

УДК 539.122:518.5

## ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ПРИБЛИЖЕНИЯ МГНОВЕННОГО СТОЛКНОВЕНИЯ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПЕРЕНОСА МЕДЛЕННЫХ НЕЙТРОНОВ

Д. Г. Модестов  
(РФЯЦ-ВНИИТФ)

Приближение мгновенного столкновения используется для представления дифференциального сечения некогерентного неупругого рассеяния. Приводится явный вид интегрального сечения в этом приближении и описываются алгоритмы выборки параметров рассеяния, необходимые для решения задач переноса методами статистического моделирования. Даются сравнения с методикой BRAND.

### Введение

При решении задач, в которых важную роль играет перенос низкоэнергетических нейтронов, возникает необходимость описания взаимодействий этих нейтронов с веществом. При описании указанных взаимодействий в отличие от взаимодействий быстрых нейтронов, кроме учета структуры атомных ядер, дополнительно необходим учет химико-физического состояния вещества. Последнее обстоятельство сильно осложняет задачу, так как появляется зависимость дифференциальных сечений от температуры, химического состава, агрегатного состояния вещества. Одним из способов разрешения возникающих проблем является использование библиотек оцененных ядерных данных, сохраненных в формате ENDF, описание которого приводится в руководстве [1]. При использовании формата для низкоэнергетических нейтронов реакцию упругого рассеяния предлагается заменять набором реакций, описываемых в рамках формализма волнового рассеяния. Такая модель достаточно хорошо описывает взаимодействие в той энергетической области, в которой сечение упругого рассеяния практически не зависит от энергии. Однако следует все же заметить, что для резонансной области указанная модель неприменима.

В настоящей работе использование таких данных будет рассматриваться в контексте решения задач переноса методами статистического моделирования [2], которые, в свою очередь, требуют вычисления интегрального сечения реакции и построения алгоритма выборки параметров рассеяния из распределения, пропорционального дифференциальному сечению. При этом среди реакций, характерных для тепловых нейтронов, пожалуй, наиболее сложной для реализации является реакция некогерентного неупругого рассеяния. Ее дифференциальное сечение рассеяния на конкретном элементе в рамках формата ENDF выражается через закон рассеяния, который представляется в виде функции от приведенного переданного импульса и приведенной переданной энергии. При этом для разных элементов могут быть рекомендованы различные типы законов рассеяния.

Формат ENDF предлагает четыре различных представления закона рассеяния данной реакции: три аналитических — приближение максвелловского одноатомного идеального газа, диффузионное приближение, приближение мгновенного столкновения — и одно табличное.

Однако в библиотеках данных, рекомендованных МАГАТЭ (IAEA Nuclear Data Centre, <http://www-nds.iaea.org>) для описания рассеяния нейтронов в различных замедлителях, диффузионное приближение отсутствует, и потому его рассмотрение не представляет практического интереса. Для приближения максвелловского одноатомного идеального газа при использовании его в рамках метода статистического моделирования существуют более общие алгоритмы, в частности предложенные в работе [3], которые позволяют использовать это приближение и в резонансной

энергетической области. В табличном представлении закон рассеяния задается табличной функцией на компактной области изменения параметров рассеяния и законом рассеяния в приближении мгновенного столкновения на всем оставшемся пространстве. При этом интегрирование табличной функции и алгоритм выборки из табличного распределения достаточно тривиальны и их описание не представляет интереса.

В связи с вышесказанным наиболее важным представляется получение необходимых выражений и алгоритмов для закона рассеяния в приближении мгновенного столкновения (short-collision-time (SCT) approximation). Обсуждение используемого термина приводится в [4]. Однако в руководстве [1] отсутствуют вид интегрального сечения и алгоритмы выборки параметров рассеяния, необходимые для решения задач переноса методами статистического моделирования. Один из вариантов их реализации описан в настоящей работе.

### Описание некогерентного неупругого рассеяния

В формате ENDF дифференциальное сечение некогерентного неупругого рассеяния задается с помощью закона рассеяния  $S(\alpha, \beta, T)$  и может быть представлено в следующем виде:

$$\frac{\partial^2 \sigma}{\partial E \partial \mu}(E_0 \rightarrow E, \mu | T) = \frac{\sigma_b}{2T} \sqrt{\frac{E}{E_0}} e^{-\beta/2} S(\alpha, \beta, T), \quad (1)$$

где  $E$  — энергия рассеянного нейтрона;  $\mu$  — косинус угла рассеяния;  $E_0$  — энергия налетающего нейтрона;  $T$  — температура в энергетических единицах;  $\sigma_b$  — сечение упругого рассеяния на связанном атоме (в рамках используемой модели оно считается постоянным);  $\alpha = \frac{E_0 + E - 2\mu\sqrt{E_0 E}}{AT}$  — квадрат приведенного переданного импульса,  $A$  — масса атома в нейтронных единицах;  $\beta = \frac{E - E_0}{T}$  — приведенная переданная энергия.

Здесь будет рассматриваться закон рассеяния в приближении мгновенного взаимодействия, который согласно [4] может быть представлен следующим образом:

$$S^{\text{SCT}}(\alpha, \beta, T) = \sqrt{\frac{\lambda}{\pi\alpha}} e^{-\frac{\lambda}{\alpha}(\alpha - |\beta|)^2 - \frac{|\beta|}{2}}, \quad (2)$$

где  $\lambda = \frac{T}{4T_{\text{эф}}(T)}$ ,  $T_{\text{эф}}(T)$  — некоторая эффективная температура, определяемая характером обобщенного спектра нормальных колебаний, соответствующего данному веществу. Хотя параметр  $\lambda$  является функцией температуры, всюду в дальнейшем, чтобы избежать излишне громоздких выражений, эта зависимость явно указываться не будет. Здесь следует заметить, что всегда выполняется соотношение  $T_{\text{эф}}(T) > T$  и, следовательно,

$$\lambda < \frac{1}{4}. \quad (3)$$

Закон рассеяния (2) может использоваться либо сам по себе, либо как асимптотическая часть закона рассеяния в табличном представлении:

$$S^{\text{T}}(\alpha, \beta, T) = \begin{cases} S_0^{\text{T}}(\alpha, \beta, T), & (\alpha, \beta) \in [0, \alpha_{\text{max}}] \times [\beta_{\text{min}}, \beta_{\text{max}}]; \\ S^{\text{SCT}}(\alpha, \beta, T), & (\alpha, \beta) \notin [0, \alpha_{\text{max}}] \times [\beta_{\text{min}}, \beta_{\text{max}}], \end{cases} \quad (4)$$

где  $S_0^{\text{T}}(\alpha, \beta, T)$  — некоторая табличная функция, а для граничных значений выполняются следующие условия:  $\beta_{\text{min}} < 0$ ,  $\beta_{\text{max}} > 0$ ,  $\alpha_{\text{max}} > 0$ .

Не конкретизируя явного вида закона рассеяния и исходя из (1), а также учитывая явный вид якобиана преобразования  $\frac{\partial(E, \mu)}{\partial(\alpha, \beta)} = \frac{AT^2}{2\sqrt{E_0 E}}$ , можно получить выражение для интегрального сечения рассматриваемой реакции, которое удобно записать следующим образом:

$$\sigma(E_0|T) = \sigma_b \frac{A_n T}{4E_0} \int_{-\varepsilon}^{\infty} e^{-\beta/2} d\beta \int_{\alpha^-}^{\alpha^+} S(\alpha, \beta, T) d\alpha, \quad (5)$$

$$\alpha^{\pm} = \frac{(\sqrt{\varepsilon + \beta} \pm \sqrt{\varepsilon})^2}{A}, \quad (6)$$

где  $\varepsilon = E_0/T$ .

Для описания алгоритма интегрирования удобно ввести обозначение для внутреннего интеграла:

$$G(\beta, E_0, T) = \int_{\alpha^-}^{\alpha^+} S(\alpha, \beta, T) d\alpha, \quad (7)$$

с использованием которого сечение (5) можно представить в следующем виде:

$$\sigma(E_0|T) = \sigma_b \frac{A_n T}{4E_0} \int_{-\varepsilon}^{\infty} e^{-\beta/2} G(\beta, E_0, T) d\beta. \quad (8)$$

Для дальнейших рассуждений необходимо из табличного представления выделить объекты, связанные с приближением мгновенного взаимодействия.

В табличном представлении интеграл (7) может быть записан в следующем виде:

$$G^T(\beta, E_0, T) = \begin{cases} G_1(\alpha^-, \alpha^+, \beta, T), & (\beta \notin [\beta_{\min}, \beta_{\max}]) \vee (\alpha^- > \alpha_{\max}); \\ G_2(\alpha^-, \alpha^+, \beta, T), & (\beta \in [\beta_{\min}, \beta_{\max}]) \wedge (\alpha^- \leq \alpha_{\max} \leq \alpha^+); \\ G_3(\alpha^-, \alpha^+, \beta, T), & (\beta \in [\beta_{\min}, \beta_{\max}]) \wedge (\alpha^+ < \alpha_{\max}), \end{cases}$$

где

$$\begin{aligned} G_1(\alpha^-, \alpha^+, \beta, T) &= e^{-|\beta|/2} G^{\text{SCT}}(\alpha^-, \alpha^+, \beta, T); \\ G_2(\alpha^-, \alpha^+, \beta, T) &= G_0^T(\alpha^-, \alpha_{\max}, \beta, T) + e^{-|\beta|/2} \tilde{G}^{\text{SCT}}(\alpha_{\max}, \alpha^+, \beta, T); \\ G_3(\alpha^-, \alpha^+, \beta, T) &= G_0^T(\alpha^-, \alpha^+, \beta, T); \\ G_0^T(\alpha^{\min}, \alpha^{\max}, \beta, T) &= \int_{\alpha^{\min}}^{\alpha^{\max}} S_0^T(\alpha, \beta, T) d\alpha; \\ \tilde{G}^{\text{SCT}}(\alpha^{\min}, \alpha^{\max}, \beta, T) &= \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}} \int_{\alpha^{\min}}^{\alpha^{\max}} e^{-\frac{\lambda}{\alpha}(\alpha-\beta)^2} \frac{d\alpha}{\sqrt{\alpha}}. \end{aligned} \quad (9)$$

Само сечение рассеяния в табличном представлении имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} \sigma^T(E_0|T) &= \sigma_b \frac{AT}{4E_0} \int_{-\varepsilon}^{\infty} e^{-\beta/2} G^T(\beta, E_0, T) d\beta = \begin{cases} I_1(E_0, T), & \varepsilon \leq -\beta_{\min}; \\ I_2(E_0, T), & \varepsilon > -\beta_{\min}, \end{cases} \\ I_1(E_0, T) &= I^T(-\varepsilon, \beta_{\max}, E_0, T) + I_+^{\text{SCT}}(\beta_{\max}, E_0, T), \\ I_2(E_0, T) &= I_-^{\text{SCT}}(\beta_{\min}, E_0, T) + I^T(\beta_{\min}, \beta_{\max}, E_0, T) + I_+^{\text{SCT}}(\beta_{\max}, E_0, T), \end{aligned} \quad (10)$$

где с учетом (2), (5), (6) и (9) использованы обозначения

$$I^T(\beta^-, \beta^+, E_0, T) = \int_{\beta^-}^{\beta^+} e^{-\beta/2} G^T(\beta, E_0, T) d\beta;$$

$$I_-^{\text{SCT}}(\beta_0, E_0, T) = \int_{-\varepsilon}^{\beta_0} G_0^{\text{SCT}}(\beta, E_0, T) d\beta; \quad (11)$$

$$I_+^{\text{SCT}}(\beta_0, E_0, T) = \int_{\beta_0}^{\infty} e^{-\beta} G_0^{\text{SCT}}(\beta, E_0, T) d\beta; \quad (12)$$

$$G_0^{\text{SCT}}(\beta, E_0, T) = \tilde{G}^{\text{SCT}}(\alpha^-, \alpha^+, |\beta|, T). \quad (13)$$

В то же время интегральное сечение в приближении мгновенного столкновения с использованием (11) и (12) может быть вычислено следующим образом:

$$\sigma^{\text{SCT}}(E_0|T) = \sigma_b \frac{AT}{4E_0} (I_-^{\text{SCT}}(0, E_0, T) + I_+^{\text{SCT}}(0, E_0, T)). \quad (14)$$

Следует заметить, что в рамках формата ENDF для представления табличного закона рассеяния  $S_0^T(\alpha, \beta, T)$  задается сетка по параметру  $\beta$  и для каждого узла этой сетки задается функция параметра  $\alpha$ . Исходя из такого представления, плотность функции распределения параметров рассеяния удобно записывать в виде (не указывая явно  $E_0$  и  $T$ )

$$f(\alpha, \beta) = f_\beta(\beta) f_\alpha(\alpha|\beta). \quad (15)$$

С учетом (1), (5) и (7) связь этих плотностей с законом рассеяния дается следующими выражениями:

$$f_\beta(\beta) \sim e^{-\beta/2} G(\beta, E_0, T); \quad (16)$$

$$f_\alpha(\alpha|\beta) \sim S(\alpha, \beta, T). \quad (17)$$

Таким образом, для использования приближения непрерывного замедления необходимо описать вычисление интегралов (9), (11) и (12), а также построить алгоритмы выборки параметра  $\beta$  из распределения с плотностью (16) и параметра  $\alpha$  из распределения с плотностью (17).

### Вычисление интегральных характеристик

Наиболее просто вычисляется значение внутреннего интеграла (9). Для этого можно воспользоваться следующей первообразной:

$$\sqrt{\frac{\lambda}{\pi}} \int e^{-\frac{\lambda}{\alpha}(\alpha-\beta)^2} \frac{d\alpha}{\sqrt{\alpha}} = \frac{1}{2} \left( e^{4\lambda\beta} \operatorname{erf} \left( \sqrt{\frac{\lambda}{\alpha}} (\alpha + \beta) \right)^* + \operatorname{erf} \left( \sqrt{\frac{\lambda}{\alpha}} (\alpha - \beta) \right) \right). \quad (18)$$

Однако здесь имеется одна тонкость. При подстановке этой первообразной в выражение (9) возникает необходимость вычисления разности интегралов ошибок, в том числе и умноженных на значение показательной функции. В том случае, если аргументы этих функций близки между собой и велики по абсолютной величине, результат вычислений получается с большой численной погрешностью, связанной с конечностью представления чисел на ЭВМ. Для того чтобы избежать подобных ошибок, удобно определить следующую функцию:

$$\operatorname{derf}(x, y, z) \equiv (\operatorname{erf}(x) - \operatorname{erf}(y)) e^z. \quad (19)$$

Алгоритм вычисления этой функции здесь рассматриваться не будет; следует только заметить, что его построение, учитывающее сделанные выше замечания, не вызывает особых проблем. Кроме необходимости применения данной функции в расчетах, ее использование в выражениях позволяет несколько снизить громоздкость последних.

\*Определение функции  $\operatorname{erf}(x)$  см. на с. 49.

Учитывая (2), (18) и (19), для функции (9) имеем следующее представление:

$$\begin{aligned} \tilde{G}^{\text{SCT}}(\alpha^{\min}, \alpha^{\max}, \beta, T) = & \frac{1}{2} \text{derf} \left( \sqrt{\frac{\lambda}{\alpha^{\max}}} (\alpha^{\max} + \beta), \sqrt{\frac{\lambda}{\alpha^{\min}}} (\alpha^{\min} + \beta), 4\lambda\beta \right) + \\ & + \frac{1}{2} \text{derf} \left( \sqrt{\frac{\lambda}{\alpha^{\max}}} (\alpha^{\max} - \beta), \sqrt{\frac{\lambda}{\alpha^{\min}}} (\alpha^{\min} - \beta), 0 \right). \end{aligned} \quad (20)$$

Для получения величин (11) и (12) необходимо проинтегрировать данную функцию по параметру  $\beta$ , подставляя согласно (13) в качестве первых двух аргументов значения  $\alpha^-$  и  $\alpha^+$ , определяемые выражением (6). При этом рассмотрение удобно провести для отрицательных и положительных значений  $\beta$  в отдельности.

Можно показать, что в области  $\beta \leq 0$  с учетом (6) и (20) функция (13) имеет следующее представление:

$$\begin{aligned} G_0^{\text{SCT}}(\beta, E_0, T) = & \frac{1}{2} \text{derf} \left( -C_- \sqrt{\beta + \varepsilon} + C_+ \sqrt{\varepsilon}, C_- \sqrt{\beta + \varepsilon} + C_+ \sqrt{\varepsilon}, -4\lambda\beta \right) + \\ & + \frac{1}{2} \text{derf} \left( C_+ \sqrt{\beta + \varepsilon} - C_- \sqrt{\varepsilon}, -C_+ \sqrt{\beta + \varepsilon} - C_- \sqrt{\varepsilon}, 0 \right), \end{aligned} \quad (21)$$

где

$$C_{\pm} = \sqrt{\frac{\lambda}{A}} (A \pm 1). \quad (22)$$

Для интегрирования (21) удобно найти первообразные от функций, содержащих интегралы ошибок:

$$\begin{aligned} \int \text{erf} \left( C_1 \sqrt{\beta + \varepsilon} + C_2 \sqrt{\varepsilon} \right) d\beta = \\ = \left( \beta + \varepsilon - \frac{C_2^2 \varepsilon + \frac{1}{2}}{C_1^2} \right) \text{erf} \left( C_1 \sqrt{\beta + \varepsilon} + C_2 \sqrt{\varepsilon} \right) + \frac{C_1 \sqrt{\beta + \varepsilon} - C_2 \sqrt{\varepsilon}}{C_1^2 \sqrt{\pi}} e^{-(C_1 \sqrt{\beta + \varepsilon} + C_2 \sqrt{\varepsilon})^2}; \end{aligned} \quad (23)$$

$$\begin{aligned} \int e^{-\omega\beta} \text{erf} \left( C_1 \sqrt{\beta + \varepsilon} + C_2 \sqrt{\varepsilon} \right) d\beta = \\ = \frac{1}{\omega} \left( \frac{C_1 e^{\omega\varepsilon \left(1 - \frac{C_2^2}{C_1^2 + \omega}\right)}}{\sqrt{C_1^2 + \omega}} \text{erf} \left( \sqrt{C_1^2 + \omega} \sqrt{\beta + \varepsilon} + \frac{C_1 C_2 \sqrt{\varepsilon}}{\sqrt{C_1^2 + \omega}} \right) - e^{-\omega\beta} \text{erf} \left( C_1 \sqrt{\beta + \varepsilon} + C_2 \sqrt{\varepsilon} \right) \right). \end{aligned} \quad (24)$$

Учитывая эти выражения, удобно также определить следующие функции:

$$dH_0(\beta, \varepsilon, C_1, C_2) = \left( \beta + \varepsilon - \frac{C_2^2 \varepsilon + \frac{1}{2}}{C_1^2} \right) \text{derf}(\xi_1, \xi_2, 0) + \frac{\xi_1 e^{-\xi_2^2} - \xi_2 e^{-\xi_1^2}}{C_1^2 \sqrt{\pi}}, \quad (25)$$

где  $\xi_1 = C_1 \sqrt{\beta + \varepsilon} + C_2 \sqrt{\varepsilon}$ ;  $\xi_2 = -C_1 \sqrt{\beta + \varepsilon} + C_2 \sqrt{\varepsilon}$ , а также

$$dH_1(\beta, \varepsilon, C_1, C_2, s, \omega) = \frac{\rho}{\omega} \text{derf}(x_1 + y_1, s(y_1 - x_1), \gamma) - \frac{1}{\omega} \text{derf}(x_2 + y_2, s(y_2 - x_2), -\omega\beta), \quad (26)$$

где  $\rho = \frac{C_1}{\sqrt{C_1^2 + \omega}}$ ;  $x_1 = \sqrt{C_1^2 + \omega} \sqrt{\beta + \varepsilon}$ ;  $y_1 = \frac{C_1 C_2 \sqrt{\varepsilon}}{\sqrt{C_1^2 + \omega}}$ ;  $x_2 = C_1 \sqrt{\beta + \varepsilon}$ ;  $y_2 = C_2 \sqrt{\varepsilon}$ ;  $\gamma = \omega\varepsilon \left(1 - \frac{C_2^2}{C_1^2 + \omega}\right)$ .

Как можно видеть, для этих функций справедливы следующие соотношения:

$$dH_0(-\varepsilon, \varepsilon, C_1, C_2) = 0; \quad (27)$$

$$dH_1(-\varepsilon, \varepsilon, C_1, C_2, 1, \omega) = 0. \quad (28)$$

Таким образом, с учетом (27) и (28) правая часть (11) равна значению первообразной (21) на верхнем пределе интегрирования и

$$I_-^{\text{SCT}}(\beta_0, E_0, T) = \frac{1}{2} \left( dH_1(\beta_0, \varepsilon, -C_-, C_+, 1, 4\lambda) + dH_0(\beta_0, \varepsilon, C_+, -C_-) \right). \quad (29)$$

В справедливости этого выражения можно убедиться, дифференцируя по параметру  $\beta_0$  либо подставляя в него (25) и (26) и сравнивая с первообразной (21) с учетом (23) и (24).

Аналогичным образом, учитывая определения (6), (20) и (22), можно показать, что в области  $\beta \geq 0$  функция (13) имеет следующее представление:

$$G_0^{\text{SCT}}(\beta, E_0, T) = \frac{1}{2} \text{derf} \left( C_+ \sqrt{\beta + \varepsilon} - C_- \sqrt{\varepsilon}, C_+ \sqrt{\beta + \varepsilon} + C_- \sqrt{\varepsilon}, 4\lambda\beta \right) + \frac{1}{2} \text{derf} \left( -C_- \sqrt{\beta + \varepsilon} + C_+ \sqrt{\varepsilon}, -C_- \sqrt{\beta + \varepsilon} - C_+ \sqrt{\varepsilon}, 0 \right). \quad (30)$$

Следует заметить, что данное выражение при  $\beta = 0$  совпадает с (21), что оправдывает использование нестрогого неравенства при определении области.

Интеграл, стоящий в правой части (12), аналогично предыдущему случаю можно выразить как разность первообразных функции  $e^{-\beta} G_0^{\text{SCT}}(\beta, E_0, T)$ . Поскольку при этом

$$\lim_{\beta \rightarrow +\infty} dH_1(\beta, \varepsilon, C_1, C_2, s, \omega) = 0,$$

значение искомого интеграла будет равняться значению первообразной на нижнем пределе интегрирования, взятому с обратным знаком. Ее выражение через функцию (26) может быть представлено следующим образом:

$$I_+^{\text{SCT}}(\beta_0, E_0, T) = \frac{1}{2} \left( dH_1(\beta_0, \varepsilon, C_+, C_-, -1, 1 - 4\lambda) + dH_1(\beta_0, \varepsilon, -C_-, -C_+, -1, 1) \right), \quad (31)$$

в чем легко убедиться, дифференцируя (31) по параметру  $\beta_0$ , либо сравнивая (31) с первообразной (30), используя соотношение (24).

### Выборка параметров рассеяния

Для моделирования взаимодействия, кроме вычисления интегрального сечения, необходимо также разработать процедуру выборки параметров рассеянного нейтрона. Следует заметить, что при моделировании переноса нейтронов может понадобиться как выборка параметра квадрата приведенного переданного импульса  $\alpha$  при заданных значении приведенной энергии  $\beta$  и интервале изменения  $\alpha$ , необходимая при использовании табличного закона рассеяния (4), так и выборка обоих параметров рассеяния при заданном интервале изменения  $\beta$ , которая, кроме табличного, необходима и при использовании закона рассеяния в приближении мгновенного столкновения (2). Учитывая эти обстоятельства, а также вид представления плотности распределения (15), удобно реализовать два алгоритма: 1) выборки  $\alpha$  при заданном значении  $\beta$ ; 2) выборки энергии  $E$  и угла рассеяния  $\mu$ . При этом второй алгоритм состоит из выборки  $\beta$ , последующей выборки  $\alpha$  по первому алгоритму, вычисления  $E$  и  $\mu$  в соответствии с определениями, используемыми в выражении (1).

Плотность функции распределения  $\alpha$  на интервале  $(\alpha_{\min}, \alpha_{\max})$  имеет вид

$$f_\alpha(\alpha|\beta, T) = \frac{1}{\tilde{G}^{\text{SCT}}(\alpha^{\min}, \alpha^{\max}, |\beta|, T)} \sqrt{\frac{\lambda}{\pi\alpha}} e^{-\frac{\lambda}{\alpha}(\alpha-|\beta|)^2}, \quad (32)$$

который получается в результате подстановки (2) в (17) и учета (9) для нормировки.

Для построения эффективной процедуры выборки удобно перейти от переменной  $\alpha$  к переменной

$$z = \frac{\lambda}{\alpha} (\alpha - |\beta|)^2. \quad (33)$$

Разрешая это уравнение относительно  $\alpha$ , можно получить при  $\beta \neq 0$  два корня в зависимости от  $z$  (зависимость от  $\lambda$  и  $\beta$  для простоты явно указываться не будет):

$$\tilde{\alpha}(z, s) = |\beta| + \frac{1}{2\lambda} \left( z + s \sqrt{z^2 + 4\lambda |\beta| z} \right), \quad (34)$$

где  $s$  принимает значения  $\pm 1$ . Как можно видеть, эти функции являются монотонными, а интервалы их изменения в области  $z > 0$  будут следующие:

$$\tilde{\alpha}(z, -1) \in (0, |\beta|); \quad \tilde{\alpha}(z, +1) \in (|\beta|, \infty),$$

причем  $\tilde{\alpha}(0, \pm 1) = \beta$ .

Можно заметить, что вероятностное пространство величины  $\alpha$  с плотностью (32) эквивалентно пространству, в котором  $\alpha$  принимает одно из значений  $\alpha_{\pm}$  на интервалах  $(\alpha_{\pm}^{\min}, \alpha_{\pm}^{\max})$ , определяемых как

$$(\alpha_{-}^{\min}, \alpha_{-}^{\max}) = (\alpha^{\min}, \alpha^{\max}) \cap (0, |\beta|); \quad (35)$$

$$(\alpha_{+}^{\min}, \alpha_{+}^{\max}) = (\alpha^{\min}, \alpha^{\max}) \cap (|\beta|, \infty) \quad (36)$$

с вероятностью  $p_{\pm}$  соответственно. Эти вероятности в соответствии с (32) вычисляются следующим образом:

$$p_{\pm}(\beta, T) = \int_{(\alpha_{\pm}^{\min}, \alpha_{\pm}^{\max})} f(\alpha|\beta, T) d\alpha = \frac{\tilde{G}^{\text{SCT}}(\alpha_{\pm}^{\min}, \alpha_{\pm}^{\max}, |\beta|, T)}{\tilde{G}^{\text{SCT}}(\alpha^{\min}, \alpha^{\max}, |\beta|, T)}.$$

Следует заметить, что если интервал (35) или (36) пуст, то вероятность попадания в данный интервал равна нулю и соответствующие величины не имеют смысла.

Каждая из величин  $\alpha_{\pm}$  является случайной величиной, определенной выражением (34) с  $s = \pm 1$  на вероятностном пространстве с множеством элементарных событий, совпадающим с интервалом  $(z_{\pm}^{\min}, z_{\pm}^{\max})$ , который получается преобразованием (33) соответствующего интервала  $(\alpha_{\pm}^{\min}, \alpha_{\pm}^{\max})$ . Вероятностная мера задается плотностью функции распределения, которая согласно (32) и (34) имеет вид

$$\tilde{f}_{\pm}(z) = \frac{1}{p_{\pm}(\beta, T)} \frac{e^{-z}}{\sqrt{\pi z}} w\left(\frac{z}{\lambda |\beta|}, \pm 1\right), \quad (37)$$

где

$$w(\zeta, s) = \sqrt{\frac{2 + \zeta + s \sqrt{\zeta^2 + 4\zeta}}{2\zeta + 8}}. \quad (38)$$

Для реализации самого алгоритма розыгрыша удобно использовать метод отказов [2] с  $e^{-z}/\sqrt{\pi z}$  в качестве плотности базового распределения. Такой подход требует вычисления верхней границы значений функции  $w$  на рассматриваемом интервале. С учетом монотонности этих функций и определения (33) данная величина может быть вычислена следующим образом:

$$\sup_{z \in (z_{\pm}^{\min}, z_{\pm}^{\max})} w\left(\frac{z}{\lambda |\beta|}, \pm 1\right) = w\left(\frac{(\alpha_{\pm}^{\max} - |\beta|)^2}{\alpha_{\pm}^{\max} |\beta|}, \pm 1\right).$$

Следует также заметить, что для разных комбинаций параметров  $\beta$ ,  $\alpha^{\min}$ ,  $\alpha^{\max}$  реализуются различные вероятностные пространства: имеющие либо только отрицательную ветвь, либо только положительную, либо обе ветви. Поэтому алгоритм выборки удобно разбить на две части: в одной

производится розыгрыш при условии нахождения параметра  $\alpha$  на одной из ветвей, в другой — розыгрыш самой ветви.

С учетом сделанных замечаний и определений алгоритм розыгрыша значения приведенного переданного импульса при условии, что он расположен на одной из ветвей ( $\alpha < |\beta|$  или  $\alpha > |\beta|$ ), будет следующим:

**Алгоритм 1.** Условная выборка  $\alpha$  на одной из ветвей.

Внешние параметры:  $\lambda, \beta, \alpha^{\min}, \alpha^{\max}, s$ .

Внутренние параметры:  $\zeta$  — случайное число, равномерно распределенное на интервале  $(0, 1)$ .

1.  $w_{\max} = w \left( \frac{(\alpha^{\max} - |\beta|)^2}{\alpha^{\max} |\beta|}, s \right)$ .
2. Вычисление  $(z^{\min}, z^{\max})$  по формуле (33).
3. Выборка  $z$  из распределения  $\frac{e^{-z}}{\sqrt{\pi z}}$ , на интервале  $(z^{\min}, z^{\max})$ .
4. Если  $w \left( \frac{z}{\lambda |\beta|}, s \right) < w_{\max} \zeta$ , то переход на шаг 3.
5.  $\alpha = \tilde{\alpha} \left( \frac{z}{\lambda |\beta|}, s \right)$ .

Общий же безусловный розыгрыш, в котором производится выбор ветви, представлен в алгоритме 2. В нем неявно используется следующее понятное ограничение:  $\alpha^{\min} < \alpha^{\max}$ .

**Алгоритм 2.** Выборка  $\alpha$ .

Внешние параметры:  $\lambda, \beta, \alpha^{\min}, \alpha^{\max}$ .

Внутренние параметры:  $\zeta$  — случайное число, равномерно распределенное на интервале  $(0, 1)$ .

1. Если  $\alpha^{\max} > |\beta|$ , то переход на шаг 3.
2. Выборка по алгоритму 1 с параметрами  $\lambda, \beta, \alpha^{\min}, \alpha^{\max}, -1$ ; выход.
3. Если  $\alpha^{\min} < |\beta|$ , то переход на шаг 5.
4. Выборка по алгоритму 1 с параметрами  $\lambda, \beta, \alpha^{\min}, \alpha^{\max}, 1$ ; выход.
5. Вычисление  $p_-$  по формуле (37).
6. Если  $p_- > \zeta$ , то переход на шаг 8.
7. Выборка по алгоритму 1 с параметрами  $\lambda, \beta, \alpha^{\max}, 1$ ; выход.
8. Выборка по алгоритму 1 с параметрами  $\lambda, \beta, \alpha^{\min}, \beta, -1$ .

Здесь необходимо сделать замечание. Хотя всюду при описании вероятностных пространств, используемых для построения алгоритма выборки, бралось условие  $\beta \neq 0$ , формальная подстановка  $\beta = 0$  приводит к тому, что  $p_- = 0$  и, следовательно, отрицательная ветвь не реализуется (всегда осуществляется переход на шаг 4 алгоритма 2). В то же время на положительной ветви  $\alpha_+ = z/\lambda$  согласно (34), а  $w \left( \frac{z}{\lambda |\beta|}, 1 \right) = 1$  согласно (38). Поэтому, исходя из (37), выборка значения  $z$  происходит из распределения с плотностью  $e^{-z}/\sqrt{\pi z}$ .

Таким образом, с учетом того, что значение  $\beta < 0$  в данном контексте нефизично, предлагаемый алгоритм может использоваться при любых допустимых  $\beta$ . Необходимо только при численной реализации во время вычисления некоторых функций явно рассматривать случаи  $\beta = 0$  и  $\alpha^{\min} = 0$ .

Для оценки возможности практического использования необходимо определить эффективность  $\Theta$  данного алгоритма. Понятие эффективности приводится в [2]. Здесь можно привести ее связь со

средним числом отказов  $N$ :  $\Theta = \frac{1}{N+1}$ . Значение этой величины для случая  $\beta \neq 0$  может быть вычислено по формуле

$$\frac{1}{\Theta} = \frac{p_-(\beta, T)}{\Theta_-} + \frac{p_+(\beta, T)}{\Theta_+} \quad (39)$$

(при  $\beta = 0, p_- = 0$  и первый член исчезает).



Здесь  $\Theta_{\pm}$  — значения эффективностей алгоритма для отрицательной и положительной ветвей. Если считать, что выборка из распределения  $e^{-z}/\sqrt{\pi z}$  имеет единичную эффективность, они могут быть вычислены следующим образом:

$$\frac{1}{\Theta_{\pm}} = \sup_{z \in (z_{\pm}^{\min}, z_{\pm}^{\max})} \frac{\rho_{\pm}(z)}{e^{-z}/\sqrt{\pi z}} = \frac{1}{p_{\pm}(\beta, T)} \sup_{z \in (z_{\pm}^{\min}, z_{\pm}^{\max})} w\left(\frac{z}{\lambda|\beta|}, \pm 1\right).$$

Подставляя это выражение в (39), можно получить

$$\frac{1}{\Theta} = \sup_{z \in (z_{-}^{\min}, z_{-}^{\max})} w\left(\frac{z}{\lambda|\beta|}, -1\right) + \sup_{z \in (z_{+}^{\min}, z_{+}^{\max})} w\left(\frac{z}{\lambda|\beta|}, +1\right).$$

Учитывая, что согласно (38) справедливы неравенства

$$w(z, -1) \leq \frac{1}{2}, \quad w(z, 1) \leq 1,$$

получаем оценку эффективности алгоритма 2 снизу:

$$\Theta \geq \frac{2}{3}. \quad (40)$$

Следует заметить, что вообще возможно повышение эффективности алгоритма 1, связанное с его усложнением. Однако, учитывая достаточно высокое значение (40), можно утверждать, что любые усложнения не приведут к заметному увеличению скорости счета, но в то же время могут вызвать увеличение накладных вычислительных расходов, которые выразятся в увеличении временных затрат. Поэтому наиболее разумным представляется, принимая во внимание вполне приемлемое значение (40), не усложнять предлагаемый алгоритм.

В том случае, когда возникает необходимость определения полного набора параметров рассеяния, предварительно должен быть определен параметр  $\beta$ . Сразу следует заметить, что при моделировании реакции неупругого некогерентного рассеяния в различных моделях для области действия приближения мгновенного взаимодействия могут реализоваться три различные ситуации:

$$1) \beta \in (-\varepsilon, \beta_0), \quad \beta_0 < 0; \quad (41)$$

$$2) \beta \in (\beta_0, \infty), \quad \beta_0 > 0; \quad (42)$$

$$3) \beta \in (-\varepsilon, \infty). \quad (43)$$

Для выборки значения  $\beta$  удобно применять метод отказов [2], который требует нахождения максимального значения плотности функции распределения. Учитывая определение (13), а также те обстоятельства (для краткости изложения они доказываться не будут), что функция  $\tilde{G}^{\text{SCT}}(\alpha^-, \alpha^+, -\beta, T)$  является возрастающей на интервале  $\beta \in (-\varepsilon, 0)$ , а функция  $\tilde{G}^{\text{SCT}}(\alpha^-, \alpha^+, \beta, T)$  — невозрастающей на интервале  $\beta \in (0, \infty)$ , можно утверждать, что

$$G_0^{\text{SCT}}(\beta, E_0, T) \leq G_0^{\text{SCT}}(\beta_0, E_0, T), \quad (44)$$

где в случаях (41) и (42) значение  $\beta_0$  совпадает с соответствующей границей интервала, а в случае (43)  $\beta_0 = 0$ . При этом для плотности функции распределения  $\beta$  в соответствии с (2), (7), (9), (13) и (16) справедливо следующее:

$$f_{\beta}(\beta) \sim G_0^{\text{SCT}}(\beta, E_0, T) \times \begin{cases} 1, & \beta < 0; \\ e^{-\beta}, & \beta > 0. \end{cases}$$

В соответствии с этим распределением и с учетом (44) плотность *мажорирующего* распределения определяется как

$$f_{\beta}^{\max}(\beta) \sim \begin{cases} 1, & \beta < 0; \\ e^{-\beta}, & \beta > 0. \end{cases} \quad (45)$$

Зависимость (45) и определяет процедуру выборки из этого распределения при возникновении различных ситуаций (41)–(43).

Вследствие простоты детально алгоритмы выборки описываться не будут. Здесь представляется необходимым привести только краткое описание вероятностных пространств:

- 1)  $\beta$  равномерно распределена на интервале  $(-\varepsilon, \beta_0)$ ;
- 2)  $\beta$  распределена на интервале  $(\beta_0, \infty)$  с плотностью  $e^{\beta_0 - \beta}$ ;
- 3)  $\beta$  с вероятностью  $\frac{\varepsilon}{\varepsilon + 1}$  равномерно распределена на интервале  $(-\varepsilon, 0)$  и с вероятностью  $\frac{1}{\varepsilon + 1}$  — на интервале  $(0, \infty)$  с плотностью  $e^{-\beta}$ .

При описании алгоритма розыгрыша параметров рассеяния алгоритмы выборки приведенной переданной энергии из мажорирующего распределения будут определяться распределениями  $N$  соответствующих вероятностных пространств 1)–3). Сам же алгоритм будет следующим:

**Алгоритм 3.** *Выборка  $E$  и  $\mu$ .*

Внешние параметры:  $N, \beta_0, T, E_0$ .

Внутренние параметры:  $\alpha, \beta; \zeta$  — случайное число, равномерно распределенное на интервале  $(0, 1)$ .

1.  $G_{\max} = G_0^{\text{SCT}}(\beta_0, E_0, T)$ ;
2. Выборка  $\beta$  из распределения  $N$ ;
3. Если  $G_0^{\text{SCT}}(\beta, E_0, T) < G_{\max}\zeta$ , то переход на шаг 2;
4. Розыгрыш  $\alpha$  по алгоритму 2 с параметрами  $\lambda(T), |\beta|, \alpha^-, \alpha^+$ ;
5.  $E = E_0 + \beta T; \mu = \frac{E_0 + E - \alpha AT}{2\sqrt{E_0 E}}$ .

Так как эффективность выборки параметра  $\alpha$  уже оценена неравенством (40), необходимо оценить эффективность выборки параметра  $\beta$ . Эта эффективность для наиболее проблемного случая (43) в соответствии с выбором мажорирующего закона рассеяния (45) может быть определена как

$$\frac{1}{\vartheta_{\beta}} = \sup_{\beta \in (-\varepsilon, \infty)} \frac{G_0^{\text{SCT}}(\beta, E_0, T) \sigma_{\max}^{\text{SCT}}(E_0|T)}{G_0^{\text{SCT}}(0, E_0, T) \sigma^{\text{SCT}}(E_0|T)} = \frac{\sigma_{\max}^{\text{SCT}}(E_0|T)}{\sigma^{\text{SCT}}(E_0|T)}, \quad (46)$$

где  $\sigma^{\text{SCT}}(E_0|T)$  задается выражением (14), а  $\sigma_{\max}^{\text{SCT}}(E_0|T)$  в соответствии с (8) и (13) определяется как интегральное сечение рассеяния, соответствующее мажорирующему закону рассеяния:

$$\sigma_{\max}^{\text{SCT}}(E_0|T) = \sigma_b \frac{A_n T}{4E_0} \int_{-\varepsilon}^{\infty} e^{-\frac{\beta + |\beta|}{2}} G_0^{\text{SCT}}(0, E_0, T) d\beta.$$

Это сечение может быть легко вычислено. Учитывая, что

$$\lim_{\beta \rightarrow 0} \tilde{G}^{\text{SCT}}(\alpha^-, \alpha^+, |\beta|, T) = \text{erf}\left(\sqrt{\lambda \frac{4E_0}{AT}}\right),$$

получаем

$$\sigma_{\max}^{\text{SCT}}(E_0|T) = \sigma_b \frac{A}{4} \text{erf}\left(\sqrt{\lambda \frac{4E_0}{AT}}\right) \left(1 + \frac{T}{E_0}\right). \quad (47)$$

К сожалению, даже имея явный вид для мажорирующего сечения, вследствие громоздкости выражений (29) и (31) затруднительно получить простое выражение для эффективности. Поэтому удобно рассмотреть предельные случаи. Учитывая (47), можно получить асимптотическое поведение этого сечения:

$$\begin{aligned} E_0 \rightarrow 0 : \quad & \sigma_{\max}^{\text{SCT}}(E_0|T) \approx \sigma_b \sqrt{\frac{\lambda AT}{\pi E_0}}; \\ E_0 \rightarrow \infty : \quad & \sigma_{\max}^{\text{SCT}}(E_0|T) \approx \sigma_b \frac{A}{4}. \end{aligned}$$

В то же время в работе [4] приведено асимптотическое поведение интегрального сечения, которое можно записать в следующем виде:

$$\begin{aligned} \sigma(E_0|T) &\xrightarrow{E_0 \rightarrow 0} \sigma_b \sqrt{\frac{T}{E_0}} \int_0^\infty e^{-\beta/2} \sqrt{\beta} S\left(\frac{\beta}{A}, \beta, T\right) d\beta, \\ \sigma(E_0|T) &\xrightarrow{E_0 \rightarrow \infty} \sigma_b \frac{A^2}{(A+1)^2}. \end{aligned} \quad (48)$$

Учитывая, что при положительных значениях параметра  $\beta$

$$S^{\text{SCT}}\left(\frac{\beta}{A}, \beta, T\right) = \sqrt{\frac{\lambda A}{\pi \beta}} e^{-\lambda A \left(1 - \frac{1}{A}\right)^2 \beta - \frac{\beta}{2}},$$

в соответствии с (46) можно записать предельные значения эффективности розыгрыша параметра  $\beta$ :

$$\lim_{E_0 \rightarrow 0} \Theta_\beta(E_0) = \frac{1}{1 + \lambda \frac{(A-1)^2}{A}}; \quad (49)$$

$$\lim_{E_0 \rightarrow \infty} \Theta_\beta(E_0) = \frac{4A}{(A+1)^2}. \quad (50)$$

Как можно видеть, для наиболее часто встречающегося в замедлителях элемента, водорода с  $A \approx 1$ , эти значения близки к 1. Численные оценки также показали, что на всем интервале энергий в этом случае эффективность близка к единице. Однако для более тяжелых элементов положение несколько хуже.

Здесь следует заметить, что для  $\lambda \leq 1/4$ , которое всегда справедливо согласно (3), выполняется

$$\frac{4A}{(A+1)^2} \leq \frac{1}{1 + \lambda \frac{(A-1)^2}{A}},$$

и потому для оценки снизу можно использовать выражение (50), которое зависит только от атомного веса и уменьшается с увеличением последнего.

Анализ имеющихся данных показал, что наибольший атомный вес среди элементов, для которых приближение мгновенного столкновения определено на всей области изменения параметров рассеяния, имеет кислород в окиси бериллия ( $A = 15,858$ ). Для этого элемента оценка эффективности розыгрыша больше 0,22. Реальный расчет при комнатной температуре и  $E_0 \approx 0,0255$  эВ дает значение  $\Theta \approx 0,33$ , а при  $E_0 \approx 0,0255 \cdot 10^{-3}$  эВ  $\Theta \approx 0,28$ . Представляется, что такую эффективность можно считать приемлемой.

Однако наиболее часто приближение мгновенного взаимодействия используется в табличном представлении закона рассеяния. Из элементов, для которых задано подобное представление, наихудшими параметрами обладает уран в двуокиси урана с  $A = 236,006$  и SCT-областью  $|\beta| > 80$ . Численная оценка эффективности алгоритма выборки для этого случая показала, что она близка к единице.

Таким образом, хотя теоретически возможны ситуации, в которых оценка эффективности (49) низка, для реальных веществ эффективность оказывается вполне приемлемой, а чаще всего близкой к единице (в случае табличного представления закона рассеяния), что наряду с простотой предлагаемого алгоритма позволяет использовать последний для моделирования рассеяния нейтронов.

### Сравнение с другими алгоритмами

Для оценки практической ценности описанных алгоритмов важно рассмотреть другие алгоритмы, предлагаемые для выборки параметров рассеяния в приближении мгновенного взаимодействия, и сравнить их эффективность. Впрочем, удалось найти только работу [5], в которой затрагивается данный вопрос. К сожалению, в ней не приводится оценка эффективности. Сразу следует заметить, что в [5] рассматривается нефизичный вид закона рассеяния. Обсуждение нефизичности приводится в работе [4].

Возможно, алгоритм методики BRAND, предложенный в [5], допускает модификацию, которая делает его применимым к закону рассеяния (2). Впрочем, можно рассмотреть применение этого алгоритма в той области, в которой используемые законы рассеяния совпадают, т. е.  $\beta > 0$ . Не вдаваясь в подробности реализации, которые описаны в [5], здесь необходимо сделать некоторые пояснения.

В работе [5] для проведения розыгрыша делается замена переменных. В частности вводится переменная  $p$ , которая связана с  $\alpha$  следующим соотношением:  $\alpha = \frac{E_0}{AT} p^2$ . Пространство изменения параметров рассеяния разбивается на три области. К сожалению, вероятности попадания в каждую из областей не приводятся.

Сразу следует заметить, что приведенные в работе [5] носители распределений в областях 1 и 2 не согласованы с границами этих областей (см. стр. 36, 37 — к сожалению, нумерация формул в [5] отсутствует).

Для области 3, которая соответствует множеству значений  $\alpha > \frac{4E_0}{AT}$ ,  $\beta > 0$ , на первый взгляд, рассогласования не наблюдается (хотя и в этом случае исходный интеграл также записан для несогласованной области, но конечное выражение имеет разумный вид). Учитывая, что в области 3 законы рассеяния, используемые в [5] и в настоящей работе, совпадают, рассмотрение будет проведено для этой области. Здесь плотность функции распределения можно представить в следующем виде:

$$f(p) = p e^{\omega p^2} (\operatorname{erf}(\gamma p + \delta) - \operatorname{erf}(\gamma p - \delta)),$$

где константы  $\omega$ ,  $\gamma$  и  $\delta$  являются функциями  $E_0$ ,  $T$ ,  $T_{\text{эф}}$  и  $A$  (явный вид см. в [5]). Область определения дополнительно ограничивается соотношением  $\gamma p - \delta < 5$ . В качестве мажорирующей плотности, необходимой для построения метода отказов, используется

$$f^{\max}(p) = 2p e^{\omega p^2}.$$

При этом выборе для оценки эффективности сверху можно использовать следующее неравенство:

$$\Theta \leq \frac{\int_2^{(\delta+5)/\gamma} f(p) dp}{\int_2^{(\delta+5)/\gamma} f^{\max}(p) dp} \quad (51)$$

(равенство было бы возможно в том случае, если бы на интервале интегрирования существовала такая  $p_0$ , что выполнялось бы  $f(p_0) = f^{\max}(p_0)$ ).

Для проверки была рассмотрена выборка  $p$  при рассеянии на кислороде в окиси бериллия, аналогичная приведенной в предыдущем разделе. Параметры, используемые при построении закона рассеяния, в этом случае имеют следующие значения:  $A = 15,858$ ;  $T = 296$  К;  $T_{\text{эф}} = 427,8$  К.

Для  $E_0 \approx 0,0255 \cdot 10^{-3}$ , при которой согласно (48) рассматриваемая область имеет существенный вес (т. е. велика вероятность попадания в нее параметров рассеяния), при расчете по формулам, приведенным в работе [5], получились следующие значения параметров:  $\omega = 2,807858938 \cdot 10^{-5}$ ;  $\gamma = 6,243918962 \cdot 10^{-3}$ ;  $\delta = 0,1047489485$ . При этом оценка эффективности, рассчитанная по формуле (51) и округленная в сторону увеличения, имеет значение  $\Theta < 3 \cdot 10^{-9}$ .

Также рассматривалась  $E_0 \approx 0,0255$ . В этом случае  $\omega = 0,02807858939$ ;  $\gamma = 0,1974500545$ ;  $\delta = 3,312452598$  и соответственно  $\Theta < 5 \cdot 10^{-12}$ . Правда, в этом случае вес рассматриваемой области заметно меньше, чем в предыдущем.

Из приведенных численных оценок можно сделать вывод, что эффективность алгоритма, описанного в настоящей работе, несколько выше, чем эффективность алгоритма методики BRAND, предложенного в [5]. К тому же в последнем искусственно ограничивается область изменения параметров рассеяния. Впрочем, исходя из принципа построения алгоритма, эти характеристики связаны: чем меньше ограничение и, следовательно, выше вероятность первичной выборки параметров из мало-значущей области, тем ниже эффективность. Также следует отметить, что отсутствует возможность применения алгоритма из [5] для случая закона рассеяния, заданного в табличном представлении.

### Заключение

В настоящей работе определены основные выражения и алгоритмы, связанные с приближением мгновенного взаимодействия, необходимые для решения задач переноса методами статистического моделирования. Это в первую очередь выражения для вкладов (29) и (32) от областей отрицательного и положительного значений приведенной переданной энергии в интегральные сечения (10) и (14). Определена зависимость (20), необходимая при вычислении внутреннего интеграла (7), для закона рассеяния, заданного в приближении мгновенного взаимодействия или в табличном представлении, а также используемая при выборке параметров рассеяния. И, наконец, описаны алгоритмы 2 и 3, которые предназначены для выборки квадрата приведенного переданного импульса и параметров рассеянного нейтрона соответственно. Оценка эффективности данных алгоритмов показывает возможность их практического применения.

### Список литературы

1. ENDF-102. Data Formats and Procedures for the Evaluated Nuclear Data File ENDF-6. Ed. by V. McLane. N.Y.: National Nuclear Data Center, Brookhaven National Laboratory. Upton, 2001. (<http://www.nndc.bnl.gov/nndcscr/documents/endl/endl102/endl102.pdf>).
2. *Соболев И. М.* Численные методы Монте-Карло. М.: Наука, 1973.
3. *Огибин В. Н., Орлов А. И.* Применение метода "мажорирующего сечения" для моделирования прохождения нейтронов в движущейся среде // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Методики и программы численного решения задач математической физики. 1984. Вып. 2(16). С. 6–9.
4. *Модестов Д. Г.* К вопросу об описании рассеяния медленных нейтронов в формате ENDF. См. настоящий выпуск. С. 47–54.
5. *Андросенко П. А., Малков М. Р., Соловьев Н. А.* Точное моделирование рассеяния нейтронов методом Монте-Карло по модели идеального газа и приближению наикратчайшего времени столкновения // Изв. ВУЗов. Ядерная энергетика. 2004. № 3. С. 32–42.

Статья поступила в редакцию 14.04.08.