

УДК 539.163

ВАРИАЦИИ ПОСТОЯННОЙ РАСПАДА 26-МИНУТНОГО ИЗОМЕРА ^{235}U
И НЕКОТОРЫЕ ВОПРОСЫ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ КРИВЫХ РАДИОАКТИВНОГО РАСПАДА

В.И.Жудов, В.М.Кулаков, Е.В.Одинов, А.Д.Панов

THE DECAY CONSTANT VARIATIONS OF 26-MINUTE ISOMER ^{235}U AND SOME MATHEMATICAL PROBLEMS OF RADIOACTIVE CURVE PROCESSING. The component separation method of the complex radioactive decay curve that represents sum of two curves with similar decay constants were developed. The evaluation displacement of decay constant when determining λ with the direct nonlinear method of least squares on original curve logarithm were determined. The displacement of this direct nonlinear method is low. The half-life difference of isomer ^{235}U introduced in UO_2 and UO_3 were determined.

Распад 26-минутного $(1/2)^+$ -изомера ^{235}U ($^{235\text{m}}\text{U}$) представляет собой уникальный случай конверсии ядерного $\beta\gamma$ -перехода на внешних электронных оболочках атома [1,2]. Энергия возбуждения изомера составляет $76,8 \pm 0,5$ эВ [3]. В конверсии участвуют преимущественно подоболочки урана 6p, 6d и 5f. Возмущение этих подоболочек в химических соединениях или в результате внедрения $^{235\text{m}}\text{U}$ как примесного атома в решетку твердого тела приводит к заметным изменениям постоянной распада λ изомера [4-7]. Такая информация представляет интерес для выяснения особенностей процесса конверсии низкоэнергетических ядерных переходов.

В настоящей работе описаны методика обработки экспериментального материала, относящегося к измерению вариаций постоянной распада λ , и некоторые результаты более общего характера, относящиеся к систематическим ошибкам при различных методах математической обработки кривых распада. Приведены также данные о вариации величины λ для изомера $^{235\text{m}}\text{U}$, внедренного в окислы UO_2 и UO_3 , полученные с помощью разработанной методики.

Задача определения вариаций постоянной λ ставится как задача разделения сложной кривой распада на два компонента с близкими периодами полураспада. Предположим, что имеются два различных соединения урана 1 и 2, в состав которых могут входить (или могут быть внедрены) атомы изомера $^{235\text{m}}\text{U}$. Соединение 1 доступно в чистом виде, поэтому можно измерить постоянную распада λ_1 ; соединение 2 в чистом виде недоступно, но можно получить смесь компонентов 1 и 2. Кривая распада для изомера, входящего в состав смеси, должна иметь вид $f(t) = A_1 \exp(-\lambda_1 t) + A_2 \exp[-(\lambda_1 + \Delta\lambda)t]$, где $\Delta\lambda = \lambda_1 - \lambda_2$; A_1 и A_2 - вклады компонентов 1 и 2 в начальную интенсивность распада. Под интенсивностью понимается экспериментально регистрируемое число распадов в фиксированный интервал времени Δt . Отношение A_1 и A_2 равно отношению концентраций компонентов 1 и 2 в образце.

Для определения величины $\Delta\lambda$ используется следующий метод. После умножения $f(t)$ на $\exp(\lambda_1 t)$ получим

$$\tilde{f}(t) = f(t) \exp(\lambda_1 t) = A_1 + A_2 \exp(-\Delta\lambda t). \quad (1)$$

Считая, что время измерения кривой распада $t_0 \approx 1/\lambda_1$, а $|\Delta\lambda| \ll \lambda_1$, разложим экспоненту в ряд, сохранив два члена:

$$\tilde{f}(t) = A_1 + A_2(1 - \Delta\lambda t) = c_1 + c_2 t, \quad (2)$$

где

$$c_1 = A_1 + A_2; \quad c_2 = -A_2 \Delta\lambda. \quad (3)$$

После умножения экспериментальной кривой на $\exp(\lambda_1 t)$ можно по методу наименьших квадратов определить значения c_1 и c_2 , однако три величины (A_1 , A_2 и $\Delta\lambda$) останутся неизвестными, поэтому двух условий (3) недостаточно для их определения. В качестве дополнительного условия можно потребовать, чтобы были известны концентрации компонентов в образце $k_i = A_i / (A_1 + A_2)$, $i = 1, 2$. Если это условие выполнено, то $A_1 = k_1 c_1$; $A_2 = k_2 c_2$; $\Delta\lambda = -(c_2/c_1) (1/k_2)$, т.е. значение $\Delta\lambda$ однозначно определяется по коэффициентам прямой (2).

Предложенная методика обработки кривых распада была реализована на ЭВМ HP2100A в системе ATS BASIC SYSTEM и прошла проверку в численных экспериментах, в которых использовалась серия из N пробных кривых. Каждая кривая имеет вид

$$q_i^{(\alpha)} = A_1 \exp(-\lambda_1 t_i) + A_2 \exp(-\lambda_2 t_i) + F + \varepsilon_i^{(\alpha)}, \quad (4)$$

где α - номер кривой (1, 2, ..., N); i - номер точки на кривой (1, 2, ..., n); A_1 , λ_1 , A_2 , λ_2 и F (постоянный фон) - одни и те же для всех кривых; $\varepsilon_i^{(\alpha)}$ - квазислучайные числа с нормальным законом распределения и дисперсией σ_i^2 , соответствующей пуассоновскому процессу:

$$\sigma_i^2 = \sqrt{A_1 \exp(-\lambda_1 t) + A_2 \exp(-\lambda_2 t) + F}. \quad (5)$$

Нормальные квазислучайные числа вырабатывались из чисел с прямоугольным распределением на интервале (0,1) по алгоритму, описанному в работе [8]. Каждая кривая выражения (4) являлась моделью экспериментальной кривой и обрабатывалась по описанной методике. По всем полученным значениям $\Delta\lambda_\alpha$ ($\alpha = 1, 2, \dots, N$) определялись оценка математического ожидания $\overline{\Delta\lambda}$ и ошибка численного эксперимента $\sigma(\overline{\Delta\lambda})$:

$$\overline{\Delta\lambda} = 1/N \sum_{\alpha=1}^N \Delta\lambda_\alpha;$$

$$\sigma(\overline{\Delta\lambda}) = \sqrt{\sum_{\alpha=1}^N (\Delta\lambda_\alpha - \overline{\Delta\lambda})^2 / N(N-1)}.$$

Полученное значение $\overline{\Delta\lambda}$ сравнивали с исходным $\Delta\lambda_0 = |\lambda_1 - \lambda_2|$. Проверка методики дала удовлетворительный результат.

Если концентрации k_1 и k_2 неизвестны, то в разложении экспоненты (1) для однозначного определения A_1 , A_2 и $\Delta\lambda$ необходимо учитывать квадратичный по $\Delta\lambda$ член. Однако в этом случае, как показали численные эксперименты, при достижимой статистике отсчетов разделение кривой на компоненты с близкими периодами становится практически неосуществимым.

Предложенная методика определения $\Delta\lambda$ связана с точным измерением постоянной распада λ_1 . Традиционный метод ее определения по логарифму кривой дает смещенную оценку постоянной λ , что связано с существенной нелинейностью метода. Хотя соответствующая систематическая ошибка, как правило, невелика, в некоторых случаях, например при определении $\Delta\lambda$, она может играть существенную роль.

Смещенность оценки величины λ в логарифмическом методе можно определить по следующей формуле (см. приложение I):

$$\delta\lambda = \lambda_0 - E(\tilde{\lambda}) = \frac{1}{2A_0} \frac{n \sum t_i \exp(\lambda_0 t_i) \left[1 + \frac{F}{A_0} \exp(\lambda_0 t_i) \right] - \sum t_i \sum \exp(\lambda_0 t_i) \left[1 + \frac{F}{A_0} \exp(\lambda_0 t_i) \right]}{(\sum t_i)^2 - n \sum t_i^2}, \quad (6)$$

где $E(\tilde{\lambda})$ - ожидаемое значение, получаемое в процессе обработки, если истинным значением является λ_0 ; A_0 - начальная интенсивность распада. Формула (6) получена в предположении пуассоновской дисперсии для случайных отклонений экспериментальных точек. Если число точек n достаточно велико, т.е. суммы выражаются через интегралы, то формулу (6) можно привести к виду

$$\delta\lambda = 6/t_0^3 A_0 \lambda_0 \left\langle \left\{ t_0/2 [\exp(\lambda_0 t_0) + 1] - 1/\lambda_0 [\exp(\lambda_0 t_0) - 1] \right\} + \right. \\ \left. + 1/2 (F/A_0) \left\{ t_0/2 [\exp(2\lambda_0 t_0) + 1] - 1/2\lambda_0 [\exp(2\lambda_0 t_0) - 1] \right\} \right\rangle, \quad (7)$$

где $t_0 = t_n$ - полное время наблюдения за распадом.

Для определения систематической ошибки в определении периода полураспада δT можно воспользоваться формулой $\delta T = T_0 - E(T) \approx -(\ln 2/\lambda_0^2) \delta\lambda$.

Формулу (7) так же, как и методику определения $\Delta\lambda$, проверяли с помощью метода Монте-Карло. Для числа испытаний $n=50$, $T_0 = 26$ мин, $t_0 = 85$ мин, $n=255$ получены результаты, приведенные в таблице.

Систематическая ошибка в определении периода полураспада δT , мин

λ_0	F	Метод определения		
		логарифмический		прямой нелинейный (теория)
		теория	расчет по методу Монте-Карло	
250	20	0,31	0,32±0,06	0,03
1200	200	0,10	0,08±0,03	0,001

Последняя строка таблицы соответствует ситуации, близкой к реальной в экспериментах, проводимых авторами. Так как ожидаемое изменение периода полураспада T для различных соединений урана составляет десятые доли минуты, значение смещенности оценки около 0,1 мин существенно и использование логарифмического метода должно привести к заметным ошибкам. В качестве альтернативы авторы использовали прямой нелинейный метод наименьших квадратов, в котором функция

$$F(A, \lambda) = \sum_{i=1}^n \left\{ [q(t_i) - F] - A \exp(-\lambda t_i) \right\}^2$$

численно минимизируется по переменным A и λ (используется метод редукиции размерности [9]). Экстремальные значения этих переменных принимаются за параметры экспоненциального распада. Эта обработка также нелинейна и дает смещенную оценку λ , которую можно определить по формуле (см. приложение 2)

$$\delta\lambda = \frac{1}{2} \frac{I_0 I_3 - I_1 I_2}{I_0 I_2 - I_1^2} \langle \delta\lambda^2 \rangle, \quad (8)$$

где $I_m = \int_0^{t_0} t^m \exp(2\lambda_0 t) dt$; $\langle \delta\lambda^2 \rangle$ - квадрат стандартного отклонения λ от среднего значения, т.е. квадрат статистической ошибки. Формула (8) справедлива для достаточно больших чисел n. Смещенность прямого нелинейного метода оказывается значительно меньше смещенности логарифмического метода и практически пренебрежимо мала (см. таблицу).

Разработанная методика была использована для определения вариации периода полураспада изомера, внедренного в окислы UO_2 и UO_3 . Изотоп ^{235}U можно получить как продукт естественного α -распада ^{239}Pu . Приготовление чистых образцов ^{235}U химическим отделением урана от плутония - довольно сложная задача из-за относительно малого периода полураспада изомера. Более простой путь приготовления образцов основан на сборе атомов отдачи урана с тонкого слоя плутония. Именно таким способом готовились образцы в настоящей работе. Сбор проводили в вакууме $10^{-5} - 10^{-6}$ Па. При этом атомы отдачи благодаря остаточной кинетической энергии (до 90 кэВ) внедрялись в подложку из исследуемого материала. Для приготовления образцов использовали источник (^{239}Pu) площадью около 1 см^2 с толщиной слоя 25 мкг/см^2 . Сбор проводили в условиях плоскопараллельной геометрии, источник и подложка почти соприкасались друг с другом. Образцы ^{235}U имели рабочую поверхность диаметром 10 мм. Химический состав подложек контролировали методом рентгеноэлектронной спектроскопии (использовали спектрометр HP5950A).

Детектором конверсионных электронов служил каналный электронный умножитель ВЭУ-6, работающий в режиме счета отдельных электронов. Кривые распада изомера получали с помощью 255 каналов многоканального анализатора HP5950A, работающего в режиме поканального счета 20 с/канал. Начальная интенсивность счета конверсионных электронов составила примерно 50 с^{-1} , постоянный фон $10-15 \text{ с}^{-1}$.

В качестве объектов исследования были взяты образцы окислов UO_2 , UO_3 и U_3O_8 природного урана. Как показывают рентгеноэлектронные исследования, U_3O_8 содержит ионы четырех- и шестивалентного урана, т.е. ионы урана соединений UO_2 и UO_3 или близких к ним в отношении 1:2 [10]. Хотя U_3O_8 и не является механической смесью UO_2 и UO_3 [10], но это допустимо предположить.

Цель авторов - определить разницу в периодах полураспада для изомера, внедренного в окислы UO_2 и UO_3 . Это можно сделать двумя способами: 1) прямым вычитанием независимо определенных периодов полураспада T_{UO_3} и T_{UO_2} , 2) разделением сложной кривой распада изомера, внедренного в U_3O_8 , на два компонента в предположении, что один из них соответствует UO_2 , другой - UO_3 , а их вклады в суммарную кривую относятся как 1:2. Это, с одной стороны, позволяет получить два независимых способа определения $\Delta T_{UO_3-UO_2}$, с другой - дает возможность по степени согласованности результатов судить о верности сделанного допущения о том, что U_3O_8 является смесью UO_2 и UO_3 .

Результат измерений T_{UO_2} , T_{UO_3} , ΔT_1 и ΔT_2 составили 25,90 (0,16), 26,22 (0,09), 0,32 (0,18) и 0,30 (0,23) мин соответственно. При этом ΔT_1 определено прямым вычитанием независимо измеренных T_{UO_3} и T_{UO_2} , ΔT_2 определено по кривым распада изомера, внедренного в U_3O_8 (T_{UO_2} приняли за известный период, а доля UO_3 в образце составляла 2/3. В скобках приведена ошибка (в минутах), означающая везде одно стандартное отклонение. Видно, что оба значения ΔT совпадают в пределах ошибок, средневзвешенное значение составляет 0,31±0,14 мин. Таким образом, в условиях реального физического эксперимента продемонстрирована возможность разделения сложной кривой радиоактивного распада на два компонента с периодами, отличающимися всего на 1% в случае, если известен вклад каждого компонента в суммарную кривую.

Результаты авторов можно сравнить со значениями, полученными в работе [6] для химически приготовленных образцов $^{235}UO_2$ и $^{235}UO_3$, а именно: $T_{UO_2}=24,68\pm 0,26$ мин, $T_{UO_3}=26,06\pm 0,08$ мин, т.е. на этих образцах наблюдается та же тенденция изменения периода полураспада, что и на образцах с внедренным изомером, но зависимость периода полураспада от степени окисления урана оказывается круче, а период систематически меньше. Это, видимо, означает, что изотопный обмен между образцами ^{238}U и ^{235}U , который может происходить при внедрении изомера в матрицу, в действительности происходит не полностью. Кроме того, возможно играет роль нарушение кристаллической решетки внедряемыми атомами изомера и то, что на поверхности окислов урана может быть повышенное содержание UO_3 . В работе [6] имеются также данные о значениях T_{UO_2} и T_{UO_3} для внедренного изомера: 25,87±0,05 и 26,60±0,05 мин соответственно, откуда $\Delta T_{UO_2-UO_3}=0,73\pm 0,07$ мин, что несколько отличается от значения, полученного в настоящей работе.

Приложение 1

Вычисление смещенности оценки постоянной λ
в методе определения ее по логарифму кривой распада

Экспериментальную кривую для чистого экспоненциального распада можно представить в виде

$$q(t_i) = A_0 \exp(-\lambda_0 t_i) + F + \varepsilon(t_i) = q_0(t_i) + \varepsilon(t_i), \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad (I)$$

где $q(t_i)$ - экспериментально измеренное значение интенсивности распада (число отсчетов за i -й промежуток времени Δt), которое представляет собой сумму двух членов: $q_0(t_i)$ - регулярной части и $\varepsilon(t_i)$ - случайной статистической ошибки. Будем считать, что значение $q(t_i)$ достаточно велико, а отдельные попадания частиц в детектор статистически независимы, поэтому ошибку $\varepsilon(t_i)$ можно считать случайной величиной с нормальным законом распределения, нулевым математическим ожиданием $E\varepsilon(t_i)$ и пуассоновской дисперсией:

$$E\varepsilon(t_i) = E\varepsilon^2(t_i) = \sigma_i^2 = A_0 \exp(-\lambda_0 t_i) + F. \quad (\text{II})$$

Эксперимент по определению величины λ повторен многократно в одинаковых условиях, т.е. значения A_0 и λ_0 каждый раз одни и те же. Обработка кривой α с помощью некоторого метода дала значение λ_α . Если эксперимент повторен N раз, то можно вычислить среднее значение $\langle \lambda \rangle_N = 1/N(\lambda_1 + \dots + \lambda_N)$. Предел $E(\lambda) = \lim_{N \rightarrow \infty} \langle \lambda \rangle_N$ — это математическое ожидание оценки постоянной λ в рассматриваемом методе, а величина $\sigma\lambda = \lambda_0 - E(\lambda)$ — смещенность метода, которая по своей сути является систематической ошибкой, вносимой в результате обработки. В данной работе рассматривается смещенность метода, в котором экспериментальная кривая после вычитания постоянного фона F логарифмируется, и по полученным точкам в помощью метода наименьших квадратов (МНК) определяется постоянная λ .

Рассмотрим семейство кривых вида (I) $q^{(\alpha)}(t_i) = q_0(t_i) + \varepsilon^{(\alpha)}(t_i)$, которые различаются только случайной составляющей. Под математическим ожиданием $E[q(t_i)]$ в момент времени t_i (где f — произвольная функция) подразумевается величина

$$E f [q(t_i)] = E f(q) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^N f [q^{(\alpha)}(t_i)]. \quad (\text{III})$$

В частности, так как $E\varepsilon = 0$, $E q = q_0 + E\varepsilon = A_0 \exp(-\lambda_0 t) + F$, что и следовало ожидать. Однако для $\ln(q-F)$ ситуация иная:

$$E \ln(q-F) = \ln(q_0 - F) + E \ln \left(1 + \frac{\varepsilon}{q_0 - F} \right) \neq \ln A_0 - \lambda t_i. \quad (\text{IV})$$

Математическое ожидание всех нечетных степеней ε равно нулю, поэтому справедливо разложение

$$E \ln \left(1 + \frac{\varepsilon}{q_0 - F} \right) = -\frac{1}{2} E \left(\frac{\varepsilon}{q_0 - F} \right)^2 + E \left[0 \left(\frac{\varepsilon}{q_0 - F} \right)^4 \right]. \quad (\text{V})$$

Будем считать, что $\sigma_i < A_0 \exp(-\lambda_0 t_i) / 3$ для всех моментов времени t_i . В этом случае второй член разложения (V) составляет менее 0,1 первого и является поправкой более высокого порядка малости. Сохраняя лишь первый член, с помощью формул (II) и (IV) получим $E \ln(q-F) = (\ln A_0 - \lambda_0 t_i) - (1/2 A_0) \exp(\lambda_0 t_i) [1 + (E/A_0) \exp(\lambda_0 t_i)]$.

Прямая 1, соответствующая по МНК $\ln(q-F)$ определяется по логарифмическому методу из выражения $1(t_i) = B - \tilde{\lambda} t_i$, где $\tilde{\lambda}$ принимается за оценку постоянной распада. Учитывая линейность функции $1(t)$ и используя определение (III), можно показать, что прямая $E(1)$ соответствует по МНК кривой $E[\ln(q-F)]$, т.е. минимизирует сумму $S(\ell) = \sum_{i=1}^n \{ E \ln [q(t_i) - F] - \ell(t_i) \}^2$; $S(E\ell) = \min$, которую удобно представить в следующем виде:

$$S(\ell) = \sum_{i=1}^n \left\{ c - t_i \sigma \tilde{\lambda} - \frac{1}{2 A_0} \exp(\lambda_0 t_i) \left[1 + \frac{F}{A_0} \exp(\lambda_0 t_i) \right] \right\}^2;$$

где $c = \ln A_0 - B$; $\sigma \tilde{\lambda} = \lambda_0 \tilde{\lambda}$. Из условий экстремальности $\partial S / \partial c = 0$; $\partial S / \partial (\sigma \tilde{\lambda}) = 0$ находим смещенность логарифмического метода:

$$\sigma \tilde{\lambda} = \lambda_0 - E \tilde{\lambda} = \frac{1}{2 A_0} \frac{n \sum t_i \exp(\lambda_0 t_i) \left[1 + \frac{F}{A_0} \exp(\lambda_0 t_i) \right] - \sum t_i \sum \exp(\lambda_0 t_i) \left[1 + \frac{F}{A_0} \exp(\lambda_0 t_i) \right]}{(\sum t_i)^2 - n \sum t_i^2}. \quad (\text{VI})$$

Если число точек n достаточно велико, то суммы в формуле (VI) можно выразить через интегралы, а формулу (VI) привести к виду

$$\begin{aligned} \delta\lambda = & 6/t_0^3 A_0 \lambda_0 \left\langle \left\{ t_0/2 [\exp(\lambda_0 t_0) + 1] - 1/\lambda_0 [\exp(\lambda_0 t_0) - 1] \right\} + \right. \\ & \left. + 1/2(F/A_0) \left\{ t_0/2 [\exp(2\lambda_0 t_0) + 1] - 1/2\lambda_0 [\exp(2\lambda_0 t_0) - 1] \right\} \right\rangle, \end{aligned} \quad (\text{УП})$$

где $t_0 = t_n$ - полное время наблюдения за распадом. Итак, формулы (VI) и (УП) являются окончательными для определения смещенности оценки по логарифмическому методу.

Следует сделать два замечания, связанных с поведением смещенности $\delta\lambda$:

- при определении периода полураспада с помощью логарифмического метода он оказывается заниженным, а значение смещенности обратно пропорционально интенсивности A_0 ;
- для усреднения результатов по нескольким кривым обычно используют один из двух способов: либо постепенную λ определяют отдельно для каждой кривой, а затем находят среднее значение, либо все кривые складывают и значение λ определяют по суммарной кривой. В этих двух случаях смещенности получатся разными, поэтому такие обработки неравнозначны, причем второй способ с меньшей смещенностью (около $1/A_0$) лучше.

Приложение 2

Вычисление смещенности оценки постоянной λ
в прямом нелинейном методе наименьших квадратов (ПНМК)

Задача ставится точно так же, как в приложении I: требуется определить смещенность $\delta\lambda = \lambda_0 - E(\lambda)$, где $E(\lambda)$ - ожидаемое значение λ , которое получается при обработке по ПНМК кривой с постоянной распада λ_0 . Для удобства перейдем к отрицательным постоянным распада. Тогда в показателе экспоненты в формуле (I) пропадет знак минус. Рассмотрим экспериментальные кривые, каждая из которых состоит из n точек, соответствующих моментам времени t_1, \dots, t_n . Каждую такую кривую представим вектором в n -мерном евклидовом пространстве E_n со скалярным произведением $(\vec{x}, \vec{y}) = \sum_{i=1}^n x_i y_i$ и нормой $\|\vec{x}\| = \sqrt{(\vec{x}, \vec{x})} = \sqrt{\sum_{i=1}^n x_i^2}$.

Рассмотрим в пространстве E_n множество $L = \{ \vec{e}; \vec{e} = [A \exp(\lambda t_1), \dots, A \exp(\lambda t_n)] \stackrel{\text{def}}{=} A \exp(\lambda \vec{t}), A \geq 0, \lambda \leq 0 \}$, которое представляет собой двумерную поверхность в n -мерном пространстве. Нетрудно видеть, что L - это конус. Действительно, если $\vec{e} \in L$, то при любом $\alpha \geq 0$ $\alpha \vec{e} \in L$. Задача состоит в том, чтобы с помощью МНК вектор \vec{q} , соответствующий экспериментальной кривой формулы (I) после вычитания фона, приблизить к вектору $\vec{e} \in L$, который позволил бы величине $\|\vec{q} - \vec{e}\|^2$ достигнуть минимального значения. Последнее условие означает, что нужно найти ортогональную проекцию \vec{q} на поверхность L : $\vec{e} = P_L \vec{q}$.

Пусть A_0 и λ_0 - истинные значения параметров рассматриваемой кривой распада, т.е. кривая представлена вектором $\vec{e}_0 = A_0 \exp(\lambda_0 \vec{t}) \in L$. Предположим, что все экспериментальные кривые \vec{q} оказываются недалеко от \vec{e}_0 , т.е. если $P_L \vec{q} = \vec{e} = A \exp(\lambda \vec{t})$, $A = A_0 + \Delta A$, $\lambda = \lambda_0 + \Delta \lambda$, то $\Delta \lambda / \lambda_0 = \delta \lambda \ll 1$, $\Delta A / A_0 = \delta A \ll 1$. В этом случае трансцендентную поверхность L вблизи \vec{e}_0 можно приблизить поверхностью, квадратичной по параметрам δA и $\delta \lambda$:

$$\vec{e} = (A_0 + \Delta A) \exp[(\lambda_0 + \Delta \lambda) \vec{t}] \approx \vec{e}_0 + \delta A \vec{e}_1 + \delta \lambda (1 + \delta A) \vec{e}_2 + \delta \lambda^2 \vec{e}_3, \quad (\text{УП})$$

где $\vec{e}_1 = A_0 \exp(\lambda_0 \vec{t}) = \vec{e}_0$; $\vec{e}_2 = A_0 \lambda_0 \vec{t} \exp(\lambda_0 \vec{t})$; $\vec{e}_3 = \frac{1}{2} \lambda_0^2 \vec{t}^2 \exp(\lambda_0 \vec{t})$.

С помощью стандартной процедуры Грама - Шмидта ортогонализуем систему $\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3$:

$$\left. \begin{aligned} \vec{f}_1 &= \vec{e}_1; \\ \vec{f}_2 &= \vec{e}_2 - \alpha \vec{e}_1; \\ \vec{f}_3 &= \vec{e}_3 - \beta \vec{e}_1 - \gamma \vec{e}_2. \end{aligned} \right\} \quad (\text{IX})$$

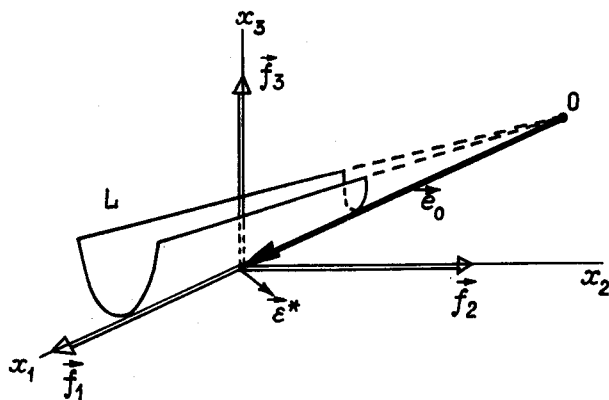
Решим эту систему относительно \vec{e}_1, \vec{e}_2 и \vec{e}_3 :

$$\left. \begin{aligned} \vec{e}_1 &= \vec{f}_1; \\ \vec{e}_2 &= \vec{f}_2 + \alpha \vec{f}_1; \\ \vec{e}_3 &= \vec{f}_3 + \gamma \vec{f}_2 + (\alpha\gamma + \beta) \vec{f}_1. \end{aligned} \right\} \quad (\text{X})$$

Сместив систему координат на вектор \vec{e}_0 , обозначив через \vec{e}^* разность $\vec{e} - \vec{e}_0$ и подставив выражения (X) в формулу (VIII), получим

$$\begin{aligned} \vec{e}^* &= [\delta A + \alpha \delta \lambda (1 + \delta A) + \delta \lambda^2 (\gamma \alpha + \beta)] \vec{f}_1 + \\ &+ [\delta \lambda (1 + \delta A) + \gamma \delta \lambda^2] \vec{f}_2 + \delta \lambda^2 \vec{f}_3 = x_1 \vec{f}_1 + x_2 \vec{f}_2 + x_3 \vec{f}_3. \end{aligned} \quad (\text{XI})$$

Посмотрим, как располагается поверхность L вблизи нового начала координат относительно ортогональных осей, задаваемых векторами $\vec{f}_1, \vec{f}_2, \vec{f}_3$. Очевидно, \vec{f}_1 совпадает с образующей конуса, так как $\vec{f}_1 = \vec{e}_0 \in L$. Из формулы (VIII) получаем $\partial^2 \vec{e}^* / \partial(\delta A) \partial(\delta \lambda) = \vec{e}_2$, поэтому \vec{e}_2 касается конуса в точке \vec{e}_0 . Так как \vec{f}_2 - линейная комбинация \vec{e}_1 и \vec{e}_2 , то и \vec{f}_2 касается конуса в точке \vec{e}_0 . $\vec{f}_3 \perp \vec{f}_1$ и $\vec{f}_3 \perp \vec{f}_2$, поэтому \vec{f}_3 - нормаль к поверхности конуса L в новом начале координат (см. рисунок). В ортогональной системе координат $\vec{f}_1, \vec{f}_2, \vec{f}_3$ поверхность L можно задать уравнением $x_3 = \Psi(x_1, x_2)$. Используя второй порядок разложения $\Psi(x_1, x_2)$ вблизи точки $(0,0)$ и учитывая, что L - конус, можно записать $\Psi(x_1, x_2) = k(x_1)x_2^2$.



Расположение ортонормированной системы векторов $\vec{f}_1, \vec{f}_2, \vec{f}_3$ относительно поверхности конуса L

Разложение для $k(x_1)$ имеет вид $k(x_1) = k_0 + k_1 x_1 + \dots$. Следует взять лишь первый член этого разложения, так как в противном случае для $\Psi(x_1, x_2)$ получится более высокий порядок разложения, чем второй. Окончательный вид формулы

$$\Psi(x_1, x_2) = k_0 x_2^2. \quad (\text{XII})$$

Функция (XII) симметрична относительно координатных плоскостей (x_1, x_3) и (x_2, x_3) . Вектор экспериментальной кривой \vec{q} в системе координат с началом в точке \vec{e}_0 есть $[\varepsilon(t_1), \dots, \varepsilon(t_n)] = \vec{\varepsilon}(\vec{t})$, т.е. случайный вектор с нулевым математическим ожиданием: $E\vec{\varepsilon}(\vec{t}) = \vec{0}$. В связи с линейностью оператора Pr

$$E(\text{Pr}_{\vec{f}_1, \vec{f}_2, \vec{f}_3} \vec{\varepsilon}) = \text{Pr}_{\vec{f}_1, \vec{f}_2, \vec{f}_3} (E\vec{\varepsilon}),$$

где $\text{Pr}_{\vec{f}_1, \vec{f}_2, \vec{f}_3}$ - оператор ортогонального проектирования на подпространство $(\vec{f}_1, \vec{f}_2, \vec{f}_3)$, поэтому $E(\text{Pr}_{\vec{f}_1, \vec{f}_2, \vec{f}_3} \vec{\varepsilon}) = \vec{0}$. С другой стороны, $\text{Pr}_L \vec{q} = \text{Pr}_L \text{Pr}_{\vec{f}_1, \vec{f}_2, \vec{f}_3} \vec{q}$, так как поверхность вблизи точки \vec{e}_0 вложена в трехмерное пространство $(\vec{f}_1, \vec{f}_2, \vec{f}_3)$. Таким образом, задача свелась к трехмерной: в ортогональной системе координат $(\vec{f}_1, \vec{f}_2, \vec{f}_3)$ случайный трехмерный вектор $\vec{\varepsilon}^* = \text{Pr}_{\vec{f}_1, \vec{f}_2, \vec{f}_3} \vec{\varepsilon}$ проектируется на поверхность, задаваемую уравнением $x_3 = k_0 x_2^2$. Запишем проекцию $\vec{\varepsilon}^*$ на поверхность L в виде суммы $x_1 \vec{f}_1 + x_2 \vec{f}_2 + x_3 \vec{f}_3$. Так как $E\vec{\varepsilon}^* = \vec{0}$ и поверхность L симметрична плоскостям (x_1, x_3) и (x_2, x_3) , то $E x_1 = E x_2 = 0$. Выразив x_1 и x_2 через $\delta\lambda$ и δA согласно формуле (XI) и перейдя к математическим ожиданиям, получим

$$E\delta A + \alpha E\delta\lambda(1 + E\delta A) + (\gamma\alpha + \beta)E\delta\lambda^2 = 0; \quad (\text{XIII})$$

$$E\delta\lambda(E\delta A + 1) + \gamma E\delta\lambda^2 = 0.$$

Решая эту систему относительно $E\delta\lambda$, получаем $E\delta\lambda = \gamma E\delta\lambda^2 / (\beta E\delta\lambda^2 - 1)$, где $E\delta\lambda$ - относительная смещенность оценки λ в методе ПИМНК. Для величин β и γ процедура ортогонализации дает следующие значения:

$$\beta = \frac{\lambda_0^2}{2} \frac{S_2^2 - S_1 S_3}{S_0 S_2 - S_1^2}; \quad (\text{XIV})$$

$$\gamma = \frac{\lambda_0}{2} \frac{S_0 S_3 - S_1 S_2}{S_0 S_2 - S_1^2},$$

где

$$S_m = \sum_{i=1}^n t_i^m \exp(2\lambda_0 t_i). \quad (\text{XV})$$

При достаточно больших числах n суммы (XV) можно выразить через соответствующие интегралы. Выполняя такой переход в формулах (XIV) и переходя к абсолютной смещенности $\Delta\lambda_{\alpha\delta c} = \lambda_0 E\delta\lambda$, получаем

$$\Delta\lambda_{\alpha\delta c} = \gamma' \sigma^2 / (\beta' \sigma^2 - 2), \quad (\text{XVI})$$

где $\sigma^2 = \lambda_0^2 E\delta\lambda^2$ - квадрат статистической ошибки постоянной λ ; $\gamma' = (I_0 I_3 - I_1 I_2) / (I_0 I_2 - I_1^2)$;

$$\beta' = (I_2^2 - I_1 I_3) / (I_0 I_2 - I_1^2);$$

$$I_m = \int_0^{t_0} t^m \exp(2\lambda_0 t) dt.$$

Оказывается, что $|\beta' \sigma^2|$ всегда гораздо меньше единицы (меньше 10^{-3}), поэтому формула (XVI) упрощается: $\Delta\lambda_{\alpha\delta c} = -1/2 \gamma' \sigma^2$, или, переходя к обозначениям, которые использовались в основном тексте работы, получаем $\delta\lambda = 1/2 \gamma' \langle \delta\lambda^2 \rangle$, где $\delta\lambda = \lambda_0 - E\lambda$ - смещенность оценки постоянной распада λ , а $\langle \delta\lambda^2 \rangle$ - квадрат стандартного отклонения λ от λ_0 - статистической ошибки определения λ .

Список литературы

1. Asaro F., Perlman I. Phys. Rev., 1957, v.107, p.318.
2. Huizenga J.R., Rao C.L., Engelhameir D.W. Ibid., p.319.
3. Жудов В.И., Кулаков В.М. и др. Письма в ЖЭТФ, 1979, т.30, с.549.
4. Neve de Mevergnies M. Phys. Letters, 1968, v.26B, p.615.
5. Neve de Mevergnies M. Phys. Rev. Letters, 1969, v.23, p.422.
6. Neve de Mevergnies M. Ibid., 1972, v.29, p.1188.
7. Neve de Mevergnies M. Phys. Letters, 1974, v.49B, p.428.
8. Форсайт Дж., Малькольм М., Маулер К. Машинные методы математических вычислений. М.: Мир, 1980, с.268.
9. Стронгин Р.Г. Численные методы в многоэкстремальных задачах. М.: Наука, 1978, с.155.
10. Teterin Yu.A., Kulakov V.M., Baev A.S. Phys.Chem.Minerals, 1981, v.7, p.151.

Статья поступила в редакцию 10 января 1984 г.

УДК 519.245:539.172.6

АНАЛИЗ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО ИНТЕГРАЛЬНЫХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ ПО ВЫХОДУ НЕЙТРОНОВ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ПРОТОНОВ ВЫСОКОЙ ЭНЕРГИИ

В.Д.К а з а р и ц к и й

A MONTE-CARLO ANALYSIS OF INTEGRAL EXPERIMENTS ON NEUTRON YIELD UNDER HIGH-ENERGY PROTONS. Monte-Carlo computations of the neutron yield obtained by a bombardment of uranium targets with high-energy protons were described. The MARS-4 code was used to simulate the secondary particle cascade. The low-energy neutron transport was calculated by the MMK22 code.

Успехи, достигнутые в моделировании ядерных реакций и межъядерного каскада [1], позволяют ставить и решать задачи о вычислении скоростей реакций с учетом реальной геометрии мишени. В настоящей работе анализируются интегральные эксперименты [2], выполненные с пучком протонов на мишени из металлического урана, окруженного слоем свинца. Измерения проводили на пучках с энергиями 300-660 МэВ, при этом рассматривали скорость захвата нейтронов ядрами ^{238}U и скорость делений. Эти или подобные эксперименты уже анализировались с использованием зарубежных [3] и отечественных программ [4]. Цель настоящей работы - проверить возможности комплекса, составленного из существующих программ Монте-Карло MMK22 [5] и MARS-4 [6]. Взаимодействие программ отражает происходящий в мишени процесс преобразования высокоэнергетических частиц в интенсивное низкоэнергетическое излучение. Программа MARS-4 моделирует перенос нуклонов и пионов, образующихся в прямых адрон-ядерных взаимодействиях. Для получаемого при некоторых допущениях относительно вида спектра вторичных частиц (см., например, работу [7]) межъядерного каскада вычисляли пространственно-энергетические распределения нейтронов испарения, испускаемых возбужденными ядрами после прохождения внутриядерного каскада. Выходы нейтронов испарения определяли по программе EVINT, написанной специально для взаимодействия программ MARS-4 и MMK22. С помощью полученного пространственно-энергетического распределения источников нейтронов программа MMK22 оценивает скорости реакций.

Общая характеристика использованных моделей взаимодействия частиц с веществом. При моделировании переноса частиц от начала, входа пучка протонов в мишень, до конца радиационного захвата медленного нейтрона ядром или вылета, необходимо пройти несколько порядков по шкале энергий, поэтому успешное решение задачи зависит от надежности и эффективности большого числа данных о взаимодействии частиц с веществом. В частности, требуется детальная информация о характеристиках взаимодействия адронов с ядрами. Она может быть получена с помощью феноменологических или полу-