

ПРЕЦИЗИОННОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧ ПЕРЕНОСА ЭЛЕКТРОНОВ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО*

П.А. Андросенко, В.И. Белоусов, А.Г. Царина

*Обнинский государственный технический университет атомной энергетики,
г. Обнинск*

Рассматриваются вопросы применения полуаналитического метода Монте-Карло для решения задач прохождения и отражения заряженных частиц в условиях барьерной геометрии. Выводятся рекуррентные формулы для оценок, позволяющие не моделировать длину свободного пробега частиц, что дает возможность с успехом решать задачи глубокого прохождения при моделировании переноса электронов методом индивидуальных соударений. Приводятся результаты расчетов, полученные по новой версии комплекса программ BRAND, основанной на разработанных алгоритмах.

ПРИМЕНЕНИЕ ПОЛУАНАЛИТИЧЕСКОГО МЕТОДА

При решении аналоговым методом Монте-Карло задач переноса излучений моделируют траектории движения частиц, последовательно разыгрывая длину свободного пробега частицы и изменение ее энерго-угловых характеристик соответственно ядру уравнения переноса. В случае же переноса электронов такой подход приводит к очень большим временам счета, т.к. число взаимодействий электрона в рамках одной траектории зачастую достигает десятков, а то и сотен тысяч столкновений. Кроме того, длины свободных пробегов электронов между столкновениями настолько малы, что задача автоматически попадает в класс задач глубокого прохождения излучения. Для преодоления этих трудностей обычно используют различные подходы (например, метод укрупненных соударений и другие), которые фактически «группируют» ряд последовательных столкновений с незначительными потерями энергии, заменяя их одним звеном ломаной траектории движения частицы. Понятно, что такие подходы являются приближенными и не позволяют напрямую воспользоваться самой современной информацией о взаимодействии излучения с веществом, которая содержится, как правило, в файлах оцененных данных.

Одним из возможных путей выхода из этой ситуации является использование полуаналитического (ПА) метода Монте-Карло [1], поскольку этот метод не требует вычислений длин свободного пробега. В настоящей работе рассматривается применение ПА-метода для расчета энергоугловых спектров прямого и отраженного излучения электронов для однородного бесконечного барьера заданной толщины d (допустим и случай $d = \infty$).

© П.А. Андросенко, В.И. Белоусов, А.Г. Царина, 2007

* Работа частично поддержана грантом РФФИ номер 07-01-96421-р_центр_а

Более того, использование ПА-метода позволяет напрямую использовать информацию о взаимодействиях электронов с веществом из файлов оцененных данных и тем самым моделировать процесс переноса электронов методом индивидуальных столкновений с точностью, лимитированной лишь точностью констант в самих файлах.

В данной работе использовались текстовые файлы оцененных данных формата ENDF-6 [2], в частности, файл вторичных распределений оцененных фотонно-электронных ядерных данных (File 26) и файл данных атомной релаксации (File 28). Были разработаны четыре основных алгоритма моделирования характеристик реакций электрона согласно формализмам формата ENDF-6, а также алгоритм моделирования хода реакции электроионизации с вычислением энергии релаксации атома. Подробное описание алгоритмов представлено в статье [3]. Кроме того, была разработана вспомогательная программа предварительной подготовки электронных данных, которая необходима для считывания информации из файлов формата ENDF-6 и представления ее в виде, удобном для использования в программном комплексе BRAND [4].

РЕАКЦИИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЭЛЕКТРОНОВ С ВЕЩЕСТВОМ

В этом разделе кратко рассматриваются четыре возможные реакции взаимодействия электронов с веществом согласно формализмам, принятым в формате ENDF-6.

Упругое взаимодействие подразумевает, что электрон продолжает свое движение с той же энергией, что и до столкновения со средой, только в другом направлении. Новых частиц при таком взаимодействии не порождается.

При тормозном излучении электрон продолжает свое движение с энергией меньшей, чем энергия до столкновения с атомом вещества, но в том же направлении, что и до столкновения. Также порождается новая частица, – фотон, летящий с некоторой энергией и в некотором направлении, отличным от направления движения электрона.

Реакция возбуждения атома вещества протекает таким образом, что электрон теряет часть своей энергии и передает ее остаточному атому. Направление движения электрона при этом не меняется.

Процесс электроионизации проходит так, что появляется новый электрон с некоторой энергией меньше, чем у налетающей частицы. В свою очередь налетающий электрон теряет часть своей первоначальной энергии. Оба электрона движутся в том же направлении, что и налетающий электрон. Причем один из них считается «рассеянным», другой – «освобожденным». Поскольку разницы между этими двумя частицами никакой нет (кроме энергии), то тот электрон, у которого энергия меньше считается «освобожденным», другой же – рассеянным. Здесь же необходимо упомянуть о перераспределении энергии релаксации атома с последующим возможным вылетом радиационных фотонов и «вышибаемых» электронов с уровней атома.

РЕКУРРЕНТНЫЕ СООТНОШЕНИЯ ДЛЯ БАРЬЕРА ЗАДАННОЙ ТОЛЩИНЫ

Пусть $p_k(z)$ – вероятность того, что частица находится в точке z перед k -м взаимодействием. Тогда вероятность провзаимодействовать в элементе dz около точки z есть $C_k \cdot p_k(z) \cdot dz$, где $C_k = \Sigma_k / w_k$, Σ_k – полное сечение k -го взаимодействия, w_k – косинус угла между направлением k -го рассеяния $\vec{\Omega}_k$ и осью OZ , нормальной к поверхности барьера. Следуя [1], получаем

$$p_{k+1}(z) = \int \frac{\Sigma_k}{w_k} \cdot p_k(z') \cdot dz' \cdot \frac{S_k}{\Sigma_k} \cdot \exp(-C_{k+1} \cdot (z - z')), \quad (1)$$

где S_k – сечение рассеяния k -го взаимодействия, т.е. S_k / Σ_k есть вероятность не поглотиться на k -ом взаимодействии. Интегрирование ведется на отрезке $[0, z]$ для случая $w_{k+1} > 0$ или на отрезке $[z, d]$ для случая $w_{k+1} < 0$.

Нетрудно показать, что

$$p_k(z) = \sum_{w_i > 0} A_{k,i} \cdot e^{-C_i \cdot z} + \sum_{w_i < 0} A_{k,i} \cdot e^{C_i \cdot (z-d)}, \quad (2)$$

причем $A_{1,1} = 1$. Суммирование ведется по соответствующим i от 1 до k . Интегрируя (1) с учетом (2), получаем следующие рекуррентные соотношения для случая $w_{k+1} > 0$

$$\begin{cases} A_{k+1,i} = \frac{S_k \cdot A_{k,i}}{|w_k| \cdot (C_{k+1} - C_i)}, & i = \overline{1, k} \\ A_{k+1,k+1} = - \left(\sum_{w_i > 0} A_{k+1,i} + \sum_{w_i < 0} A_{k+1,i} \cdot e^{C_i \cdot d} \right), \end{cases} \quad (3)$$

и для случая $w_{k+1} < 0$

$$\begin{cases} A_{k+1,i} = - \frac{S_k \cdot A_{k,i}}{|w_k| \cdot (C_{k+1} - C_i)}, & i = \overline{1, k} \\ A_{k+1,k+1} = - \left(\sum_{w_i > 0} A_{k+1,i} \cdot e^{-C_i \cdot d} + \sum_{w_i < 0} A_{k+1,i} \right). \end{cases} \quad (4)$$

Итак, движение частицы организуется следующим образом: энерго-угловая часть плотности перехода моделируется методом индивидуальных столкновений; по полученным значениям $\vec{\Omega}_k$ и E_k вычисляются необходимые величины для формул (3) или (4), затем вычисляются коэффициенты разложения (2) для $p_k(z)$. Моделирование пробега частицы заменяется аналитическим интегрированием по всевозможным пробегам.

В качестве оценки энергетического спектра альбеда можно использовать оценку

$$\xi = \sum_{k=1}^l p_k(0) \cdot \chi(-w_k), \quad (5)$$

где $\chi(t) = \begin{cases} 0, & t < 0 \\ 1, & t \geq 0 \end{cases}$ – функция Хевисайда, l – число рассеяний.

Оценкой энергетического спектра по заданному направлению $\vec{\Omega}_D$ будет

$$\eta = \sum_{k=1}^l p(\vec{\Omega}_k \rightarrow \vec{\Omega}_D) \cdot p_k(d), \quad (6)$$

где $p_k(d)$ для направления $\vec{\Omega}_D$ находятся аналогично $p_{k+1}(z)$ для направления $\vec{\Omega}_{k+1}$. Отметим, что эти же оценки можно использовать и для нахождения характеристик излучения в фиксированной точке z_D , необходимо лишь $p_k(d)$ заменить на $p_k(z_D)$.

РЕКУРРЕНТНЫЕ СООТНОШЕНИЯ ДЛЯ ПОЛУПРОСТРАНСТВА

Если геометрия задачи – полупространство, то рекуррентные формулы существенно упрощаются. При интегрировании в (1) для случая $w_{k+1} < 0$, т.е. на полу-

интервале $[z, \infty]$, получается, что коэффициент при $\exp(-C_{k+1} \cdot z)$ тождественно равен нулю. Таким образом, аналог (2) здесь есть

$$p_{k+1}^{\infty}(z) = \sum_{w_i > 0} A_{k,i} \cdot e^{-C_i \cdot z}. \quad (7)$$

Интегрируя (1) с учетом (7), получаем

$$\begin{cases} A_{k+1,i} = \text{sign}(w_{k+1}) \frac{S_k \cdot A_{k,i}}{|w_k| \cdot (C_{k+1} - C_i)}, & i = \overline{1, k} \\ A_{k+1,k+1} = -\chi(w_{k+1}) \cdot \sum_{w_i > 0} A_{k+1,i} \end{cases}. \quad (8)$$

Соответственно изменятся и оценки

$$\xi = \sum_{k=1}^L \chi(-w_k) \cdot \sum_{w_i > 0} A_{k,i}, \quad \eta = \sum_{k=1}^L p(\bar{\Omega}_k \rightarrow \bar{\Omega}_D) \cdot \sum_{w_i > 0} \frac{A_{k,i}}{C_0 - C_i}. \quad (9)$$

Отметим, что дисперсия η не зависит от угла между осью OZ и направлением $\bar{\Omega}_D$, что позволяет оценивать угловой спектр отраженного излучения при w_D близких к нулю. Это свойство оценки η аналогично свойству независимости дисперсии χ от толщины барьера d (см. [1]).

РЕШЕНИЕ НЕКОТОРЫХ ЗАДАЧ ПЕРЕНОСА ЭЛЕКТРОНОВ

Полученные рекуррентные соотношения и разработанные алгоритмы были реализованы в рамках специально созданной программы для решения задач переноса электронов методом индивидуальных соударений в условиях плоской геометрии. Вся информация о взаимодействиях электронов с веществом используется напрямую из файлов оцененных данных, поэтому можно говорить о том, что создан прецизионный инструмент для моделирования переноса электронов методом Монте-Карло. Основой новой программы является комплекс программ BRAND.

Моделирование процесса переноса излучения электронов в кремнии

Первый пример с простой геометрией был взят из эксперимента [6]: оценка потоков моноэнергетических электронов для кремния. Дана полубесконечная пластина из кремния толщиной 0.048085 см, точечный источник находится в начале координат, оценивается спектр электронов с начальной энергией 2.43 МэВ при прохождении через пластину. Количество дискретных разбиений по энергии – 600. Результаты вычислений можно видеть на рис. 1. Видно хорошее совпадение результатов расчетов и эксперимента (статистическая погрешность расчета – менее 1%).

Моделирование процесса переноса излучения электронов в алюминии

Второй пример с барьерной геометрией был взят из эксперимента [7]: оценка мощности дозы моноэнергетических электронов в алюминии. Дана полубесконечная пластина из алюминия, точечный источник находится в начале координат, оценивается распределение мощности дозы электронов с начальной энергией 1 МэВ при прохождении данной пластины. Результаты вычислений можно видеть на рис. 2. Также на рисунке проведено сопоставление с расчетами программы PENELOPE [8] по данным того же эксперимента. Моделирование данной задачи с

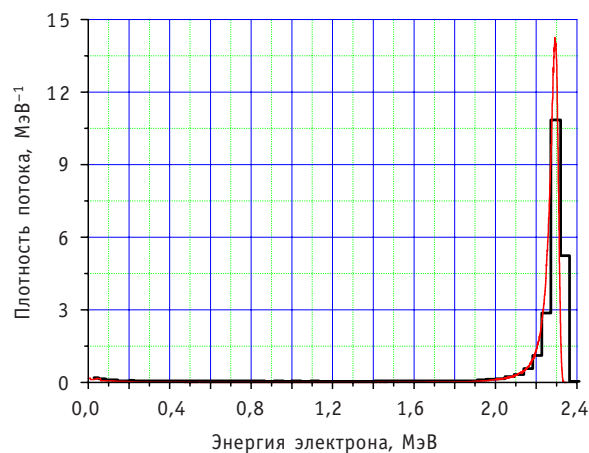


Рис. 1. Оценка плотности потока электронов с начальной энергией 2,43 МэВ после прохождения через кремниевую пластину толщиной 0,048085 см: ———— – эксперимент; ———— – BRAND

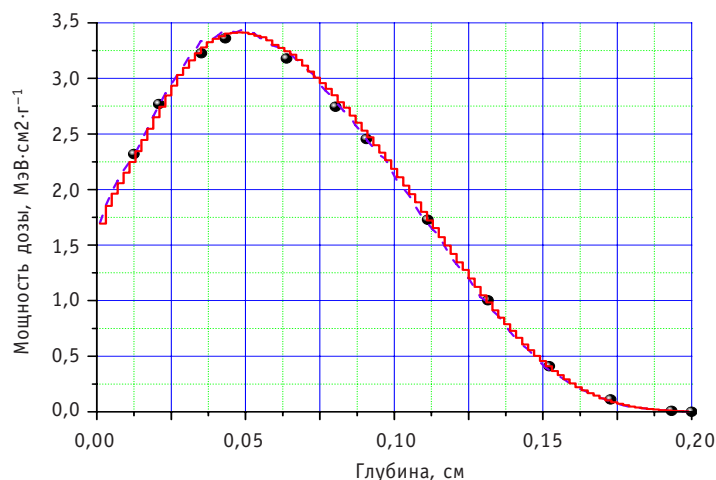


Рис. 2. Оценка распределения мощности дозы по глубине алюминиевой пластины от электронов с начальной энергией 1 МэВ: ● – эксперимент; - - - - PENELOPE; ———— – BRAND

использованием программы PENELOPE сделано самостоятельно.

После сопоставления экспериментальных данных и результатов вычислений программного комплекса BRAND можно сделать вывод о достаточной точности полученной оценки решения задачи. Результат решения задачи альтернативной расчетной программой PENELOPE подтверждает правильность новой разработанной версии программного комплекса BRAND.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Создан специальный программный комплекс, позволяющий решать задачи глубокого прохождения электронов в барьерной геометрии с использованием метода индивидуальных столкновений. В процессе расчета моделирование длины свободного пробега частиц заменяется аналитическим интегрированием по всевозможным пробегам. Вся информация о взаимодействиях электронов с веществом используется напрямую из файлов оцененных данных, поэтому можно утверждать, что создан прецизионный инструмент для моделирования переноса электронов методом Монте-Карло. Основой новой программы является комплекс программ

BRAND. В дальнейшем планируется создание новой версии комплекса, реализующей моделирование фотон-электронных каскадов.

Литература

1. Андросенко П.А., Ефименко Б.А. Модификация метода Монте-Карло для расчета локальных характеристик потока излучения // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 1978. – Вып. 18. – №6. – С. 1493-1499.
2. ENDF-102. Data Formats and Procedures for the Evaluated Nuclear Data File, ENDF-6. BNL-NCS-44945-01/04-Rev., Informal Report, Revised April 2001, N.Y. 11973-5000.
3. Androsenko P.A., Belousov V.I. The electron transport problem sampling by Monte Carlo individual collision technique. / Monte Carlo 2005 Topical Meeting, Chattanooga Marriott and Convention Center, Chattanooga, Tennessee (USA. – April 17-21, 2005).
4. Андросенко П.А., Белоусов В.И., Коньков А.В., Царина А.Г. Современный статус комплекса программ BRAND // Вопросы атомной науки и техники. Серия: Физика ядерных реакторов – 2006. – Вып. 1. – С. 74-84.
5. Андросенко П.А., Белоусов В.И. Прецизионное решение задач переноса электронов методом моделирования индивидуальных столкновений. / Научная сессия МИФИ. Т.5. Теоретические проблемы физики. – Москва, 2005. – С. 20-22.
6. Singh J.J. Transmission of 2.43 MeV Electrons Through Thick Silicon Targets // NASA Technical Note D-5075 – 1969.
7. Nakai Y. // Jpn. J. Appl. Phys. 2. – 1963. – P. 743.
8. Salvat F., Fernandez-Varea J.M., Sempau J. PENELope, a code system for Monte Carlo Simulation of Electron and Photon Transport. // Universitat de Barcelona – Barcelona, Spain, 2003.

Поступила в редакцию 2.05.2007

code that is a model of degradation of a water-cooled reactor fuel rod under severe accidents.

УДК 621.039.5+519.85

Monte Carlo Precise Solution of Electron Transport Problem \ P.A. Androsenko, V.I. Belousov, A.G. Tsarina; Editorial board of journal «Izvestia visshikh uchebnikh zavedeniy. Yadernaya energetika» (Communications of Higher School. Nuclear Power Engineering). – Obninsk, 2007. – 6 pages, 2 illustrations. – References – 8 titles.

The approach of the work is to consider questions of the semi-analytic Monte Carlo method application for the problems decision of charged particles deep transmission, and also albedo, in conditions of barrier geometry. Estimation recurrent formulas for building of the sampling process without simulating of the particles free path length are deduced that allow the researcher to solve problems of deep penetration by simulating of electrons transport with the individual collisions technique successfully. The results of calculations from new BRAND version code that based on developed algorithms are given.

УДК 621.039.5+519.85

Monte Carlo Simulation of Ionizing Radiation Influence on Chemical Composition of Human Tissues \ P.A. Androsenko, V.I. Belousov, A.G. Tsarina; Editorial board of journal «Izvestia visshikh uchebnikh zavedeniy. Yadernaya energetika» (Communications of Higher School. Nuclear Power Engineering). – Obninsk, 2007. – 5 pages, 1 table, 1 illustration. – References – 4 titles.

The description and justification of the algorithm for modeling of radiation influence on tissue cells structure is developed on the basis of a statistical testing method. The main researched parameter is a dynamics of the concentration changes of free radicals and substances that are structural elements of cells. The received results agree well with theoretical and experimental data.

УДК 621.362

Universal mathematical model of electricity generation channel for heat, electrical and physical characteristics calculation \ D.G. Lazarenko; Editorial board of journal «Izvestia visshikh uchebnikh zavedeniy. Yadernaya energetika» (Communications of Higher School. Nuclear Power Engineering). – Obninsk, 2007. – 12 pages, 2 illustrations. – References – 16 titles.

Mathematical model of cylindrical geometry electricity generation channel for termionic reactor-converter for heat, electrical and physical characteristics calculation is considered. Proposed calculation method is suitable for multivariate calculations including optimization of output characteristics of electricity generation channels.

УДК 621.039.58

Mathematical Model of the Automated Technological Complex «Protection Object - Safety System» Function Process with Renewable Unit and Recurrent Control of Safety System \ A.I. Pereguda, D.A. Timashov; Editorial board of journal «Izvestia visshikh uchebnikh zavedeniy. Yadernaya energetika» (Communications of Higher School. Nuclear Power Engineering). – Obninsk, 2007. – 9 pages, 2 illustrations. – References – 9 titles.

In the paper mathematical model of the automated technological complex «protection object - safety system» function process is proposed, in which system of scheduled recovery procedures is considered. The aim of this system is to provide safety operation of protection object. Cascade of integral equations was obtained and solved to calculate propability of complex crash on time interval $[0, t]$.

УДК 621.534: 519.7

Scattering Problem for Model Potential of Fission for Heavy Nucleus and Program Systems in Applied Mathematical Programs \ A.V. Tikhonenko; Editorial board of journal «Izvestia visshikh uchebnikh zavedeniy. Yadernaya energetika» (Communications of Higher School. Nuclear Power Engineering). – Obninsk, 2007. – 10 pages, 5 tables, 8 illustrations. – References – 16 titles.

Models of two- and tree-peaked fission barriers for heavy nucleus are formulated and program systems are developed in order to obtain exact solutions for wave functions, calculate transmission