

О СТАТИСТИЧЕСКИХ МЕТОДАХ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПЕРЕНОСА ЭЛЕКТРОНОВ В ВЕЩЕСТВЕ

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.

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 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 использования и его приспособленностью к решению сложных граничных задач распространения излучения 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 бóльшую трудность, чем

моделирование переноса фотонов. Взаимодействие нейтральных частиц с материалами 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). Ее преимущество 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 проигрывает 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 с ним гамма-излучения), распространяющийся внутри плотного вещества.

Задача переноса электронов в веществе ставится при 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.

При 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 ее 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]:

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

где $\eta = 1,7 \cdot 10^{-5} Z^{2/3} (1-\beta^2) [1,13 + 3,76(Z\alpha/\beta)^2] / \beta^2$ – 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 данных¹. 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

¹www.nist.gov

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 [12]. При этом путь электрона в веществе моделируется с помощью так называемой 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

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

где $\Phi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E, t)$ — дифференциальная плотность потока частиц в момент времени t в точке с координатами \mathbf{r} , 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]

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

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 формулируются в виде статистических моделей переноса электронов в веществе, соответствующих математическим задачам для кинетического уравнения переноса (1) в стационарном случае или его упрощенного варианта (2).

Модель индивидуальных соударений. Наиболее простой и очевидной моделью переноса частиц в веществе является МИС [6]. 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.

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_{i-1} — средний свободный пробег частицы в материале объекта, γ — равномерно распределенное на $(0, 1)$ случайное число;

- вычисление координат точки взаимодействия: $\mathbf{r}_i = \mathbf{r}_{i-1} + \Delta s_i \Omega_{i-1}$, где Ω_{i-1} — единичный вектор, указывающий направление движения частицы;

- проверка вылета частицы из объекта, вычисление вклада частицы в плотность

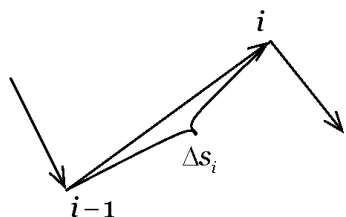


Рис. 1. Траектория электрона в модели индивидуальных соударений

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: $\Delta E_i = - \int_0^{\Delta s_i} \frac{dE}{ds} ds$,

$$\frac{dE}{ds} = \left(\frac{dE}{ds} \right)_{ion} + \left(\frac{dE}{ds} \right)_{rad};$$

— розыгрыш полярного угла рассеяния частицы в точке взаимодей-

ствия из распределения $F(\theta < \theta^*) = \frac{1}{\sigma_i^{(k)}} \int_0^{\theta^*} \frac{d\sigma_i^{(k)}}{d\Omega} d\Omega$, где $d\sigma_i^{(k)} / d\Omega$ —

дифференциальное сечение рассеяния при взаимодействии k -го типа;

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

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

Модель индивидуальных соударений 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 укрупненных соударений (МУС). Для описания движения электронов в веществе широко используется МУС [6]. Она 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 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, используемые в этой теории, — приближенные и имеют ограниченную область применимости. Длина звена вложенной траектории разыгрывается, а выбирается определенным образом в соответствии с областью применимости теории многократных соударений. Вычислительные схемы МУС необходимо тщательно сопоставлять с результатами расчетов, проведенных с использованием более детальной и точной МИС, для исключения систематических погрешностей.

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

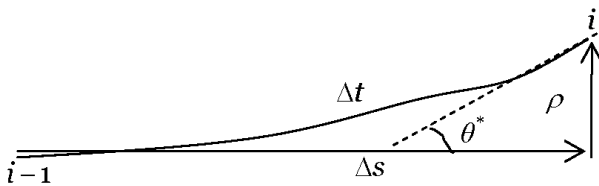


Рис. 2. Построение алгоритма по модели укрупненных соударений

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

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

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

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 приближенным способом (см., например, работы [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 Ω_i в исходной системе координат.

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

Модель “уголщенных” траекторий. В настоящей работе для описания движения электронов в веществе предлагается МУТ [8], которая 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

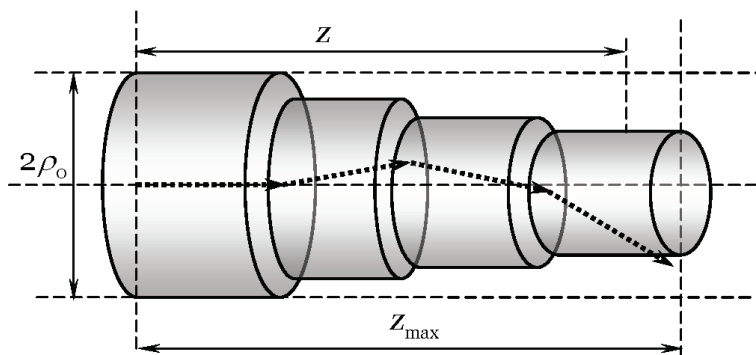


Рис. 3. Задача о движении электрона в трубке

схема МУТ аналогична МИС. В ней также проводится розыгрыш сначала длины прямолинейного участка траектории, а затем энергии и направления движения рассеянной частицы.

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: $2\rho = n\lambda$, где $\lambda = (\sigma_{el} \cdot N)^{-1}$ — средний свободный пробег электрона, который определяется через полное сечение упругих столкновений; 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, $z_{\max} = z|_{E=0,9E_0}$, 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 трех 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, т.е. $\cos \theta^* < 0$ (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 $z \geq z_{\max}$.

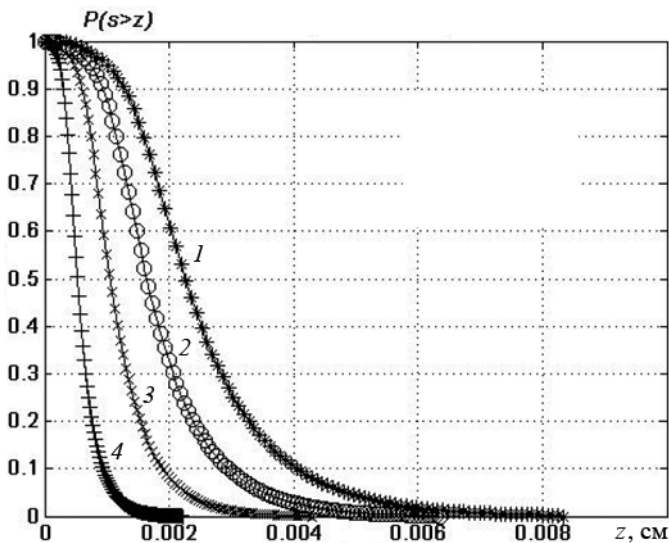


Рис. 4. Вероятность прохождения электроном пути $s > z$ при начальной энергии 900, 700, 500 и 300 кэВ (соответственно 1, 2, 3 и 4)

В результате 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 описанным выше способом.

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

Указанные выше распределения используются для розыгрышей всех необходимых величин в алгоритме построения i -го звена “утолщенной” траектории электрона (рис. 6), который состоит из следующих этапов.

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 $\mathbf{r}_i = \mathbf{r}_{i-1} + \Delta s_i \boldsymbol{\Omega}_{i-1}(\theta_{i-1}^*, \varphi_{i-1}^*)$.

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

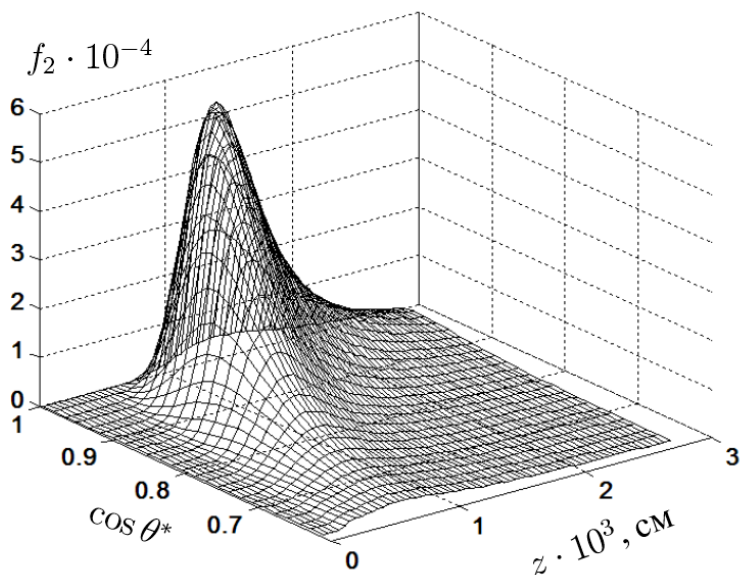


Рис. 5. Плотность распределения $f_2(\cos \theta^* | z, E_0)$

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 работе [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 $f_2(\cos \theta^* | z, E_0)$.

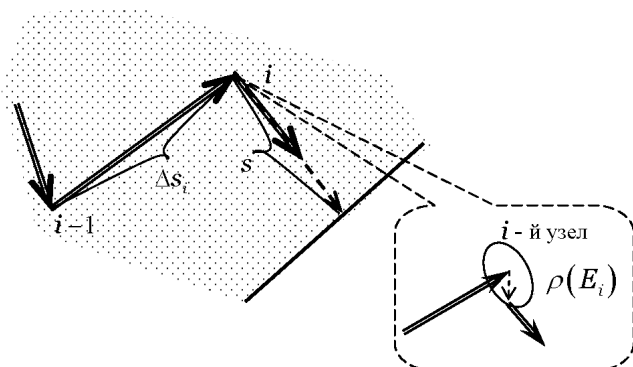


Рис. 6. Схема построения i -го узла “утолщенной” траектории электрона

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 так же, как в п. 3, находится энергия E электрона, вылетевшего из объекта, и электрон регистрируется с весом $W(s, E_i) = 1 - \int_0^s f_1(t|E_i)dt$, равным вероятности прохождения электроном расстояния s .

Замечание. Основную трудность при розыгрыше необходимых параметров траектории электрона $\xi(\Delta s, \cos \theta^*, E)$ представляет решение уравнения $\gamma = \int_{\xi_{\min}}^{\xi} f(t|P) dt$ (здесь 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 приведенном алгоритме, аналогично работам [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 $\xi(P, \gamma)$.

Модель “утолщенных” траекторий 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 пластине толщиной 0,5 мм. Результаты расчетов по МУТ сравнивались с результатами расчетов, полученных с использованием МИС. Получено совпадение результатов в рамках статистической погрешности. При этом время расчетов с использованием МИС на два порядка превышает аналогичный показатель для МУТ.

Отметим, что время, затраченное на получение распределений для МУТ, сравнимо с временем расчетов по МИС или превышает его и составляет значительную величину даже на современных многопроцессорных суперкомпьютерах. Однако очевидным является преимущество МУТ перед МИС, которое заключается в том, что трудоемкий расчет распределений для МУТ проводится только один раз для конкретного материала (например, железа). В дальнейшем эти распределения в виде двумерных и трехмерных 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).

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 , $r_0 = 0$ — 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 плотность распределения $f(r, \Omega, \varepsilon, t | \varepsilon_0)$, где $\varepsilon_0, \varepsilon$ — 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 очень большого объема памяти для хранения таблиц их значений и поэтому являются неудобными для использования в практических задачах.

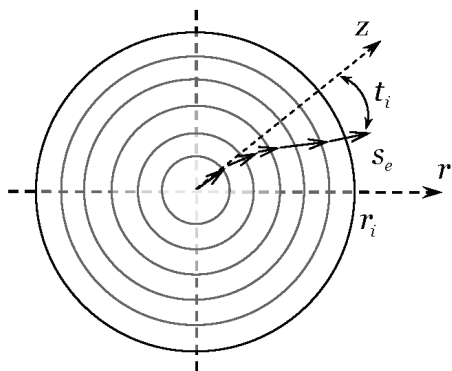


Рис. 7. Схема расчета распределения характеристик электронных потоков

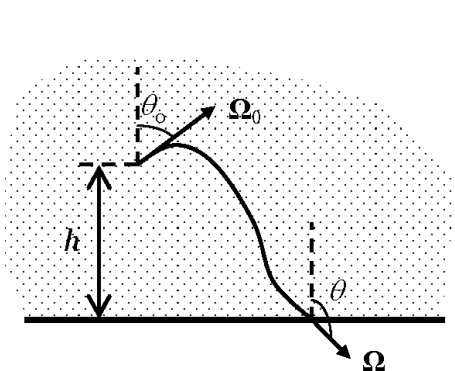


Рис. 8. Траектория электрона в приграничном слое объекта

Однако, в ряде приложений нет необходимости в детальном описании 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 $p = p(h, E_0, \theta_0)$ и средней потери энергии $\bar{E} = \bar{E}(h, E_0, \theta_0)$ вылетевшего электрона. При этом многомерная функция распределения заменяется на две трехмерные таблицы. Такое упрощение не дает угловых распределений электронов эмиссии, а также не учитывает разброса 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) $\sigma = \bar{E}\sqrt{p(1-p)}$, где значения величин p и \bar{E} выбираются из указанных выше трехмерных таблиц. Потери энергии электрона разыгрываются при этом по формуле

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

где $\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x \exp(-t^2) dt$ — функция ошибок; $\operatorname{erf} \operatorname{inv}(x)$ — обратная функция ошибок. Предложенная аппроксимация энергетического распределения электронов не следует из каких-либо априорных соображений. Ее применимость и работоспособность проверяются эмпирически с помощью вычислительных экспериментов.

Для анализа эффективности рассмотренных статистических моделей переноса электронов были проведены расчеты электронных потоков, вылетающих из железной пластины при облучении ее гамма-излучением. Более подробное описание численного эксперимента изложено в работе [20]. 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 сравнивалась 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 и 100 кэВ.

Результатом расчетов является нормированное энергетическое распределение фото- и комптоновских электронов $f_e(E)$, т.е.

$$\int_0^{E_{\max}} f_e(E) dE = 1.$$

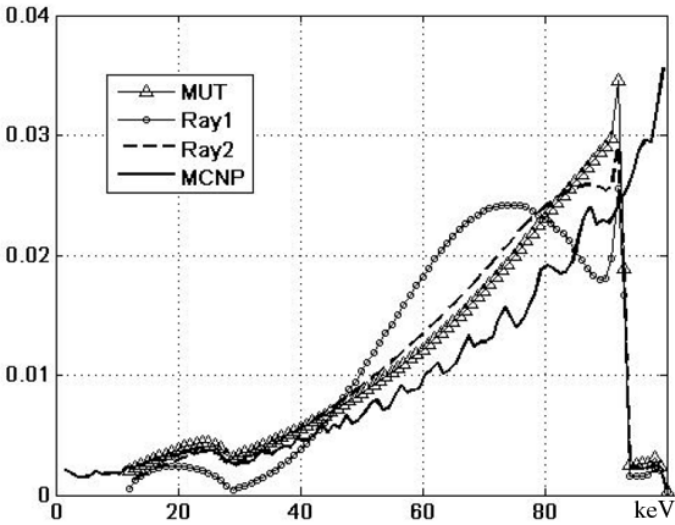


Рис. 9. Спектры электронов, инжектируемых с границы объекта, облучаемого фотонами с энергией 100 кэВ, рассчитанные по моделям MUT (Δ), Ray1 (\circ), Ray2 (---) и с использованием программного пакета MCNP (—)

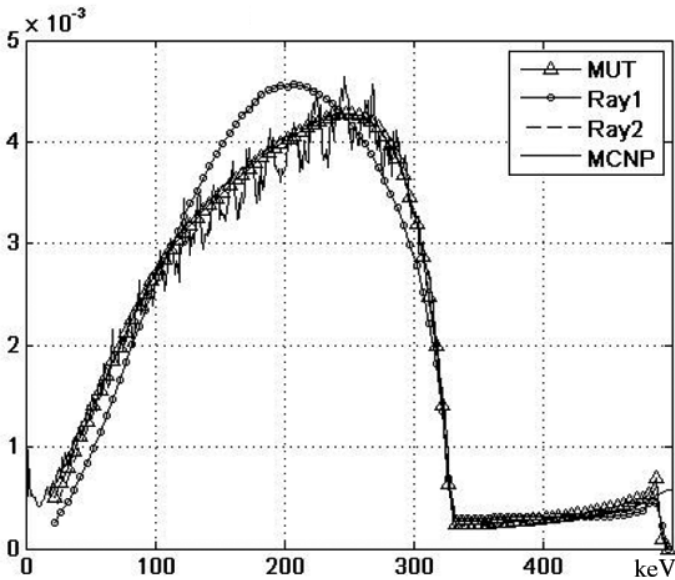


Рис. 10. Спектры электронов, инжектируемых с границы объекта, облучаемого фотонами с энергией 500 кэВ; обозначения см. рис. 9

Сравнительный анализ результатов показывает, что инженерная модель без дисперсии дает неудовлетворительный результат, в то время как использование той 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.

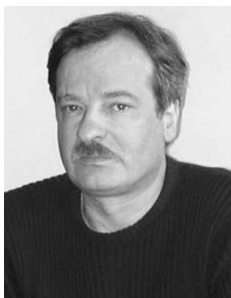
Приведем в заключение оценки эффективности предложенных моделей. Расчеты по МУТ требуют примерно в 30–40 раз меньше времени, чем по MCNP, а по инженерной модели примерно в 20 раз меньше, чем по МУТ при использовании одного и того же числа фотонных траекторий.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Н е р а з р у ш а ю щ и й контроль. Россия. 1900–2000 гг.: Справочник / Под ред. В.В. Ключева. – 2-е изд., исправ. и доп. – М.: Машиностроение, 2002.
2. Э л е к т р о д и н а м и ч е с к о е действие ионизирующих излучений / С.Н. Ганага, Л.Н. Здуход, С.В. Пантелеев и др. // Физика ядерного взрыва; Под ред. В.М. Лоборева. – Т. 2. – С. 107.
3. М а т е м а т и ч е с к о е моделирование и методики решения многомерных задач переноса частиц и энергии, реализованные в комплексе САТУРН-3 / Р.М. Шагалиев и др. // Вопросы атомной науки и техники. Сер. “Матем. моделирование физических процессов”. – 1999. – Вып. 4. – С. 20–26.
4. М о д е л и р о в а н и е распространения оптического излучения в фантоме биологической ткани на суперЭВМ MBC1000/M / Л.П. Басс, О.В. Николаева, В.С. Кузнецов и др. // Матем. моделирование. – 2006. – Т. 18, № 1. – С. 29–42.
5. С у ш к е в и ч Т. А.. Математическое моделирование переноса излучения. – М.: Бином, 2005. – 661 с.
6. А к к е р м а н А. Ф. Моделирование траекторий заряженных частиц в веществе. – М.: Энергоатомиздат, 1991. – 200 с.
7. B r i e s m e i s t e r J. F. (ed.). MCNP — A General Monte Carlo N-Particle Transport Code. LANL Report LA-13709-M, Los Alamos, 2000.
8. С к а ч к о в М. В.. Модель “утолщенных траекторий” для описания движения электронов в веществе и ее реализация на MBC-5000M / Международный семинар “Супервычисления и математическое моделирование”. – Саров, 2006. – С. 91–92.
9. В з а и м о д е й с т в и е импульсных пучков заряженных частиц с веществом / В.И. Бойко, В.А. Скворцов, В.Е. Фортвов и др. – М.: Физматлит, 2003.
10. L a n d a u L. On the energy loss of fast particles by ionization // J. Phys. USSR. **8** (1944) 201.
11. B l u n s k O., L e i s e g a n g S. Zum Energieverlust schneller Elektronen in duennen Schichten // Z. Physik **128** (1950) 500.
12. А к к е р м а н А. Ф., Н и к и т у ш е в Ю. М., Б о т в и н В. А. Решение методом Монте-Карло задач переноса быстрых электронов в веществе. – Алмата: Наука, 1972.

13. Пляшешников А. В., Лапа А. В., Кольчужкин А. М. Моделирование процесса переноса электронов с использованием вложенных Марковских цепей // Методы Монте-Карло в вычислительной математике и математической физике; Под ред. Г.И. Марчука. – Новосибирск: Изд-во ВЦ СО АН СССР, 1974. – С. 283–288.
14. Lewis H. W. Multiple scattering in an infinite-medium // Phys. Rev. 1950, Vol. 78. – P. 526–533.
15. Spencer L. V. Theory of electron penetration // Phys. Rev. 1955. Vol. 98. P. 1597–1611.
16. Monte Carlo simulation tool with CAD interface / R. Jaenisch, C. Bellon, U. Samadurau et. al. // Review of Progress in Quantitative NDE, 574–579 (2006).
17. О моделировании экспериментов с проникающим излучением / М.Е. Жуковский, С.В. Подоляко, М.В. Скачков и др. // Матем. моделирование. – 2007. – Т. 19, № 1. – С. 29–42.
18. Markov M. B., Zhukovskiy M. E. Modeling the radiative electromagnetic field // International J. of Computing Sci. and Math. – 2008. – Vol. 2, no. 1.
19. Monte Carlo radiographic model with CAD-based geometry description / G.-R. Jaenisch, C. Bellon, U. Samadurau, M. Zhukovskiy et. al. // Insight. – 2006. – No. 10. – P. 618–623.
20. Жуковский М. Е., Скачков М. В. Статистические модели электронной эмиссии. Модель “утолщенных траекторий”, 2007. – 27 с. (Препринт ИПМ им. М.В. Келдыша РАН № 80). http://www.keldysh.ru/papers/2007/rep80/rep2007_80.html

Статья поступила в редакцию 9.04.2008



Михаил Евгеньевич Жуковский — ведущий научный сотрудник института прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН. Канд физ.-мат. наук, автор более 40 научных публикаций в области математического моделирования процессов генерации радиационных электромагнитных полей, статистического моделирования процессов взаимодействия ионизирующего излучения с веществом, математического моделирования в задачах неразрушающего контроля.

M. Ye. Zhukovskii – Ph. D. (Phys.-Math.), leading researcher of the Keldysh Institute for Applied Mathematics, RAS. Author of more than 40 publications in the field of mathematical simulation of processes of generating radiation electromagnetic fields, statistical simulation of processes of interaction of ionizing radiation with substance, mathematical simulation in problems of non-destructive inspection.



Михаил Викторович Скачков — доцент кафедры “Прикладная математика” Московского инженерно-физического института (государственный университет). Канд физ.-мат. наук, автор более 20 научных публикаций в области математического моделирования процессов генерации радиационных электромагнитных полей, статистического моделирования процессов взаимодействия ионизирующего излучения с веществом, проблем математической физики и вычислительной математики.

M. V. Skachkov – Ph. D. (Phys.-Math.), assoc. professor of “Applied Mathematics” department of the Moscow Engineering and Physics Institute (state university) Author of more than 20 publications in the field of mathematical simulation of processes of generating radiation electromagnetic fields, statistical simulation of processes of interaction of ionizing radiation with substance, mathematical simulation, problems of mathematical physics and computational mathematics.