

УДК.518.5 + 539.121.7

РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ О РАССЕЯНИИ ЭНЕРГИИ ИОНИЗИРУЮЩЕГО
ИЗЛУЧЕНИЯ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО НА СИСТЕМЕ "МИНСК-222"

Ю.Г. Косарев, В.А.Наумов, С.Г.Розин, А.А.Ярошевич

Основным следствием прохождения излучения через вещество является ионизация и электронное возбуждение молекул. Однако другие механизмы потерь энергии — такие как упругое рассеяние заряженных частиц и атомов отдачи на молекулах, колебательные возбуждения молекул и решетки — могут также приводить к разрыву химических связей, образованию свободных радикалов и влиять на характер рассеяния энергии излучения в пространстве. Знание каналов диссипации энергии и состава первичных продуктов радиолиза было бы весьма полезно для выяснения механизмов химического и биологического действия излучений, и, наоборот, если последние известны, позволило бы оценить ожидаемый эффект облучения (например, степень диссоциации, число радиационных повреждений и т.д.).

В настоящей работе решается задача о рассеянии энергии моноэнергетической заряженной частицей. Ею может быть электрон, протон, тяжелый ион не слишком высокой энергии (α -части-

ца, осколок деления). Задача ограничена условиями стационарности и бесконечной протяженности среды. Рассматриваются среды, состоящие из легких элементов – водорода, кислорода, азота. Ограничения на плотность среды не накладываются. Источник первичных частиц считается точечным мононаправленным.

Цель задачи заключается :

- 1) в определении пространственного распределения образованных в среде продуктов –ионов, возбужденных молекул, радикалов, т.е. в восстановлении картины трека заряженной частицы на стадии образования первичных продуктов радиолиза;
- 2) в расчете пространственного распределения рассеянной энергии заряженной частицы;
- 3) в выяснении роли отдельных процессов, обуславливающих передачу облучаемой среде энергии падающих частиц.

Ограничиваясь нерелятивистскими энергиями, можно пренебречь ядерными взаимодействиями, а также тормозным и черенковским излучением и считать, что частица теряет энергию в результате неупругого рассеяния на электронной оболочке молекул и упругого рассеяния на атомах в целом. Неупругие взаимодействия сопровождаются возбуждением молекул и образованием широкого спектра вторичных электронов, часть из которых, в свою очередь, может ионизовать молекулы и т.д. При упругом рассеянии тяжелой частицы могут возникать быстрые атомы отдачи, способные взаимодействовать со средой таким же образом, как и падающая частица. Таким образом, прохождение ионизирующей частицы через вещество представляет каскадный процесс.

Поставленная задача требует решения системы уравнений Больцмана, описывающей замедление падающей и каскадных частиц, с учетом энергетической зависимости сечений, сложных угловых распределений и энергетических спектров каскадных частиц. Все это затрудняет использование численных методов и позволяет считать наиболее эффективным в данном случае метод Монте-Карло [1].

Метод Монте-Карло рассматривает сложный процесс как цепочку элементарных звеньев с известным распределением вероятности того или иного конкретного акта. Проводя большое число испытаний в соответствии с законами элементарных процессов, мы реализуем математическую модель действительной совокупности событий.

Каждое испытание заключается в расчете многократного олуздания частицы. Даже при сравнительно простых формулах для

расчета элементарного акта столкновения (реализуемого 300–400 операциями) общее время решения задачи огромно.

Необходимое условие применения данного метода – существенное сокращение числа операций на расчет одного акта столкновения. Одним из путей сокращения числа операций служит применение таблиц большого объема, обеспечивающих достаточную точность и простоту выборки (2–3 операции)[2]. Для использования таблиц необходим достаточный объем оперативной памяти.

Размещение этих таблиц во внешних запоминающих устройствах малоэффективно из-за частого и незакономерного обращения к ним. Кроме того, так как взаимодействие заряженной частицы со средой представляет каскадный процесс, хранение параметров частиц каскадного дерева требует большого количества рабочих ячеек оперативной памяти. Согласно оценке, для решения данной задачи требуется оперативная память объемом 16000–20000 ячеек. Таким объемом памяти обладает вычислительная система "Минск-222", состоящая из 2 или 3 машин "Минск-22".

Естественно разбить решение задачи на 2 этапа.

Первый этап, выполняемый на одной машине, состоит в построении вероятностной модели взаимодействия первичной частицы и проведении K испытаний согласно данной вероятностной модели, т.е. в выполнении K расчетов взаимодействий первичной частицы. В каждом отдельном испытании фиксируется число порожденных вторичных частиц и их параметры.

Следующий этап, выполняемый на второй машине, состоит в построении вероятностной модели, отвечающей взаимодействию каскадной частицы, и обработке согласно новой вероятностной модели каждого результата из уже проделанных K испытаний первого этапа.

Алгоритм решения задачи имеет следующий вид:

I. Рассчитывается место $(n+1)$ -го взаимодействия частицы. Длина ℓ свободного пробега частицы – случайная величина. Закон её распределения записывается в виде:

$$P\{\ell < x\} = 1 - e^{-\int_0^x \Sigma_t ds},$$

где S – расстояние от места n -го столкновения.

Вычислив длину свободного пробега и зная координаты и направляющие косинусы частицы U_n, V_n, W_n после n -го столкновения, находим координаты $(n+1)$ -го столкновения по следу –

шим формулам:

$$x_{n+1} = x_n + u_n \ell;$$

$$y_{n+1} = y_n + v_n \ell;$$

$$z_{n+1} = z_n + w_n \ell.$$

2. В случае многотомной среды определяется, с каким из видов атомов произошло взаимодействие.

3. Определяется тип взаимодействия. Вероятности определенных взаимодействий пропорциональны соответствующим сечениям, поэтому этапы 2 и 3 легко моделируются.

4. Определяется потеря энергии T . Вводится сечение потери энергии, меньшей или равной T , $\sigma(E, T) = \int_0^T d\sigma(T, E)$. Дифференциальное сечение $d\sigma$ нормируется так, что

$$\int_0^{T_{max}} d\sigma(T, E) = 1,$$

где T_{max} — максимальная энергия, которую может потерять частица.

При этом каждому, произвольно выбранному на отрезке $(0, 1)$ числу, символизирующему $\sigma(E, T)$, соответствует определенная потеря энергии T .

5. Угол рассеяния первичной частицы находится через потерю энергии T .

6. Направляющие косинусы вычисляются известным способом: вычисляются два псевдослучайных числа α_1 и α_2 ; если $(\frac{1}{2} - \alpha_1)^2 + (\frac{1}{2} - \alpha_2)^2 \leq \frac{1}{4}$, то вычисляются

$$\alpha = \frac{\frac{1}{2} - \alpha_1}{\sqrt{(\frac{1}{2} - \alpha_1)^2 + (\frac{1}{2} - \alpha_2)^2}} \quad \text{и} \quad \beta = \frac{\frac{1}{2} - \alpha_2}{\sqrt{(\frac{1}{2} - \alpha_1)^2 + (\frac{1}{2} - \alpha_2)^2}};$$

зная $\cos \theta = c$, $\sin \theta = d$, а также u_n, v_n, w_n , находим

$$u_{n+1} = (\alpha d w_n u_n - \beta d v_n) / \sqrt{1 - w_n^2} + \alpha u_n;$$

$$v_{n+1} = (\beta c w_n v_n + \beta d u_n) / \sqrt{1 - w_n^2} + \alpha v_n;$$

$$w_{n+1} = -\beta c \sqrt{1 - w_n^2} + \alpha w_n.$$

7. Определяется возможность рождения вторичной частицы.

Дальнейшее движение первичной частицы и однотипных с ней вторичных частиц рассматривается на I-й машине согласно пп. I-6.

Моделирование историй вторичных частиц, характер взаимодействия которых со средой иной, нежели первичной частицы, осуществляется на второй машине, согласно пп. I-6.

История частицы считается законченной при достижении ее заданной минимальной энергии.

Программа I-й машины состоит из 9 блоков, 440 команд, из них 5 команд системы. На 2-й машине программа содержит 450 команд, из них 3 команды системы.

Отработка программы производилась на варианте, являющемся продолжением работы [3] и представляющем интерес с точки зрения биологического действия протонов низких энергий.

Определялось полное количество и пространственное распределение в треке протона молекул, диссоциировавших в результате упругого рассеяния на них протона и атомов отдачи. Ограниченность данных по сечениям неупругих взаимодействий не позволяет смоделировать полностью процесс замедления протона с энергией, меньшей нескольких сотен килоэлектронвольт. Поэтому соответствующие потери энергии описывались интегральной характеристикой $(\frac{dE}{dx})_{неупр.}$, аппроксимируемой аналитическими выражениями. При этом вместо пп. 2, 3 вводилось определение неупругих потерь энергии между двумя последующими актами упругого рассеяния.

Моделировалось замедление первичного протона и каскадных частиц, способных производить диссоциацию в среде, состоящей из гомоядерных молекул. Замедление частиц, возникающих с энергией, меньшей энергии диссоциации D , не рассматривалось. Истории частиц обрывались при достижении ими энергии $E \leq D$.

ЛИТЕРАТУРА

1. M.J.Berger. Methods in computational physics. vol 1. Pergamon Press, London, 1963.
2. Ю.Г. Косарев. Примеры использования таблиц для сокращения времени счета. — Данный сборник, стр. 46-54
3. В.А. Наумов, Н.А.Троицкий, С.Г. Розин. Известия АН БССР, серия физико-энергетическая, № 2, 1968.

Поступила в редакцию
4.III.1968 г.