

<u>ИПМ им.М.В.Келдыша РАН</u> • <u>Электронная библиотека</u> <u>Препринты ИПМ</u> • <u>Препринт № 80 за 2019 г.</u>



ISSN 2071-2898 (Print) ISSN 2071-2901 (Online)

Алексеев М.В., Егорова В.А., Жуковский М.Е., Садовничий Д.Н., Тараканов И.А., Усков Р.В.

О моделировании радиационно-индуцированных зарядовых эффектов в мелкодисперсных материалах замкнуто-ячеистой структуры

**Рекомендуемая форма библиографической ссылки:** О моделировании радиационно-индуцированных зарядовых эффектов в мелкодисперсных материалах замкнуто-ячеистой структуры / М.В.Алексеев [и др.] // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2019. № 80. 15 с. doi:10.20948/prepr-2019-80 URL: <u>http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2019-80</u>

Ордена Ленина ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ имени М.В.Келдыша Российской академии наук

# М.В. Алексеев, В.А. Егорова, М.Е. Жуковский, Д.Н. Садовничий, И.А. Тараканов, Р.В. Усков

### О моделировании радиационноиндуцированных зарядовых эффектов в мелкодисперсных материалах замкнуто-ячеистой структуры

Алексеев М.В., Егорова В.А., Жуковский М.Е, Садовничий Д.Н., Тараканов И.А., Усков Р.В.

## О моделировании радиационно-индуцированных зарядовых эффектов в мелкодисперсных материалах замкнуто-ячеистой структуры

Разработаны алгоритмы суперкомпьютерного моделирования для исследования радиационно-индуцированных зарядовых эффектов в гетерогенных полидисперсных материалах с прямым учетом их микроструктуры. Построена геометрическая модель гетерогенной среды с применением алгоритмов Штилингера-Любачевского для многомодальных структур. Модель включает в себя дискретную систему детекторов для статистической оценки функционалов на пространстве решений уравнений переноса фотон-электронного каскада. Приведены результаты демонстрационных расчетов параметров зарядовых полей, показали, что пространственное распределение радиационнокоторые индуцированных зарядов имеет резко неоднородную структуру, обусловленную наличием границ материалов с сильно различными радиационными свойствами.

*Ключевые слова:* математическое моделирование, ионизирующее излучение, зарядовые эффекты, полидисперсные структуры

Mikhail Vladislavovich Alekseev, Varvara Alekseevna Egorova, Mikhail Evgenievich Zhukovskiy, Dmitriy Nikolaevich Sadovnichiy, Ilya Alekseevich Tarakanov, Roman Vladimirovich Uskov

On modeling of the radiation-induced charge effects in the fine dispersed materials of closed-cell structure

Supercomputer simulation algorithms for investigation of radiation-induced charge effects in heterogeneous polydisperse materials with direct account of their microstructure are developed. A geometric model of the heterogeneous environment is worked out with the use of algorithms Stillinger-Lubachevsky for multimodal structures. The model includes a discrete system of detectors for statistical evaluation of functionals on the space of solutions of the photon-electron cascade transport equations. The results of the demonstration calculations of the parameters of the charge fields are presented. It is shown the spatial distribution of radiation-induced charges has a sharply inhomogeneous structure due to the presence of the boundaries of materials with strongly different radiation properties.

*Key words:* mathematical modeling, ionizing radiation, charge effects, polydispersed structure

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 18-01-00582.

Введение	. 3
1 Геометрическая модель замкнуто-ячеистой среды	.4
2 Моделирование формирования и развития фотон-электронного каскада	.7
3 Результаты моделирования зарядовых эффектов	.9
Заключение	13
Библиографический список	14

#### Введение

Настоящая работа является продолжением исследований авторов в области разработки методов детального суперкомпьютерного моделирования процессов взаимодействия ионизирующего излучения с веществом в комплексе с сопутствующими тепловыми, механическими, электродинамическими эффектами [1 - 3]. Такое моделирование требует полномасштабного применения сверхвысокопроизводительной вычислительной техники и современных технологий распараллеливания (MPI, OpenMP, CUDA).

В [1, 2] рассмотрены вопросы расчета исходных данных для моделирования радиационно-индуцированных эффектов. При этом основное внимание уделено способам переноса результатов статистического моделирования взаимодействия излучения с веществом на разностную сетку, обеспечивающим интеграцию «по данным» для различных групп уравнений модели генерации вторичных, радиационно-индуцированных процессов.

В [3] разработана комплексная модель для суперкомпьютерного исследования параметров радиационно-индуцированных термомеханических полей в гетерогенных средах со сложной дисперсной структурой. Построен способ расчета параметров фотон-электронного каскада, генерируемого в объекте при взаимодействии излучения с веществом. Создана геометрическая модель среды с прямым разрешением ее микроструктуры.

В настоящей работе кратко описаны:

- способ построения геометрической модели дисперсной структуры, включающей дискретную детекторную систему для оценки функционалов на пространстве решений уравнения переноса;
- алгоритм статистического моделирования фотон-электронного каскада в гетерогенных средах с регулярной замкнуто-ячеистой структурой, основанный на построении случайных траекторий частиц излучения [4, 5].

Основное внимание уделено изложению результатов моделирования радиационно-индуцированных зарядовых эффектов во фрагменте замкнутоячеистой структуры, которая состоит из связующего и мелкодисперсных металлических и диэлектрических включений.

#### 1 Геометрическая модель замкнуто-ячеистой среды

Рассмотрим мелкодисперсную среду замкнуто-ячеистой структуры, состоящую из связующего и включений. Будем считать, что все включения имеют одинаковый размер (диаметр). Геометрическая модель материала должна включать также модель детекторной системы для статистической оценки требуемых физических величин. Детекторная (регистрирующая) система состот из заданного числа сферических детекторов одинакового радиуса. Детекторы должны быть изолированы друг от друга (не должны пересекаться) и от включений.

Модель среды с детекторами может рассматриваться как полидисперсная среда, состоящая из двух типов твердых неперекрывающихся частиц: включений и детекторов (бимодальный материал). Примером такого материала может служить бимодальный полиэтилен [6].

Для построения геометрической модели полидисперсной среды в работе применен алгоритм Стиллинжера-Любачевского [7]. Алгоритм имитирует процесс механического сжатия набора твердых частиц [7, 8]. Сжатие сферических частиц достигается путем моделирования последовательных дискретных событий в рамках событийного молекулярно-динамического моделирования (eventdriven molecular dynamic, eMD).

События в таком алгоритме — это столкновения частиц друг с другом, а также столкновения между частицей и твердыми стенками. Критерием остановки процесса сжатия является малость пути всех частиц между соударениями относительно заданного порога. В данном алгоритме реализован идеально упругий механизм твердых столкновений.

При реализации данного алгоритма на каждом шаге по времени генерируется список возможных событий. При этом существенным достоинством алгоритма является то, что для любой частицы и на любой стадии вычислений подерживается запись только о двух событиях: о совершившемся и о планируемом.

Пример работы построенного для рассматриваемых сред алгоритма представлен на рис. 1, 2.



Рис. 1 – Пример бимодальной структуры (красный цвет – включения, синий – детекторы); изображение без связующего



Рис. 2 – Пример бимодальной структуры (красный цвет – включения, синий – детекторы); изображение со связующим

С целью детального исследования закономерностей формирования пространственных распределений зарядов в мелкодисперсных средах рассмотрим фрагмент дисперсной структуры в виде объекта кубической формы со стороной 30 мкм, в котором в качестве связующего применяется полибутадиен, а включением является алюминиевый или диэлектрический шарик диаметром 20 мкм (рис. 3).



Рис. 3 – Фрагмент гетерогенного дисперсного материала

Результат работы описанного выше алгоритма построения геометрической модели исследуемого фрагмента мелкодисперсного материала (рис. 3) изображен на рис. 4.



Рис. 4 – Построение детекторной системы для фрагмента (слева); в разрезе (справа); красным помечены детекторы внутри включения

Вычислительные эксперименты проводились для двух вариантов материала фрагмента:

- материал 1: связующее полибутадиен ( $C_4H_6$  плотность  $\rho = 0.95 g / cm^3$ ), включение алюминий;
- материал 2: связующее полибутадиен, включение перхлорат аммония  $(NH_4ClO_4, \rho = 1.95 g / cm^3).$

#### 2 Моделирование формирования и развития фотон-электронного каскада

Рассматриваются процессы взаимодействия излучения с веществом, когда время изменения мощности источника значительно превышает время жизни частиц в плотной материи облучаемого объекта. В этом случае справедливы квазистационарные интегро-дифференциальные уравнения переноса фотонов и электронов. Перенос частиц, сопровождающийся рождением вторичных частиц, в каскадных процессах взаимодействия излучения с веществом описывается системой интегральных уравнений.

Сложный процесс переноса частиц через вещество может быть представлен последовательностью элементарных процессов взаимодействия частицы с атомами материи (траектория движения частицы). Эти процессы включают рассеяние, торможение или исчезновение частицы вследствие поглощения или выхода из рассматриваемой системы (из объекта). Это представление удобно для моделирования переноса излучения методом Монте-Карло.

Задачей теории переноса излучения является вычисление показаний детектора в поле излучения. Искомые (измеренные) значения представляются в виде показаний некоторого детектора и записываются в виде функционала на пространстве решений уравнения переноса. Рассматриваются такие регистрирующие устройства (детекторы), показания которых равны сумме вкладов некоторых столкновений частиц в чувствительном объеме детектора (аддитивные детекторы).

Для оценки искомого измеренного значения методом Монте-Карло моделируются случайные траектории частиц. Суммируются вклады этих траекторий в детектор. Построение траектории частицы осуществляется в соответствии с выбранной физической моделью взаимодействия излучения с веществом. Основными количественными характеристиками модели являются распределения вероятностей взаимодействия частицы с веществом. Эти распределения строятся путем обработки сечений соответствующих процессов взаимодействия [9]. Основным источником этих данных является база данных Национального центра ядерных данных [10].

Траектории моделируются с использованием индивидуальных вычислительных алгоритмов для каждого типа частиц с учетом их физических свойств (главным образом число столкновений и проникающая способность).

Перенос фотонов характеризуется относительно небольшим числом столкновений вдоль траектории и высокой проникающей способностью. Построение их траекторий включает трассировку объекта и розыгрыш взаимодействия в точках поворота траектории. Схема алгоритма показана на рис. 5.

Она состоит из следующих шагов:

- вычисляются точки пересечения с поверхностями, ограничивающими однородные компоненты объекта;
- сегменты пересечения формируются с использованием точек пересечения поверхностей;

- точка взаимодействия фотона со средой разыгрывается на множестве интервалов пересечения (сегментов) с использованием соответствующих распределений вероятностей процессов в соответствующем материале.



Рис. 5 – Схема построения траектории фотона

Тип взаимодействия разыгрывается на основе соответствующих вероятностных распределений. Характеристики фотонов определяются в соответствии с типом взаимодействия. Дополнительные частицы, которые могут появиться в результате взаимодействия фотона со средой, сохраняются для последующего моделирования (каскад частиц).

Процесс повторяется до конца траектории фотона (поглощение или вылет за границы расчетной области). Рассмотренный подход относительно прост и эффективен для этого типа частиц.

Взаимодействие электронов с веществом сильно отличается от такового для фотонов. Количество столкновений вдоль траектории огромно, а проникающая способность очень низкая. Вся траектория обычно лежит в небольшой области внутри объекта. Подход, используемый для моделирования переноса фотонов, является избыточным, поскольку полная трассировка объекта не является необходимой на каждом шаге траектории электрона. Поэтому для электронов используется «квазиоднородный» подход. Траектория электрона строится сегментами, лежащими в однородных частях объекта. Эти сегменты могут содержать от сотен до тысяч взаимодействий. Общая схема построения сегмента траектории электрона описана ниже.

Процесс начинается с определения слоя (вещества однородной части объекта), в котором находится электрон. Затем рассчитывается тормозной путь (CSDA в терминологии NIST) электрона в токовом слое. CSDA — это величина, показывающая среднюю длину траектории электрона до его термализации. Сфера радиуса CSDA — это область, вероятность покинуть которую для электрона исчезающе мала. Это позволяет игнорировать геометрическую модель вне этой сферы для данного электрона.

Расстояние до элемента геометрической модели объекта от исходного положения электрона (начало строящегося сегмента) сохраняется для всех элементов геометрической структуры, находящихся внутри сферы CSDA. Участок траектории строится до термализации электрона или до конца текущего слоя.

Подробно разработанные алгоритмы построения случайных траекторий частиц фотон-электронного каскада рассмотрены в работе [3].

#### 3 Результаты моделирования зарядовых эффектов

Ниже в этом разделе описаны предварительные результаты математического трехмерного моделирования радиационно-индуцированных зарядовых эффектов во фрагменте гетерогенной мелкодисперсной структуры.

Отметим, что заряд накапливается в точках начала (положительный) и конца (отрицательный) электронной траектории, поэтому в гетерогенной дисперсной среде распределение заряда имеет сложный «негладкий» вид. В частности, во включениях рождается много больше электронов, чем в связующем, поскольку макроскопическое сечение фотоионизация и комптоновского рассеяния в веществе включения значительно больше, чем в связующем. Число электронов, переходящих из включения в связующее, превосходит число электронов, перемещающихся в обратном направлении (рис. 6). Поэтому вблизи границы включение-связующее включение будет заряжаться положительно, а связующее – отрицательно.



Рис. 6 – Потоки электронов на границе материалов

Тормозной путь электрона с энергией около 20 кэВ равен примерно 4 мкм, а радиус шарика – 10 мкм. Рожденный вблизи центра включения электрон термализуется и не выходит за пределы сферы радиуса меньше тормозного пути, тем самым внутри центральной окрестности включения будет электронное равновесие. Поэтому следует ожидать, что внутри включения образуется незаряженная область в виде сферы с радиусом порядка нескольких мкм. Снаружи включения, около его границы, будет формироваться отрицательно заряженная область толщиной менее тормозного пути электрона в связующем (рис. 7, 8).







Рис. 7 показывает график зависимости плотности заряда сферического слоя в материале 1 от расстояния от центра алюминиевого включения. График показывает, что вблизи границы раздела двух сред рассматриваемой дисперсной структуры происходит разделение заряда, причем тонкий внутренний (внутри алюминиевого включения) приграничный слой заряжается положительно, а внешний (в полибутадиене) слой – отрицательно.

В материале 2 характер зависимости плотности заряда от расстояния от центра включения аналогичный (рис. 8).



Рис. 9 – 3D изображение распределения плотности заряда; передняя четверть области вырезана для наглядности; красный цвет – положительный заряд, синий – отрицательный

10

Отметим общие для обоих исследуемых материалов закономерности формирования радиационно-индуцированных зарядовых эффектов (рис. 9 - 11). Центральная внутренняя часть включения и периферия связующего заряжаются слабо из-за малости пробега электронов и, как следствие, локального электронного равновесия в этих областях.

Во внутренней приграничной области включения формируется положительный заряд, обусловленный преобладанием вылета электронов из включения в связующее над обратным процессом. В приграничной к включению области связующего формируется отрицательный заряд за счет переноса электронов из включения в связующее.



Рис. 10 – Распределение заряда в плоскости, перпендикулярной оси z по центру включения

Ниже на рис. 12 - 17 изображены пространственные распределения зарядов (в единицах заряд электрона/куб. см) в исследуемых материалах.

На всех рисунках приведены результаты, полученные для единичного потока фотонов (1 фотон/см<sup>2</sup>).



Рис. 11 – Распределение заряда в плоскости, перпендикулярной оси z посередине включения, вид «сверху»



Рис. 12 – Распределение зарядов в материале 1, срез в плоскости z=const через центр включения



Рис. 13 – Распределение зарядов в материале 2, срез в плоскости z=const через центр включения



#### Заключение

Разработаны алгоритмы суперкомпьютерного моделирования для исследования радиационно-индуцированных зарядовых эффектов в гетерогенных полидисперсных материалах с прямым учетом их микроструктуры.

Построена геометрическая модель гетерогенной мелкодисперсной среды, которая включает в себя дискретную модель детектирующей системы для ста-

тистической оценки функционалов на пространстве решений уравнений переноса фотон-электронного каскада.

Проведено математическое трехмерное моделирование радиационноиндуцированных зарядовых эффектов во фрагменте объекта дисперсной структуры, результаты которого показали, что при облучении исследуемого фрагмента формируются зарядовые поля с резко неоднородной пространственной структурой, причем неоднородности возникают вблизи граничных поверхностей связующего и включений. Приграничный сферический слой внутри рассмотренных включений заряжается положительно. Слой вокруг включения в связующем заряжается отрицательно. В результате вблизи указанных граничных поверхностей возникает разделение зарядов, которое может привести к усилению генерируемого электрического поля.

Установлено, что основными характеристиками, влияющими на характер распределения зарядовых, тепловых и токовых радиационно-индуцированных полей в гетерогенном материале, являются макроскопическое сечение взаимодействия фотонов с веществом и проникающая способность (тормозной путь) электронов в материале.

Формирование зарядовых эффектов на границе раздела двух сред обусловлено преобладанием электронной эмиссии из включения (материал с большим макроскопическим сечением фотонов) в связующее (материал с большей проникающей способностью электронов) над эмиссией в обратном направлении. На расстоянии более длины тормозного пути от границы раздела двух сред связующее практически не заряжается из-за электронного равновесия.

#### Библиографический список

- 1. Егорова В.А., Иноземцева К.К., Жуковский М.Е. Подход к моделированию радиационно-индуцированных вторичных эффектов в сложных технических объектах // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2018. № 110. 24 с. doi:10.20948/prepr-2018-110.
- О расчете исходных данных для моделирования радиационноиндуцированных эффектов в материалах пористого типа / М.В.Алексеев [и др.] // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2018. № 208. 21 с. doi:10.20948/prepr-2018-208.
- О моделировании радиационноиндуцированных термомеханических эффектов в гетерогенных материалах сложной дисперсной структуры / М.В.Алексеев [и др.] // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2019. № 32. 24 с. doi:10.20948/prepr-2019-32.
- 4. Жуковский М.Е., Усков Р.В. Гибридное распараллеливание алгоритмов моделирования каскадных процессов переноса излучения // Матем. моделирование, 27:5 (2015), 39–51 <u>http://mi.mathnet.ru/mm3598.</u>
- 5. Egorova V., Uskov R.V., Zhukovskiy M. The simulation of the photonelectron cascade on heterogeneous supercomputers. The International Sym-

posium on Structural Health Monitoring and Nondestructive Testing (SHM-NDT-2018), Saarbrücken, Germany, 4-5 Oct. 2018. Proceedings. <u>https://www.ndt.net/article/shmndt2018/papers/SHM-NDT-2018\_paper\_32.pdf</u>

- 6. https://zetsila.ru/бимодальный-полиэтилен/.
- 7. M. Skoge, A. Donev, F. H. Stillinger, and S. Torquato. "Packing hard spheres in high dimensional Euclidean spaces", Phys. Rev. E, **74**: 041127 (2006).
- Болкисев А.А. О применении метода случайного поиска к задаче случайной упаковки твёрдых частиц для моделирования структуры смесевого твёрдого топлива // Вестник удмуртского ун-та. Математика. Механика. Компьютерные науки, 2. (2012) 106-113.
- 9. Zhukovskiy M.E., Podolyako S.V., and Uskov R. V., «Model of individual collisions for description of electron transport in matter» Math. Models Comput. Simul. **4**, 101-109 (2012).
- 10. https://www.nndc.bnl.gov/sigma