

应用球谐近似计算电子在空腔中的能量沉积

罗正明

(核工业部辐射防护研究所)

摘要 应用球谐近似于电子输运方程, 得到各级球谐矩满足的双曲型方程组。给出了相应的初始和边界条件以及 Lax-Wendroff 格式。由此而得到稳定的数值解。计算了均匀分布于无限高矩形空腔的电子源在此空腔中的能量沉积分布和能量沉积系数。

关键词 电子; 能量沉积; 空腔; P_n 近似。

引言

空腔中均匀分布的电子源在此空腔中的能量沉积分布, 是辐射测量和剂量学实际应用中经常涉及的问题。例如为了准确估计空腔电离室的能量沉积比率, 需要估计等效电子源在空腔中的能量沉积^[1]。在 β 放射性气体测量中也需要估计 β 放射性气体在电离室中产生的电离量。在某些外照射和内照射计算中也经常遇见类似问题, 所谓骨髓剂量计算是一个重要的典型例子。虽然这样的问题不少, 但很少见到相应的理论计算工作。一些已经发表的工作, 作了简化的计算, 进一步的发展还是必要的^[2]。从原则上说, Monte-Carlo 技术和电子双群输运理论都可以较精确地处理这一问题^[3~7]。在本文中我们将发展一种更简单的但也是比较精确的方法来处理这一问题。我们指的是应用球谐近似的可能性。

直接应用球谐近似来处理电子束输运问题是不太成功的。原因不难理解, 一般来说单向电子束入射到介质中其角分布是极端各向异性的。考虑到电子的弹性散射角分布亦是极端各向异性, 因此在很大的空间范围内电子的角分布是相当各向异性的。这使得应用球谐近似发生困难。这一情况是十分不同于中子或 X 射线的情况。但是, 如果空腔中的电子源是各向同性的或近似各向同性的, 则空腔中和室壁中的大部分空间电子分布函数仍是接近各向同性的。准确地说, 就是可以用不多的头几个球谐函数来近似电子的角分布。这个判断就构成文中所叙述的方法的理论基础。

电子输运方程的球谐近似解

在平面对称的几何条件下, 电子输运方程是

$$\begin{aligned}
 -\partial f / \partial t + \mu \partial f / \partial x = \int_{4\pi} R_c N_A Z_c A_c \delta_c(t, \vec{u}, \vec{u}') [f(\vec{x}, t, \mu) - f(\vec{x}, t, \mu')] d\vec{u}' \\
 + S(\vec{x}) \delta(t - 1) / 4\pi \quad |\vec{x}| \leq a
 \end{aligned} \quad (1)$$

和

$$-\partial f / \partial t + \mu \partial f / \partial x = \int_{-a}^a R_w N_A Z_w A_w \delta_w(t, \vec{u}, \vec{u}') [f(x, t, \mu') - f(x, t, \mu)] d\vec{u}'$$

$$a < |x| \leq a+1 \quad (2)$$

这里 $f(x, t, \mu)$ 表示电子分布函数, 亦即微分注量。 $f(x, t, \mu) ds dt d\vec{u}$ 表示单位时间穿过在 X 地方, 其法线方向为 $\vec{u}$ 的面积元 ds , 相对射程在 $t \rightarrow t+dt$ 之间, 方向在 $\vec{u} \rightarrow \vec{u}+d\vec{u}$ 之间的电子数。 c, w 分别表示矩形空腔和壁材料的量。 μ 是电子运动方向 $\vec{u}$ 与 x 轴的夹角的余弦。 N_A 是 Avogadro 常数。 Z, A 分别为原子序数和原子量。 $\delta(t, \vec{u}, \vec{u}')$ 是电子在原子库仑场中的散射截面。 R 是电子的初始动能对应的射程。深度 x 和剩余射程 t 都以 R 为单位。 a 是矩形空腔的半宽度, 以 R 为单位。在本文中对室壁的性质作了一个近似处理, 即认为它是一种与空腔慢化能力相同但散射能力不同的介质。因而我们有 t 在界面上保持连续的条件。这就大大地简化了边界条件。虽然, 实际上在界面上电子的相对剩余射程 t 有一个小的跳跃。将微分注量展成球谐函数序列, 我们有

$$f(x, t, \mu) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)}{4\pi} P_l(\mu) N_l(x, t) \quad (3)$$

应用 Legendre 多项式的加法定理:

$$P_l(\vec{u} \cdot \vec{u}') = P_l(\mu) P_l(\mu') + \sum_{m=-l}^l P_l^m(\mu) P_l^m(\mu') \cos(m\varphi' - m\varphi) \quad (4)$$

于是得到球谐距 $N_l(x, t)$ 满足的方程组

$$|x| \leq a: -\frac{\partial N_l}{\partial t} + \frac{1}{2l+1} \left[(l+1) \frac{\partial N_{l+1}}{\partial x} + l \frac{\partial N_{l-1}}{\partial x} \right] = -\frac{\alpha_s d_l^s}{t(t+\alpha_s)} N_l + s(x) \delta_{l0} \quad (5)$$

$$a < |x| \leq a+1: -\frac{\partial N_l}{\partial t} + \frac{1}{2l+1} \left[(l+1) \frac{\partial N_{l+1}}{\partial x} + l \frac{\partial N_{l-1}}{\partial x} \right] = -\frac{\alpha_w d_l^w}{t(t+\alpha_w)} N_l \quad (6)$$

$$(l=0, 1, \dots)$$

所谓 P_n 近似, 就是说大于 n 阶的球谐矩为 0。这样, 我们就把无限耦合的偏微分方程组解耦了。在公式(5), (6)中的散射系数的具体形式分别为^[6]

$$\alpha = 16A/3N_A \phi ZBR \quad (7)$$

$$d_l = \frac{(Z+1)}{4B} \left\{ l(l+1) \left[\frac{1}{2} (-\ln \eta - 1) - \sum_{i=1}^l 1/i \right] + 2\pi l \frac{Z\beta}{137} - \left(\beta^2 + \frac{\pi Z\beta}{137} \right) \sum_{i=1}^l 1/i \right\} \quad (8)$$

$$\eta = \frac{1}{4} (Z^{1/3}/121)^2 T^{-1} (T+2)^{-1} \left[1.13 + 3.76 \left(\frac{Z}{137} \right)^2 (T+1)^2 T^{-1} (T+2)^{-1} \right] \quad (9)$$

这里 $\phi = 8\pi r_e^2/3$, 电子经典截面。 B 是初能电子的阻止数。 $\beta = v/c$, T 是电子动能, 以电子静止能量 $m_e c^2$ 为单位。 η 称为屏蔽因子。为了应用 Lax-Wendroff 格式解双曲型方程组(5), (6), 我们引入以下变换

$$\tilde{N}_l = (2l+1)^{1/2} N_l \quad (10)$$

这样完整的初值边值问题可以写成

$$|x| \leq a:$$

$$-\frac{\partial \tilde{N}_l}{\partial t} + \frac{l+1}{(2l+1)^{1/2}(2l+3)^{1/2}} \frac{\partial \tilde{N}_{l+1}}{\partial x} + \frac{1}{(2l+1)^{1/2}(2l-1)^{1/2}} \frac{\partial \tilde{N}_{l-1}}{\partial x}$$

$$= -\frac{\alpha_s d_l^s}{t(t+\alpha_s)} \tilde{N}_l + \delta_{l0} S(x) \quad (11)$$

$$a < |x| \leq a+1;$$

$$-\frac{\partial \tilde{N}_l}{\partial t} + \frac{l+1}{(2l+1)^{1/2}(2l+3)^{1/2}} \frac{\partial \tilde{N}_{l+1}}{\partial x} + \frac{1}{(2l+1)^{1/2}(2l-1)^{1/2}} \frac{\partial \tilde{N}_{l-1}}{\partial x} = -\frac{\alpha_0 d_l}{t(t+\alpha w)} \tilde{N}_l \quad (12)$$

$$N_l(t, x)|_{t=1} = 0 \quad (13)$$

$$N_l(t, x)|_{x=\pm(a+1)} = 0 \quad (14)$$

$$N_l(t, a^+) = N_l(t, a^-); N_l(t, -a^+) = N_l(t, -a^-) \quad (15)$$

Lax-Wendroff 格式是最常用于求解双曲型方程组的稳定格式。本文用的是具有二阶精度的 Lax-Wendroff 格式^[10]。其离散化后的形式(对空腔区域)是:

$$\begin{aligned} \tilde{N}_l^{n+1,m} = & \tilde{N}_l^{n,m} + \frac{p}{2} \sum_k A_{lk} (\tilde{N}_k^{n,m+1} - \tilde{N}_k^{n,m-1}) + \frac{p}{2} \sum_k A_{lk}^* (\tilde{N}_k^{n,m+1} - \\ & 2\tilde{N}_k^{n,m} + \tilde{N}_k^{n,m-1}) \Delta t - \frac{\alpha_0 d_l}{t_n(t_n + \alpha_0)} \tilde{N}_l^{n,m} + \delta_{l0} \Delta s \end{aligned} \quad (16)$$

对室壁区域, 离散格式亦是相似的。读者可自行推导。A 矩阵的定义是

$$A = \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{3}} & & & \\ & & \circ & & \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{15}} & & \\ & \frac{1}{\sqrt{15}} & 0 & & \\ & & & \ddots & (4n^2-1)^{1/2} \\ \circ & & & & (4n^2-1)^{1/2} & 0 \end{bmatrix} \quad (17)$$

这是一对称方阵。方阵 A^2 是 A 的平方, 它的每一个矩阵元 A_{lk}^2 为

$$A_{lk}^2 = \sum_j A_{lj} A_{jk} \quad (18)$$

这样可以按步进方式由初始条件及离散公式(16) 逐次算出下一步的各球谐矩 $\tilde{N}_l^{n+1,m}$ 。n 是相对剩余射程的第 n 个分点。m 是沿 x 方向的第 m 个分点。其中零级球谐矩, 即通量是我们最感兴趣的。计算了 $\tilde{N}_0$ 后我们即得到能量沉积 $D_E(x)$ 。按定义

$$D_E(x) = \int_0^1 N_0(x, t) \frac{dE}{dt} dt \quad (19)$$

应用 Spencer 的近似阻止本领公式, 我们有^{[9],[11]}

$$\frac{dE}{dt} = A_0 t^{-1/2} + A_1 t^{1/2} + A_2 t^{3/2} + A_3 t^{5/2} \quad (20)$$

电子在空腔中的总能量沉积是

$$\varepsilon = \int_{-a}^a D_E(x) dx \quad (21)$$

相应的能量沉积系数 γ_E 为

$$\gamma_E = \varepsilon / 2aE_0 \quad (22)$$

亦同时求出。E₀ 是电子初能。

计算结果

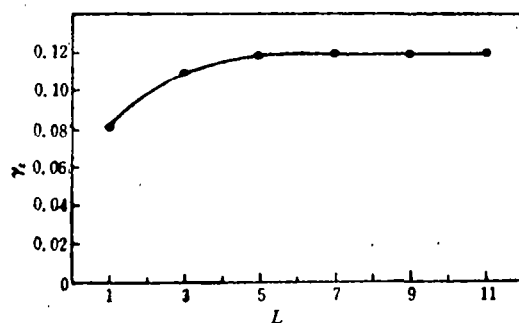


图1 P_L 近似的阶 L 与计算精度的关系
0.025 MeV 的电子在宽度为 0.03 的空腔中(碳壁)的能量沉积系数。

Fig. 1 The computational precision as a function of the order, L of the P_L approximation, the calculated energy deposition coefficients for the electron of 0.025 MeV in a cavity with $a = 0.03$ surrounded by carbon wall

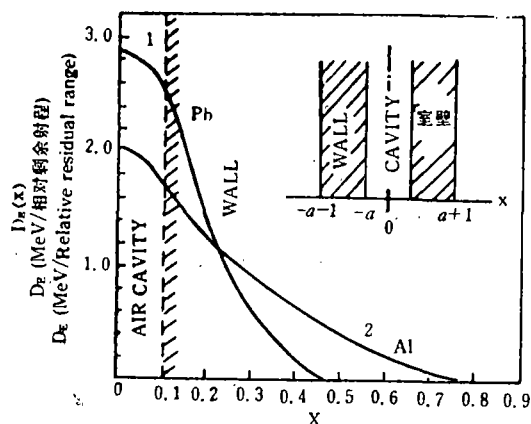


图2 能量沉积的空间分布曲线 2 是 0.1 MeV 电子在 $a = 0.1$, 铝壁的空腔中能量沉积分布; 曲线 1 是铅壁情况

Fig. 2 The electron energy deposition distribution, D_E in air cavity and in different walls. The electron energy is 0.1 MeV, and $a = 0.1$.

在这一节,我们将给出应用球谐近似方法计算均匀分布于无限高的矩形狭缝中的各向同性电子源在此狭缝中的能量沉积。电子源能量分别为 0.1, 0.4, 1 MeV。室壁材料为碳、铝、铜、锡、铅和空气。空腔狭缝充满空气。狭缝的宽度从 0.1 到 1.6。至于更宽的狭缝中的能量沉积,可通过适当的外推得到。为了便于利用这些资料,最后我们提出一个简单的拟合公式。在本节开始,我们讨论一下这个方法的精度。

1. P_n 近似的精度分析

由于没有可用的实验数据,要想分析 P_n 近似的精度就必须对理论本身的近似程度有明确的判断。事实上当 P_n 近似的阶 n 逐步增加时,我们应得到逐步趋于真解的近似解。然而我们更关心趋于真解的速度,也就是说我们更希望能确定 P_n 的阶数与解的精度之间的关系,以便能确定一个适当的阶 L ,在此阶近似下计算的能量沉积以良好精度近似真解。我们的方法如下:首先选择室壁材料为轻元素(在我们情况下为碳),最窄的缝宽($a = 0.05$)的计算几何条件。然后计算不同阶 n 的球谐近似所对应的能量沉积。事实上,这是一条很快趋于定值的单调上升曲线。从图 1 中可以看出,取 $n = 7$ 时解的精度与 $n = 11$ 时几乎没有不同。这表明 P_L 近似能够保证计算结果的良好精度。选择碳壁和最窄的缝宽作为确定球谐近似的阶的算例的原因是这种计算条件对应用球谐近似最不利。如果在这样条件下 P_L 近似已经取得好的结果,则其它计算结果亦应是相当好的。事实上当壁材料的原子序数增加时,电子散射效应增加,角分布更趋于各向同性,从而 P_n 近似的前提更得到保证。因此有理由得到更好的结果。缝

宽增加亦产生相似的效果。所以,在我们以后的全部计算中都选用 P_L 近似。

2. 计算结果

应用 P_L 近似,我们计算了分布于空气狭缝中的均匀电子源在不同室壁材料中的能量沉积以及它们在空气缝中的能量沉积。计算时将 t 在 $[0, 1]$ 区间分 100 格,将 x 在 $[0, a + 1]$ 区间内分 $100 \times (a + 1)$ 格。这时 $p = \Delta t / \Delta x = 1$,保证了计算格式的稳定性。由于计算几何条件是对称的,因

而仅需要计算右半边狭缝和室壁的电子输运。在对称平面 $x=0$ 上, 为确定 $N_l(l=0,1,\dots,7)$ 我们引入对称条件

$$f(-x, t, -\mu) = f(x, t, \mu) \quad (23)$$

因而

$$N_l(-x, t) = (-1)^l N_l(x, t) \quad (24)$$

计算几何如图2所示。图2亦给出电子在铅壁和铅壁及空气隙内的能量沉积空间分布。从计

表1 电子在空腔中的能量沉积系数(碳壁)
Table 1 The energy deposition coefficients of electron for carbon wall

$E(\text{MeV}) \backslash a$	0.05	0.10	0.20	0.40	0.80
0.1	0.1542	0.2697	0.4579	0.6946	0.8480
0.4	0.1639	0.2822	0.4699	0.7016	0.8514
1.0	0.1746	0.2961	0.4834	0.7095	0.8551

表2 电子在空腔中的能量沉积系数(铝壁)
Table 2 The energy deposition coefficients for Al wall

$E(\text{MeV}) \backslash a$	0.05	0.10	0.20	0.40	0.80
0.1	0.1860	0.3162	0.5024	0.7202	0.8608
0.4	0.1942	0.3255	0.5108	0.7251	0.8631
1.0	0.2031	0.3354	0.5194	0.7301	0.8655

表3 电子在空腔中的能量沉积系数(铜壁)
Table 3 The energy deposition coefficients for Cu wall

$E(\text{MeV}) \backslash a$	0.05	0.10	0.20	0.40	0.80
0.1	0.2363	0.3868	0.5718	0.7618	0.8810
0.4	0.2466	0.3980	0.5813	0.7663	0.8837
1.0	0.2525	0.4027	0.5839	0.7677	0.8843

表4 电子空腔中的能量沉积系数(锡壁)
Table 4 The energy deposition coefficients for Sn wall

$E(\text{MeV}) \backslash a$	0.05	0.10	0.20	0.40	0.80
0.1	0.2656	0.4254	0.6087	0.7826	0.8920
0.4	0.2834	0.4454	0.6259	0.7926	0.8969
1.0	0.2901	0.4509	0.6291	0.7943	0.8976

表 5 电子在空腔中的能量沉积系数(铅壁)
Table 5 The energy deposition coefficients for Pb wall

$E(\text{MeV}) \backslash a$	0.05	0.10	0.20	0.40	0.80
0.1	0.2960	0.4636	0.6439	0.8034	0.9024
0.4	0.3350	0.5071	0.6806	0.8248	0.9130
1.0	0.3400	0.5105	0.6820	0.8255	0.9136

表 6 电子空腔中的能量沉积系数(空气壁)
Table 6 The energy deposition coefficients for Air wall

$E(\text{MeV}) \backslash a$	0.05	0.10	0.20	0.40	0.80
0.1	0.1492	0.2626	0.4514	0.6909	0.8461
0.4	0.1593	0.2759	0.4642	0.6984	0.8498
1.0	0.1705	0.2906	0.4786	0.7067	0.8538

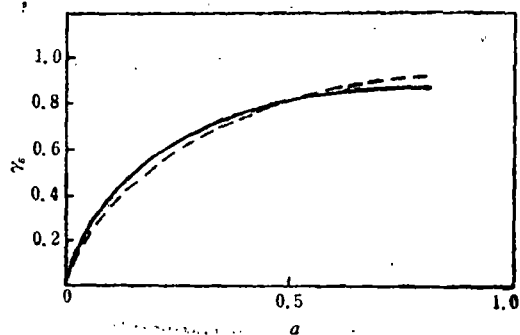


图 3 γ_E 随 a 的变化, 虚线为拟合曲线。
Fig. 3 The electron energy deposition coefficients as a function of cavity semi-width, a . The dash line is fitting curve.

算结果可以看出空气隙内能量沉积在空间上变化不大, 因而在一些简化计算中均匀分布近似是一个可接受的假设。表 1-6 给出了室壁为空气、碳、铝、铜、锡和铅的不同厚度的空气空腔中的电子能量沉积系数。一个显著的特点是能量沉积系数与能量仅有微弱的关系。因此, 在一些应用计算中忽略能量沉积系数与能量的关联对简化问题可能有好处。

3. 能量沉积函数的近似公式

能量沉积函数十分近似放射性原子的积累曲线。图 3 给出了这样的例子。从应用的角度看, 将能量沉积函数的计算结果拟合简单的函数是有利的。我们建议以下近似公式

$$\gamma_E \approx 1 - \sum_{i=1}^m A_i e^{-\lambda_i a} \quad (25)$$

最简单的情况是 $m=1$ 。此时有

$$\gamma_E \approx 1 - e^{-\lambda a} \quad (26)$$

$$\lambda = \sum_j W_j a_j \ln(1 - \gamma_E(j)) / \sum_j a_j^2 W_j \quad (27)$$

利用公式(27)可以确定拟合参数 λ 。 j 是指不同狭缝宽度的标号, $\gamma_E(j)$ 是相应于宽度 a_j 的计算能量沉积系数。图 3 给出了 0.4 MeV 的电子在铜壁的空气空腔中能量沉积系数随空腔狭缝的半宽度的变化(实线)。虚线给出拟合曲线。 w_j 是加权系数。权系数的取法满足条件 $w_j a_j = \text{常数}$ 。目的是增加小空腔能量沉积的权重。

致谢

此工作是作者在联邦德国 Wuerzburg 大学完成的。对于 A.M.Kellerer 教授对本工作的支持,作者深表谢意。作者同样十分感谢洪堡基金会对本工作给予的资助。

参 考 文 献

- [1] Luo Zhengming, Radiat. Res. 84, 1(1980).
- (2) 杨兆铭, 原子能科学技术, 399~409 (1964).
- [3] M. Green, Proc. Phys. Soc. 82, 204(1963).
- [4] 罗正明, 原子能科学技术, 资料选编 77 (1976).
- [5] M. J. Berger and S. M. Seltzer, Phys. Rev. C 2, 621(1970).
- [6] Luo Zhengming, Phys. Rev. B Vol 32, 824(1985).
- [7] Luo Zhengming, Phys. Rev. B Vol 32, 812(1985).
- [8] B. Divison, Neutron Transport Theory. Oxford University Press p 127. (1957).
- [9] L. V. Spencer, Phys. Rev. 98, 1597(1955).
- [10] A. R. Mitchell, Computational Methods in Partial Differential Equations, Wiley, New York, p 169, 1969).
- [11] L. V. Spencer, Energy Dissipation by Fast Electrons, NBS Monoragh 1, p 4.

(1986 年 7 月 2 日收到)

APPLICATION OF THE SPHERICAL HARMONIC METHOD TO CALCULATION OF ELECTRON ENERGY DEPOSITION IN A RECTANGULAR CAVITY

Luo Zhengming

(Institute of Radiation Protection, N. I. M.)

ABSTRACT Using the spherical harmonic approximation to solve electron transport equation, a set of hyperbolic differential equations that governs spherical harmonic moments has been obtained. Correspondingly, a set of initial and boundary conditions has also been given. Utilizing the Lax-Wendroff numerical scheme, the stable numerical solutions which include electron energy deposition in the cavity and its energy deposition coefficients have been obtained.

KEY WORDS Electron, Energy deposition, Cavity, P_n Approximation.