

УДК 539.122:518.5

ВЫЧИСЛЕНИЕ ФУНКЦИИ ПЛОТНОСТИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ НЕЙТРОНОВ ПРИ УПРУГОМ РАССЕЯНИИ

Д. Г. Модестов
(РФЯЦ-ВНИИТФ)

Плотность распределения косинуса угла рассеяния в реакции упругого рассеяния нейтрона обычно задается в системе центра масс. Хотя такое представление не усложняет моделирования реакции, для использования некоторых методов повышения эффективности расчетов удобно иметь возможность вычислять плотность распределения нейтронов в произвольной системе отсчета. В работе приводится алгоритм вычисления данной плотности и пример ее использования.

Ключевые слова: уравнение переноса, рассеяние нейтронов, статистическое моделирование, методы повышения эффективности.

При решении некоторых задач переноса методами статистического моделирования существует необходимость оценки плотности распределения вторичных частиц при взаимодействии. В частности, такая необходимость возникает при использовании методов выборки по важности и оценке потока в точке, описание которых дается в книге [1]. Данные методы направлены на повышение эффективности расчета отклика в детекторе. При этом требуется оценка плотности распределения в системе покоя детектора. Следует отметить, что существует ряд практических задач, в которых необходимо учитывать движение структурных элементов среды (например атомов) относительно детектора. Соответственно возникает необходимость расчета плотности распределения в произвольной системе отсчета. Наверное, не будет преувеличением сказать, что для решения большинства практических задач учет движения при выборке параметров вторичных частиц оказывает заметное влияние только при моделировании упругого рассеяния нейтронов. Таким образом, в первую очередь представляется необходимым рассмотреть именно это взаимодействие.

Прежде чем дать описание вычисления плотности распределения, необходимо отметить, что кинематика процесса упругого рассеяния наиболее просто описывается в системе центра инерции, или, следуя терминологии [2], *ц-системе*.

Эта простота связана с тем, что в *ц-системе* энергии нейтрона и атома не меняются (см., например, [2]). С учетом вышеприведенного обстоятельства распределение параметров рассеянного нейтрона практически всегда задается в указанной системе. Это распределение, используя понятие обобщенных функций, в частности δ -функции, можно записать в следующем виде:

$$\frac{1}{2\pi} f_{\text{ц}}(\chi) \delta(E - E_{\text{ц}}) d\psi d\chi dE,$$

где χ — косинус угла рассеяния; ψ — азимутальный угол; E — энергия рассеянного нейтрона; $E_{\text{ц}}$ — энергия первичного нейтрона; $f_{\text{ц}}(\chi)$ — плотность распределения косинуса угла рассеяния, которая является здесь единственным свободным параметром. При этом, исходя из физических соображений, необходимо отметить, что $f_{\text{ц}}(\chi)$ является ограниченной функцией на интервале $[-1, 1]$ и, следовательно, плотностью меры, абсолютно непрерывной относительно меры Лебега на этом же интервале. Все параметры заданы в *ц-системе*. Построение процедуры выборки этих параметров не вызывает затруднений, равно как и преобразование их в любую систему отсчета.

Однако для применения методов повышения эффективности в задачах определения отклика в детекторе удобно иметь явное выражение плотности распределения в его системе покоя.

Эта система в дальнейшем будет называться *л-системой*. Такое название в некотором смысле согласуется с терминологией [2], хотя в этой работе оно используется только для частного случая покоящегося атома.

Для описания процедуры вычисления плотности распределения в л-системе удобно ввести следующие обозначения: m_n — масса нейтрона; m_a — масса атома; \vec{P}_0 — импульс нейтрона в ц-системе до рассеяния; \vec{P} — импульс нейтрона в ц-системе после рассеяния; \vec{Q} — импульс нейтрона в л-системе после рассеяния; \vec{V} — скорость движения центра инерции в л-системе. Здесь и всюду далее стрелками обозначаются векторы (например \vec{V}), два рядом стоящих в выражении вектора (например $\vec{V}\vec{Q}$) обозначают скалярное произведение, а обозначение векторной величины без стрелки указывает на абсолютное значение этой величины ($V = \sqrt{\vec{V}\vec{V}}$).

Согласно [2] \vec{P}_0 и \vec{V} вычисляются по скоростям в л-системе нейтрона \vec{v}_n и атома \vec{v}_a по формулам

$$\vec{V} = \frac{1}{m_n + m_a} (m_n \vec{v}_n + m_a \vec{v}_a);$$

$$\vec{P}_0 = \frac{m_n m_a}{m_n + m_a} (\vec{v}_n - \vec{v}_a).$$

Кроме того, существует связь между импульсами нейтрона в разных системах, которая дается выражением (см., например, [2])

$$\vec{Q} = \vec{P} + m_n \vec{V}. \quad (1)$$

При этом параметры в ц-системе в силу закона сохранения импульса связаны соотношением $P^2 = P_0^2$.

Косинус угла рассеяния в ц-системе, который имеет смысл косинуса полярного угла в сферической системе координат на множестве состояний рассеяния, определяется соотношением (рисунок)

$$\chi = \frac{\vec{P}_0 \vec{P}}{P^2}. \quad (2)$$

В л-системе проекция направления движения частицы после рассеяния на направление движения центра масс (см. рисунок)

$$\mu = \frac{\vec{V} \vec{Q}}{VQ}. \quad (3)$$

Кроме того, удобно определить в ц-системе параметр χ' (см. рисунок):

$$\chi' = \frac{\vec{V} \vec{P}}{VP}, \quad (4)$$

который аналогично χ имеет смысл косинуса полярного угла в другой сферической системе координат.

Определенные таким образом параметры всегда можно однозначно, с точностью до поворота вокруг выделенной оси (\vec{P}_0 для χ и \vec{V} для χ' и μ), дополнить ортогональными им параметрами ψ , ψ' и φ так, чтобы координаты (χ, ψ) , (χ', ψ') и (μ, φ) образовали сферическую систему координат в соответствующих пространствах состояний рассеяния [3]. Эти системы координат схематично показаны на рисунке. Существенным в таком выборе координат является то, что меры $d\chi d\psi$, $d\chi' d\psi'$ и $d\mu d\varphi$ представляют равномерную меру Лебега на единичной сфере и являются инвариантными относительно группы вращений трехмерного пространства [3].

Сразу следует отметить, что, так как координаты (χ, ψ) и (χ', ψ') определены в одной системе отсчета, то они получаются друг из друга трехмерным вращением, которое является взаимно однозначным преобразованием. Также μ является однозначной функцией χ' (и, следовательно, χ) и согласно (1), (3) имеет вид

$$\mu = \frac{P\chi' + m_n V}{\sqrt{P^2 + m_n^2 V^2 + 2m_n V P\chi'}}. \quad (5)$$

Обратное, вообще говоря, неверно.

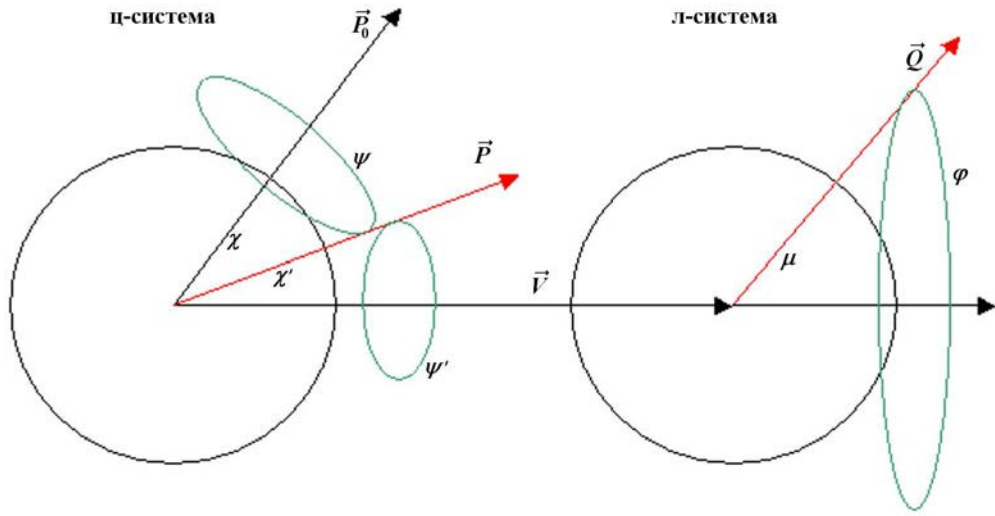
Таким образом, при вычислении плотности распределения в л-системе возникает необходимость определения зависимости $\chi(\mu)$. Для этого удобно найти зависимость модуля импульса рассеянного нейтрона в л-системе от параметра μ . Используя (1), можно показать, что модуль импульса рассеянного нейтрона в л-системе при заданных значениях P , V и μ является неотрицательным корнем уравнения

$$Q^2 - 2m_n V \mu Q + m_n^2 V^2 - P^2 = 0. \quad (6)$$

Следует отметить, что вследствие взаимной однозначности соответствия параметров рассеяния в разных системах отсчета каждому неотрицательному корню этого уравнения однозначно соответствует некоторый угол рассеяния в ц-системе. Как известно, уравнение (6) в общем случае имеет два комплексных корня, значения которых могут быть вычислены по формуле

$$Q = m_n V \mu \pm \sqrt{P^2 - m_n^2 V^2 (1 - \mu^2)}. \quad (7)$$

Прежде чем анализировать выражение (7), следует напомнить, что оно необходимо для построения меры, абсолютно непрерывной относительно меры Лебега на сфере. Как известно (см.,



Обозначение параметров в различных системах отсчета

например, [4]), ее плотность определена с точностью до функции, носитель которой имеет нулевую лебеговскую меру. В частности, на множестве нулевой лебеговской меры, не ограничивая общности, значение плотности всегда можно положить равным нулю. Таким образом, зависимость числа неотрицательных корней уравнения (6) от параметров взаимодействия, учитывая их явный вид (7), можно определить выражением

$$n = \begin{cases} 1, & P \geq m_n V; \\ 0, & m_n V \mu \leq \sqrt{(m_n V)^2 - P^2}; \\ 2, & m_n V \mu > \sqrt{(m_n V)^2 - P^2}. \end{cases} \quad (8)$$

Здесь, в частности, считается, что $n = 0$ при $m_n V \mu = \sqrt{(m_n V)^2 - P^2}$, однако, как можно видеть из (7), в этом случае имеется один корень. Но такое значение параметра μ является особым для уравнения (6): при прохождении через эту точку два различных комплексно-сопряженных корня превращаются в два действительных. Забегая немного вперед, можно сказать, что кривая $m_n V \mu = \sqrt{(m_n V)^2 - P^2}$ является границей носителя угловой плотности распределения в л-системе в том случае, когда параметры рассеяния удовлетворяют соотношению $P < m_n V$. При этом область, в которой $n = 0$, соответствует нулевой плотности.

Учитывая вышеприведенные замечания, а также то, что граница носителя является множеством нулевой лебеговской меры, можно формально положить на этой границе $n = 0$. Это

приведет к занулению плотности распределения (см. ниже) и позволит избежать вычисления этой плотности в особых точках.

С учетом того, что связь между импульсами в разных системах отсчета дается выражением (1), значение косинуса угла рассеяния в ц-системе легко определяется по значению модуля импульса в л-системе согласно определению (2):

$$\chi = \frac{1}{P^2} (\vec{Q} \vec{P}_0 - m_n \vec{P}_0 \vec{V}).$$

Учитывая связь энергии с импульсом, которая приводится, например, в [2], а также неоднозначность зависимости $\chi(\mu)$, выражение для плотности распределения в ц-системе с использованием определений (2)–(4) в соответствии с числом корней уравнения (6) можно представить в виде

$$f_{\text{л}}(\mu, \varphi, E) = \frac{1}{2\pi} \sum_{i=1}^n f_{\text{ц}}(\chi_i) \delta\left(E - \frac{Q_i^2}{2m_n}\right) \frac{\partial(\chi_i, \psi)}{\partial(\mu, \varphi)}. \quad (9)$$

Здесь Q_i — i -е значение модуля импульса нейтрона, полученное решением (6); χ_i и χ'_i — соответствующие ему косинусы полярных углов в ц-системе, определяемые выражениями (2) и (4).

В случае $n = 0$ выражение (9) считается тождественным нулю. Дальнейшие выкладки приводятся только для случая $n \neq 0$.

Чтобы вычислить якобиан в (9), удобно построить следующую цепочку преобразований (см. рисунок):

$$(\chi_i, \psi) \rightarrow (\chi'_i, \psi') \rightarrow (\mu, \varphi).$$

Тогда

$$\frac{\partial(\chi_i, \psi)}{\partial(\mu, \varphi)} = \frac{\partial(\chi_i, \psi)}{\partial(\chi'_i, \psi')} \frac{\partial(\chi'_i, \psi')}{\partial(\mu, \varphi)}.$$

При этом преобразование $(\chi_i, \psi) \rightarrow (\chi'_i, \psi')$, как было указано выше, является поворотом единичной сферы. Поскольку используемая здесь мера $d\chi d\psi$ инвариантна относительно группы вращений трехмерного пространства, а сфера является орбитой этой группы, очевидно выполнение равенства $\frac{\partial(\chi_i, \psi)}{\partial(\chi'_i, \psi')} = 1$. Второе же преобразование для полярных углов, как можно видеть из рисунка, имеет вид $\varphi = \psi' + \varphi_0$, и потому $\frac{\partial(\chi'_i, \psi')}{\partial(\mu, \varphi)} = \frac{d\chi'_i}{d\mu}$. Используя явную зависимость, представленную в выражении (5), получаем

$$\frac{\partial(\chi_i, \psi)}{\partial(\mu, \varphi)} = \frac{d\chi'_i}{d\mu} = \frac{Q_i^2}{P |Q_i - m_n V \mu|}.$$

Таким образом, выражение для плотности распределения в л-системе имеет вид

$$f_{\text{л}}(\mu, \varphi, E) = \sum_{i=1}^n \omega_i(\mu, \varphi) \delta\left(E - \frac{Q_i^2}{2m_n}\right), \quad (10)$$

где

$$\omega_i(\mu, \varphi) = \frac{1}{2\pi} f_{\text{ц}}(\chi_i) \frac{Q_i^2}{P |Q_i - m_n V \mu|}. \quad (11)$$

Учитывая конечность функции $f_{\text{ц}}$, а также замечания, сделанные при определении числа корней (8), можно утверждать, что значение $\omega_i(\mu, \varphi)$ всегда конечно, хотя сама функция неограниченна. При реализации предлагаемого метода существовало опасение, что эта неограниченность, имеющая коренной характер, может способствовать сильному росту дисперсии оцениваемых функционалов. Однако сравнительные расчеты ряда задач в приближениях максвелловского одноатомного идеального газа и покоящихся атомов показали, что различие в дисперсиях не существенно.

В заключение представляется полезным привести пример использования плотности распределения нейтронов в л-системе.

Вклад в оценку потока в пространственной точке \vec{r}_0 при упругом взаимодействии в точке \vec{r} можно представить в следующем виде:

$$\frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}_0|^2} \int W(E, \vec{r}, \vec{r}_0) f_{\text{л}}(\mu, \varphi, E) dE,$$

где $W(E, \vec{r}, \vec{r}_0)$ — вероятность того, что частица с энергией E пройдет по прямой без столкновений из \vec{r}_0 в \vec{r} ; μ и φ — косинус полярного угла и азимутальный угол соответственно, которые определяют направление этой прямой. Данное выражение в несколько других обозначениях, с явным видом $W(E, \vec{r}, \vec{r}_0)$, приводится в [1, с. 134, формула 3.70]. Подставляя в него (10), можно получить выражение для вклада в оценку потока в точке:

$$\frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}_0|^2} \sum_{i=1}^n W\left(\frac{Q_i^2}{2m_n}, \vec{r}, \vec{r}_0\right) \omega_i(\mu, \varphi).$$

Для других методов повышения эффективности использование плотности (10), (11) аналогично.

Список литературы

1. *Спанье Дж., Гелбард З.* Метод Монте-Карло и задачи переноса нейтронов. М.: Атомиздат, 1972.
2. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Механика. М.: Наука, 1988.
3. *Гельфанд И. М., Минлос Р. А., Шапиро З. Я.* Представления группы вращений и группы Лоренца, их применения. М.: Физматгиз, 1958.
4. *Колмогоров А. Н., Фомин С. В.* Элементы теории функций и функционального анализа. М.: Наука, 1976.

Статья поступила в редакцию 16.06.09.