МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РФ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования
«Московский государственный технический университет имени Н. Э. Баумана
(национальный исследовательский университет)»

Факультет «Фундаментальные науки»
Кафедра Физики

ДОМАШНЕЕ ЗАДАНИЕ №1
по дисциплине «Вычислительная физика»
на тему: «Решение задачи переноса излучения методом Монте-Карло»

Выполнил: Ярков А.В.
Группа: ФН4-81Б

Москва
2021

Оглавление

Введение

Метод Монте-Карло представляет собой метод численного решения математических задач с помощью моделирования случайных чисел. Является эффективным методом для решения задач, связанных с эволюцией различных физических процессов, сопровождаемых какими-либо случайными факторами.

Задача переноса излучения включает в себя моделирование взаимодействия большого числа частиц, в частности частиц излучения с частицами среды. Пучки заряженных и нейтральных частиц нашли широкое применение при решении практических и научных задач. Сложность состоит в том, что несмотря на известные из эксперимента или других расчётов микроскопические характеристики взаимодействия (сечение взаимодействия, сечение рассеяния), макроскопические характеристики (плотность потока, распределение выделившейся энергии в веществе) требуют непосредственного расчёта.

В то время, как задача переноса излучения может быть решена с помощью кинетических уравнений, описывающих прохождение излучения через вещество, метод Монте-Карло предлагает более простой способ решения подобной задачи. Сущность метода Монте-Карло сводится к тому, что сложный стохастический процесс взаимодействия излучения с веществом сводится к рассмотрению последовательности независимых случайных событий, к которым относятся:

- рождение частицы в некоторой точке;
- последовательное движение этой частицы в некотором направлении без взаимодействия;
- взаимодействие какого-ибо вида в новой точке;
- задание нового направления движения с новой энергией в случае, если частица не была поглощена.

Теоретическая часть

1. Кинетическое уравнение Больцмана

При теоретическом описании потока излучения применяется понятие пространственно-временного энергетически-углового распределения частиц:

$$\varphi = \varphi(\boldsymbol{r}, t, E, \boldsymbol{\Omega}).$$

В случае стационарного процесса изменение плотности потока частиц обусловлено следующими процессами:

1. Движение частиц (убыль): $\boldsymbol{\Omega}\nabla\varphi(\boldsymbol{r}, E, \boldsymbol{\Omega})d\boldsymbol{r}dEd\boldsymbol{\Omega}$.
2. Взаимодействие с веществом (убыль): $\Sigma(\boldsymbol{r}, E)\varphi(\boldsymbol{r}, E, \boldsymbol{\Omega})d\boldsymbol{r}dEd\boldsymbol{\Omega}$.
3. Наличие источников (прирост): $q(\boldsymbol{r}, E, \boldsymbol{\Omega})d\boldsymbol{r}dEd\boldsymbol{\Omega}$.
4. Комптоновское рассеяние с верхних энергетических уровней (прирост): $\int d\boldsymbol{\Omega} \int_E^{E_{max}} \Sigma_s(\boldsymbol{r}, E' \to E, \boldsymbol{\Omega}' \to \boldsymbol{\Omega})\varphi(\boldsymbol{r}, E', \boldsymbol{\Omega}')dE'$.

Тогда уравнение баланса излучения будет выглядеть следующим образом:

$$\boldsymbol{\Omega}\nabla\varphi(\boldsymbol{r}, E, \boldsymbol{\Omega}) + \Sigma(\boldsymbol{r}, E)\varphi(\boldsymbol{r}, E, \boldsymbol{\Omega}) = q(\boldsymbol{r}, E, \boldsymbol{\Omega}) + \\ + \int d\boldsymbol{\Omega} \int_E^{E_{max}} \Sigma_s(\boldsymbol{r}, E' \to E, \boldsymbol{\Omega}' \to \boldsymbol{\Omega})\varphi(\boldsymbol{r}, E', \boldsymbol{\Omega}')dE' . \quad (1)$$

Если рассмотреть луч $\boldsymbol{\xi} = \xi\boldsymbol{\Omega}$, то первое слагаемое может быть переписано в виде

$$\boldsymbol{\Omega}\nabla\varphi(\boldsymbol{r}, E, \boldsymbol{\Omega}) = \frac{d\varphi}{d\xi}. \quad (2)$$

Тогда решение уравнения (1) совместно с условием (2) может быть найдено в виде:

$$\varphi(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{E}) = \varphi_0(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{E}) + \int_0^{\xi_0} d\xi' \, e^{-\tau(\xi')} \int d\boldsymbol{E}' \, \Sigma_s(\boldsymbol{r} - \xi'\boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{E}' \to \boldsymbol{E})\varphi(\boldsymbol{r} - \xi'\boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{E}') , \quad (3)$$

где введено обозначение $\boldsymbol{E} = (E, \boldsymbol{\Omega})$, ξ_0 – расстояние от границы рассматриваемой области до положения частицы вдоль луча $\boldsymbol{\Omega}$, $\tau(\xi') = \tau(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', E) =$

$\int_0^{\xi_0} d\xi' \, \Sigma(\boldsymbol{r} - \xi'\boldsymbol{\Omega}, E)$ – оптическое расстояние от границы среды до текущей точки, $\varphi_0(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{E})$ определяется выражением:

$$\varphi_0(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{E}) = f(\boldsymbol{r} - \xi_0\boldsymbol{\Omega}, \mathbf{E})e^{-\tau(\xi'=\xi_0)} + \int_0^{\xi_0} d\xi' \, e^{-\tau(\xi')} q(\boldsymbol{r} - \xi'\boldsymbol{\Omega}, \mathbf{E}), \qquad (4)$$

в котором $f(\boldsymbol{r} - \xi_0\boldsymbol{\Omega}, \mathbf{E})$ – функция-источник на границе среды.

Остаётся перейти от плотности потока к плотности по столкновениям:

$$\Psi(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{E}) = \varphi(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{E})\Sigma(\boldsymbol{r}, E). \qquad (5)$$

Тогда, если перейти к плотности по столкновениям в уравнении (3) с помощью замены (5) и заменить интегрирование по лучу $\boldsymbol{\xi}$ интегрированием по объёму: $\xi = |\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'|$, $\boldsymbol{\Omega} = \frac{\mathbf{r}-\mathbf{r}'}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}$, $d\boldsymbol{r} = \xi^2 d\xi d\boldsymbol{\Omega}$, придём к уравнению:

$$\Psi(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{E}) = q_1(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{E}) + \iint K(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{E}', \boldsymbol{r}, \boldsymbol{E})\Psi(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{E}') \, d\boldsymbol{r} d\boldsymbol{E}', \qquad (6)$$

представляющим собой интегральное уравнение Фредгольма второго рода, в котором

$$q_1(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{E}) = \int d\boldsymbol{r}' q(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{E}')\Sigma(\boldsymbol{r}, E)e^{-\tau(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', E)} \cdot \frac{\delta\left(\boldsymbol{\Omega} - \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}'}{|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'|}\right)}{|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'|^2}, \qquad (7)$$

$$K(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{E}', \boldsymbol{r}, \boldsymbol{E}) = \frac{\Sigma(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{E}' \to \boldsymbol{E})}{\Sigma(\boldsymbol{r}', E')}\Sigma(\boldsymbol{r}, E)e^{-\tau(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', E)} \cdot \frac{\delta\left(\boldsymbol{\Omega} - \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}'}{|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'|}\right)}{|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'|^2}. \qquad (8)$$

2. Метод Монте-Карло для решения задачи переноса излучения

Схема метода Монте-Карло для решения задачи переноса излучения выглядит следующим образом:

1. Розыгрыш точки рождения, энергии и направления вылета n-ой частицы (если первый заход в этот пункт, то $n = 1$). Задание начального веса (“выживаемости”) частицы: $W_n = 1$.
2. Розыгрыш длины свободного пробега.

3. Расчёт координаты точки k-го взаимодействия (если первый заход в этот пункт, то $k = 1$).

4. Проверка: осталась ли частица в области решения задачи. Если нет, то $n = n + 1$ и переход в пункт 1.

5. Розыгрыш типа взаимодействия: если не рассеяние, то $n = n + 1$ и переход в пункт 1.

6. Определение параметров рассеяния $\cos\Theta_s, E$.

7. Проверка: если $E < E_{min}$, то $n = n + 1$ и переход в пункт 1.

8. Переход к старой системе координат.

9. Определение веса частицы: $W_n = W_n \cdot \frac{\Sigma_s}{\Sigma}$.

10. Проверка: если $W < W_{min}$, то $n = n + 1$ и переход в пункт 1.

11. Вычисление вклада рассматриваемой частицы в показания детектора выбранным способом (в дальнейшем будет рассмотрен только метод локальной оценки потока).

12. Розыгрыш новой длины свободного пробега, $k = k + 1$ и переход в пункт 3.

Задача розыгрыша точки рождения и направления вылета частицы существенно упрощается в случае однородного изотропного источника. В этом случае точка рождения и направление вылета разыгрываются таким образом, что плотность вероятности точек рождения не зависит от точки, а плотность вероятности направлений вылета – от направлений. Энергия инжектируемых частиц полностью определяется материалом источника.

Розыгрыш длины свободного пробега существенно упрощается в случае однородной среды: $\Sigma(\boldsymbol{r}, E) = \Sigma(E)$. Тогда длина свободного пробега может быть определена из предположения о равномерном распределении оптических расстояний:

$$e^{-\Sigma(E)L} = \gamma, \tag{9}$$

тогда длина свободного пробега определяется выражением:

$$L = -\frac{\ln\gamma}{\Sigma(E)}. \qquad (10)$$

Как правило, полное сечение взаимодействий частицы со средой состоит из трёх частей: комптоновской; части, ответственной за фотоэффект (поглощение) и части, ответственной за рождение электрон-позитронной пары. Тогда оно может быть записано в виде:

$$\Sigma = \sigma_s + \sigma_{ph} + \sigma_{e-p}. \qquad (11)$$

Тип взаимодействия разыгрывается следующим образом:

1. Розыгрыш равномерно распределённой случайно величины на единичном отрезке: γ.
2. Если $\frac{\sigma_s}{\Sigma} > \gamma$, то комптоновское рассеяние; если нет, то переход к следующему пункту.
3. Если $\frac{\sigma_s+\sigma_{ph}}{\Sigma} > \gamma$, то фотоэффект; если нет, то результат взаимодействия – образование электрон-позитронной пары.

Если произошло комптоновское рассеяние, то частица “выжила”, и необходимо разыграть “новые” энергию и направление частицы (фотона). Энергия рассеянного фотона E и угол рассеяния Θ связаны через энергию фотона до рассеяния E' выражением:

$$E = E' \Big/ \left[1 + \frac{E'(1-\cos\Theta)}{mc^2}\right]. \qquad (12)$$

Удобнее перейти к безразмерным параметрам $\alpha = \frac{E}{m_0c^2}$, $\alpha' = \frac{E'}{m_0c^2}$, где m_0 – масса покоя электрона, тогда выражение (12) преобразуется к виду:

$$\alpha = \frac{\alpha'}{1+\alpha'(1-\cos\Theta)}. \qquad (13)$$

Учитывая приведённую выше связь между энергией и углом рассеяния, разыграть необходимо лишь одну из этих величин. Пусть этой величиной будет энергия α. Плотность распределения энергии после рассеяния пропорциональна функции

$$f(x,\alpha') \sim p(x,\alpha') = \frac{x}{\alpha'} + \frac{\alpha'}{x} + \left(\frac{1}{\alpha'} - \frac{1}{x}\right)\left(2 + \frac{1}{\alpha'} - \frac{1}{x}\right), \tag{14}$$

если $\frac{\alpha'}{1+2\alpha'} < x < \alpha'$. Тогда справедливо соотношение:

$$p(x,\alpha') \leq 1 + 2\alpha' + \frac{1}{1+2\alpha'}. \tag{15}$$

Величина α может быть определена с помощью метода исключения, алгоритм которого имеет следующий вид:

1. Разыгрываются два значения γ_1, γ_2 равномерно распределённой на единичном отрезке случайной величины.
2. Вычисляется $\mathrm{x} = \alpha'(1 + 2\alpha'\gamma_1)/(1 + 2\alpha')$ и находится $p(x,\alpha')$ из выражения (14).
3. Если $\gamma_2 \cdot \left(1 + 2\alpha' + \frac{1}{1+2\alpha'}\right) < p(x,\alpha')$, то $\alpha = x$, иначе переходим к пункту 1.

После определения энергии косинус угла рассеяния определяется следующим образом:

$$\mu_s = \cos\Theta_s = 1 - \frac{1}{\alpha} + \frac{1}{\alpha'}. \tag{16}$$

Для угла рассеяния справедливы неравенства $0 \leq \Theta_s \leq \pi$ (полярный угол). Азимутальный угол определяется следующим розыгрышем:

$$\psi_s = 2\pi \cdot \gamma. \tag{17}$$

В декартовой системе координат направление движения задаётся тремя направляющими косинусами: $\boldsymbol{\Omega} = \boldsymbol{i}\omega_1 + \boldsymbol{j}\omega_2 + \boldsymbol{k}\omega_3$. Формулы перехода между “старым” $\boldsymbol{\Omega}'$ и “новым” $\boldsymbol{\Omega}$ направлением выглядят следующим образом:

$$\omega_3 = \omega_3'\mu_s + \cos\psi_s\sqrt{(1-\mu_s^2)\left(1-{\omega_3'}^2\right)}, \tag{18}$$

$$\omega_2 = \frac{\omega_2'(\mu_s - \omega_3'\omega_3) + \omega_1'\sin\psi_s\sqrt{(1-\mu_s^2)\left(1-{\omega_3'}^2\right)}}{1-{\omega_3'}^2}, \tag{19}$$

$$\omega_1 = \frac{\omega_1'(\mu_s - \omega_3'\omega_3) - \omega_2'\sin\psi_s\sqrt{(1-\mu_s^2)\left(1-{\omega_3'}^2\right)}}{1-{\omega_3'}^2}. \tag{20}$$

3. Метод локальной оценки потока

Метод локальной оценки потока позволяет стянуть детектор в точку. Плотность по столкновениям в рассматриваемой точке $x^* = (\boldsymbol{r}, \boldsymbol{E})$ определяется согласно выражению (6) соотношением

$$\Psi(x^*) = q_1(x^*) + \int K(x', x^*)\Psi(x')dx' . \tag{21}$$

Так как $q_1(x^*)$ может быть оценена аналитически, то интерес представляют лишь рассеянные частицы. Следовательно поток частиц в точке x^* определяется выражением:

$$\varphi(x^*) = \int \frac{K(x', x^*)}{\Sigma_s(x^*)}\Psi(x')dx' . \tag{22}$$

Формально, согласно выражению (22) $\varphi(x^*)$ - функционал от плотности по столкновениям с откликом $g(x', x^*) = \frac{K(x', x^*)}{\Sigma_s(x^*)}$.

Метод локальной оценки потока даёт следующее выражение для вклада частиц с энергией α в показания детектора:

$$\eta(\alpha) = \sum_{n=1}^{N} W_n \cdot \frac{K(x', x^*)}{\Sigma_s(x^*)} . \tag{23}$$

Для избавления от δ-функции, содержащейся в ядре $K(x', x^*)$ в выражении (23), её можно проинтегрировать по пучку направлений $\Delta\boldsymbol{\Omega}_i^*$. Тогда оценка плотности потока частиц в точке x^* будет равна математическому ожиданию от случайной величины (23). Это плотность потока частиц, которые движутся в выбранном пучке направлений $\Delta\boldsymbol{\Omega}_i^*$, энергия которых попадает в интервал $(E^*, E^* + \Delta E_i^*)$:

$$\eta(\alpha) = \sum_{n=1}^{N} W_n \cdot \frac{e^{-\tau(\boldsymbol{r_n}, \boldsymbol{r}^*, E_n^*)}}{|\boldsymbol{r_n} - \boldsymbol{r}^*|} \cdot \frac{\Sigma_s(\boldsymbol{r_n}, E_n \to E_i^*, \boldsymbol{\Omega_n} \to \boldsymbol{\Omega_i^*})}{\Sigma_s(\boldsymbol{r_n}, E_n)} \, \Delta(\boldsymbol{\Omega_n}, \boldsymbol{\Omega}_i^*) \, \Delta(E_n, E_i^*). \tag{24}$$

Дифференциальное сечения рассеяния в выражении (24) определяется по формуле Клейна-Нишины-Тамма:

$$\Sigma_s(\alpha', \Theta_s) = \frac{Zr_e^2}{2} \cdot \frac{1 + \mu_s^2 + {\alpha'}^2 (1 - \mu_s)^2 / \left(1 + \alpha'(1 - \mu_s)\right)}{[1 + \alpha'(1 - \mu_s)]^2}, \qquad (25)$$

где Z – атомный номер материала среды, r_e – классический радиус орбиты электрона.

Интегрирование выражения (25) по телесному углу даёт выражение для полного сечения комптоновского рассеяния фотонов на свободных электронах:

$$\Sigma_s(\alpha') = 2\pi Z r_e^2 \left\{ \frac{1 + \alpha'}{{\alpha'}^2} \left[\frac{2(1 + \alpha')}{1 + 2\alpha'} - \frac{\ln(1 + 2\alpha')}{\alpha'} \right] + \frac{\ln(1 + 2\alpha')}{2\alpha'} - \frac{1 + 3\alpha'}{(1 + 2\alpha')^2} \right\}. \qquad (26)$$

Нормировка выражения (24) на число частиц даст следующую оценку для вклада потока частиц в детектор:

$$\varphi(\alpha) = \frac{\eta(\alpha)}{N}. \qquad (27)$$

Практическая часть

1. Постановка задачи

Плоских изотропный однородный эллиптический источник фотонов с полуосями $a = 15$ см, $b = 30$ см изготовлен из материала кобальт-60 ($E = 1.3\ MeV$). Фотоны распространяются в среде, представляющей собой алюминиевый параллелепипед с площадью основания 60×80 см^2 и высотой 20 см.

Необходимо:

1. Построить распределение точек вылета фотонов для $N = 100, 500, 1000$.
2. Для тех же значений N построить “ёжика”, иголки которого соединяют точки рождения частиц с точками их первого взаимодействия.
3. Для $N = 10^5$ рассчитать виртуальные вклады в детекторы методом локальной оценки потока. Число детекторов: 7. Положения детекторов на оси: $h = 5, 15, 20$ см. Остальные детекторы в центрах боковых граней.

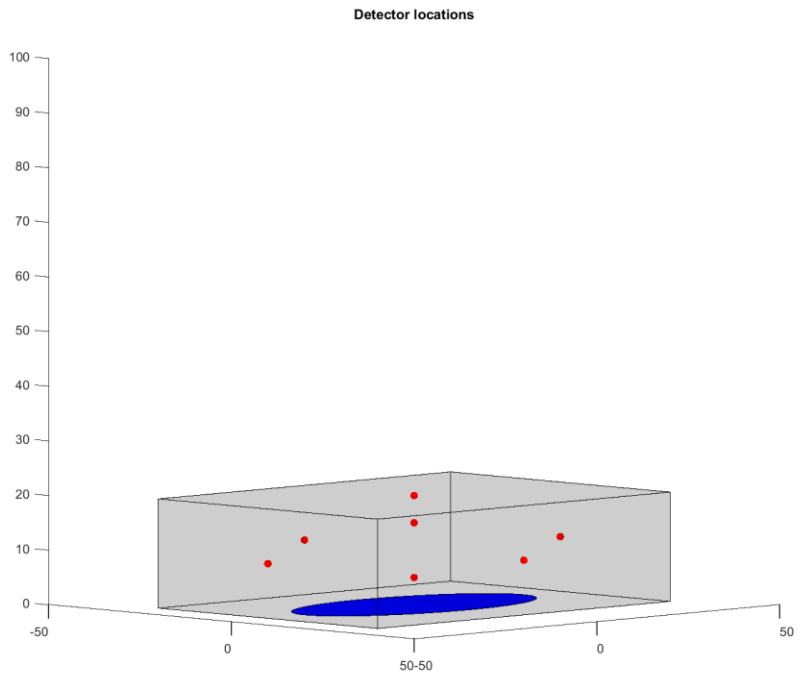


Рисунок 1. Геометрия источника и среды, положения детекторов.

2. Полученные результаты

$N = 100$

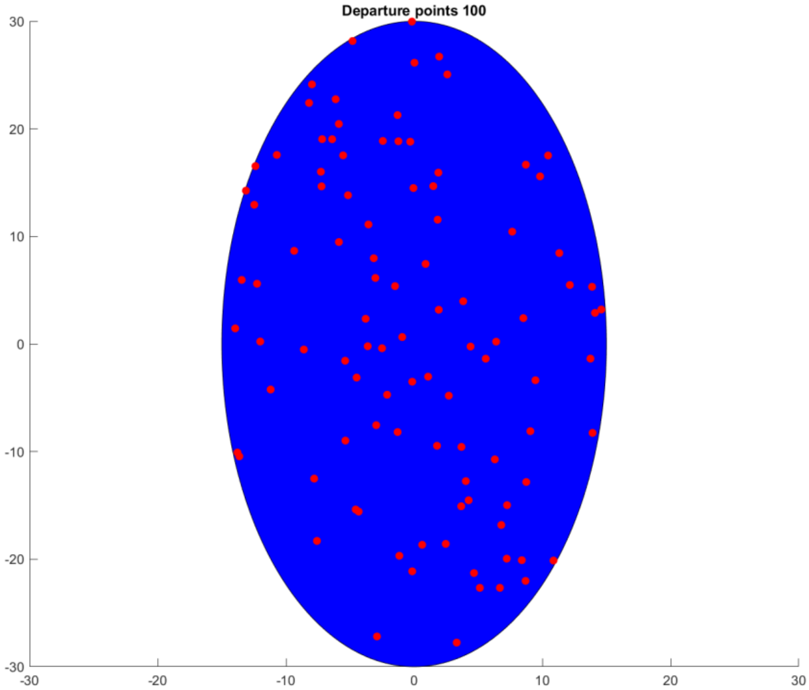


Рисунок 2 Розыгрыш точек вылета частиц ($N = 100$).
Красными точками показаны точки вылета частиц.

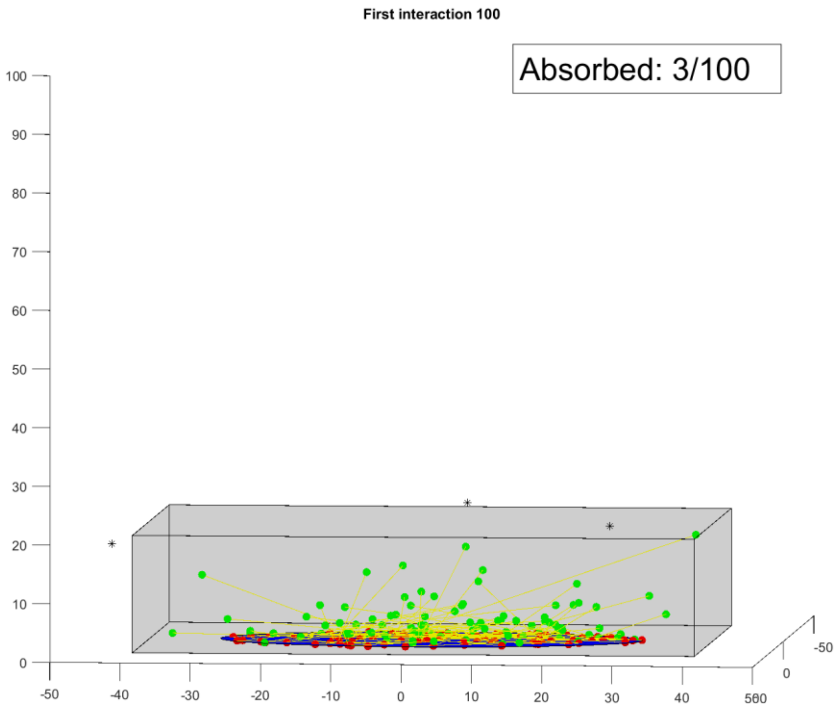


Рисунок 3. Розыгрыш точек первого взаимодействия ($N = 100$).
Красными точками показаны точки вылета частиц.
Зелёными точками показаны точки первого взаимодействия частиц.
Чёрными звёздами показаны поглощённые частицы.
Жёлтыми линиями – пути частиц.

$N = 500$

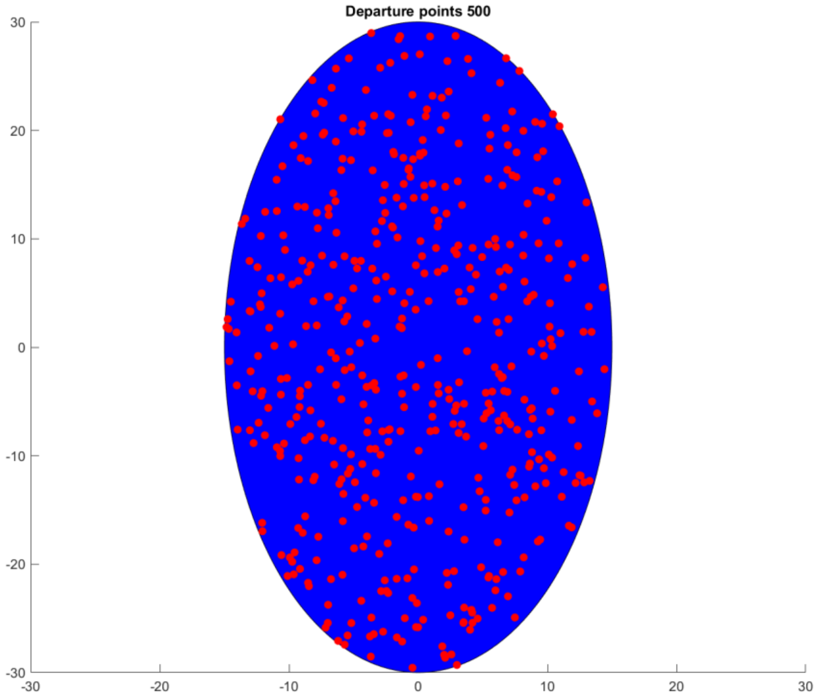


Рисунок 4. Розыгрыш точек вылета частиц ($N = 500$).
Красными точками показаны точки вылета частиц.

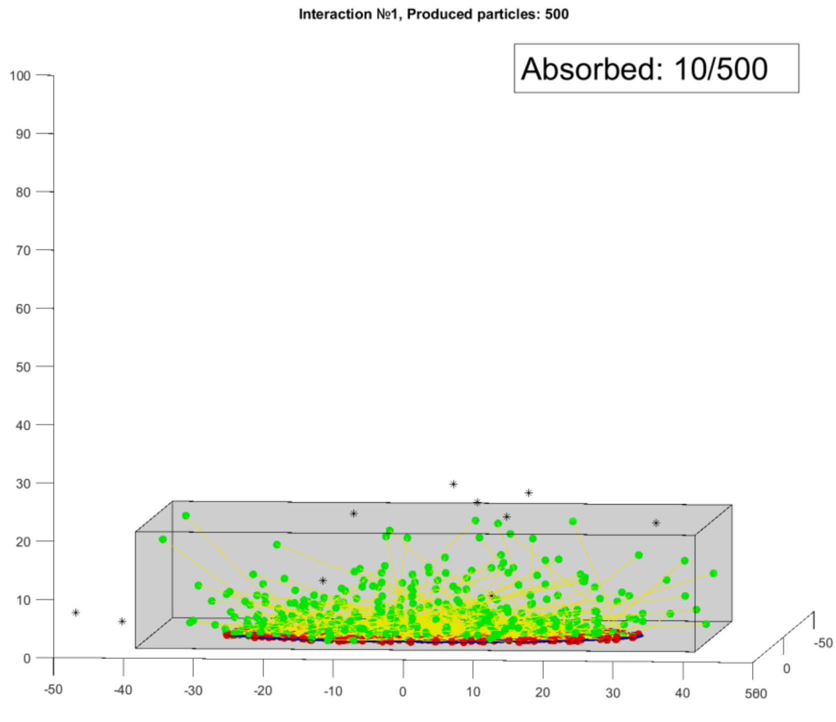


Рисунок 5. Розыгрыш точек первого взаимодействия ($N = 500$).
Красными точками показаны точки вылета частиц.
Зелёными точками показаны точки первого взаимодействия частиц.
Чёрными звёздами показаны поглощённые частицы.
Жёлтыми линиями – пути частиц.

$N = 1000$

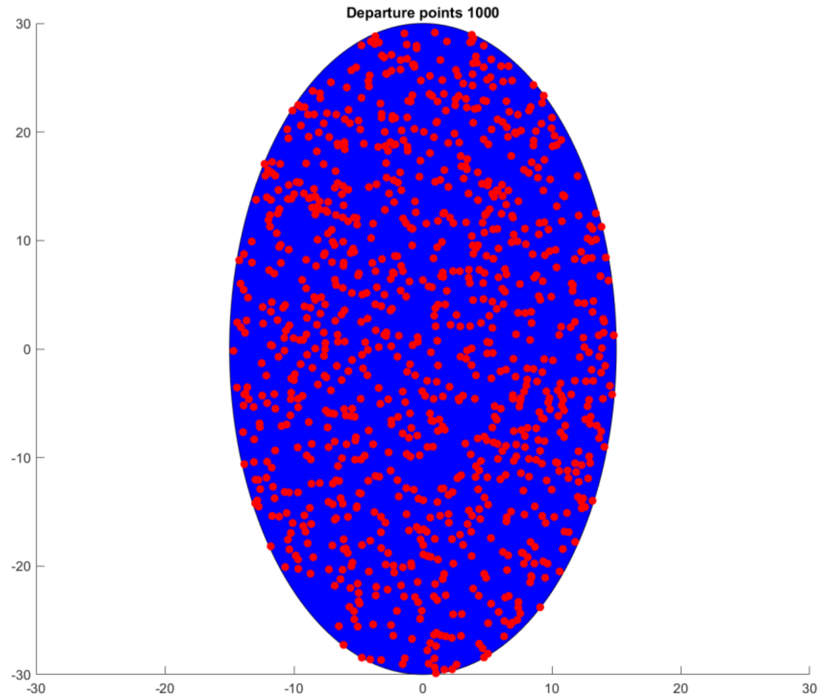


Рисунок 6. Розыгрыш точек вылета частиц ($N = 1000$).
Красными точками показаны точки вылета частиц.

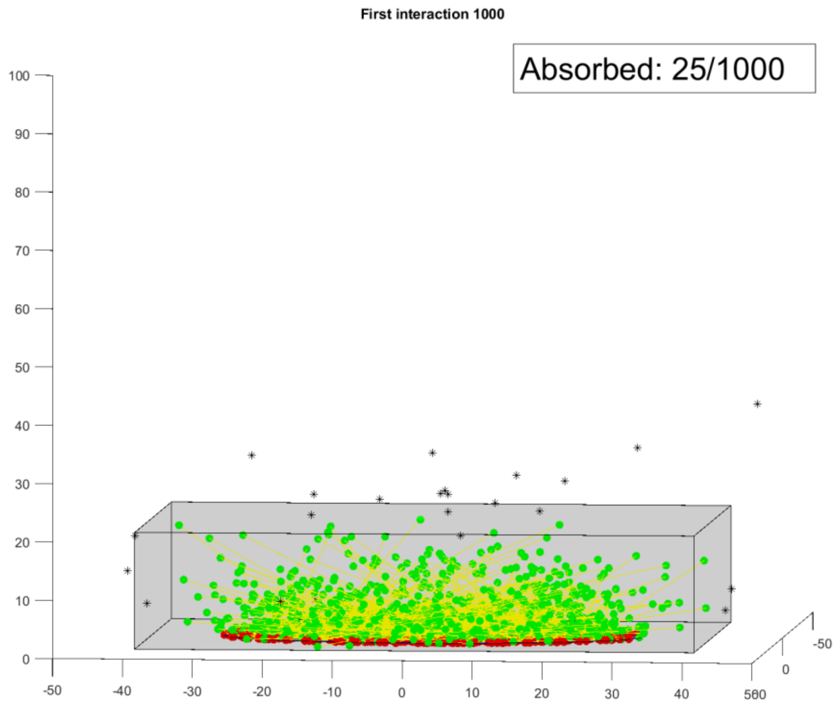


Рисунок 7. Розыгрыш точек первого взаимодействия ($N = 1000$).
Красными точками показаны точки вылета частиц.
Зелёными точками показаны точки первого взаимодействия частиц.
Чёрными звёздами показаны поглощённые частицы.
Жёлтыми линиями – пути частиц.

Результат розыгрыша четвёртого взаимодействия на примере $N = 500$:

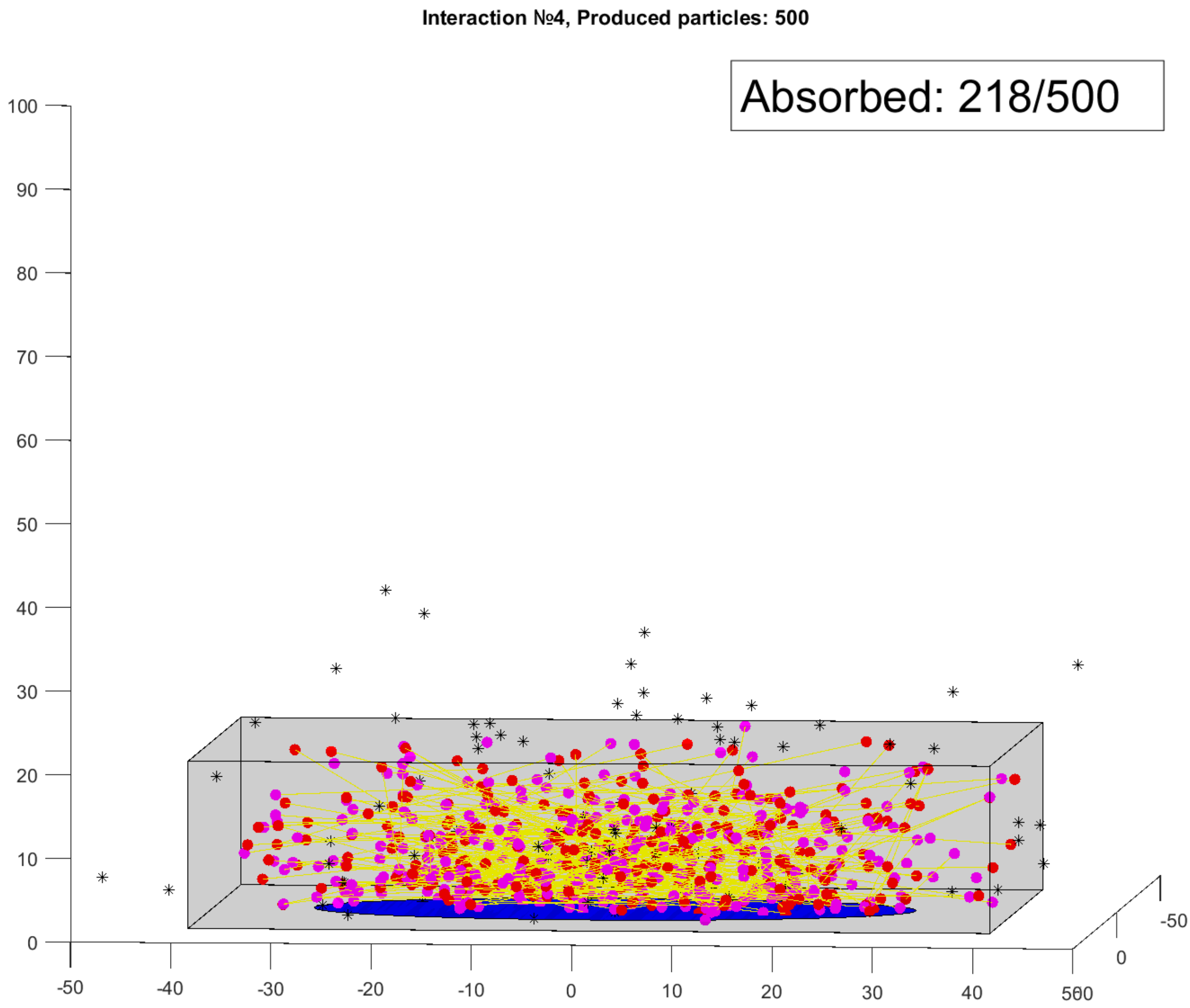
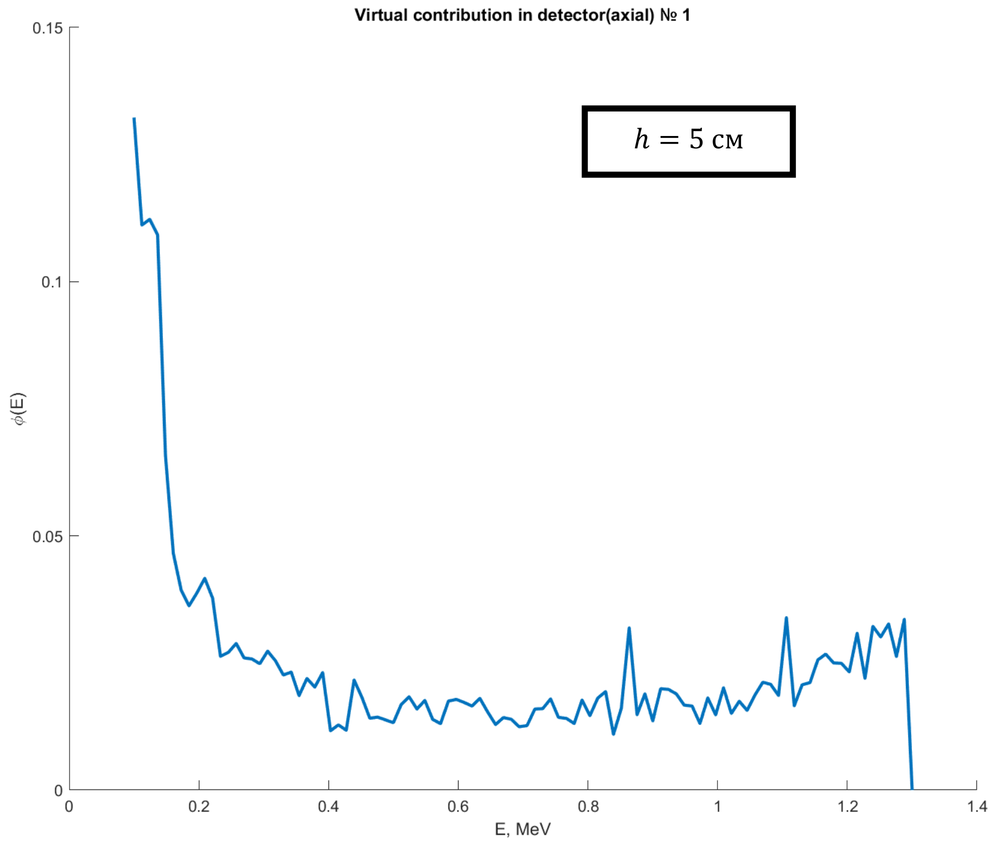
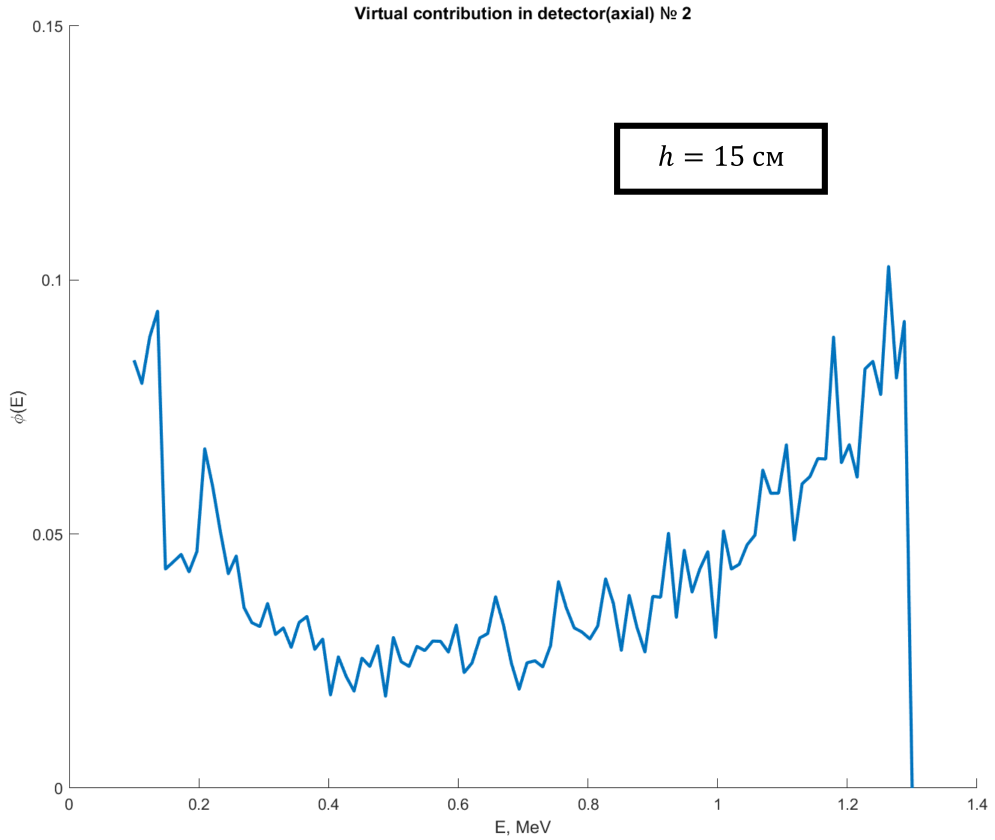


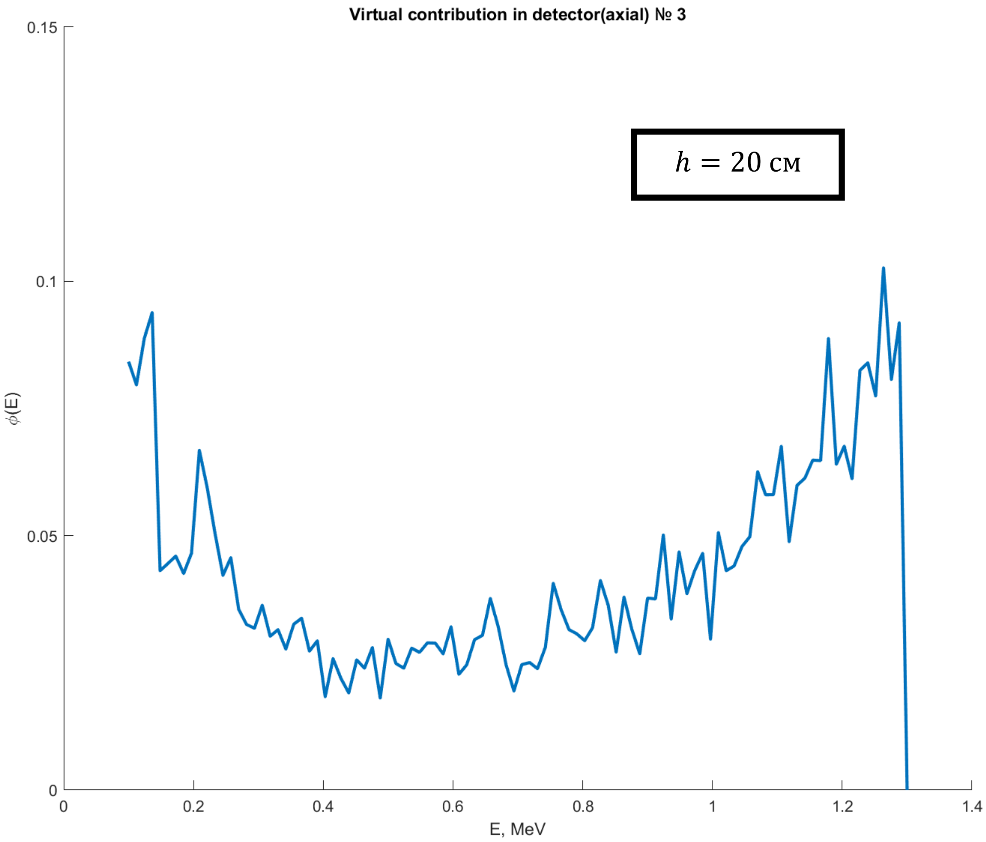
Рисунок 8. Розыгрыш точек четвёртого взаимодействия ($N = 500$).
Фиолетовыми точками показаны точки третьего взаимодействия частиц.
Красными точками показаны точки четвертого взаимодействия.
Чёрными звёздами показаны поглощённые частицы.
Жёлтыми линиями – пути частиц.

Оценка вклада частиц в детекторы на для $N = 10^5$:

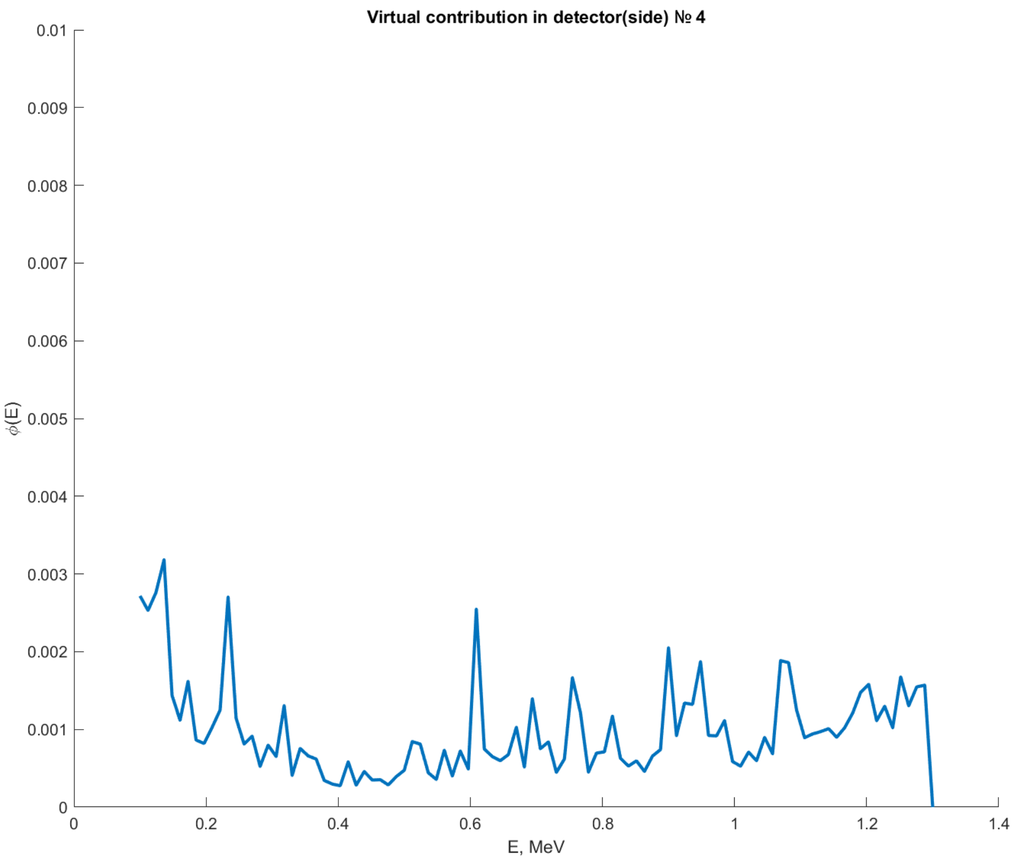
Детекторы на оси:

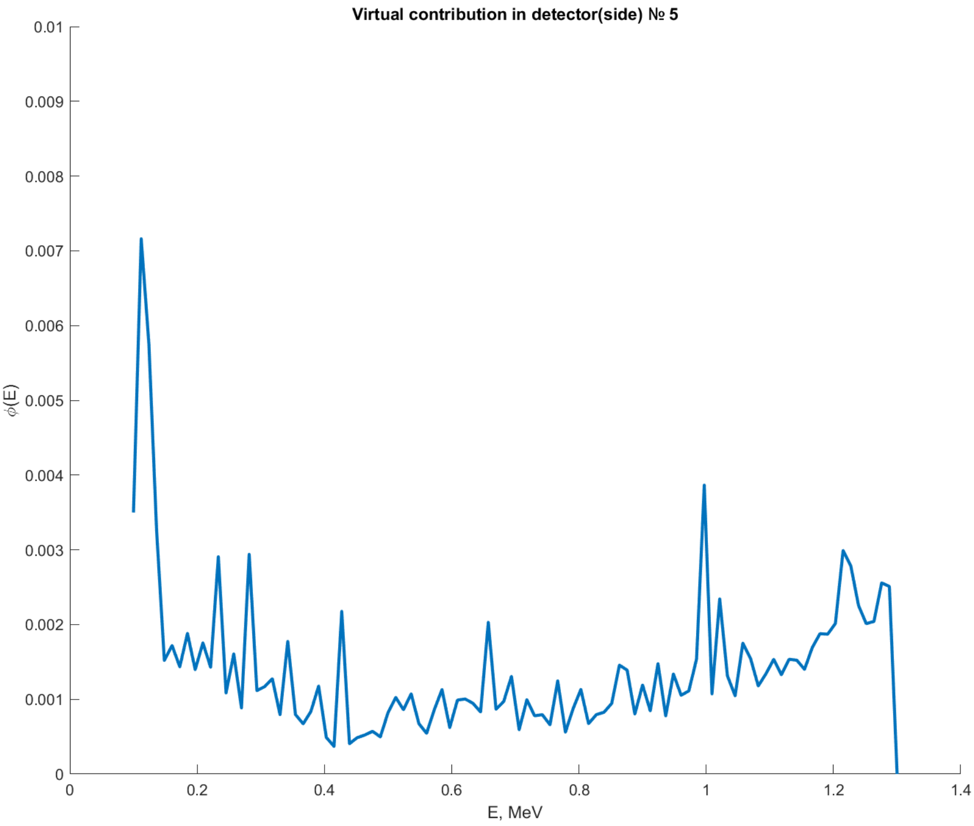


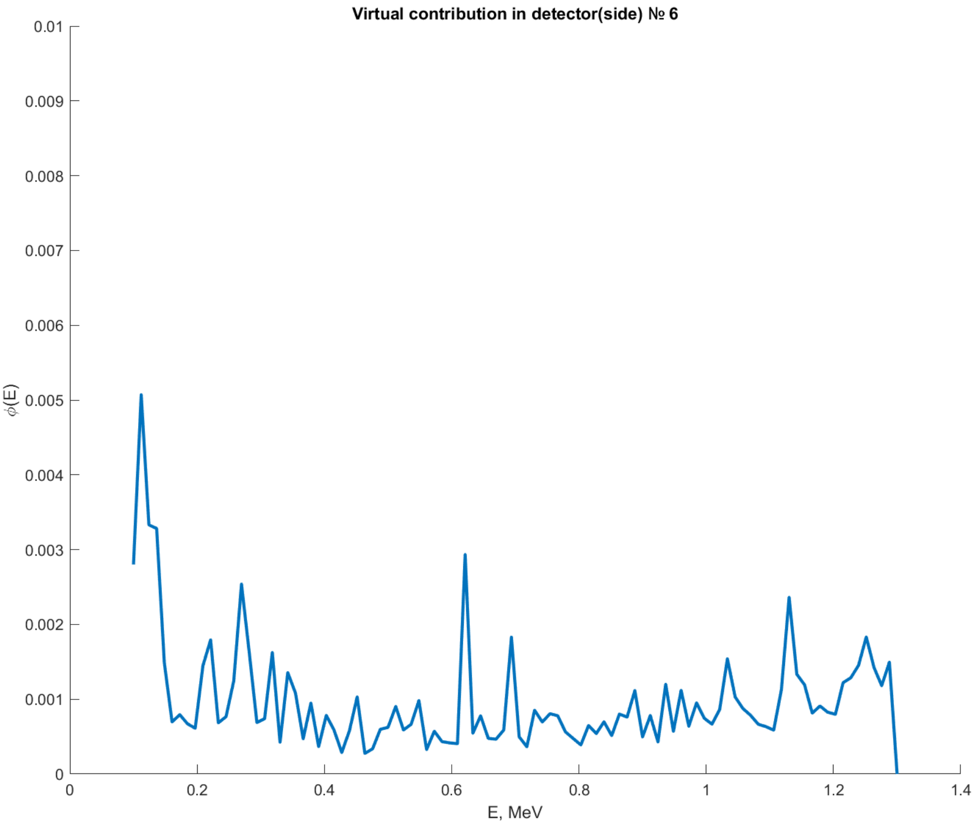


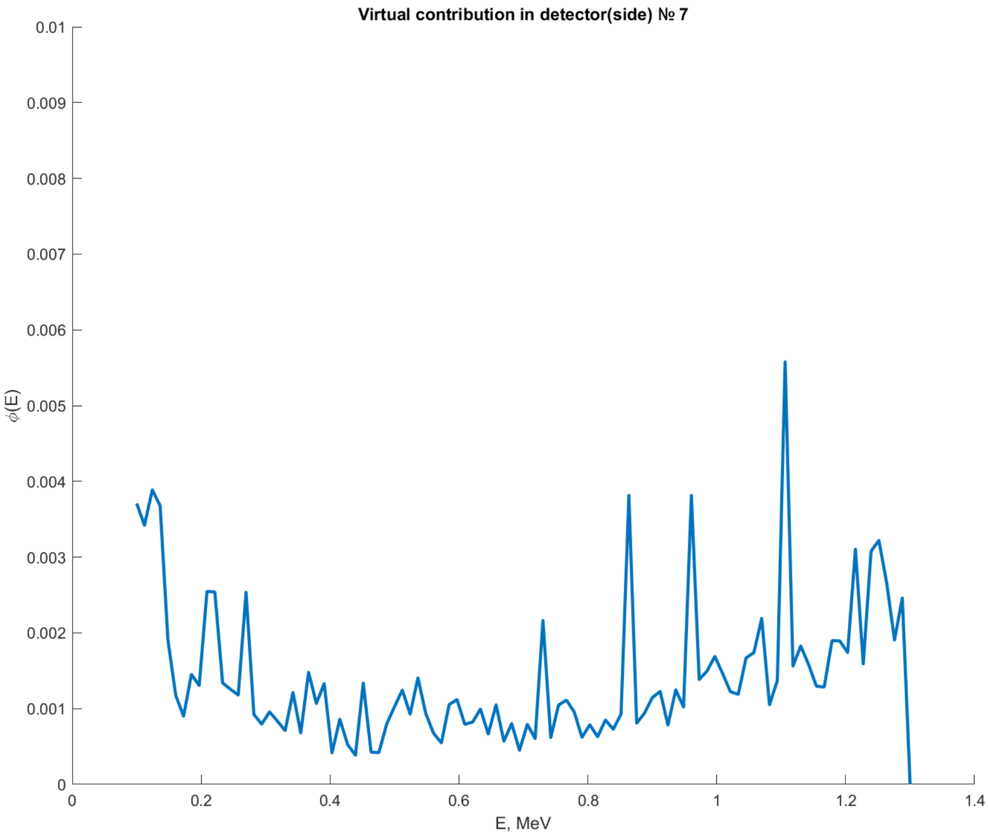


Детекторы на гранях:




Virtual contribution in detector(side) № 5
0.01
0.009
0.008
0.007
0.006
0.005
0.004
0.003
0.002
0.001
0
φ(E)
0
0.2
0.4
0.6
0.8
1
1.2
1.4
E, MeV


Virtual contribution in detector(side) № 6
0.01
0.009
0.008
0.007
0.006
0.005
0.004
0.003
0.002
0.001
0
φ(E)
0
0.2
0.4
0.6
0.8
1
1.2
1.4
E, MeV



Virtual contribution in detector(side) № 7
0.01
0.009
0.008
0.007
0.006
0.005
0.004
0.003
0.002
0.001
0
ϕ(E)
0
0.2
0.4
0.6
0.8
1
1.2
1.4
E, MeV

Заключение

Решение задачи переноса излучения методом Монте-Карло позволяет без особых вычислительных затрат получить оценки для макроскопических параметров, описывающих систему. Анализ полученных результатов позволяет сделать следующие выводы:

- во всех рассмотренных случаях проявляется изотропность и однородность источника частиц;
- число поглощённых частиц быстро растёт с увеличением номера взаимодействия (для $N = 500$ уже на четвёртом взаимодействии поглощена почти половина всех частиц);
- метод локальной оценки потока показал, что большой вклад в детекторы, особенно находящиеся близко к источнику, вносят низкоэнергетические частицы, что обусловлено, во-первых, быстрой потерей энергии частиц при комптоновском рассеянии и, во-вторых, локализацией низкоэнергетических частиц близи источника;
- метод локальной оценки потока показал изотропность среды и источника частиц, что видно из практически совпадающих показаниях детекторов, расположенных на боковых гранях.