

P11-2005-134

И. В. Амирханов, Е. В. Земляная, А. Полянский*,
Т. П. Пузынина, В. В. Ужинский

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЯДЕРНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ
ПРИ ПРОМЕЖУТОЧНЫХ ЭНЕРГИЯХ МЕТОДОМ
КВАНТОВОЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

*Институт ядерных проблем, Свек, Польша

<p>Амирханов И. В. и др. Моделирование ядерных взаимодействий при промежуточных энергиях методом квантовой молекулярной динамики</p> <p>В работе обсуждаются особенности вычислительной схемы, реализующей метод квантовой молекулярной динамики применительно к моделированию ядерных взаимодействий. Представлены численные результаты, демонстрирующие работу метода КМД.</p> <p>Работа выполнена в Лаборатории информационных технологий ОИЯИ.</p> <p>Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 2005</p>	<p>P11-2005-134</p>
--	---------------------

Перевод авторов

<p>Amirkhanov I. V. et al. Simulation of Nuclear Interactions at Intermediate Energies by the Quantum Molecular Dynamics Method</p> <p>A numerical scheme of the quantum molecular dynamics method (QMD) for the nuclear interactions simulation is discussed. Numerical results on the basis of the QMD method are demonstrated.</p> <p>The investigation has been performed at the Laboratory of Information Technologies, JINR.</p> <p>Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 2005</p>	<p>P11-2005-134</p>
--	---------------------

ВВЕДЕНИЕ

Метод квантовой молекулярной динамики (КМД) [1, 2] является одним из статистических методов моделирования ядерных взаимодействий, активно развивающихся в последние два десятилетия. Он основан на обобщении «классической» модели молекулярной динамики на квантовые системы. Согласно данному подходу расчет основных физических характеристик ядерных реакций сводится к численному интегрированию уравнений движения с использованием двухчастичных потенциалов, характерных для ядерных взаимодействий. Предполагается, что центры волновых пакетов, ассоциируемых с нуклонами, двигаются по классическим траекториям между актами стохастического рассеяния частиц. При моделировании рассеяния учитывается паулевская блокировка конечных состояний. Все это позволяет рассчитывать на более широкую область применения данного подхода по сравнению с другими известными методами, в частности, с наиболее распространенной каскадно-испарительной моделью (КИМ) [3].

К сожалению, в модели КМД нет механизма релаксации возбужденных ядер-остатков. Поэтому предпринимались и предпринимаются попытки ликвидировать этот недостаток. Так, в нашей предыдущей работе [4] были рассмотрены комбинации модели КМД с различными моделями девозбуждения остаточных ядер и показано, что привлечение современных моделей [5, 6] позволяет удовлетворительно описать выход низкоэнергетических частиц в адрон-ядерных взаимодействиях при промежуточных энергиях. В настоящей работе обсуждаются особенности вычислительной схемы, реализующей КМД-подход, и представлены численные результаты, демонстрирующие работу метода КМД в сравнении с моделью КИМ. Расчеты проводились с использованием пакета CHIMERA [7], программная реализация которого была существенно модифицирована.

1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Уравнения движения в модели КМД для N нуклонов представляют систему $6N$ нелинейных уравнений:

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{r}}_{oi} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_{oi}}, \\ \dot{\mathbf{p}}_{oi} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}_{oi}}, \end{cases} \quad (1)$$

где H — полный N -частичный гамильтониан, который имеет вид

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_{oi}^2}{2m} + U_N + U_P + U_C. \quad (2)$$

Здесь U_N — ядерная потенциальная энергия; U_P — полная энергия «взаимодействия Паули»; U_C — кулоновская энергия системы; \mathbf{r}_{oi} и \mathbf{p}_{oi} — координата и импульс i -й частицы соответственно; m — масса нуклона.

Для аппроксимации ядерной потенциальной энергии используется параметризация Скирма [8]. Кулоновский потенциал описывается в терминах функции ошибок на основе гауссовского распределения заряда. «Потенциал Паули» приведен в [8].

Для определения координат и импульсов нуклонов ядер в основном состоянии численно решалась система уравнений движения с диссипацией энергии [8,9]:

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{r}}_{oi} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_{oi}} - \frac{u}{v} \frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}_{oi}}, \\ \dot{\mathbf{p}}_{oi} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}_{oi}} - u \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_{oi}}. \end{cases} \quad (3)$$

$u = 180$ МэВ/фм · с; $v = 100$ (МэВ/фм · с)². Начальные условия для этой системы задавались случайным образом. Через время порядка 100–200 фм/с эволюция системы заканчивалась, в результате чего первоначально «горячее» ядро остывало до температуры $T \simeq 0$ независимо от первоначальных координат и импульсов.

Значения полученных координат и импульсов, а также прицельный параметр соударения \mathbf{b} , выбираемый случайно по распределению bdb , и положение налетающего нуклона на оси соударения использовались в качестве начальных условий для системы (1).

В ходе эволюции системы два нуклона испытывали стохастическое рассеяние, если разделяющее их расстояние оказывалось меньше расстояния, определяемого NN -рассеянием [10]):

$$r_{ij} < \sqrt{\sigma_{NN}/\pi}.$$

Здесь σ_{NN} — эффективное сечение NN -взаимодействия.

Через время ~ 100 –150 фм/с эволюция системы заканчивалась и производилась кластеризация нуклонов в префрагменты. Далее к префрагментам применялась модель релаксации возбужденных ядер. В литературе известны различные модели девозбуждения и мультифрагментации ядер-остатков. (Некоторые из них обсуждались в [4].) В наших исследованиях исходный пакет SHIMERA был дополнен моделью испарения и деления ядер, развитой в работе [5].

2. СХЕМА ЧИСЛЕННОГО ИССЛЕДОВАНИЯ

Расчет основных физических характеристик в рамках подхода КМД сводится к многократному (не менее 10000) численному интегрированию системы (1) при разных случайных значениях прицельного параметра. Поэтому важное значение имеет оптимизация вычислительной схемы с целью сокращения времени счета.

В работе [7] для численного интегрирования систем (1), (3) применялась двухшаговая эйлеровская схема второго порядка точности, которая на каждом n -м шаге по времени имеет следующий вид:

$$\begin{cases} \mathbf{r}_{oi} \left(n + \frac{1}{2} \right) = \mathbf{r}_{oi}(n) + \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{\mathbf{p}_{oi}(n)}{m} + \nabla_{p_{oi}} U(n) \right), \\ \mathbf{p}_{oi} \left(n + \frac{1}{2} \right) = \mathbf{p}_{oi}(n) - \frac{\Delta t}{2} \nabla_{r_{oi}} U(n), \end{cases} \quad (4)$$

$$\begin{cases} \mathbf{r}_{oi}(n+1) = \mathbf{r}_{oi}(n) + \Delta t \left(\frac{\mathbf{p}_{oi} \left(n + \frac{1}{2} \right)}{m} + \nabla_{p_{oi}} U \left(n + \frac{1}{2} \right) \right), \\ \mathbf{p}_{oi}(n+1) = \mathbf{p}_{oi}(n) - \Delta t \nabla_{r_{oi}} U \left(n + \frac{1}{2} \right). \end{cases} \quad (5)$$

В наших расчетах использовался более экономичный одношаговый алгоритм:

$$\begin{cases} \mathbf{r}_{oi}(n+1) = \mathbf{r}_{oi}(n) + \Delta t \left(\frac{\mathbf{p}_{oi}(n)}{m} + \nabla_{p_{oi}} U(n) \right), \\ \mathbf{p}_{oi}(n+1) = \mathbf{p}_{oi}(n) - \Delta t \nabla_{r_{oi}} U(n). \end{cases} \quad (6)$$

Очевидно, что при применении алгоритма (6) время счета по сравнению с предыдущей двухшаговой схемой сокращается в два раза. Хотя процедура (6) имеет лишь первый порядок точности, это не сказывается на конечных физических результатах, что подтверждается численными экспериментами, некоторые из них представлены на рис. 1, 2.

Оптимальный выбор шага интегрирования Δt имеет большое значение с точки зрения оптимизации вычислений. На рис. 3, 4 представлены результаты численных экспериментов с различным шагом Δt . Видно, что при достаточно большой статистике результаты согласуются между собой.

С учетом особенностей рассматриваемой задачи была разработана версия программы для запуска на параллельных вычислительных системах с использованием технологии MPI. Обмен между процессорами осуществлялся лишь

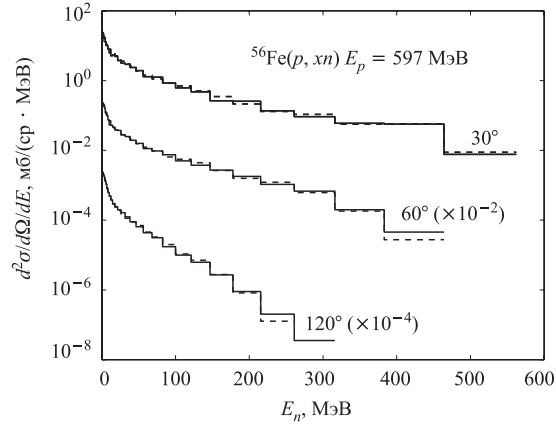


Рис. 1. Расчет сечений реакции $^{56}\text{Fe}(p, xn)$ при энергии $E_p = 113$ МэВ с использованием двухшаговой схемы (4), (5) (штрихи) и одношаговой схемы (6) (сплошные кривые). Статистика: 47000 событий

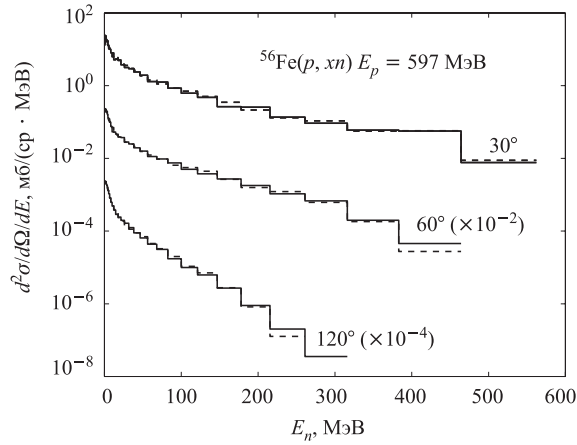


Рис. 2. То же, что и на рис. 1, но для энергии $E_p = 597$ МэВ

на стадии, когда задавалась начальная конфигурация с использованием генератора случайных чисел, а также на конечной стадии, когда на основе усредненных данных производился расчет собственно физических характеристик. Большая доля вычислений, осуществляемых независимо, и малый объем операций обмена между процессорами привели к тому, что фактическое уменьшение времени счета было пропорционально числу параллельных процессоров.

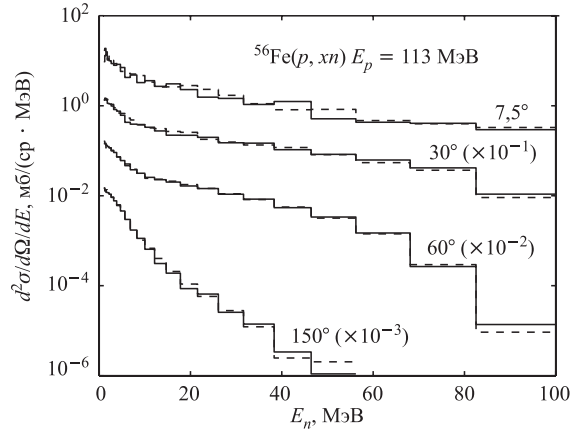


Рис. 3. Расчет сечений реакции $^{56}\text{Fe}(p, xn)$ при энергии $E_p = 113$ МэВ с использованием одношаговой схемы (6). Статистика: 47000 событий. Сплошные кривые: $\Delta t = 0,5$ фм/с; штрихи: $\Delta t = 0,25$ фм/с

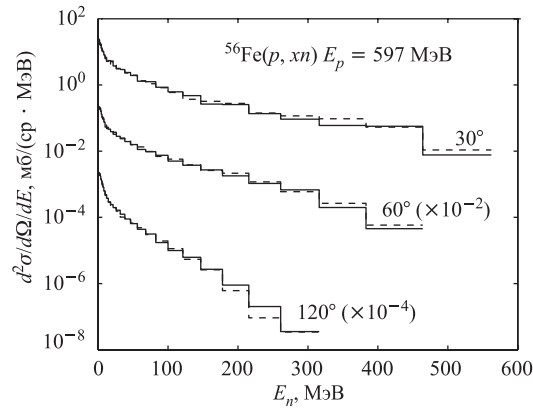


Рис. 4. То же, что и на рис. 3, но для энергии $E_p = 597$ МэВ

3. ЧИСЛЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

На рис. 5–8 представлены результаты численных расчетов по нашей программной реализации модели КМД в сравнении с предсказаниями каскадно-испарительной модели (использовалась версия, опубликованная в [3]) и экспериментальными данными из работы [11]. Как видно из рисунков, для энергий налетающих протонов меньше или порядка 256 МэВ результаты, рассчитан-

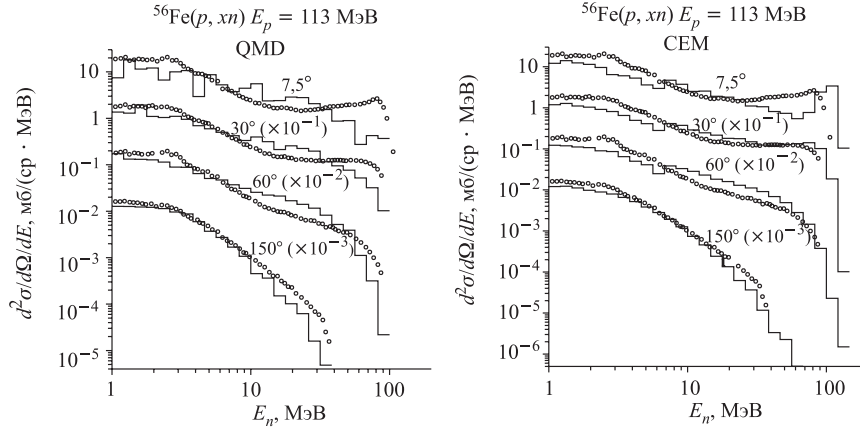


Рис. 5. Расчет сечений реакции $^{56}\text{Fe}(p, xn)$ при энергии $E_p = 113$ МэВ по моделям КМД (слева) и КИМ (справа)

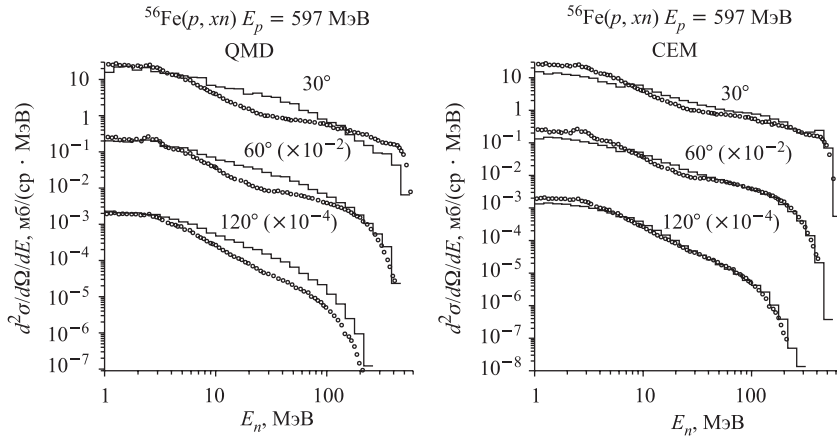


Рис. 6. То же, что и на рис. 5, но для энергии $E_p = 597$ МэВ

ные в рамках КМД, согласуются как с расчетами по КИМ, так и с экспериментом (см. рис. 5, 7). При более высоких энергиях необходимо учитывать анизотропное NN -рассеяние.

В заключение отметим, что рассмотренная реализация модели КМД может быть полезна при численном исследовании взаимодействий ионов с различными материалами.

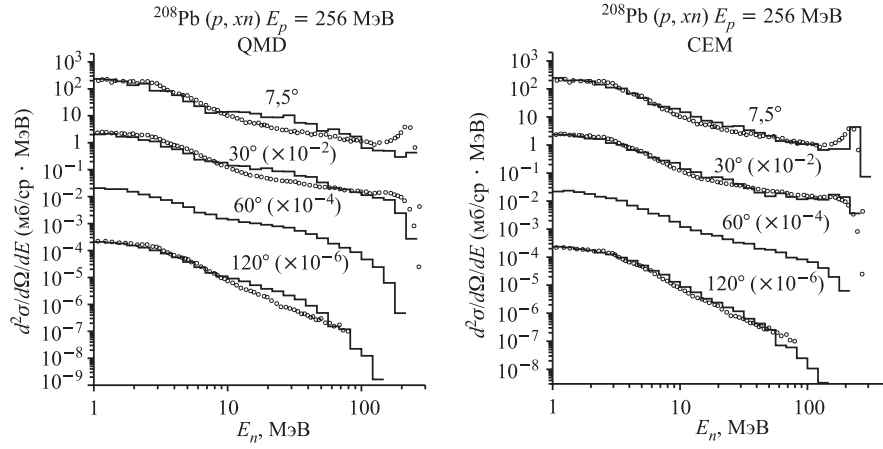


Рис. 7. Расчет сечений реакции $^{208}\text{Pb}(p, xn)$ при $E_p = 256$ МэВ по моделям КМД (слева) и КИМ (справа)

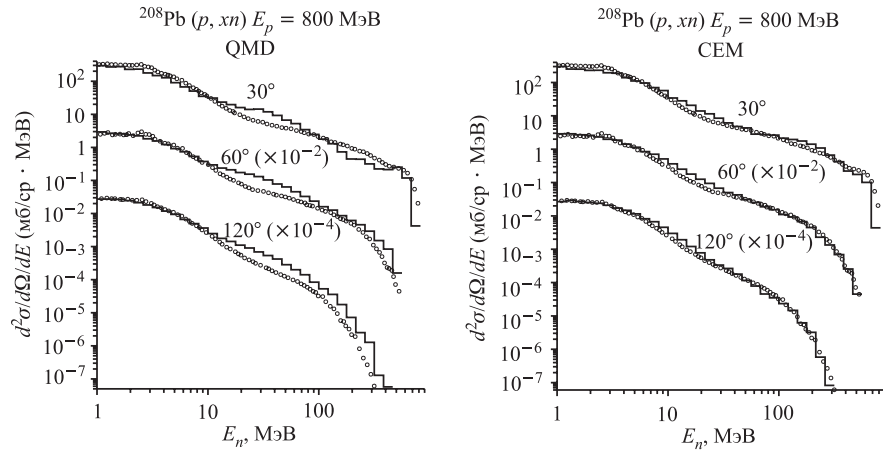


Рис. 8. То же, что и на рис. 7, но для энергии $E_p = 800$ МэВ

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ № 03-01-00657 и 03-02-17079.

ЛИТЕРАТУРА

1. Aichelin J., Stöcker H. // Phys. Lett. B. 1986. V. 176. P. 14;
Peilert G. et al. // Phys. Rev. C. 1989. V. 39. P. 1402;

- Peilert G. et al. // Nuclear Dynamics and Nuclear Disassembly, ed. J.B. Natowitz // Proc. of the Symposium, Dallas, Texas, Apr. 1989, World Scientific;*
Hartnack C. et al. // Nucl. Phys. A. 1989. V. 495. P. 303c;
Neise L. et al. // Nucl. Phys. A. 1990. V. 519. P. 375c;
Bohnet A. et al. // Phys. Rev. C. 1991. V. 44. P. 2111;
Valta P. et al. // Nucl. Phys. A. 1992. V. 538. P. 417c;
Müller W., Begemann-Blaich M., Aichelin J. // Phys. Lett. B. 1993. V. 298. P. 27.
2. *Polanski A., Uzhinsky V. V. Monte Carlo simulation of hadron-nucleus interactions within the QMD model // Proc. of the 6-th World Multiconference on Systemics, Cybernetics and Informatics, July 14-18, 2002, Orlando, Florida, USA. P. 79–89;*
A. Polanski et al. Development of Quantum Molecular Dynamic (QMD) Model to Describe Fission and Fragment Production // Proc. of the Conference ICRS-10-RPS 2004. Madeira Island (Portugal) from 9–14 May 2004. // Radiation Protection Dosimetry, in print.
 3. *Барашенков В. С., Тонеев В. Д. Взаимодействия высокоэнергетических частиц и атомных ядер с ядрами. М.: Атомиздат, 1972;*
Bertini N. W. et al. // Phys. Rev. C. 1974. V. 9. P. 522;
Bertini N. W. et al. // Phys. Rev. C. 1976. V. 14. P. 590;
Bondorf J. P. et al. // Phys. Lett. B. 1976. V. 65. P. 217;
Bondorf J. P. et al. // Zeit. fur Phys. A. 1976. V. 279. P. 385;
Toneev V. D., Gudima K. K. // Nucl. Phys. A. 1983. V. 400. P. 173.
 4. *Амирханов И. В. и др. Численный анализ взаимодействий частиц с ядрами в рамках модели квантовой молекулярной динамики. Сообщение ОИЯИ Р11-2004-149, Дубна, 2004.*
 5. *Furihata S. // Nucl. Instr. Meth. B. 2000. V. 171. P. 252; ArXiv: nucl-th/0003036.*
 6. *Bondorf J. P. et al. // Phys. Rep. 1995. V. 257. P. 134.*
 7. *Lukasik J., Z. Majka and T. Kozik // Phys. Lett. B. 1993. V. 318. P. 419;*
Lukasik J. // CHIMERA - Microscopic Description of Heavy Ion Collisions at Intermediate Energies, a dissertation of the Jagellonian University, Cracow, Poland, 1993.
 8. *Boal D. H., Glosli J. N. // Phys. Rev. C. 1988. V. 38. P. 1870.*
 9. *Wilets L. et al. // Nucl. Phys. A. 1977. V. 282. P. 341;*
Wilets L., Yariv Y., Chestnut R. // Nucl. Phys. A. 1978. V. 301. P. 359;
Callaway D. J. E., Wilets L., Yariv Y. // Nucl. Phys. A. 1979. V. 327. P. 250.
 10. *Bertsch G. F., Das Gupta S. // Phys. Rep. 1988. V. 160. P. 189.*
 11. *Niita K. et al. // Phys. Rev. C. 1995. V. 52. P. 2620.*

Получено 12 сентября 2005 г.

Редактор *М. И. Зарубина*

Подписано в печать 17.10.2005.

Формат 60 × 90/16. Бумага офсетная. Печать офсетная.

Усл. печ. л. 0,5. Уч.-изд. л. 0,58. Тираж 310 экз. Заказ № 55066.

Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований
141980, г. Дубна, Московская обл., ул. Жолио-Кюри, 6.

E-mail: publish@pds.jinr.ru

www.jinr.ru/publish/