

О статистических методах моделирования переноса электронов в веществе.

Жуковский М.Е.

Институт прикладной математики им. М.В.Келдыша РАН

Скачков М.В.

Московский инженерно-физический институт (Государственный университет)

Аннотация.

Предложены алгоритмы статистического моделирования переноса электронов в плотных материалах, основанные на предварительном расчете плотности распределений характеристик электронных потоков и методе вложенных траекторий. Разработана эффективная модель «утолщенных» траекторий для расчета энергетических и угловых распределений электронов при их распространении в объектах, а также упрощенная инженерная модель для определения спектральных характеристик электронов. Рассмотренные алгоритмы показали свое преимущество перед такими известными пакетами, как MCNP.

On the statistical methods of modeling the electron transport in matter.

M.Zhukovskiy

Keldysh Institute for applied mathematics RAS

M.Skachkov

Moscow Engineering Physics Institute (State University)

Abstract.

Statistical methods of modeling the electron transfer in a dense matter are developed. The methods are based on the beforehand calculation of electron fluxes characteristics distributions and on the nested trajectories method. The effective “thickened paths” model for modeling the electrons propagation in materials is constructed. The simplified “engineering” model for calculating the spectral electron characteristics is built up. The advantage of the developed algorithms in comparison with widely known MCNP code is shown.

Введение.

Математическое моделирование процессов взаимодействия ионизирующего излучения с объектами сложной геометрии и внутренней структуры имеет большое значение во многих приложениях. В частности, в рамках задач рентгеновской диагностики материалов и конструкций требуется определить и исследовать рентгеновские изображения объектов [1], а при изучении электромагнитного воздействия проникающего излучения необходимо проанализировать распределение потоков релятивистских электронов, возникающих в результате взаимодействия ионизирующего излучения с материалами объектов [2].

Моделированию процессов трансформации проникающего излучения в материалах объектов посвящено большое число публикаций. В одних работах используются и развиваются сеточные методы решения уравнения переноса излучения [3-5]. В других разрабатываются вычислительные алгоритмы, основанные на статистическом моделировании методом Монте-Карло процессов переноса и взаимодействия излучения с веществом [6,7]. Преимущество метода Монте-Карло перед альтернативными методами, основанными на численном решении кинетического уравнения, определяется удобством и приспособленностью этого метода к решению сложных граничных задач в многокомпонентных средах.

Эффективность применения метода Монте-Карло определяется в настоящее время, во-первых, развитием способов уменьшения статистической погрешности результатов расчетов и, во-вторых, прогрессом в области создания быстродействующих многопроцессорных вычислительных систем.

Статистическое моделирование переноса электронов и других заряженных частиц представляет значительно большую трудность, чем моделирование переноса фотонов. Взаимодействие нейтральных частиц с материалами объектов характеризуется небольшим числом независимых столкновений с атомами вещества и участками свободного и прямолинейного движения этих частиц между столкновениями. При взаимодействии фотонов с веществом происходит один из возможных элементарных процессов взаимодействия (поглощение, упругое или неупругое рассеяние). Перенос электронов и других заряженных частиц происходит при постоянном действии кулоновских сил, приводящих к большому числу элементарных взаимодействий. Например, фотон в алюминии теряет энергию 500 кэВ, испытывая при этом около десяти столкновений, а электрон теряет ту же энергию, испытывая около 10^5 элементарных взаимодействий.

Настоящая работа посвящена описанию методики статистического моделирования переноса электронов в веществе. Центральным звеном методики является модель утолщенных траекторий [8] (МУТ). Преимущество этой модели заключается в отказе от

использования приближенных распределений теории многократного рассеяния при сохранении экономичности вычислений. Распределения для расчетов с использованием МУТ получают путем расчетов по модели индивидуальных соударений (МИС), которая, имея примерно одинаковую с МУТ точность, значительно проигрывает последней в быстродействии.

С помощью МУТ строятся распределения для расчетов по упрощенной инженерной модели электронной эмиссии с поверхности объекта под действием ионизирующего излучения. Эта модель теряет в точности по сравнению с МУТ, но выигрывает в скорости расчетов.

Физическая модель.

Рассматривается поток электронов (в том числе, родившихся внутри вещества, например, в результате взаимодействия гамма-излучения с этим веществом), распространяющийся внутри плотного вещества.

Задача переноса электронов в веществе ставится при следующих достаточно общих предположениях:

- 1) рассеивающие центры среды (атомы) расположены случайно;
- 2) электрон потока взаимодействует одновременно только с одним рассеивающим центром;
- 3) электроны потока не взаимодействуют между собой.

В этих предположениях можно говорить о достаточно четкой пространственной локализации взаимодействия и прийти к понятию траектории частицы как некоторой ломаной, в точках излома которой происходит взаимодействие электронов с веществом и изменение состояния частицы, т.е. направления её движения и энергии.

Взаимодействие электронов с веществом характеризуется упругим рассеянием и столкновениями, сопровождающимися потерями энергии, обусловленными двумя основными механизмами: радиационным и ионизационным торможением [9].

Дифференциальное сечение упругого рассеяния аппроксимируется формулой Мотта [6,7]:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{N \cdot Z \cdot (Z+1) \cdot r_e^2 \cdot (1-\beta^2)}{\beta^4 \cdot (1-\cos\theta + 2\eta)^2} \cdot \left(1 - \frac{\beta^2}{2} \cdot \frac{1-\cos\theta}{2} + \pi\alpha Z\beta \cdot \frac{1+\cos\theta}{2} \cdot \sqrt{\frac{1-\cos\theta}{2}} \right),$$

где $\eta = 1.7 \cdot 10^{-5} \cdot Z^{2/3} \cdot (1 - \beta^2) \cdot [1.13 + 3.76 \cdot (Z \cdot \alpha / \beta)^2] / \beta^2$ – параметр экранирования, α – постоянная тонкой структуры, Z – заряд ядер атомов среды, N – концентрация атомов среды, r_e – классический радиус электрона, β – отношение скорости электрона к скорости света, θ – угол между направлениями движения электрона до и после столкновения.

Потери энергии электрона в процессе всех типов неупругих столкновений учитываются в приближении непрерывного замедления, т.е. предполагается, что за пройденный путь Δt

электрон теряет энергию $\Delta E = \int_0^{\Delta t} \left(-\frac{dE}{ds} \right) ds$, где $\left(-\frac{dE}{ds} \right)$ – линейная тормозная

способность электрона, значения которой для разных материалов и энергий электрона имеются, например, в базе данных на сайте www.nist.gov. Использование этого приближения обусловлено отсутствием у авторов доступа к апробированной базе данных по сечениям элементарных неупругих взаимодействий электронов с атомами среды.

Флуктуации энергетических потерь учитываются по теории Ландау [10], развитой Блунком и Лейзегангом [11].

Математические модели переноса электронов в веществе.

Как известно, метод Монте-Карло в задачах переноса частиц в веществе сводится к построению большого числа траекторий частиц, представляющих некоторые ломаные линии, прямолинейные участки которых соответствуют свободным пробегам до столкновений. Свободный пробег, результат столкновения (поглощение или рассеяние), а также характеристики электрона после столкновения (энергия и направление движения рассеянной частицы) разыгрываются из соответствующих вероятностных распределений. Результаты выборки из конечного числа траекторий обрабатываются статистическими методами. Результатом моделирования является распределение частиц, вылетевших из объекта, по энергии и направлению движения.

Распространение электронов в веществе имеет ряд характерных особенностей, которые в большинстве случаев не позволяют непосредственно моделировать их траектории с помощью метода Монте-Карло. Электроны, двигаясь в веществе, теряют энергию в упругих и неупругих столкновениях, пока их скорость не снизится до тепловой или пока электрон не достигнет границ объекта. Определяющую роль в их торможении играет кулоновское взаимодействие с атомами, поэтому длина пробега между столкновениями мала, а сами столкновения сопровождаются в основном малыми потерями энергии. Вследствие этого электрон испытывает на своем пути огромное число столкновений, что делает практически

невозможным прямое моделирование их траекторий (см. ниже, модель индивидуальных соударений).

Эти трудности обычно обходят, используя методы группировки столкновений (см., например, [12]). При этом путь электрона в веществе моделируется с помощью т.н. «вложенной траектории» [13]. В отличие от реальных траекторий, где узлами являются точки столкновений, переход из одного узла вложенной траектории в другой есть результат многократного рассеяния (см. ниже, модель укрупненных соударений). Основой для такого моделирования являются результаты теории многократного рассеяния, в частности, распределение Гоудсмита-Саундерсона.

Для использования метода Монте-Карло не требуется, вообще говоря, формулировать математическую модель в виде уравнений. Но фактически всегда можно говорить о том, что с помощью этого метода решается один из вариантов кинетического уравнения. Кинетическое уравнение Больцмана в общем случае нестационарного переноса записывается в виде:

$$\frac{1}{v} \frac{d\Phi}{dt} + \mathbf{\Omega} \cdot \nabla \Phi + N\sigma \cdot \Phi = N \int d\Omega' \int dE' \frac{d^2 \sigma(E', E, \mathbf{\Omega}' \cdot \mathbf{\Omega})}{dE d\Omega} \Phi + S, \quad (1)$$

где $\Phi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E, t)$ – дифференциальная плотность потока частиц в момент времени t , в точке с координатами \mathbf{r} и движущихся в направлении $\mathbf{\Omega}$ с энергией E , $S(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E, t)$ –

плотность источников, $\sigma = \sum_k \sigma_k$ и $\frac{d^2 \sigma(E', E, \mathbf{\Omega}' \cdot \mathbf{\Omega})}{dE d\Omega} = \sum_k \frac{d^2 \sigma_k(E', E, \mathbf{\Omega}' \cdot \mathbf{\Omega})}{dE d\Omega}$ –

полное и дифференциальное сечения взаимодействия, индекс k указывает на конкретный элементарный процесс взаимодействия. Предполагается только бинарный характер соударения.

В стационарном случае и в приближении непрерывного замедления (частица теряет энергию малыми порциями, не рассеиваясь при этом) уравнение (1) переходит в уравнение Левиса–Спенсера [14,15]

$$\mathbf{\Omega} \cdot \nabla \Phi + N\sigma_{el} \cdot \Phi - \frac{\partial}{\partial E} \left[\left(-\frac{dE}{ds} \right) \cdot \Phi \right] = N \int d\Omega' \frac{d\sigma_{el}(E, \mathbf{\Omega}' \cdot \mathbf{\Omega})}{d\Omega} \Phi + S, \quad (2)$$

где $\left(-\frac{dE}{ds} \right)$ – линейная тормозная способность электрона, σ_{el} и $\frac{d\sigma_{el}}{d\Omega}$ – полное и

дифференциальное сечения упругого рассеяния.

Далее в работе будут рассмотрены общие схемы метода Монте-Карло, которые будут формулироваться в виде статистических моделей переноса электронов в веществе. Эти

статистические модели соответствуют математическим задачам для кинетического уравнения переноса (1) в стационарном случае или его упрощённого варианта (2).

Модель индивидуальных соударений (МИС).

МИС [6] является наиболее простой и очевидной моделью переноса частиц в веществе. В ней осуществляется прямое моделирование траекторий частиц, начальные координаты, энергия и направление движения которых выбираются или разыгрываются в соответствии с распределением источников S . Считается, что в каждой узловой точке траектории (рис.1) происходит один из возможных элементарных процессов взаимодействия. Вероятность каждого из этих процессов пропорциональна его вкладу в полное сечение взаимодействия. Распределения угла рассеяния и потери энергии частицы описываются дифференциальными сечениями соответствующих элементарных процессов.

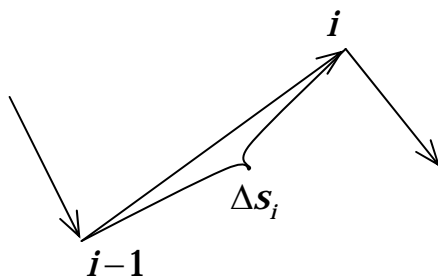


Рис.1. Траектория электрона в модели индивидуальных соударений.

Алгоритм построения i -го звена траектории частицы в МИС имеет следующий вид:

- розыгрыш пробега частицы в соответствии с законом ослабления $\Delta s_i = -\lambda_{i-1} \ln \gamma$, $\lambda_{i-1} = (\sigma_{i-1} N)^{-1}$, где σ_{i-1} – полное сечение взаимодействия электрона с веществом (см. формулу (1)) или полное сечение упругого рассеяния (см. формулу (2)), λ – средний свободный пробег частицы в материале объекта, γ – равномерно распределённое на $(0,1)$ случайное число;
- вычисление координат точки взаимодействия: $\mathbf{r}_i = \mathbf{r}_{i-1} + \Delta s_i \mathbf{\Omega}_{i-1}$, где $\mathbf{\Omega}_{i-1}$ – единичный вектор, указывающий направление движения частицы;
- проверка вылета частицы из объекта, вычисление вклада частицы в плотность потока, угловые и энергетические распределения частиц на границе объекта (регистрация частицы);
- розыгрыш вида взаимодействия, вероятность каждого из которых есть $p_k = \sigma_{i-1}^{(k)} / \sigma_{i-1}$, где $\sigma_{i-1}^{(k)}$ – сечение взаимодействия k -го типа;

- розыгрыш потери энергии частицы или вычисление потери энергии по схеме

непрерывного замедления:
$$\Delta E_i = - \int_0^{\Delta s_i} \frac{dE}{ds} ds, \quad \frac{dE}{ds} = \left(\frac{dE}{ds} \right)_{ion} + \left(\frac{dE}{ds} \right)_{rad};$$

- розыгрыш полярного угла рассеяния частицы в точке взаимодействия из распределения

$$F(\theta < \theta^*) = \frac{1}{\sigma_i^{(k)}} \int_0^{\theta^*} \frac{d\sigma_i^{(k)}}{d\Omega} d\Omega, \text{ где } d\sigma_i^{(k)} / d\Omega - \text{ дифференциальное сечение рассеяния}$$

при k -м взаимодействии;

- розыгрыш азимутального угла рассеяния $\varphi^* = 2\pi\gamma$;

- определение нового направления движения рассеянной частицы Ω_i в исходной системе координат.

Модель индивидуальных соударений (МИС) широко используется при моделировании нейтронных и фотонных траекторий. Применение МИС для заряженных частиц связано с огромными вычислительными затратами, поскольку взаимодействие заряженных частиц обычно сопровождается очень большим числом соударений.

Модель укрупнённых соударений (МУС).

Для описания движения электронов в веществе широко используется модель укрупнённых соударений (МУС) [6]. Эта модель объединяет в себе целый класс алгоритмов, построенных с использованием метода Монте-Карло (модель катастрофических столкновений, модель малых передач энергии и др.) на основе идеи вложенных траекторий и результатах теории многократного рассеяния (см. выше). При построении МУС предполагается, что на каждом из звеньев вложенной траектории частицы происходит большое число индивидуальных соударений. Распределения углов рассеяния и потерь энергии в конце каждого из звеньев траектории берутся из теории многократного рассеяния. Распределения этой теории являются приближенными и имеют ограниченную область применимости. Длина звена вложенной траектории не разыгрывается, а выбирается определенным образом в соответствии с областью применимости теории многократных соударений. Вычислительные схемы МУС приходится тщательно сопоставлять с результатами расчетов, проведенных с использованием более детальной и точной МИС, для того, чтобы избежать систематических погрешностей.

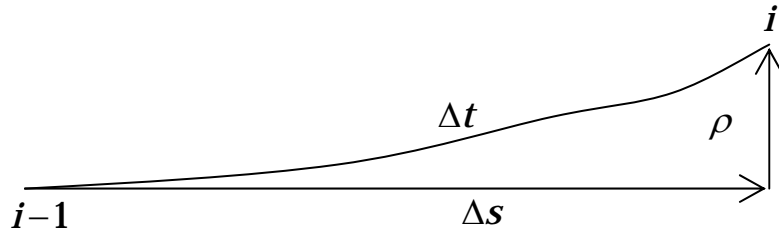


Рис.2. Построение алгоритма по модели укрупненных соударений.

Алгоритм построения i -го звена вложенной траектории электрона (рис.2) в МУС строится по следующей схеме:

- выбор криволинейного отрезка траектории $\Delta t(E_{i-1})$;
- розыгрыш угла многократного рассеяния $\theta^*(\Delta t, \gamma)$ из распределения Гоудсмита – Саундерсона:

$$F(\Delta t, \cos \theta^*) = \sum_{l=0}^{\infty} \left(l + \frac{1}{2} \right) \cdot \exp(-\Delta t \cdot G_l) \cdot P_l(\cos \theta^*),$$

$$G_l = 2\pi N \int_{-1}^1 \frac{d\sigma_{el}}{d\Omega} \cdot [1 - P_l(\mu)] \cdot d\mu,$$

где $d\sigma_{el}/d\Omega$ – дифференциальное сечение упругого рассеяния, $P_l(\mu)$ – полином Лежандра, N – плотность атомов среды;

- вычисление или розыгрыш прямолинейного шага траектории $\Delta s(\Delta t, \theta^*)$ и радиального смещения $\rho(\Delta t, \theta^*)$ каким-либо приближённым способом (см., например, [6, 9]);
- розыгрыш азимутального угла рассеяния $\varphi^* = 2\pi\gamma$;
- определение новых координат электрона \mathbf{r}_i ;
- регистрация электрона, если он вылетел из объекта;
- розыгрыш потери энергии из интегральных распределений Ландау, Блунка – Лейзеганга или вычисление энергии электрона E_i по схеме непрерывного замедления;
- определение нового направления движения электрона $\mathbf{\Omega}_i$ в исходной системе координат.

МУС значительно экономичнее МИС по вычислительным затратам. Недостатком МУС является наличие в расчётах систематической погрешности, обусловленной приближениями теории многократного рассеяния и использованием приближённых формул для вычисления прямолинейного шага траектории $\Delta s(\Delta t, \theta^*)$ и радиального смещения $\rho(\Delta t, \theta^*)$ (см. рис.2).

Модель утолщённых траекторий (МУТ).

В настоящей работе для описания движения электронов в веществе предлагается модель утолщённых траекторий (МУТ) [8]. Эта модель относится к классу моделей, основанных на методе вложенных траекторий. Однако, в отличие от известных алгоритмов, построенных с использованием этого метода, в МУТ не используются приближенные распределения теории многократных столкновений. Вычислительная схема МУТ аналогична МИС. В ней также сначала производится розыгрыш длины прямолинейного участка траектории, а затем энергии и направления движения рассеянной частицы.

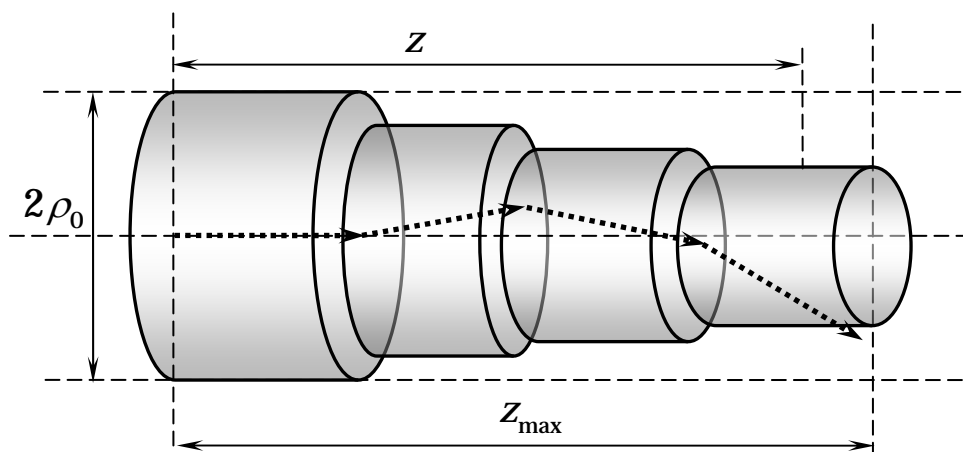


Рис.3. Задача о движении электрона в трубке.

Все распределения, необходимые для розыгрышей параметров траектории и энергии электрона, получают заранее с использованием МИС. Для этого решают вспомогательную задачу о рассеянии электронов, движущихся вдоль трубки (рис.3). Толщина этой трубки меняется вдоль траектории электрона и зависит от его текущей энергии $2\rho = n\lambda$ (λ – средний свободный пробег электрона, который определяется через полное сечение упругих столкновений $\lambda = (\sigma_{el} \cdot N)^{-1}$, N - концентрация атомов вещества). Коэффициент пропорциональности n зависит от материала, внутри которого движется электрон, энергии электрона, и определяется в результате анализа результатов расчетов с использованием модели индивидуальных соударений. Длина трубки z_{max} определяется из условия малости потери энергии электроном, например, $z_{max} = z(E_0, E = 0.9E_0)$, т.е. длина трубки ограничивается величиной, на которой электрон теряет 10% своей начальной энергии. Оценка z_{max} может быть проведена, например, в приближении непрерывного замедления.

В указанной задаче вклад электрона в искомые распределения на выходе из трубки вычисляется при выполнении одного из трёх условий:

1) если электрон вылетел за боковую поверхность трубки, т.е. поперечное (перпендикулярное оси симметрии трубки) смещение электрона $\rho^* \geq \rho$;

2) если электрон начал движение в обратном (по отношению к начальному) направлении: $\cos \theta^* < 0$ (θ^* - угол между осью трубки, которая выбирается в направлении первоначального движения электрона, и направлением движения после очередного столкновения);

3) если электрон вылетел через «дно» трубки, т.е. его продольное смещение Z превысило длину трубки $Z \geq Z_{\max}$.

Таким образом, получают: 1) плотность распределения электронов по координате и начальной энергии $f_1(z | E_0)$, 2) плотность распределения электронов по косинусу угла рассеяния, координате и начальной энергии $f_2(\cos \theta^* | z, E_0)$, 3) плотность распределения электронов по конечной энергии, координате и начальной энергии $f_3(E | z, E_0)$ или среднюю конечную энергию электронов $\bar{E}(z, E_0)$ (для схемы непрерывного замедления).

В качестве примера на рис.4 изображены графики зависимости вероятности $P(s > z)$ прохождения электроном пути $s > z$ в трубке для различных начальных энергий электрона. Эти зависимости получены для железа (Fe) описанным выше способом.

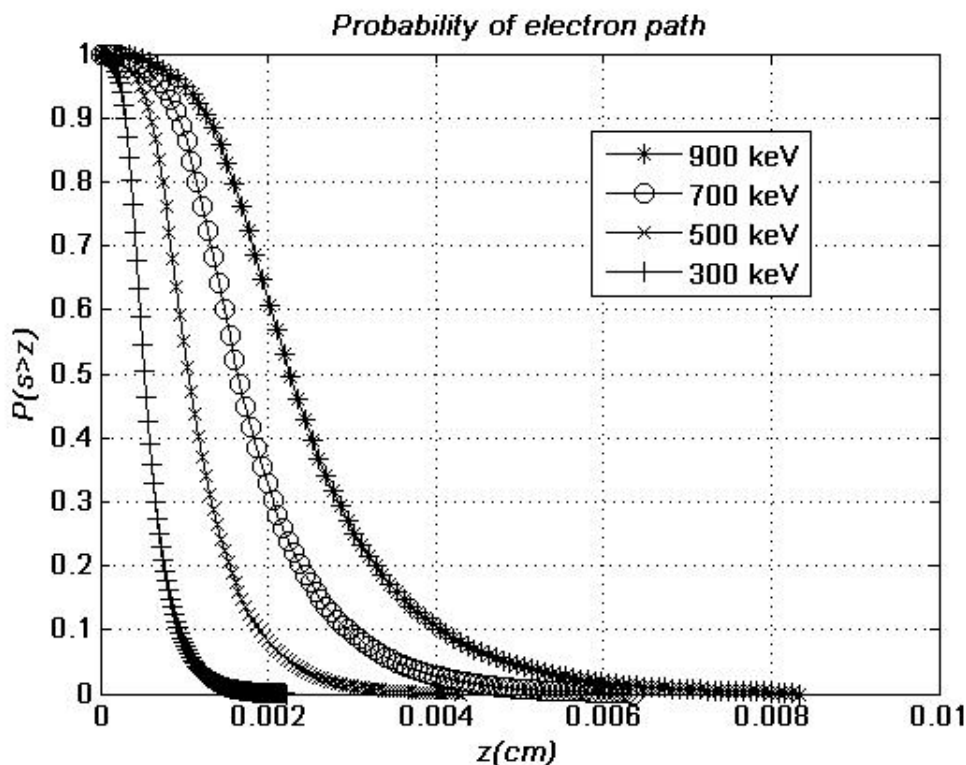


Рис.4 Вероятность прохождения электроном пути $s > z$.

На рис.5 приведена плотность распределения $f_2(\cos\theta^* | z, E_0)$, рассчитанная для моделирования переноса электронов в железе методом утолщенных траекторий ($E_0=500\text{кэВ}$).

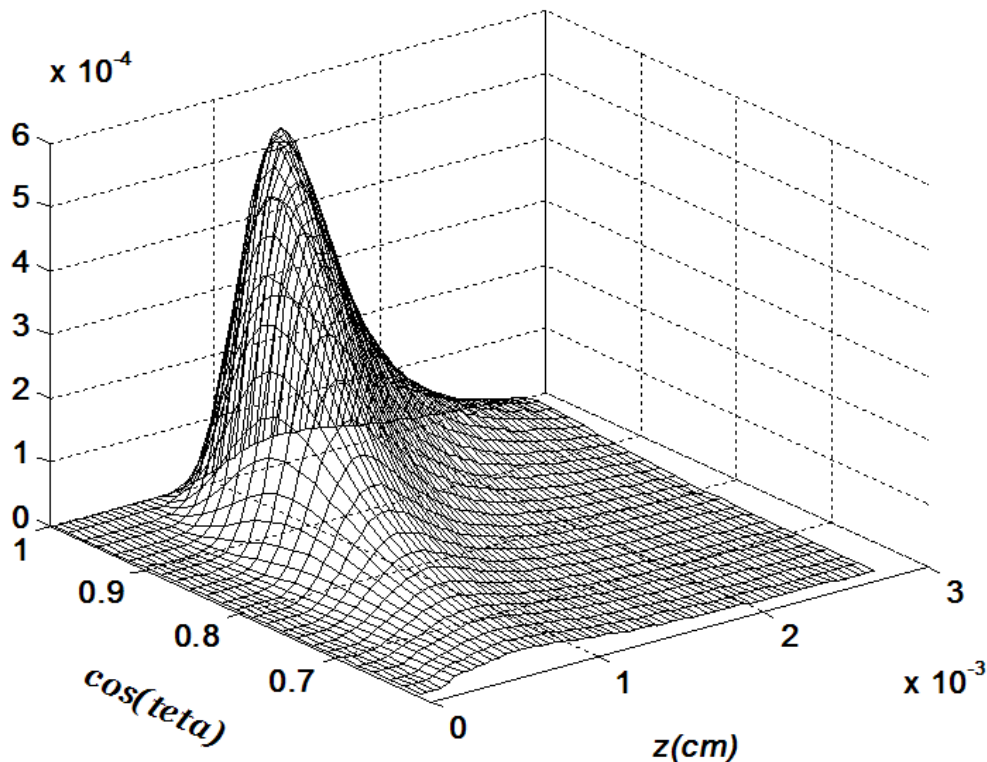


Рис.5 Плотность распределения $f_2(\cos\theta^* | z, E_0)$.

Указанные выше распределения используются для розыгрышей всех необходимых величин в алгоритме построения i -го звена «утолщённой» траектории электрона (рис.6), который имеет следующий вид:

- 1) розыгрыш пробега электрона $\Delta s_i(E_{i-1}, \gamma)$ в соответствии с распределением $f_1(z | E_0)$;
- 2) вычисление координат i -го узла траектории $\mathbf{r}_i = \mathbf{r}_{i-1} + \Delta s_i \mathbf{\Omega}_{i-1}(\theta_{i-1}^*, \varphi_{i-1}^*)$;
- 3) розыгрыш энергии электрона в i -м узле траектории $E_i(E_{i-1}, \Delta s_i, \gamma)$ в соответствии с распределением $f_3(E | z, E_0)$ (для схемы непрерывного замедления энергия электрона находится по таблице $E_i(\Delta s_i, E_{i-1})$);
- 4) розыгрыш азимутального угла рассеяния в соответствии с равномерным распределением $\varphi_i^* = 2\pi\gamma$. Угол φ^* отсчитывается от оси X системы координат, связанной с текущим

звеном траектории. Ось Z этой системы координат совпадает с осью трубки, а оси X, Y определяются аналогично [16];

- 5) уточнение положения i -го узла траектории путем его смещения в поперечном направлении на полуширину траектории $\rho^*(\varphi^*, \rho_i(E_i))$, проверка вылета электрона из объекта (рис.6). Если электрон вылетел из объекта, то его траектория заканчивается;
- 6) розыгрыш косинуса полярного угла рассеяния $\theta^*(E_{i-1}, \Delta s_i, \gamma)$ в соответствии с распределением $f_2(\cos \theta^* | z, E_0)$;
- 7) определение направления движения рассеянного электрона $\Omega_i(\theta^*, \varphi^*)$ в исходной системе координат;
- 8) вычисление вклада в плотность потока от $(i+1)$ -го звена траектории электрона. Для этого определяется расстояние s от i -го узла траектории до границ объекта в направлении движения электрона Ω_i . Если $s > z_{\max}(E_i)$, то регистрации электрона не происходит, если же $s \leq z_{\max}(E_i)$, то:
 - а) находится энергия E электрона, вылетевшего из объекта, также как в п.3;
 - б) электрон регистрируется с весом $W(s, E_i) = 1 - \int_0^s f_1(t | E_i) dt$, равным вероятности прохождения электроном расстояния s .

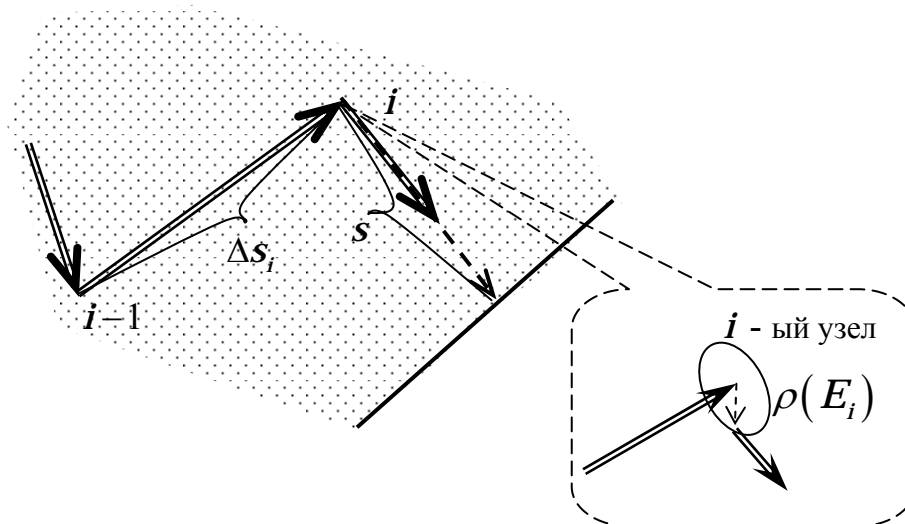


Рис.6. Схема построения i -го узла утолщенной траектории электрона.

Замечание. Основную трудность при розыгрыше необходимых параметров траектории электрона $\xi(\Delta s, \cos \theta^*, E)$ представляет решение уравнения $\gamma = \int_{\xi_{\min}}^{\xi} f(t|P) dt$ (P - набор параметров соответствующего распределения, $\gamma \in (0,1)$ - равномерно распределенная случайная величина). Вычисление ξ на каждом звене траектории, учитывая, что число таких траекторий может достигать 10^{10} , требует неприемлемо больших вычислительных затрат. Поэтому в алгоритме, аналогично [16, 17], предусмотрено использование заранее подготовленных (путем численного решения указанного уравнения) таблиц $\xi(P, \gamma)$, построенных с заданной точностью на равномерных сетках по γ и P . При этом внимание уделяется как точности вычисления интеграла, так и требованию малости изменения значений в соседних ячейках таблиц. Применение этих таблиц позволяет свести вычисление ξ к нескольким арифметическим операциям определения номера элемента массива $\xi(P, \gamma)$.

МУТ реализована в виде параллельного программного кода на многопроцессорной вычислительной системе с распределенной памятью МВС-15000.

В качестве примера рассмотрена модельная задача о прохождении плоскопараллельного потока электронов с начальной энергией 2 МэВ в железной (Fe) пластине толщиной 0.5 мм. Результаты расчетов по МУТ сравнивались с результатами расчетов, полученных с использованием МИС. Сравнение показало совпадение результатов в рамках статистической погрешности. При этом время расчетов с использованием МИС превышает аналогичный показатель для МУТ на 2 порядка.

Отметим, что время, затраченное на получение распределений для МУТ, сравнимо или превышает время расчётов по МИС и составляет значительную величину даже на современных многопроцессорных суперкомпьютерах. Однако очевидным является преимущество МУТ перед МИС, которое заключается в том, что трудоёмкий расчет распределений для МУТ проводится только один раз для конкретного материала (например, железа). В дальнейшем эти распределения в виде двумерных и трёхмерных таблиц могут многократно использоваться при решении различных задач переноса частиц в веществе.

Модификации алгоритмов статистического моделирования переноса электронов.

Естественным обобщением методов статистического моделирования, в основе которых лежит предварительный расчет плотности распределений характеристик электронных потоков, может служить следующий подход (рис.7).

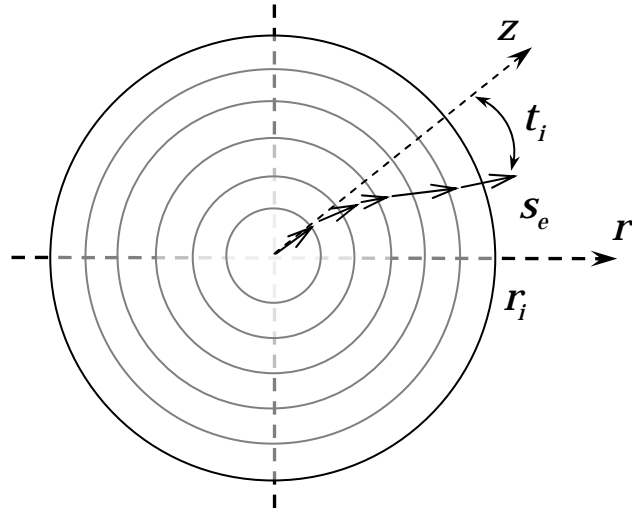


Рис.7. Схема расчета распределения электронных характеристик.

Вводится дискретная сетка по r ($\{r_i\}_{i=0}^I = \{r_0, \dots, r_I = \lambda(\varepsilon_0)\}$, $\lambda(\varepsilon_0)$ - тормозная способность электрона с энергией ε , $r_0 = \mathbf{0}$ - начало траектории). На этой сетке путем моделирования траектории движения электрона s_e (начальное направление движения электрона совпадает с направлением оси Z) рассчитывается (например, с использованием модели утолщенных траекторий) многомерная функция распределения $f(r, \Omega, \varepsilon, t | \varepsilon_0)$ ($\varepsilon_0, \varepsilon$ - начальная и текущая энергии электрона; Ω - текущее направление движения электрона, t - поперечное смещение). Эта функция может многократно использоваться для решения задач о переносе электронов в различных постановках.

В качестве другой модификации обсуждаемых алгоритмов рассмотрим следующий подход для решения задачи об электронной эмиссии из плоского приграничного слоя объекта под действием ионизирующего излучения. Такие задачи актуальны во многих практических приложениях [18]. Статистическую модель переноса электронов в приграничном материале объекта можно построить, если заранее получить плотность распределения $f(E, \Omega, E_0, \Omega_0, h)$ вылетающих электронов по глубине рождения h , начальной энергии E_0 , начальному направлению движения Ω_0 , конечной энергии E и конечному направлению движения Ω (рис.8). Такую модель будем называть в дальнейшем «инженерной».

Рассмотренные многомерные функции требуют огромного количества памяти для хранения таблиц их значений и поэтому, являются неудобными для использования в практических задачах.

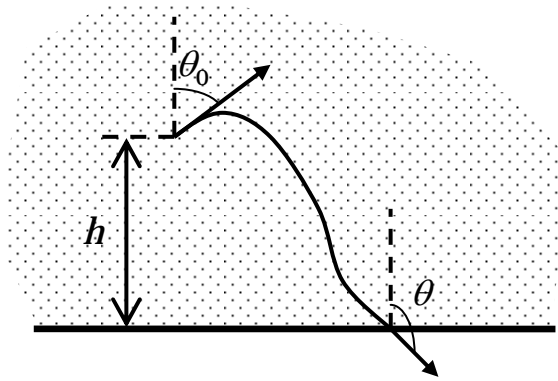


Рис.8. Траектория электрона в приграничном слое объекта.

Однако, в ряде приложений не требуется детального описания параметров электронных потоков. Например, во многих задачах радиографии [19] необходимо определить энергетический спектр электронов, покидающих облучаемый объект, а угловое распределение не играет заметной роли. В этом случае упрощением рассмотренной выше инженерной модели может быть переход к распределениям вероятности вылета $p(h, E_0, \theta_0)$ и средней энергии $\bar{E}(h, E_0, \theta_0)$ вылетевшего электрона. При этом многомерная функция распределения заменяется на две трёхмерные таблицы. Такое упрощение не дает угловые распределения электронов эмиссии, а также не учитывает разброс энергий этих электронов, который тем больше, чем меньше вероятность вылета электрона.

Учесть распределение энергий вылетающих электронов в описанной выше простейшей инженерной модели удастся введением искусственного среднеквадратичного отклонения (дисперсии): $\sigma = \bar{E} \cdot \sqrt{p \cdot (1 - p)}$. Потери энергии электрона разыгрываются при этом по формуле

$$E = \bar{E} + \sqrt{2} \cdot \sigma \cdot \operatorname{erfinv} \left\{ (2\gamma - 1) \cdot \operatorname{erf}(\bar{E} / \sigma \sqrt{2}) \right\},$$

где $\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x \exp(-t^2) dt$ - функция ошибок, $\operatorname{erfinv}(x)$ - обратная функция

ошибок. Предложенная аппроксимация энергетического распределения электронов не следует из каких-либо априорных соображений. Её применимость и работоспособность проверяются эмпирически с помощью вычислительных экспериментов.

Для анализа эффективности рассмотренных статистических моделей переноса электронов были проведены расчёты электронных потоков, вылетающих из железной (Fe) пластины при облучении ее гамма-излучением. Для расчетов использовались три рассмотренные модели: МУТ (на рисунках ниже – MUT), инженерная модель без дисперсии

(Ray1), инженерная модель с дисперсией (Ray2). Результаты расчетов и эффективность алгоритмов сравнивались с аналогичными расчетами, проведенными с использованием широко известного пакета MCNP [7]. На рис. 9, 10 изображены графики полученных спектральных зависимостей электронов.

В расчетах использовался точечный источник фотонов с энергией 500 кэВ и 100 кэВ.

Результатом расчетов является нормированное энергетическое распределение фото- и

комптоновских электронов $f_e(E)$, т.е. $\int_0^{E_{\max}} f_e(E) dE = 1$.

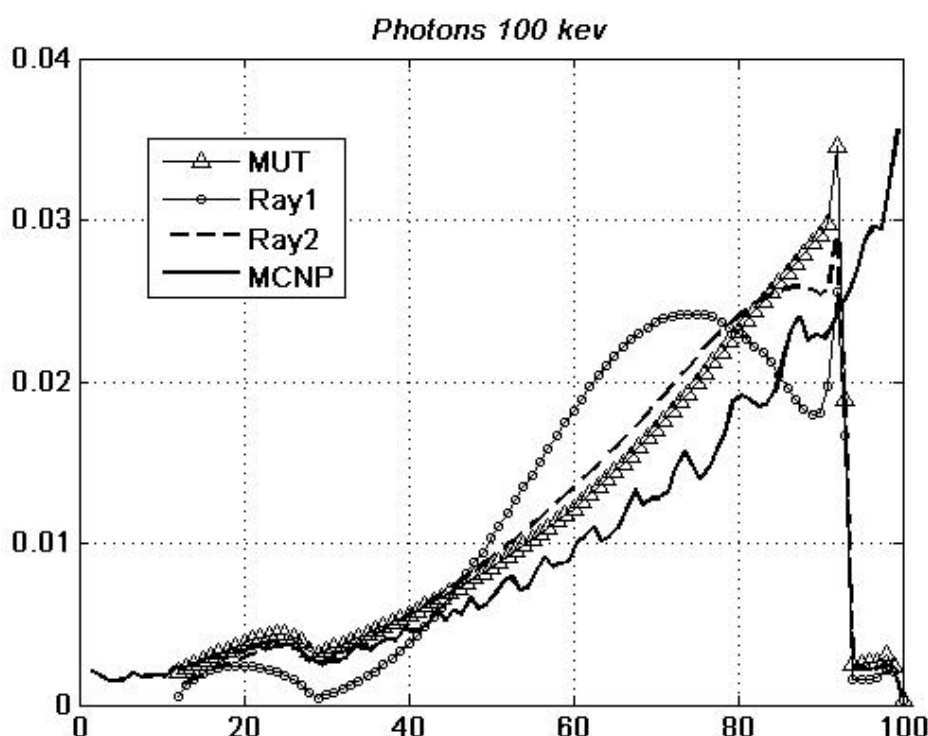


Рис.9 Спектры электронов, инжектируемых с границы объекта, облучаемого фотонами с энергией 100 кэВ.

Сравнительный анализ результатов показывает, что инженерная модель без дисперсии дает неудовлетворительный результат, в то время как использование этой же модели с дисперсией позволяет получать спектры, близкие к результатам расчетов по МУТ и MCNP.

Отметим, что первый максимум спектра (около 25 кэВ при использовании фотонов с энергией 100 кэВ и около 250 кэВ для источника с энергией 500 кэВ) обусловлен главным образом комптоновскими электронами, а второй максимум (соответственно 90 и 490 кэВ) – фотоэлектронами.

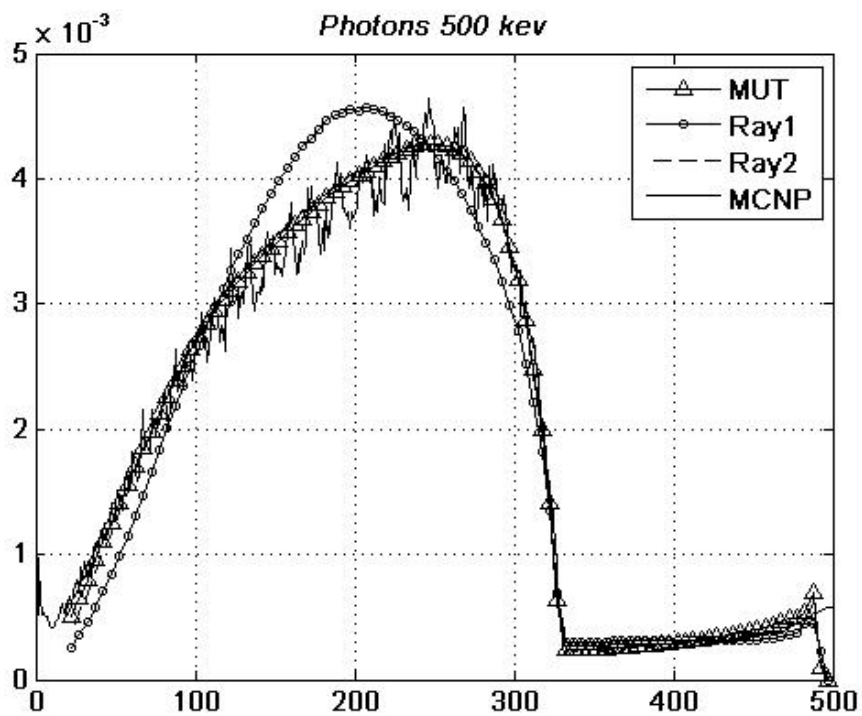


Рис.10 Спектры электронов, инжектируемых с границы объекта, облучаемого фотонами с энергией 500 кэВ.

Приведем в заключение оценки эффективности предложенных моделей. Расчеты по МУТ требуют примерно в 30-40 раз меньше времени, чем по MCNP, а по инженерной модели – примерно в 20 раз меньше, чем по МУТ при использовании одного и того же количества фотонных историй.

Литература

1. Неразрушающий контроль. Россия. 1900-2000 гг.: Справочник. Под ред. В.В.Клюева. – 2-ое изд., исправ. и доп. М.: Машиностроение, 2002.
2. С.Н.Ганага, Л.Н.Здуход, С.В.Пантелеев, Ю.В.Парфенов, О.Ф.Тарасов, А.В.Шапранов, Электродинамическое действие ионизирующих излучений // Физика ядерного взрыва под ред. В.М.Лоборева, т.2, с. 107.
3. Р.М.Шагалиев и др. Математическое моделирование и методики решения многомерных задач переноса частиц и энергии, реализованные в комплексе САТУРН-3. // Вопросы атомной науки и техники, серия: Матем. моделирование физических процессов. 1999, вып. 4, с. 20-26.
4. Л.П.Басс, О.В.Николаева, В.С.Кузнецов, А.В.Быков, А.В.Приезжев, А.А.Дергачев. Моделирование распространения оптического излучения в фантоме биологической ткани на суперЭВМ МВС1000/М. // Матем. моделирование. 2006, т.18, №1, с. 29-42.
5. Т.А.Сушкевич. Математическое моделирование переноса излучения. М., Бином, 2005, 661 с.
6. А.Ф.Аккерман. Моделирование траекторий заряженных частиц в веществе. М., Энергоатомиздат, 1991, 200 с.
7. J.F.Briesmeister (ed.). MCNP - A General Monte Carlo N-Particle Transport Code. LANL Report LA-13709-M, Los Alamos, 2000.
8. М.В.Скачков. Модель «утолщенных траекторий» для описания движения электронов в веществе и ее реализация на МВС-5000М. Международный семинар «Супервычисления и математическое моделирование». Саров, 2006, с. 91-92.
9. В.И.Бойко, В.А.Скворцов, В.Е.Фортов, И.В.Шаманин. Взаимодействие импульсных пучков заряженных частиц с веществом. Москва, Физматлит, 2003.
10. L.Landau, "On the Energy Loss of Fast Particles by Ionization," // J. Phys. USSR **8** (1944) 201.
11. O.Blunck and S.Leisegang, "Zum Energieverlust schneller Elektronen in duennen Schichten," // Z. Physik **128** (1950) 500.
12. А.Ф.Аккерман, Ю.М.Никитушев, В.А.Ботвин. Решение методом Монте-Карло задач переноса быстрых электронов в веществе. Алма-Ата, «Наука», 1972.
13. А.В.Пляшешников, А.В.Лапа, А.М.Кольчужкин. Моделирование процесса переноса электронов с использованием вложенных Марковских цепей. В кн.: Методы Монте-Карло в вычислительной математике и математической физике. Под ред. Г.И.Марчука. Новосибирск, Изд. ВЦ СО АН СССР, 1974, с.283-288.
14. H.W.Levis. // Phys. Rev. 1950, Vol. 78, № 3, p. 526-533.
15. L.V.Spencer. // Ibid. 1955, Vol. 98, № 6, p. 1597-1611.
16. R.Jaenisch, C.Bellon, U.Samadurau, M.Zhukovskiy und S.Podoliako. Monte Carlo Simulation Tool with CAD Interface. // Review of Progress in Quantitative NDE, 574-579 (2006).
17. М.Е.Жуковский, С.В.Подоляко, М.В.Скачков, Г.-Р.Йениш. О моделировании экспериментов с проникающим излучением // Матем. моделирование. 2007, т.19, №1, с. 29-42.
18. М.В.Markov, М.Е.Zhukovskiy. Modeling the radiative electromagnetic field. // International Journal of Computing Science and Mathematics. Vol 2, No 1, 2008.
19. G.-R.Jaenisch, C.Bellon, U.Samadurau, M.Zhukovskiy und S.Podoliako. Monte Carlo Radiographic Model with CAD-based Geometry Description. // Insight № 10, 618-623 (2006).