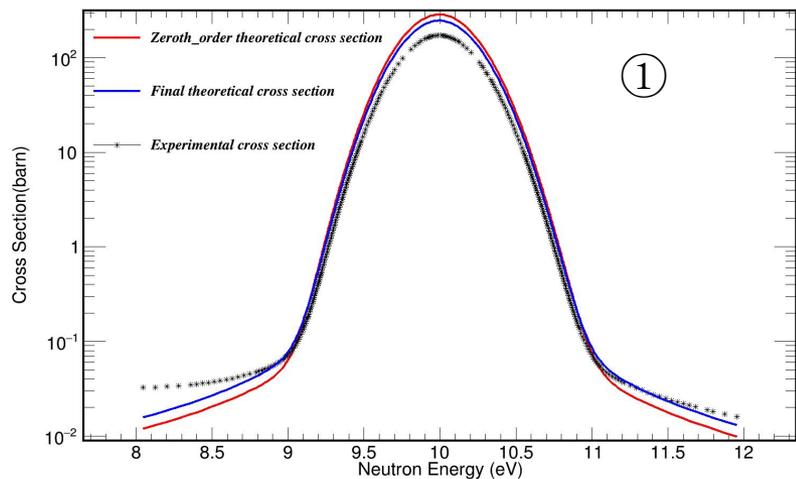
第二步：拟合，查看输出文件和拟合优度，画图，比较评价数据与实验数据的差别

第三步：手动修改.par文件中的共振参数，重新拟合并重复第二步

第四步：重复第三步

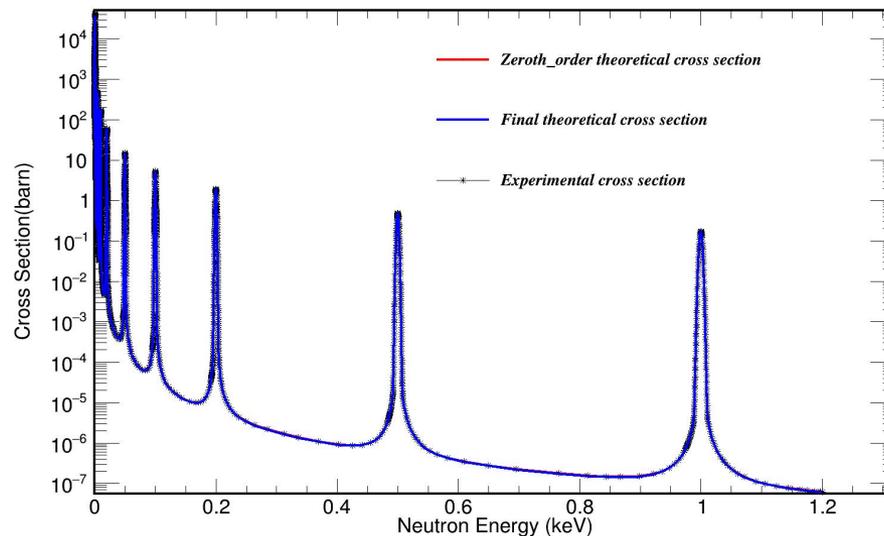
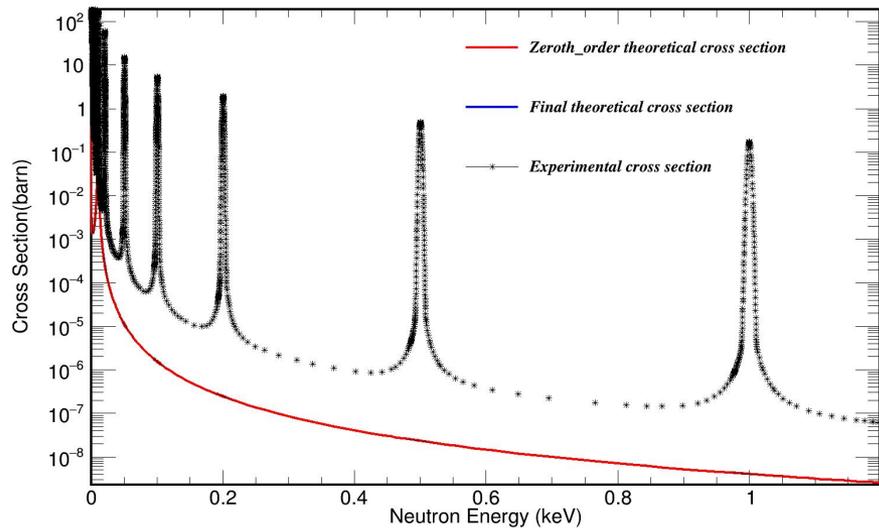
.....输出最后的共振参数，评价完成。

以ex001为例：图中红线均为共振参数通过共振重造结合实验展宽计算的理论截面数据（未拟合）



	①	②	③
非贝叶斯拟合优度	26.99	0.65	0.65
贝叶斯拟合优度	2.26	0.83	0.68
$\Gamma_\gamma$ (eV)	1.95	3.13	3.19
$\Gamma_n$ (eV)	3.36	2.11	2.09

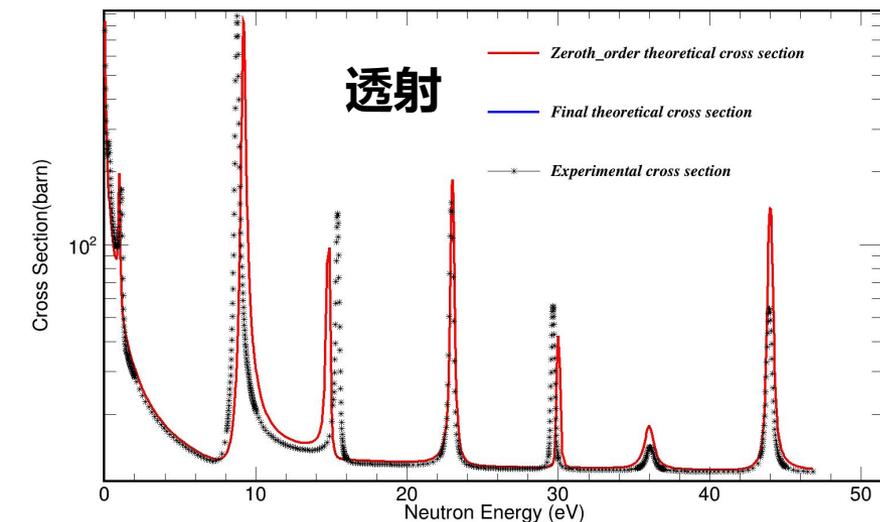
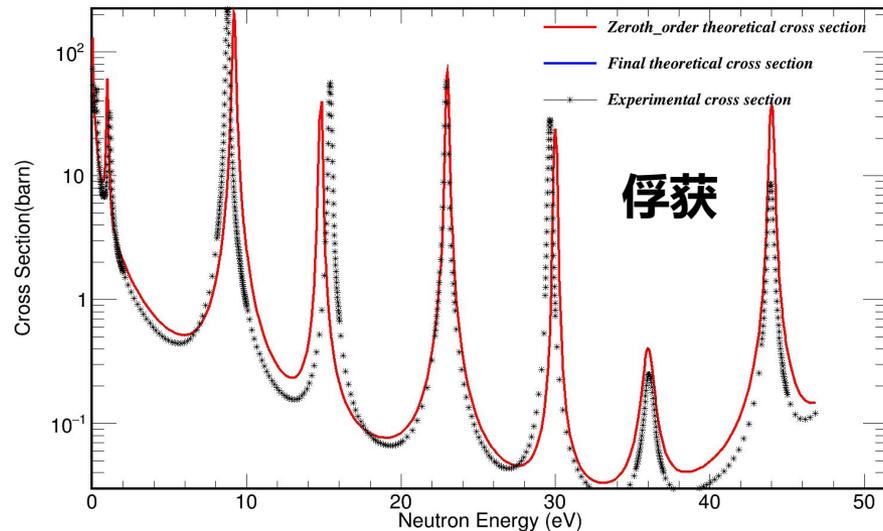
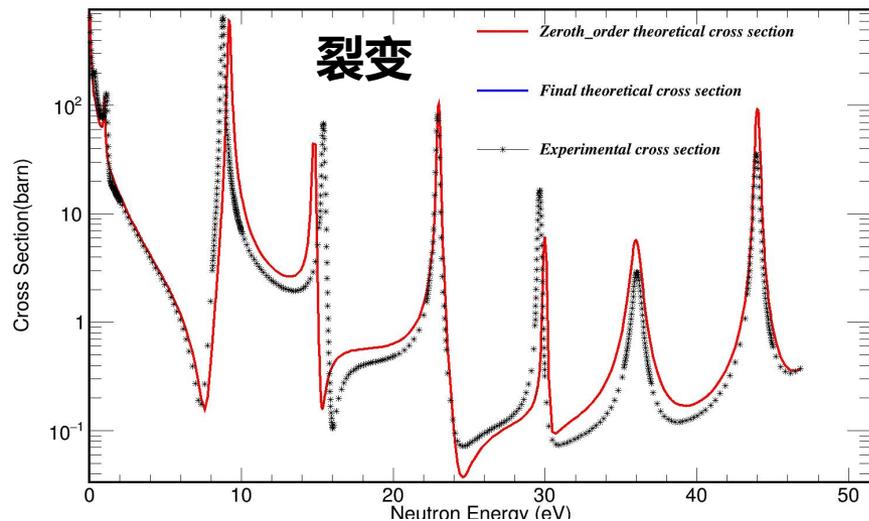
# IHEP ex002: 多个共振峰的评价, 虚拟核素



共振能量 (eV) $E_\lambda$	中子宽度 (eV) $\Gamma_n$	伽马宽度 (eV) $\Gamma_\gamma$	裂变宽度1 (eV) $\Gamma_{f1}$	裂变宽度2 (eV) $\Gamma_{f2}$
99.99	5.0456E-01	9.9110E-01	4.9104E-01	4.9104E-01
200.00	5.0579E-01	9.8910E-01	4.8883E-01	4.8883E-01
500.00	5.0704E-01	9.8673E-01	4.8642E-01	4.8642E-01
999.86	4.9702E-01	9.7260E-01	4.8922E-01	4.8922E-01

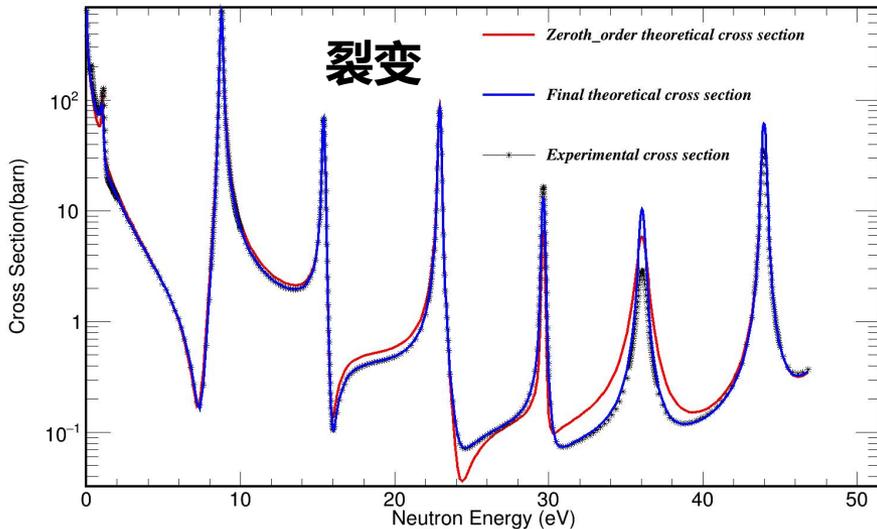
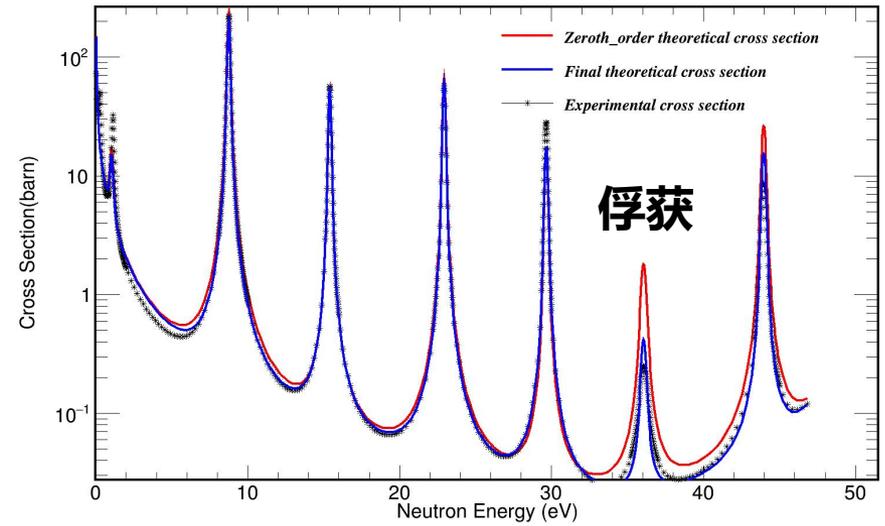
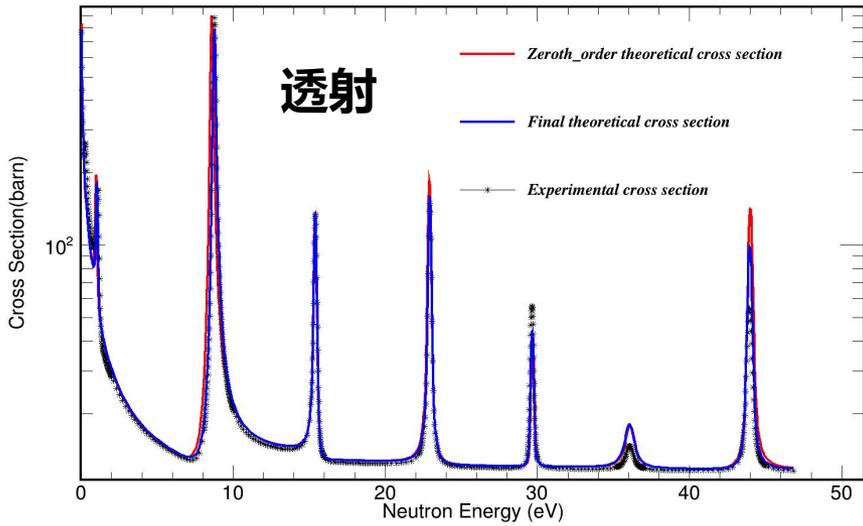
## ex022: 核素U-235, 包括中子裂变、俘获、透射数据

第一步：输入不同截面对应的共振参数以及理论计算所需要的其它参数，通过R矩阵计算理论截面，与准备好的实验数据拟合。



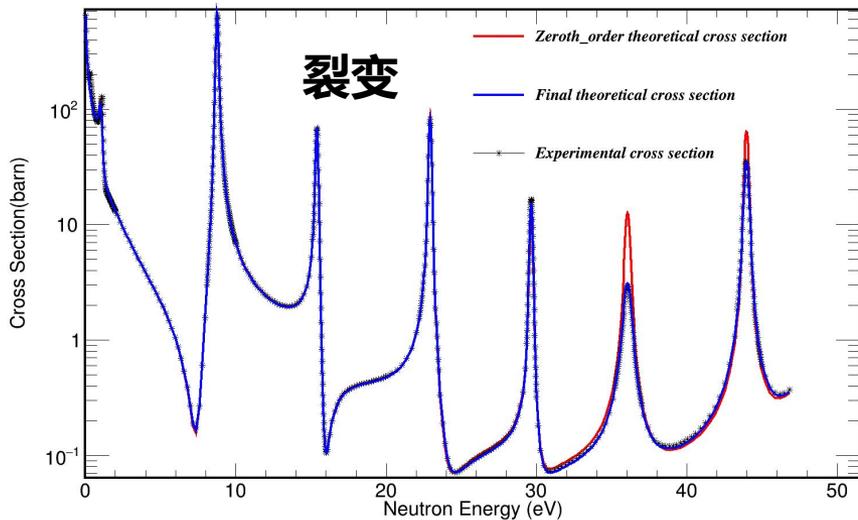
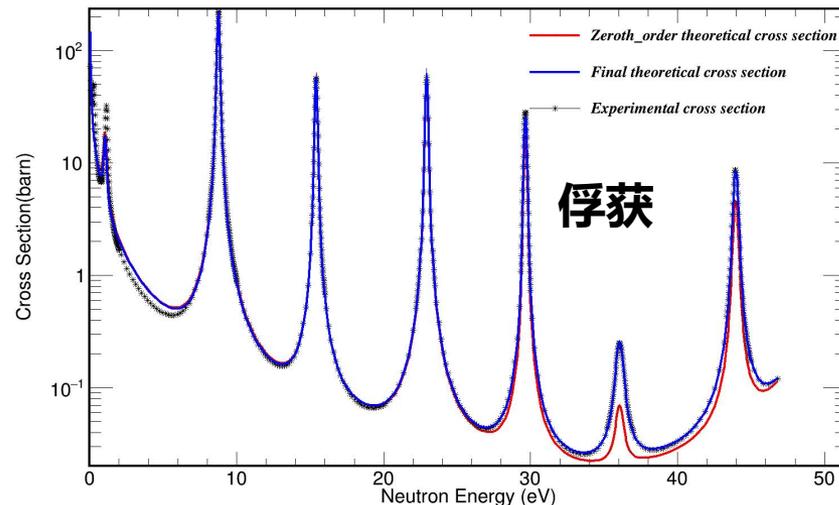
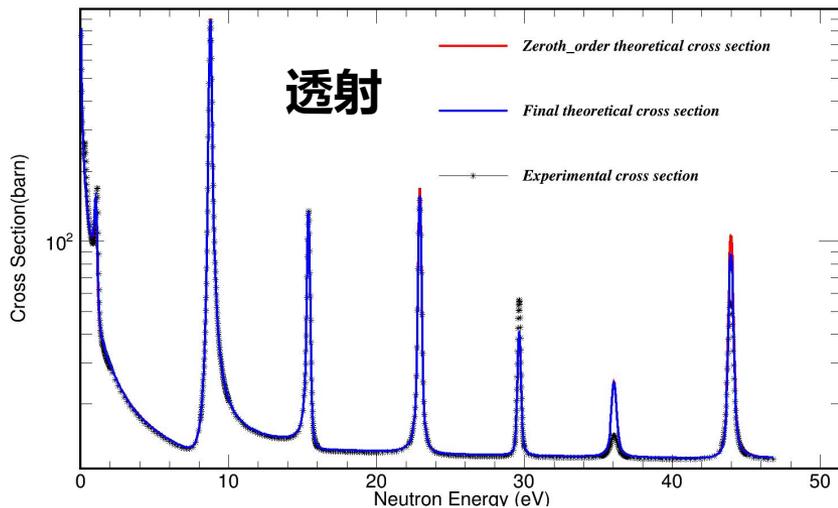
分别对应中子裂变、俘获和透射（全截面）的计算。非贝叶斯拟合分析。这一步完成后需作图比较理论数据与实验数据的区别，根据实际情况调整共振参数（eyeball），反复进行多次操作。

第二步：在第一步基础上，依次对透射、裂变、俘获数据进行贝叶斯拟合，通过参数变换标志进行参数调节（共振能量，中子宽度，伽马宽度，裂变宽度）。



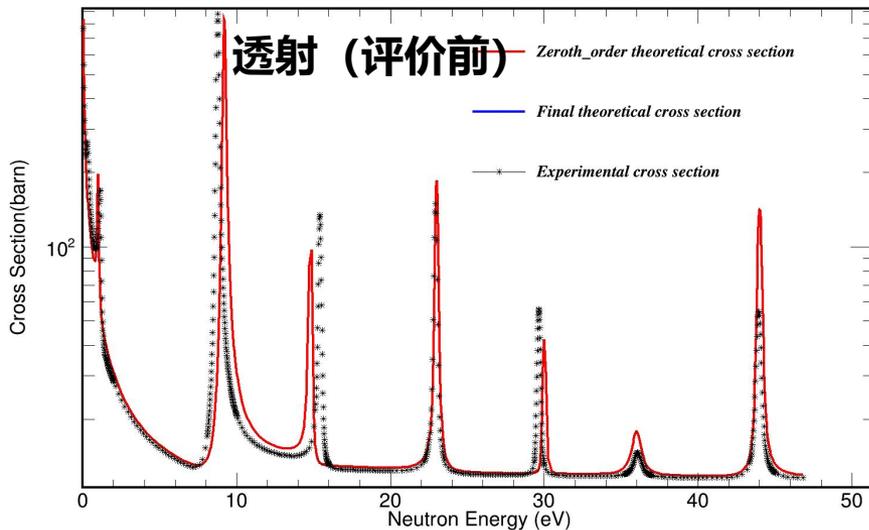
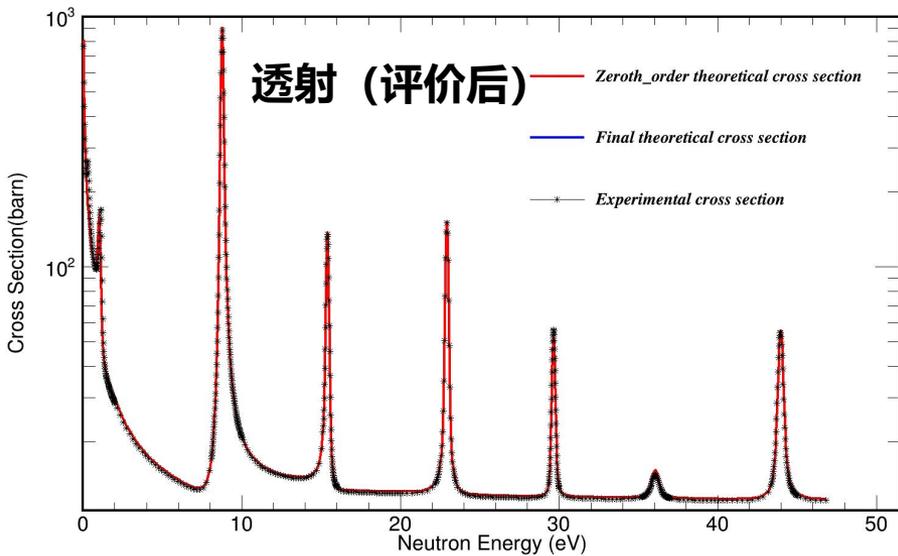
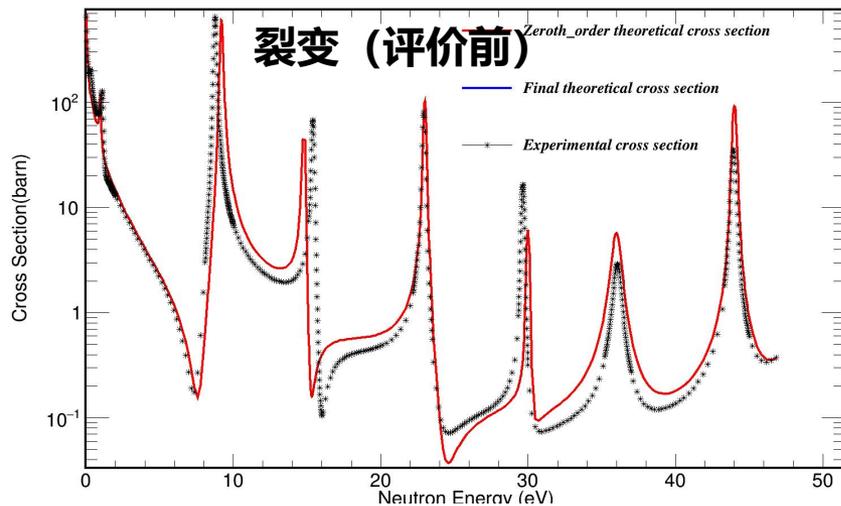
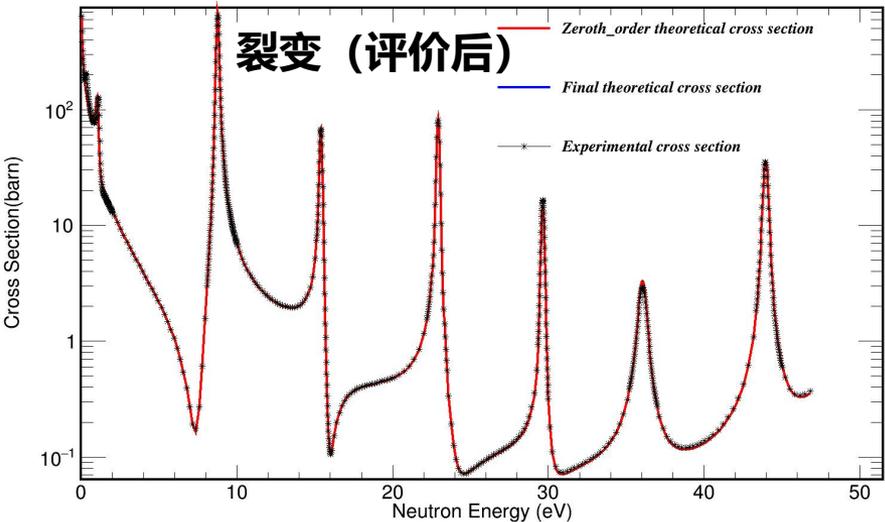
区别于第一步，这一步为贝叶斯拟合，即参数调整由程序完成。同样，需作图比较两者之间的区别，并用程序输出的参数作为输入，进行多次拟合。

第三步：在前两步的基础上，通过贝叶斯产生协方差矩阵，并将协方差作为输入重新进行贝叶斯拟合

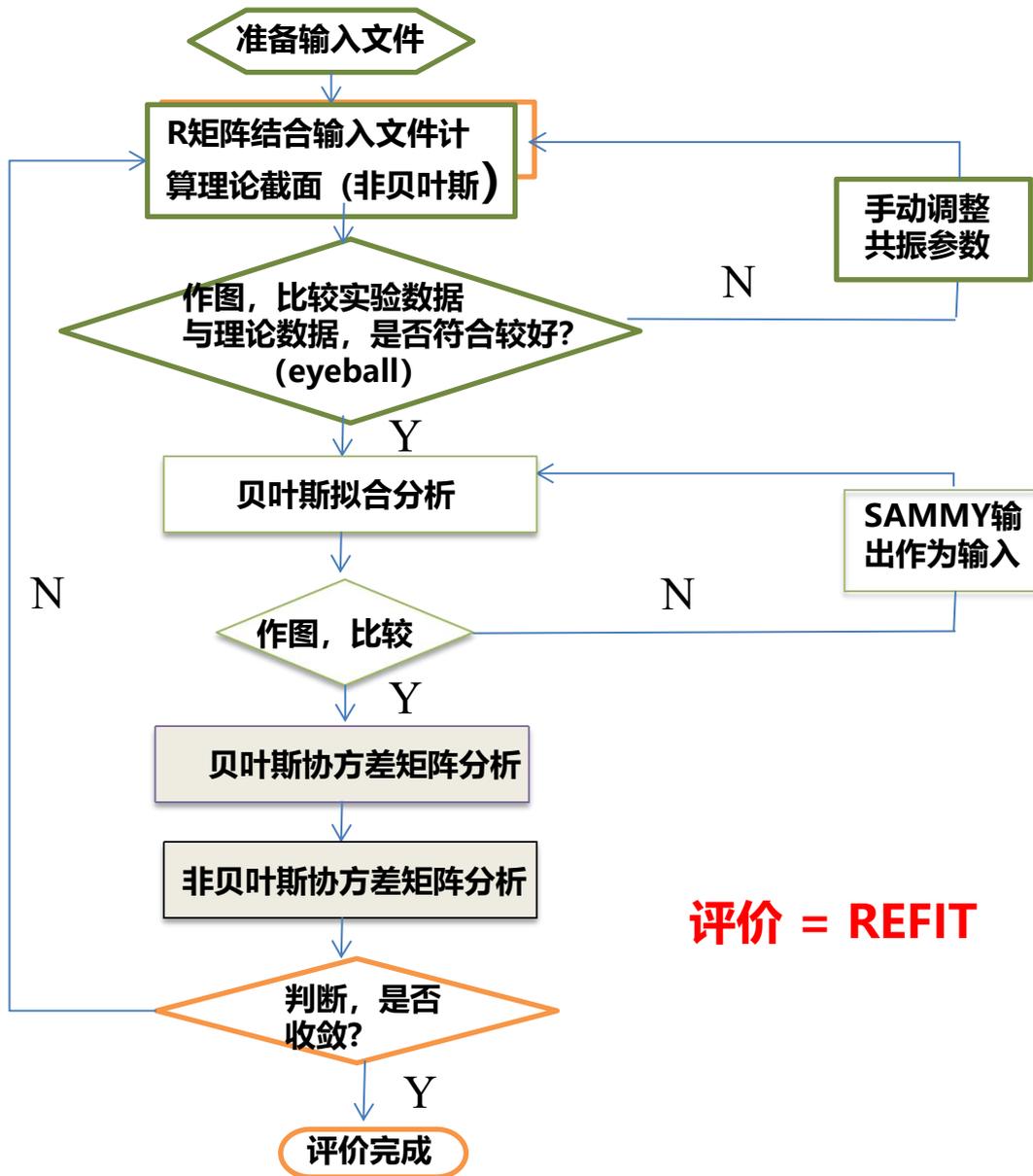


经过前两步的拟合分析，可以获得较为合理的初值 (reasonable but not great)。在此基础上，依次拟合产生协方差数据，顺序：透射-裂变-俘获。在这一步，不同反应截面通过协方差矩阵联系在一起

📖 第四步：检查，结合协方差矩阵进行非贝叶斯分析，比较。评价完成或返回第一步。



## IHEP 总结：SAMMY核数据评价的流程（结合说明书、例子ex022以及可查的数据）



**评价 = REFIT**

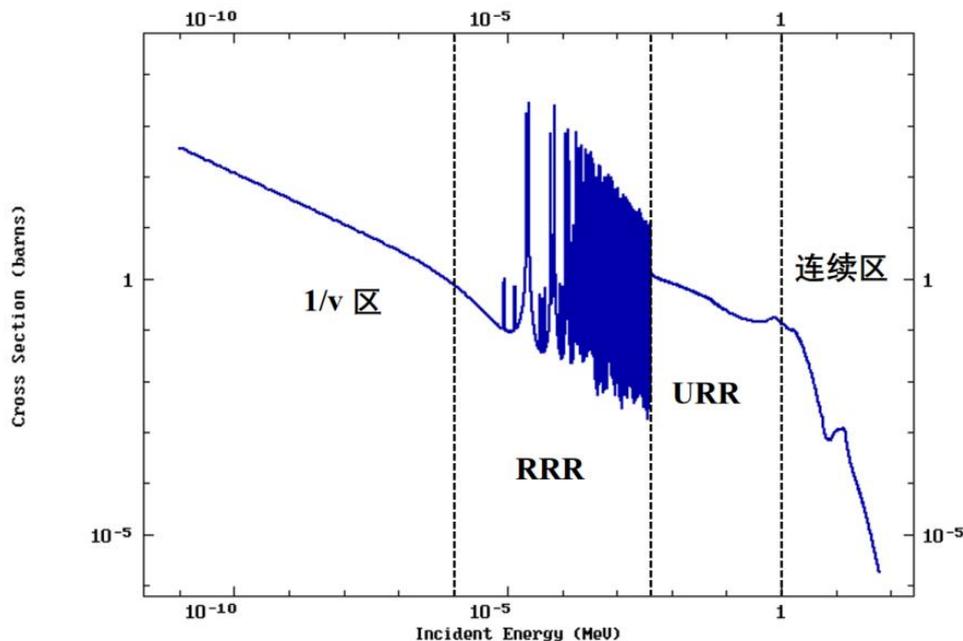
**Step1:** 准备的数据应包括R矩阵计算理论截面所需的信息，以及需要修正的实验相关信息。这一步程序不做理论与实验的拟合。手动调整共振参数（共振能量、中子宽度、伽马宽度），使理论与实验符合较好。

**Step2:** 对不同反应类型的理论数据和实验数据依次进行贝叶斯拟合。参数调整由程序完成，可以将一次拟合的结果作为下一次拟合的输入。

**Step3:** 不同类型数据通过协方差矩阵进行统一评价

**Step4:** 每一次拟合都可以输出拟合优度，用户可以自己定义收敛条件。据此判断是否重新拟合。

- 📖 对于可分辨共振区（能量较低），中子截面特性可以由一组共振参数（共振能量，中子宽度，伽马宽度，裂变宽度等）结合R矩阵理论进行描述。
- 📖 但由于共振能级间距随着能量的增大而减小，共振峰会变得十分密集，加上多普勒展宽效应和实验测量仪器的分辨率限制，共振峰相互堆叠，难以分辨。**不可分辨共振区截面是很多共振的贡献之和，每个共振能级的共振参数无法获得。**
- 📖 不可分辨共振区的中子截面：需以**统计理论为基础，用统计参数（共振参数的平均值和分布函数等）**来描述，称为伪共振参数。
- 📖 仍为R矩阵理论，但对应的SAMMY输入参数与可分辨共振区完全不同。



## 上万个共振峰相互堆叠的平均截面

$$\langle \sigma_{cc'} \rangle = \pi \lambda_c^2 g_c \langle (\delta_{cc'} - U_{cc'})^2 \rangle$$

**不可分辨共振区描述截面的参数区别于可分辨共振区，包括：**

- 中子强度函数
- 平均俘获宽度
- 平均能级间距等

参数	可分辨共振区 (RRR)	不可分辨共振区(URR)
测量靶的本征参数	相对原子质量, R矩阵形式的匹配半径, 样品厚度, 基态自旋和宇称等	相对原子质量, R矩阵形式的匹配半径, 结合能, 对能, 不同激发态对应的激发能, 自旋, 宇称
中子与测量靶的反应道参数	道半径, 道自旋, 中子自旋, 中子与靶的相对轨道角动量, 以及不同反应道中子与靶核的耦合量子数 (自旋组信息) 等	
共振参数 (需要评价的参数)	共振能量、共振宽度 (总宽度、俘获宽度、中子宽度、裂变宽度等)、是否进行评价的标识等	不同相对轨道角动量对应的中子强度函数、平均俘获宽度、平均能级间距等 (如果裂变反应道打开, 需输入裂变参数)
实验数据	能量, 截面 (透射率、产额), 不确定度	能量, 截面 (透射率、产额), 不确定度
实验条件的修正参数	温度 (多普勒展宽效应) 靶厚 (多重散射与自吸收) 分辨率函数 (中子产生靶系统的非直线飞行, 大约30个参数)	
白光中子源相关参数	真空管长度, 脉冲时间结构等	
SAMMY程序的控制参数	拟合迭代次数、分析的最大能点数、截面数据类型、数据格式等	拟合迭代次数、分析的最大能点数、截面数据类型、数据格式等

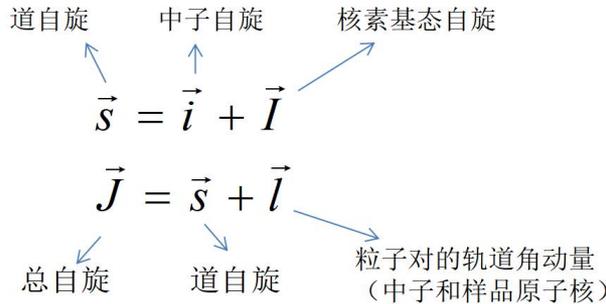
注: 进入可分辨共振区之前的平滑曲线, 需要用到“假能级”, 即对应的共振峰能量为负。

# SAMMY在Back-n上应用 ( $^{232}\text{Th}$ 和 $^{197}\text{Au}$ 的俘获截面评价)

将SAMMY应用到Back-n上的 $^{232}\text{Th}$ 俘获截面实验数据：计算理论截面所需的重要输入，包括反应道相关的自旋组信息以及共振参数

## ✓自旋组信息

### 自旋耦合

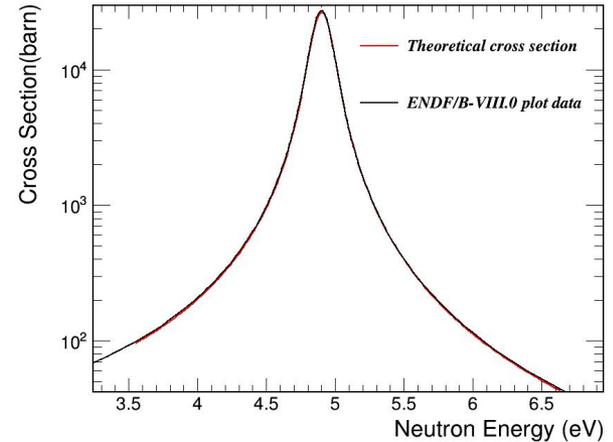


核结构库: <https://www.nndc.bnl.gov/nudat2/>

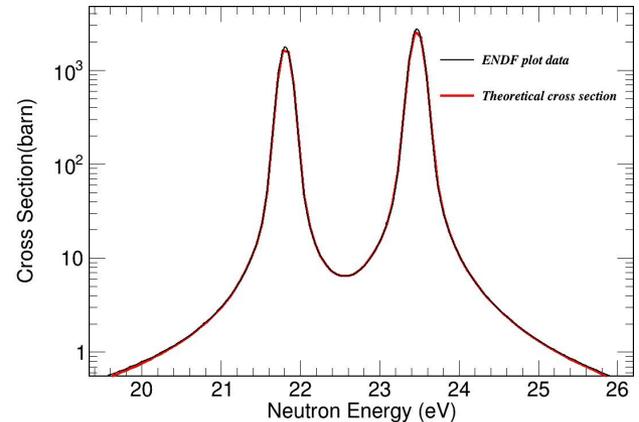
### 宇称计算

中子宇称  $\pi_n$ : +  
 核基态宇称  $\pi_I$ : 利用壳模型计算  
 轨道角动量对应的宇称  $\pi_l$ :  $(-1)^l$   
 总宇称  $\pi_J$ :  $\pi_J = \pi_n \cdot \pi_I \cdot \pi_l$

## $^{197}\text{Au}$ 第一个共振峰理论截面值



## $^{232}\text{Th}$ 在21.8 eV和 23.5 eV共振峰的理论截面值



✓共振参数：考虑到实验数据评价所得的共振参数与评价库的共振参数应该在合理的误差范围内，将ENDF/B-VIII.0评价库的参数作为共振参数初值

实验条件的修正参数：温度多普勒展宽效应；能量分辨率函数展宽效应；多重散射和自屏蔽效应。

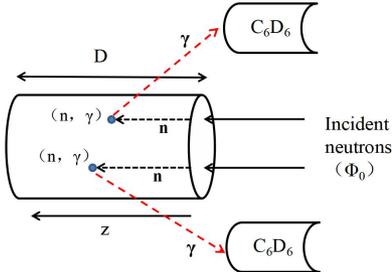
## 1. 温度多普勒展宽效应：

由靶核与中子之间的热运动引起。由于样品靶核处于不停的热运动之中，因此中子与靶核的相对运动能量与假设靶核绝对静止的情况不完全一致。

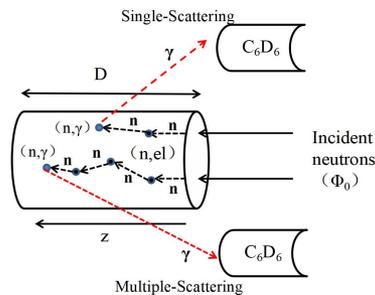
✓选择 293 K, FGM自由气体模型

## 2. 多重散射和自屏蔽效应：

自屏蔽

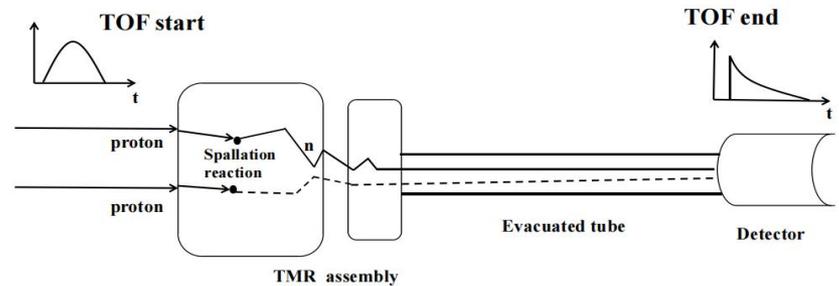


多重散射



✓<sup>232</sup>Th 样品厚度为  $1.819 \times 10^{-3}$  atoms/barn, 直径 30 mm

## 3. 分辨率函数展宽效应：



Back-n 能量分辨率函数参数

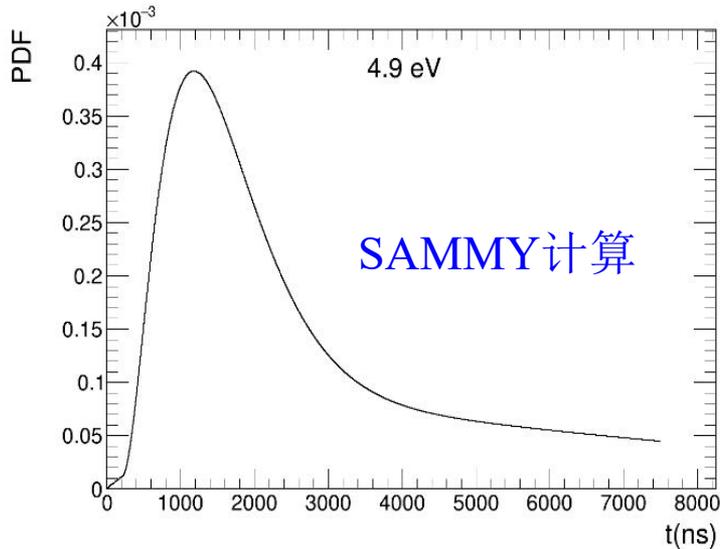
Coefficient name	Value	Coefficient name	Value
$\tau_5$	-7.7191	$a_{13}$	0.61907
$\tau_6$	-508.55	$a_{14}$	$-1.2642 \times 10^{-7}$
$\tau_7$	-0.55887	$a_{15}$	-0.61892
$A_0$	323.99	$a_{35}$	-0.00016821
$A_1$	-55.164	$a_{36}$	0.00024247
$A_2$	2.3531	$a_{37}$	0.014514
$A_3$	945.26	$a_{53}$	-0.069287
$A_4$	-0.90422	$a_{54}$	$5.2120 \times 10^{-8}$
$A_2$	1.0	$a_{55}$	0.069509
$A_4$	-1.0		



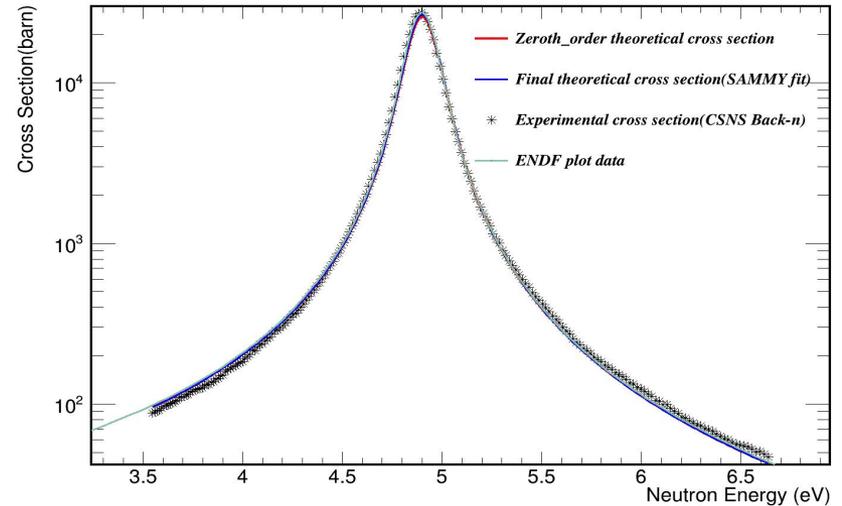
作为SAMMY输入

```
RPI RESOLUTION PARAMETERS FOLLOW
BURST1      1.000      0.000
TAU 00000      0.0      0.0      0.0      0.0      -7.7      -508.55      -0.5589
TAU
LAMB000      323.99      -55.164      2.3531      945.26      -0.90422
LAMB0
A1 00000      0.0      0.0      0.0      0.0      7.36e-4      0.00000      0.00000
A1
EXPON11111      0.0      1.0      0.000415      -1.0      0.00108
EXPON|
```

## ✓ 中子能量4.9 eV对应的延迟时间分布



## ✓ SAMMY拟合结果

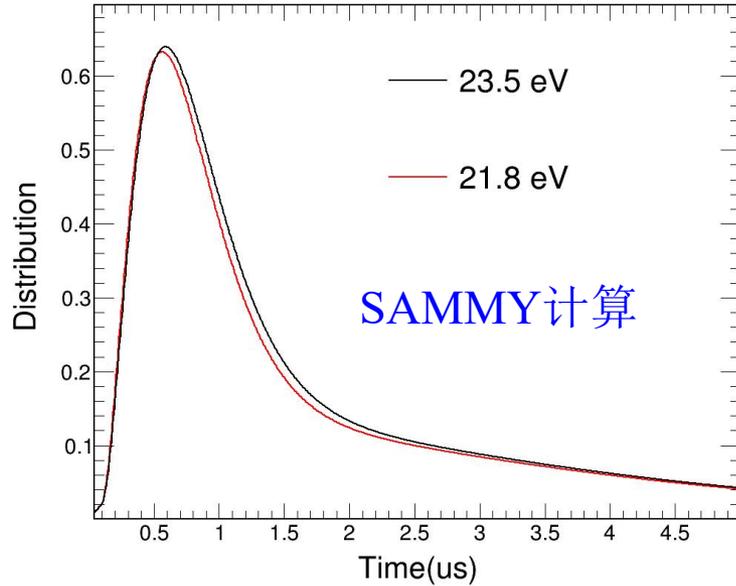


## ✓ 共振参数

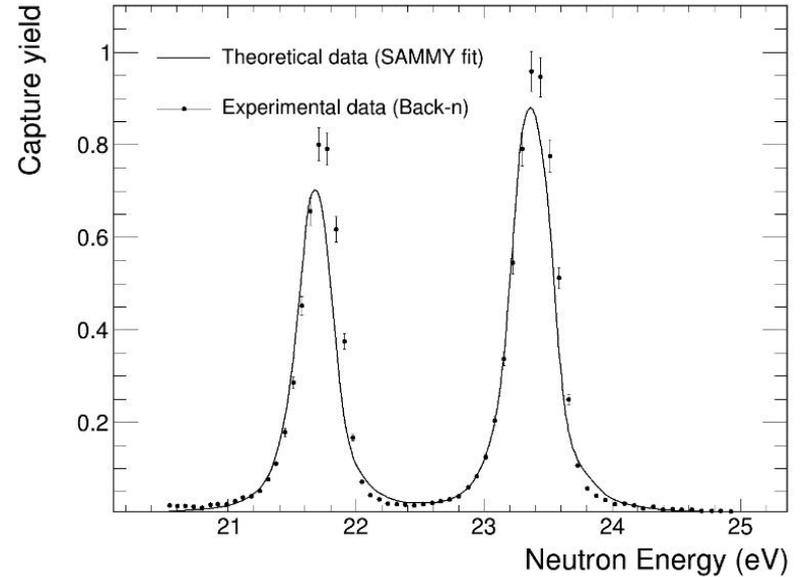
	$E_\lambda$ (eV)	$\Gamma_n$ (meV)	$\Gamma_\gamma$ (meV)
ENDF/B-VIII.0	4.900	14.960	121.400
CENDL-3.2	4.906	15.200	122.250
This work	$4.893 \pm 0.007$	$15.027 \pm 0.282$	$117.900 \pm 2.380$

**Jiang B**, Han J, Jiang W, et al. *Monte-Carlo calculations of the energy resolution function with Geant4 for analyzing the neutron capture cross section of  $^{232}\text{Th}$  measured at CSNS Back-n[J]. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A, 2021, 1013: 165677.*

## ✓ 中子能量21.8 eV和23.5 eV对应的延迟时间分布



## ✓ SAMMY拟合结果

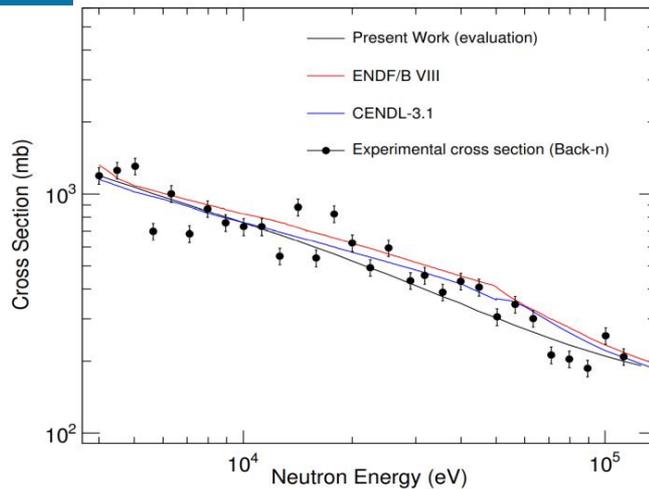


共振参数	共振能量 (eV)	中子宽度 (eV)	伽马宽度 (eV)
ENDF/B-VIII.0	21.8086	2.034	25.822
<b>This work</b>	<b>21.6655</b>	<b>1.238</b>	<b>93.687</b>
ENDF/B-VIII.0	23.4674	3.769	24.400
<b>This work</b>	<b>23.3514</b>	<b>2.878</b>	<b>50.390</b>

- ✓ 拟合过程中依次放开对每个参数的拟合限制，对各个参数逐一评价，针对每一个参数都进行多次拟合
- ✓ 评价所得的共振能量与 ENDF/B-VIII.0 评价库的参数差别较小，而伽马宽度差别较大

- 由于共振能级间距随着中子能量的增加而减小，共振峰在不可分辨共振能区变得十分密集，加上多普勒展宽效应和分辨率展宽效应的限制，共振峰相互堆叠，难以分辨

## 评价结果



- ✓ 理论基础为统计模型，通过产生虚拟的平均共振参数以描述平均反应截面
- ✓ 主要参数包括平均能级间距 $D_l$ ，中子强度函数 $S$ ，平均俘获宽度 $\langle \Gamma_\gamma \rangle$ 和有效散射半径 $R'$ 等
- ✓ 评价步骤与可分辨共振区的步骤一致，程序为SAMMY中内嵌的FITACS程序

参数	L=0 (s波)	L=1 (p波)	L=2 (d波)
中子强度函数S (n-TOF)	<b>0.87E-4</b>	<b>1.9E-4</b>	<b>0.89E-4</b>
中子强度函数S (This Work)	<b>0.87E-4</b>	<b>1.9E-4</b>	<b>1.15E-4</b>
平均俘获宽度 (n-TOF)	<b>18.8 meV</b>	<b>20.6 meV</b>	<b>18.8 meV</b>
平均俘获宽度 (This Work)	<b>23.9 meV</b>	<b>25.8 meV</b>	<b>23.9 meV</b>
平均俘获宽度 (ENDF VIII)	<b>24.3 meV</b>		

1、总结：能量分辨率函数的展宽修正是白光中子源上测量数据的关键实验条件修正，它用于中子共振截面测量实验数据分析，对确定共振峰参数十分重要。利用Geant4开展了CSNS散裂靶系统中子产生和慢化的全过程模拟，获得不同能量中子在散裂靶系统中经历的延迟时间分布以及相应的中子等效距离分布。使用中子核数据评价中广泛使用的RPI解析函数形式来拟合分布，确定了适用于Back-n装置的能量分辨率函数参数，为实验数据的能量分辨率函数展宽修正提供参考。

## 2、展望：

(1) 在已有能量分辨率函数计算结果的基础上，将双束团时间分布结构与散裂靶系统中的中子延迟时间分布进行卷积，并以自定义函数的形式嵌入到SAMMY程序中完成修正；

(2) 通过修改SAMMY的基础代码，将Back-n双束团分布的函数形式写入程序，以此来包含束团结构的影响；

(3) 结合不同的SAMMY版本，对RPI函数形式做进一步尝试和细化。