



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 101 за 2015 г.



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

**Жуковский М.Е., Воронин Ф.Н.,
Подолько С.В.**

Суперкомпьютерное
моделирование переноса
нейтронов в сложных
технических объектах

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Жуковский М.Е., Воронин Ф.Н., Подолько С.В. Суперкомпьютерное моделирование переноса нейтронов в сложных технических объектах // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2015. № 101. 27 с.
URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2015-101>

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

М.Е. Жуковский, Ф. Н. Воронин, С.В. Подоляко

**Суперкомпьютерное моделирование
переноса нейтронов
в сложных технических объектах**

Москва — 2015

Жуковский М.Е., Воронин Ф. Н., Подоляко С.В.

Суперкомпьютерное моделирование переноса нейтронов в сложных технических объектах

Разработан программный комплекс для статистического моделирования на суперкомпьютерах с экстремальным параллелизмом переноса нейтронного излучения в многокомпонентных объектах сложной геометрии. Комплекс позволяет проводить оценку энерговыделения и плотности источников вторичного гамма-излучения, генерируемого при взаимодействии быстрых нейтронов с веществом. Реализованные в комплексе алгоритмы основаны на решении интегрального уравнения переноса нейтронов с помощью построенных весовых модификаций метода Монте-Карло и предназначены для расчетов на гетерогенных суперкомпьютерах с применением технологий MPI и NVidia® CUDA.

Ключевые слова: нейтронное излучение, статистическое моделирование, гибридное распараллеливание, гетерогенные суперкомпьютеры

*Mikhail Evgenievich Zhukovskiy, Fyodor Nikolaevich Voronin,
Sergey Victorovich Podolyako*

Supercomputing the neutron transport in complex technical objects

Heterogeneous supercomputer software package for statistical modeling of neutron transport in multicomponent objects of complex geometry is worked out. It gives possibility of evaluating the energy deposit and the density of secondary gamma radiation sources generated by neutron flux. Algorithms based on Monte Carlo solving the integral transport equation are implemented in developed software. Corresponding codes of the software are directed for parallel calculations by use of MPI and NVidia® CUDA technologies.

Key words: neutron radiation, statistical modeling, hybrid parallelization, heterogeneous supercomputers

Работа выполнена при поддержке Программы фундаментальных исследований Президиума РАН по стратегическим направлениям развития науки: "Фундаментальные проблемы математического моделирования".

Оглавление

Введение	3
1 Блок подготовки макроконстант.....	4
2 Моделирование переноса нейтронного излучения.....	9
3 Программная реализация алгоритма	18
4 Модельные примеры расчетов.....	23
Заключение.....	26
Библиографический список.....	26

Введение

Вычислительный комплекс предназначен для расчета переноса нейтронов с энергией до 14 МэВ с целью оценки энерговыделения нейтронного излучения и параметров генерируемого нейтронами вторичного гамма-излучения в сложных технических объектах и в воздухе.

Математическая модель переноса нейтронов построена при следующих основных предположениях. Процессы взаимодействия нейтронов с атомами (нуклидами) конструкционных материалов объектов подразделяются на четыре основных типа – упругое рассеяние, неупругое рассеяние, захват нейтронов и реакции типа (n, xn) , $x = 2, 3, \dots$. Для нейтронов с энергией $\varepsilon_n \leq 14$ МэВ из всех реакций (n, xn) актуальной является только реакция $(n, 2n)$. Вклад остальных процессов пренебрежимо мал. Вероятность реакций с выходом заряженных частиц также мала для большинства неделящихся нуклидов (при $\varepsilon_n \leq 14$ МэВ). Там, где такие реакции есть, с точки зрения решения задач переноса нейтронов они рассматриваются как поглощение.

Большинство типовых материалов являются композитными, т.е. состоят из химической и/или механической смеси различных веществ, которые в свою очередь также могут быть композитными. Поэтому одной из составных частей разработанного вычислительного комплекса является алгоритм и реализующий его программный блок для расчета макроконстант взаимодействия нейтронов с композитными материалами.

Искомые физические величины определяются как функционалы на пространстве решений уравнения переноса нейтронов. Для статистической оценки этих функционалов моделируются случайные траектории нейтронов в многокомпонентной среде со сложной геометрией. Для построения таких траекторий разработан соответствующий вычислительный блок.

Расчет парциального вклада каждой траектории нейтрона в плотность энерговыделения и плотность источников вторичного гамма-излучения осуществляется блоком регистрации (детектирования).

Последние два блока объединены в «вычислитель».

Общая структура разработанного программного комплекса схематично изображена на рис. 1.

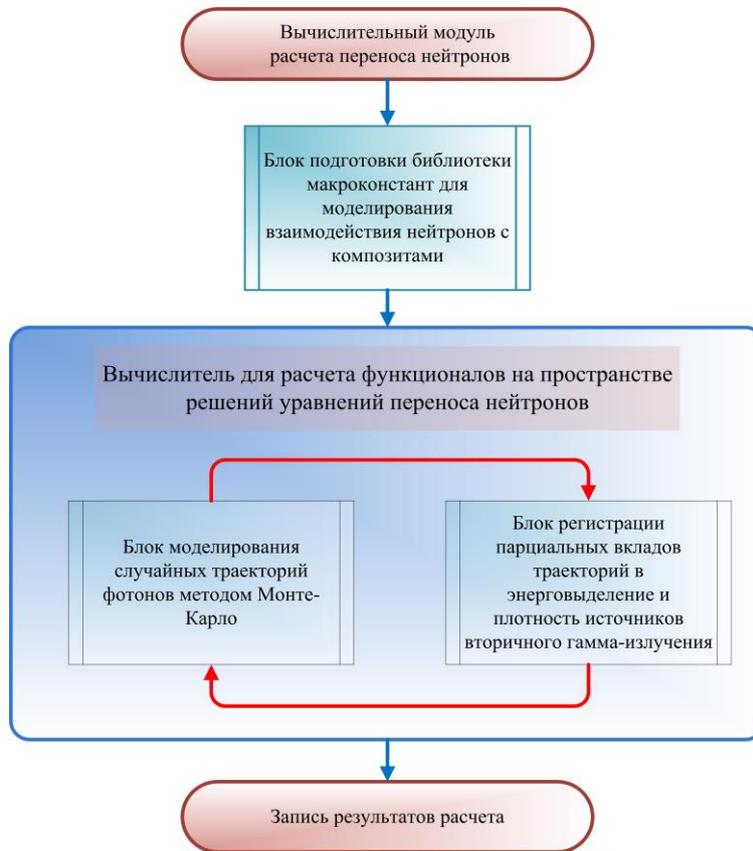


Рис. 1 Общая структура программного комплекса моделирования переноса нейтронов

Ниже описаны составные части созданного параллельного программного комплекса и реализованные в них подходы и алгоритмы.

1 Блок подготовки макроконстант

Моделирование случайных траекторий нейтронов с помощью разработанных весовых модификаций метода Монте-Карло требует в качестве исходных данных следующие величины:

- полные сечения нейтронов – μ ;
- вероятность выживания (непоглощения) – p_{sr} ;
- функции распределения для рассеяния в нейтронные группы – W ;
- функции углового распределения нейтронов при переходе из одной группы в другую – $F_{k \rightarrow n}(\cos \theta)$;
- вероятность образования вторичных частиц (гамма-квантов) – w_γ ;
- функции распределения вторичного гамма-излучения по фотонным энергетическим группам – $F_{k \rightarrow n}(\epsilon)$;
- керма – K ;

- плотность вещества – ρ .

Исходным материалом для данного блока вычислителя (рис. 1) является композитный материал, состоящий из смеси веществ $X_i, i = 1, \dots, I$, для которых заданы их массовые доли $\{\eta_i\}_{i=1}^I$; $\sum_{i=1}^I \eta_i = 1$ и плотность композитного материала ρ .

Введем обозначения:

$\sigma^A = (N_A / A) \sigma$ – полное массовое сечение взаимодействия нейтрона $[см^2/г]$;

$\rho'_i = \eta_i \rho$ – парциальная плотность i -го вещества в композите;

$Q = K \cdot \Phi$, Q – плотность энергосвечения $[МэВ/см^3]$, K – керма на единичный флюенс $[МэВ/см]$, Φ – плотность потока нейтронов $[1/см^2]$.

По определению $\mu_i = \rho(\sigma_i / A_i) \Rightarrow (\sigma_i / A_i) = (\mu_i / \rho_i) \Rightarrow \sigma_i^A = \mu_i / \rho_i$.

Макроскопическое сечение μ'_i для i -го вещества в композите будет равно $\mu'_i = (\sigma_i / A_i) \cdot \rho'_i = (\sigma_i / A_i) \cdot \eta_i \cdot \rho = \sigma_i^A \cdot \eta_i \cdot \rho$.

Введем $\mu = \rho \cdot \sum_{i=1}^I \eta_i \cdot \sigma_i^A = \rho \cdot \hat{\sigma}^A$, и тогда $\mu'_i / \mu = (1 / \hat{\sigma}^A) \cdot \sigma_i^A \cdot \eta_i$.

Рассчитаем плотность энергосвечения Q для композитных материалов.

Пусть на материал падает поток нейтронов с плотностью Φ .

Плотность столкновений Ψ нейтронов равна $\Psi = \mu \Phi$.

Определим энергосвечение на одно столкновение как $\varepsilon_\Psi = Q / \Psi$. Соответственно, $\varepsilon_\Psi = Q / \Psi = K \Phi / \mu \Phi = K / \mu$.

Величина ε_Ψ удобна для расчета энергосвечения методом Монте-Карло. Действительно, рассчитывая ε_Ψ всякий раз, когда происходит столкновение в фиксированном детекторе, получим вклад в энергосвечение от каждой нейтронной траектории. Сумма таких вкладов даст оценку энергосвечения в детекторе для заданного числа запущенных нейтронов.

Вероятность p_i того, что столкновение, при котором выделилась энергия $\varepsilon_\Psi^i = K_i / \mu_i$, произошло с i -ым элементом композита, есть $p_i = \mu'_i / \mu = (1 / \hat{\sigma}^A) \cdot \sigma_i^A \cdot \eta_i$. Отсюда среднее значение выделившейся при одном столкновении энергии ε_Ψ равно:

$$\varepsilon_\Psi = 1 / \mu \sum_i K_i (\rho \cdot \sigma_i^A \cdot \eta_i / \rho_i \cdot \sigma_i^A) = (1 / \hat{\sigma}^A) \cdot \sum_i \eta_i (K_i / \rho_i).$$

Рассмотрим теперь функции распределения для вероятности межгрупповых переходов нейтронов для композитов.

Пусть заданы вероятности переходов $W_i(G_k \rightarrow G_n), k \leq n$.

Предположим, что произошло столкновение с атомом i -го элемента. Вероятность этого события, как указано выше, равна $p_i = \mu'_i / \mu$.

Следовательно, вероятность перехода $\hat{W}(G_k \rightarrow G_n)$ в результате этого столкновения будет равна:

$$\hat{W}(G_k \rightarrow G_n) = \sum_i W_i p_i = \sum_i (\mu_i / \mu) W_i = (1 / \hat{\sigma}^A) \cdot \sum_i \eta_i \cdot \sigma_i^A \cdot W_i.$$

Аналогичным образом получаем выражение для функции распределений косинусов углов рассеяния нейтронов для композитов $F_{k \rightarrow n}^i(\cos \theta)$.

$$\hat{F}_{k \rightarrow n}(\cos \theta) = \sum_i F_{k \rightarrow n}^i(\cos \theta) \cdot p_i = (1 / \hat{\sigma}^A) \cdot \sum_i \eta_i \cdot \sigma_i^A \cdot F_{k \rightarrow n}^i(\cos \theta).$$

Для функции энергетического распределения гамма-квантов по группам для композитов $F_{k \rightarrow n}^i(\varepsilon_\gamma)$ получаем

$$\hat{F}_{k \rightarrow n}(\varepsilon_\gamma) = (1 / \hat{\sigma}^A) \sum_{i=1}^I \eta_i \cdot \sigma_i^A \cdot F_{k \rightarrow n}^i(\varepsilon_\gamma).$$

Для вероятности непоглощения

$$\hat{p}_{sr} = (1 / \hat{\sigma}^A) \sum_{i=1}^I \eta_i \cdot \sigma_i^A \cdot p_{sr}^i.$$

И, наконец, для вероятности рождения вторичных частиц (фотонов)

$$\hat{w}_{sr} = (1 / \hat{\sigma}^A) \sum_{i=1}^I \eta_i \cdot \sigma_i^A \cdot w_{sr}^i.$$

После анализа вышеприведенных формул была реализована следующая схема генерации макроконстант и необходимых вероятностных распределений для композитных материалов (рис. 2).

- На первом этапе исходные данные обрабатываются и сохраняются в таблицах, удобных для просмотра и считывания. Вместо полного макроскопического сечения (μ_{total}) и кермы (K) сохраняются соответственно массовые сечения (σ^A) и величина (K/ρ).
- На втором этапе, согласно заданным данным о составе композитных материалов, составляющих объект, формируются таблицы макроконстант и распределений, требуемых для моделирования случайных траекторий нейтронов.

В предоставленных данных используется «групповое» задание сечений и других макроконстант, при котором нейтроны и фотоны с достаточно близкими

энергиями объединяют в группы. Вся область изменения энергии разбивается на отдельные интервалы (группы) $\Delta\varepsilon_i = [\varepsilon_{i-1}, \varepsilon_i]$.



Рис. 2 Блок-схема модуля подготовки библиотеки макроконстант для композитных материалов

В групповой модели переноса нейтронов энергетическая зависимость сечений и источников формально аппроксимируется кусочно-постоянными функциями, принимающими постоянное значение в пределах каждого энергетического интервала. Значения групповых макроконстант вычисляются в результате усреднения данных (в групповом интервале $\Delta\varepsilon_i$) с некоторым весом $\varpi(\varepsilon)$.

На основе разработанного алгоритма создан программный модуль для вычисления макроконстант взаимодействия быстрых нейтронов с веществом композитных материалов и построения вероятностных распределений, требуемых для моделирования случайных траекторий нейтронов в сложных технических объектах.

В качестве результата работы модуля рассмотрим, например, композитный материал, состоящий из алюминия и воздуха с массовыми коэффициентами, соответственно, 0.2 и 0.8. На рис. 3,4 приведены вероятностные распределения, рассчитанные с помощью рассматриваемого программного модуля.

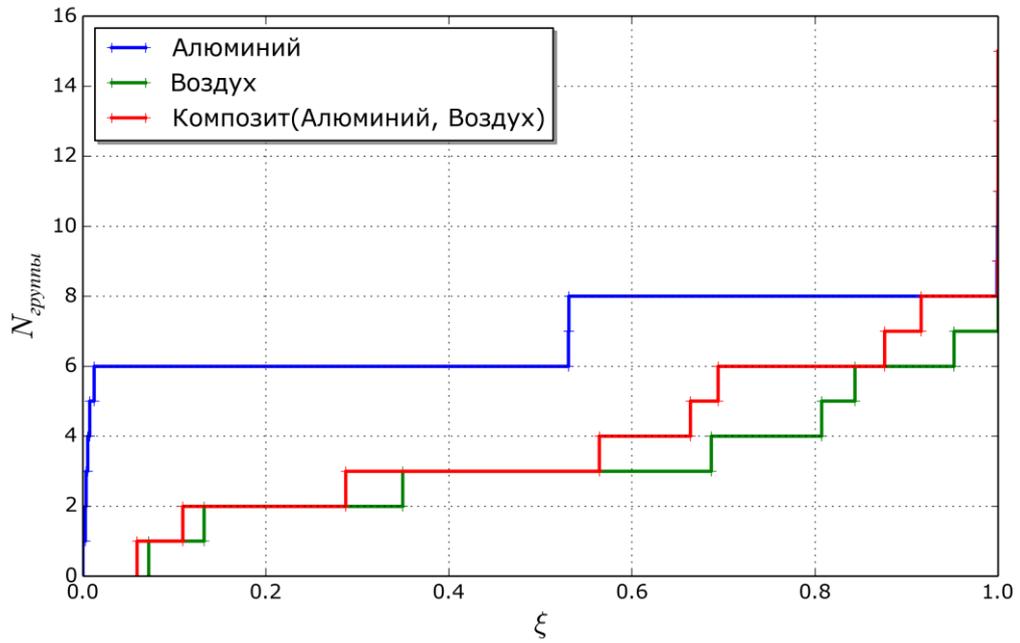


Рис. 3 Функция энергетического распределения фотонов, генерируемых нейтронами из энергетической группы ($2.5 \div 4 \text{ МэВ}$)

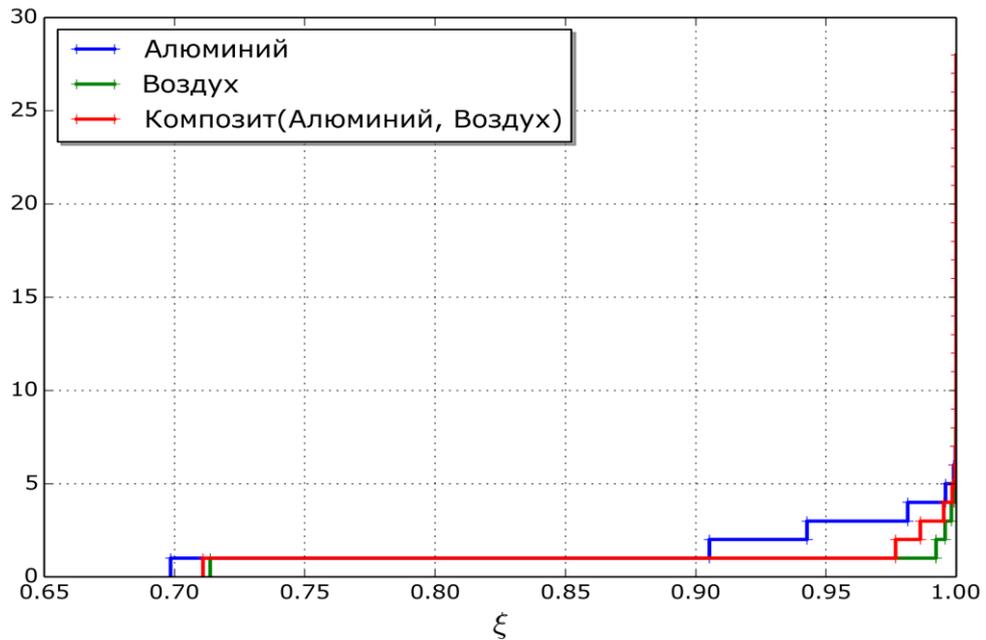


Рис. 4 Функция распределения для розыгрыша переходов нейтронов из энергетической группы ($2.5 \div 4 \text{ МэВ}$)

2 Моделирование переноса нейтронного излучения

Процесс переноса нейтронов в веществе описывается уравнением:

$$\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, \varepsilon) = \Psi^1(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, \varepsilon) + \int_0^\infty d\xi \cdot a(\mathbf{r} - \xi\mathbf{\Omega}, \mathbf{r}, \varepsilon) \times \int d\mathbf{\Omega}' \int d\varepsilon' \partial^2 \sigma_s(\mathbf{r}, \varepsilon, \mathbf{\Omega}, \varepsilon', \mathbf{\Omega}') \frac{\sigma(\mathbf{r}, \varepsilon)}{\sigma(\mathbf{r} - \xi\mathbf{\Omega}, \varepsilon')} \Psi(\mathbf{r} - \xi\mathbf{\Omega}', \mathbf{r}, \varepsilon'). \quad (1)$$

В уравнении (1):

$\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, \varepsilon)$ – плотность столкновений частиц излучения с веществом;

$\Psi^1(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, \varepsilon) = \sigma(\mathbf{r}, \varepsilon) \Phi^0(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, \varepsilon)$ – плотность первых столкновений;

$\Phi^0 = S(\mathbf{r}, \varepsilon, \mathbf{\Omega}) \cdot \exp\left\{-\int_0^\xi \sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r} - \xi'\mathbf{\Omega}, \varepsilon) d\xi'\right\}$, $S(\mathbf{r}, \varepsilon, \mathbf{\Omega})$ – функция источника.

Ядро интегрального оператора

$$k = a(\xi, \mathbf{r}, \varepsilon) \partial^2 \sigma(\mathbf{r}, \varepsilon, \mathbf{\Omega}, \varepsilon', \mathbf{\Omega}') \sigma(\mathbf{r}, \varepsilon) / \sigma(\mathbf{r} - \xi\mathbf{\Omega}, \varepsilon)$$

имеет смысл плотности вероятности перехода из точки $x' = (\mathbf{r} - \xi\mathbf{\Omega}, \mathbf{\Omega}', \varepsilon)$ в точку $x = (\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, \varepsilon)$; $k \cdot d\xi d\mathbf{\Omega}' d\varepsilon'$ интерпретируется как вероятность перехода $x' \rightarrow x$;

$a(\xi, \mathbf{r}, \varepsilon) = \exp\left\{-\int_0^\xi \sigma(\mathbf{r} - \xi'\mathbf{\Omega}, \varepsilon) d\xi'\right\}$ – «ослабление» пучка нейтронов за счет процессов рассеяния и поглощения.

Алгоритмы статистического моделирования переноса излучения можно построить на основе вероятностной интерпретации ядра интегрального оператора $k(x', x)$. То есть, рассматривая ядро $k(x', x)$ как плотность вероятности перехода из точки x' в точку x , можно строить траектории частиц и подсчитывать вклад этих траекторий в искомую величину [1].

Процесс переноса можно рассматривать как однородную цепь Маркова столкновений частиц с атомами вещества, в результате которых может произойти поглощение или рассеяние с вероятностями σ_a/σ и σ_s/σ соответственно (σ , σ_a , σ_s – полное сечение, сечение поглощения и сечение рассеяния) [2]. Такое рассмотрение возможно, поскольку условная плотность распределения $p(x_{n-1}, x_n)$, являющаяся переходной плотностью из точки x_{n-1} в точку x_n , не зависит от предыдущих значений x_0, x_1, \dots, x_{n-2} [3, 4].

Траектория частицы $T = \{x_0, x_1, \dots, x_N\}$ заканчивается в результате поглощения или вылета из рассматриваемой области пространства (объекта).

Пусть функция Ψ удовлетворяет уравнению (2), которое запишем в виде:

$$\Psi = \Psi^1 + K\Psi. \quad (2)$$

Задачей теории переноса является вычисление измеряемых в эксперименте величин, которые являются функционалами вида [2]:

$$J_h = (\Psi, h) = \int \Psi(x)h(x)dx. \quad (3)$$

Для оценки функционалов (3) используется метод Монте-Карло. Рассматриваемые далее в этой главе модификации метода Монте-Карло [5 - 8] основаны на представлении решения уравнения (2) рядом Неймана [1]:

$$\Psi = \sum_{n=0}^{\infty} K^n \Psi^1, \quad (4)$$

где K^n – оператор с итерированным ядром оператора из (1).

Для J_h получим:

$$J_h = \sum_n \int K^n \Psi^1(x)h(x)dx. \quad (5)$$

Представление решения уравнения в виде (5) можно записать как разложение $\Psi = \sum_k \Psi_k, k = 0, 1, \dots$. Это представление называется разложением по столкновениям [9] и имеет простой физический смысл. Нулевой член есть плотность потока нерассеянных частиц, первый – однократно рассеянных и т.д. Поэтому рассматриваемое представление называют разложением по порядкам рассеяния.

Геометрическое описание сложных объектов

Кусочно-однородная гетерогенная среда, которая характеризует корпус объекта, может быть адекватно описана посредством явного задания разделяющих поверхностей между ее однородными составляющими. Такое «поверхностно ориентированное» описание позволяет определить соответствующие пространственные структуры, используя замкнутые оболочки.

Адекватное поверхностно ориентированное описание кусочно-однородных объектов проведено с помощью введения пары (μ, U) . Здесь $\mu = \{\mu_p\}$ – набор параметров для описания характеристик среды. Например, μ_p ($p = 1, \dots, P$) может быть вектором, определяющим коэффициенты взаимодействия излучения данной энергии в p -ой однородной части объекта. Вторая составляющая поверхностного описания $U = \{u_q\}$ – множество разделяющих оболочек u_q , задающих границы между однородными частями объекта.

При моделировании переноса и регистрации излучения в веществе детектирующая система включается в понятие «объект», и для ее описания используются те же подходы, что и для облучаемого опытного образца или исследуемой конструкции.

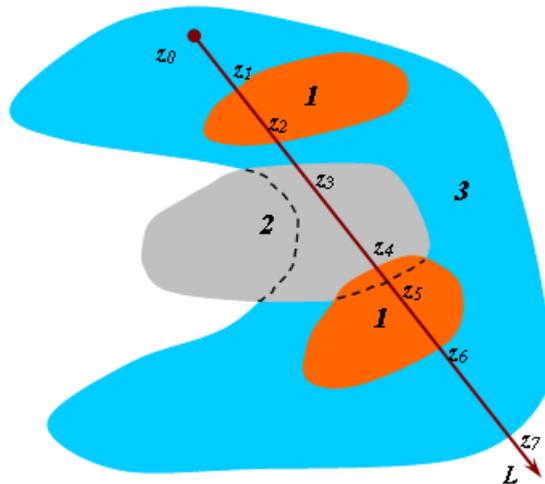


Рис. 5 Трехкомпонентный объект

Поверхности оболочек должны быть замкнутыми, а их число – конечно. В то же время не предполагается их выпуклость, а также односвязность множеств, ограниченных этими оболочками. Часть оболочек может пересекаться или иметь общую границу. На рис. 5 изображен пример кусочно-гомогенной структуры, состоящей из трех однородных частей.

Для определения вещества той или иной однородной составляющей объекта строится система приоритетов конструкционных материалов рассматриваемого объекта. При этом предполагается, что вещество оболочки с более высоким приоритетом «вытесняет» вещество с меньшим приоритетом. Например, на рис. 5 высшим приоритетом обладает вещество с номером 1, а низшим – с номером 3. Для задания пустотелых объектов задаются две оболочки: одна, внешняя, заполнена веществом стенки объекта, а вторая, внутренняя, – воздухом или иным веществом, содержащимся внутри. При этом вещество внутреннего заполнения «вытесняет» вещество стенки, то есть имеет больший приоритет.

Важно отметить, что разработанный способ описания объектов в совокупности с построенным алгоритмом его трассировки не требует задания границ между разделяющими оболочками (рис. 5). Более того, границы между оболочками при необходимости можно получить в процессе трассировки объекта.

Это обстоятельство значительно упрощает логическую часть алгоритма, что является важным для реализации вычислительного алгоритма на графических процессорах.

Построенный алгоритм описания разделяющих граничных поверхностей между гомогенными частями объекта подразумевает применение дискретной

модели поверхности в виде плоских многоугольников. Этот алгоритм поверхностно ориентированного представления объектов имеет ряд преимуществ, когда есть необходимость использования сложных неравномерных сеток. Он может быть эффективно использован при математическом моделировании задач переноса излучения в объектах, содержащих разнородные по форме и размерам элементы. Кроме того, применение, например, триангуляционной модели дискретизации разделяющих поверхностей дает возможность построения эффективного алгоритма для трассировки объекта с использованием гибридных вычислительных суперкомпьютеров, содержащих графические подсистемы в качестве арифметических сопроцессоров.

Описывать граничные поверхности можно разными способами.

Наиболее удобный – триангуляционный, когда поверхность задается с помощью набора треугольников, который аппроксимирует данную поверхность. Этот метод наиболее универсальный, поскольку позволяет описывать практически любые поверхности и легко реализуем на современных гибридных вычислительных системах.

Разработанный метод дискретного описания гетерогенных структур дает возможность эффективного использования метода Монте-Карло для моделирования процессов переноса излучения на современных гибридных вычислительных системах. Существенной особенностью разработанного подхода для описания многокомпонентных объектов является инвариантность значительной его части относительно линейных преобразований систем координат. Ниже рассмотрены основные особенности этого подхода.

Трассировка объекта

Первым этапом моделирования переноса частиц методом Монте-Карло является определение очередной точки взаимодействия частицы с веществом. Для этого проводится розыгрыш длины очередного звена траектории в соответствии с плотностью распределения:

$$p_l = \mu(\mathbf{r}' + \mathbf{\Omega}l) \exp(-\tau(\mathbf{r}'; \mathbf{\Omega}l)), \text{ где } \tau(l; \mathbf{r}', \mathbf{\Omega}) = \int_0^l \mu(\mathbf{r}' + l\mathbf{\Omega}) dl \quad (6)$$

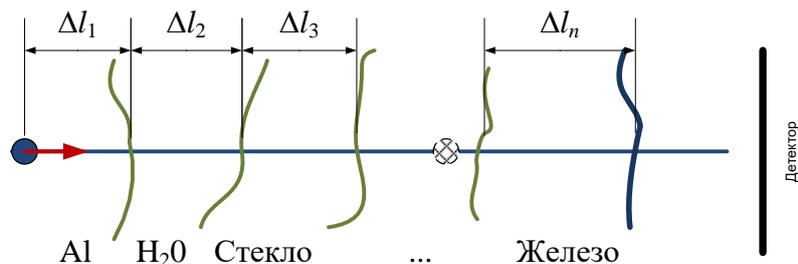


Рис. 6 Схема определения точки взаимодействия в кусочно-однородной среде

Реализация указанного этапа моделирования проводится с помощью алгоритма (рис. 6), состоящего из следующих основных шагов.

На рис. 7 приведена блок-схема определения точки взаимодействия нейтрона.

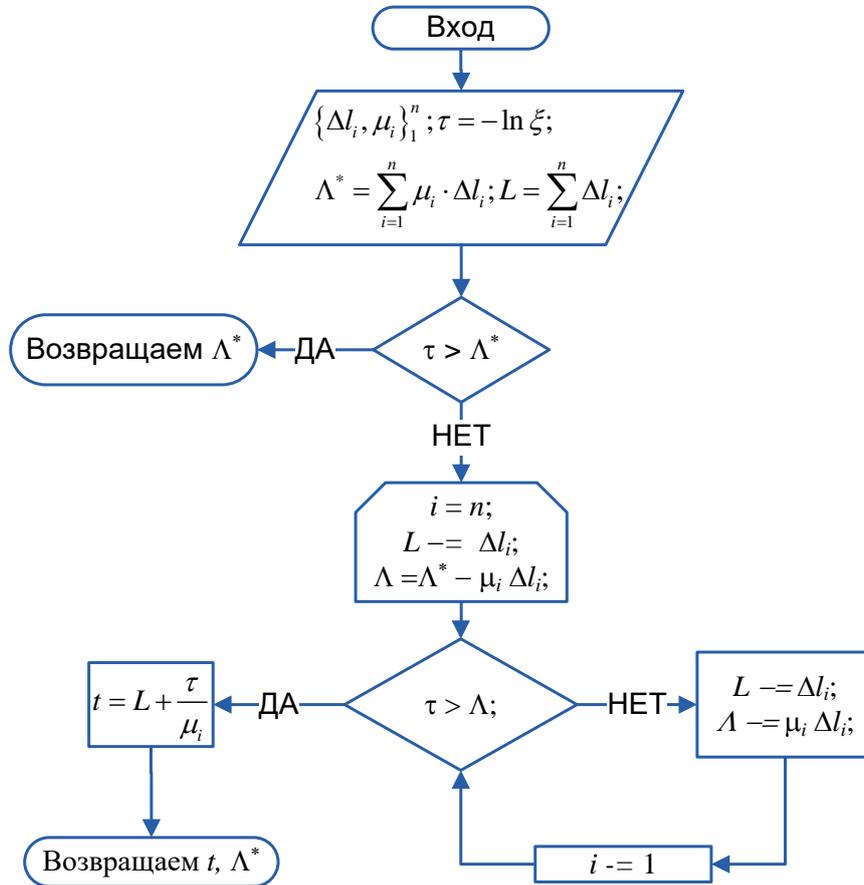


Рис. 7 Блок-схема алгоритма определения точки взаимодействия частицы

Сначала выполняется «трассировка» объекта [10], то есть определение всех точек пересечения луча, выходящего из текущей точки взаимодействия частицы вдоль направления ее движения со всеми оболочками объекта (рис. 5).

Затем вычисляется оптическая толщина объекта $\tau_{tot} = \sum_i \tau_i$ между началом луча и точкой его выхода из объекта (τ_i – оптическая толщина i -ой пересекаемой компоненты, сумма по всем пересекаемым компонентам).

Наконец, проводится розыгрыш длины очередного звена τ в соответствии с формулой $\tau = -\ln \gamma$, $\gamma \in (0,1)$ – равномерно распределенная случайная величина. В зависимости от используемой модификации метода Монте-Карло, формула для определения τ может меняться. Например, если используются веса, заменяющие розыгрыш вылета частицы из объекта, длина звена определяется по формуле $\tau = -\ln(1 - (1 - e^{-\tau_{tot}})\gamma)$.

Моделирование источника излучения

Функция источника $S(\mathbf{r}, \varepsilon, \boldsymbol{\Omega}) = d^3N/(dVd\varepsilon d\boldsymbol{\Omega})$, в общем случае, равна количеству частиц, которые испускаются источником из единицы объема вокруг точки \mathbf{r} , имеют энергию в единичном интервале энергий вокруг значения ε и летят в единице телесного угла вокруг направления $\boldsymbol{\Omega}$.

Наиболее часто встречающийся вид источника можно записать в следующем виде: $S(\mathbf{r}, \varepsilon, \boldsymbol{\Omega}) = S_r(\mathbf{r}) \cdot S_\varepsilon(\varepsilon) \cdot S_\Omega(\boldsymbol{\Omega})$.

Приведем примеры:

Функция $S_r(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$ описывает точечный источник в точке \mathbf{r}_0 .

Функция $S_\Omega(\boldsymbol{\Omega}) = \delta(\boldsymbol{\Omega} - \boldsymbol{\Omega}_0)$ описывает мононаправленный источник (луч вдоль направления $\boldsymbol{\Omega}_0$).

Функция $S_\Omega(\boldsymbol{\Omega}) = 1/4\pi$ описывает изотропный источник.

Функция $S_\varepsilon(\varepsilon) = \delta(\varepsilon - \varepsilon_0)$ описывает моноэнергетический источник излучения с заданной энергией ε_0 .

Следовательно, функция $S(\mathbf{r}, \varepsilon, \boldsymbol{\Omega}) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \cdot \delta(\varepsilon - \varepsilon_0) \cdot \delta(\boldsymbol{\Omega} - \boldsymbol{\Omega}_0)$ описывает точечный, коллимированный и моноэнергетический источник излучения, функция $S(\mathbf{r}, \varepsilon, \boldsymbol{\Omega}) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \cdot S_\varepsilon(\varepsilon) / 4\pi$ описывает точечный изотропный источник, а функция $S(\mathbf{r}, \varepsilon, \boldsymbol{\Omega}) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0 - (\boldsymbol{\Omega}_0, \mathbf{r})) \cdot \delta(\varepsilon - \varepsilon_0) \cdot \delta(\boldsymbol{\Omega} - \boldsymbol{\Omega}_0)$ описывает плоский фронт частиц с энергией ε_0 .

Рассмотрим моделирование «плоского» источника более подробно.

Геометрическая модель источника должна отвечать следующим требованиям:

- вычислительная простота задания точки вылета нейтрона;
- отсутствие участков объекта, которые не могли бы попасть под «обстрел» первичных нейтронов;
- минимизация числа «холостых» первичных нейтронов, то есть таких нейтронов, траектории которых не пересекают объект.

Исходя из вышеперечисленных требований, была предложена и реализована следующая схема моделирования плоского источника.

1. На первом этапе определяем параметры сферы, описывающей объект, то есть определяем центр сферы и ее радиус.
2. На втором этапе строим плоскость излучения, $\mathbf{r} = \mathbf{r}_0 + (\boldsymbol{\Omega}_0, \mathbf{r})$, где \mathbf{r}_0 – точка смещенная от центра сферы на два радиуса в направлении $-\boldsymbol{\Omega}_0$.
3. Затем переходим из лабораторной системы координат к локальной и проецируем объект на плоскость излучения.
4. Находим прямоугольник, описывающий проекцию объекта на плоскость.
5. Найденные вершины прямоугольника переводим обратно в лабораторную систему координат.

6. Имея координаты вершин, можно находить точку запуска нейтрона, генерируя два независимых случайных числа.



Рис.8 Блок - схема алгоритма моделирования плоского источника

Эффективность модели определяется отношением площади проекции объекта на плоскость излучения к площади найденного прямоугольника - $k_{eff} = S_{proj} / (H \cdot L)$.

Блок-схема алгоритма приведена на рис. 8.

Дискретная модель детектирующей системы

Статистическая оценка функционалов на пространстве решений уравнения переноса проводится, как уже говорилось выше, путем построения случайных траекторий частиц и вычисления парциальных вкладов каждой траектории в искомый функционал.

В процессе моделирования переноса нейтронов на вычислительной технике нужно построить дискретную модель системы детекторов, позволяющую с требуемой точностью рассчитывать искомые величины.

Такой моделью будем называть совокупность элементарных детекторов, допускающих геометрическое (в конфигурационном пространстве) и физическое (энергия, скорости и т.д.) описание, пригодное для использования в компьютерных расчетах.

Размеры элементарных детекторов следует выбирать, с одной стороны, достаточно малыми, чтобы внутри них свойства вещества можно было считать постоянными, а с другой стороны, достаточно большими, чтобы достичь требуемой

точности расчета за приемлемое вычислительное время. В детектор очень малых размеров может попасть малое число частиц, и статистическая оценка измеряемой величины окажется слишком грубой.

Помимо указанных эмпирических критериев выбора размеров детектора, следует учитывать также общие требования к совокупности детекторов. Например, если требуется рассчитать пространственное распределение энерговыделения излучения в заданной части объекта, то число детекторов в ней должно быть достаточно велико, чтобы описать требуемое распределение с приемлемой точностью. Это, конечно, накладывает дополнительные ограничения на размеры детекторов.

Разработанный программный комплекс предназначен для расчета двух типов измеряемых величин: энерговыделение нейтронного излучения в элементах конструкций облучаемых объектов и плотность источников вторичного гамма-излучения, генерируемого нейтронным потоком в конструкционных материалах объектов.

Рассмотрим случай, когда искомой величиной является плотность энерговыделения $Q(\mathbf{r})$. Для оценки этой величины методом Монте-Карло вводятся *объемные детекторы* в конфигурационном пространстве $\Delta V(\mathbf{r})$. Величина $Q(\mathbf{r})$ оценивается по формуле

$$Q(\mathbf{r}) = (1/\Delta V(\mathbf{r})) \cdot \sum_{n=1}^N K_n w_n / \mu_n . \quad (7)$$

В этой формуле N – общее число столкновений в данном детекторе, μ_n – полное макроскопическое сечение взаимодействия нейтрона с веществом детектора, w_n – статистический вес нейтрона, K_n – керма на единичный поток.

Выше введено понятие объемного детектора («воксела»). Форма таких детекторов может быть различной (сфера, прямоугольный параллелепипед и т.д.) в зависимости от постановки и геометрии задачи. Так, в задачах радиационной электродинамики удобно в качестве детекторов использовать ячейки прямоугольной пространственной сетки, на которой решаются уравнения Максвелла. При исследовании энерговыделения в плоскостойких структурах объемные детекторы выбирают так, чтобы часть их граничных поверхностей была параллельна границам раздела сред с различными физическими свойствами.

Для оценки плотности источников вторичных гамма-квантов $S_\gamma(\mathbf{r})$ используются объемные детекторы $\Delta V(\mathbf{r})$ в конфигурационном пространстве. Однако помимо пространственного распределения источников гамма-излучения требуется, как правило, оценивать спектральное распределение гамма-квантов в каждом детекторе $\Delta V(\mathbf{r})$ (угловое распределение квантов полагается изотропным).

Для этого вводится дискретная сетка по энергии (8):

$$\{\varepsilon_{n_\varepsilon}^\gamma\}_{n_\varepsilon=0}^{N_\varepsilon} = (\varepsilon_0, \varepsilon_1 > \varepsilon_0, \dots, \varepsilon_{N_\varepsilon} > \varepsilon_{N_\varepsilon-1}). \quad (8)$$

Величина спектрального распределения плотности источников гамма-излучения $S_\gamma(\mathbf{r}, \varepsilon)$ оценивается следующим образом:

$$S_\gamma(\mathbf{r}, \varepsilon_{n_\varepsilon}^\gamma) = (1 / \Delta V(\mathbf{r})) \cdot \sum_{n=1}^N w_n w_n^\gamma \eta(\varepsilon_{n_\varepsilon}^\gamma - \varepsilon_\gamma) \cdot \eta(\varepsilon_\gamma - \varepsilon_{n_\varepsilon-1}^\gamma). \quad (9)$$

В этой формуле w_n, w_n^γ – статистические веса нейтрона и кванта, соответственно, $\eta(x)$ – единичная функция Хевисайда.

Построение случайных траекторий нейтрона проводится в рамках поверхностно ориентированного описания объекта. При этом дискретизация замкнутых оболочек, ограничивающих гомогенные составляющие объекта, выполняется с помощью триангуляции.

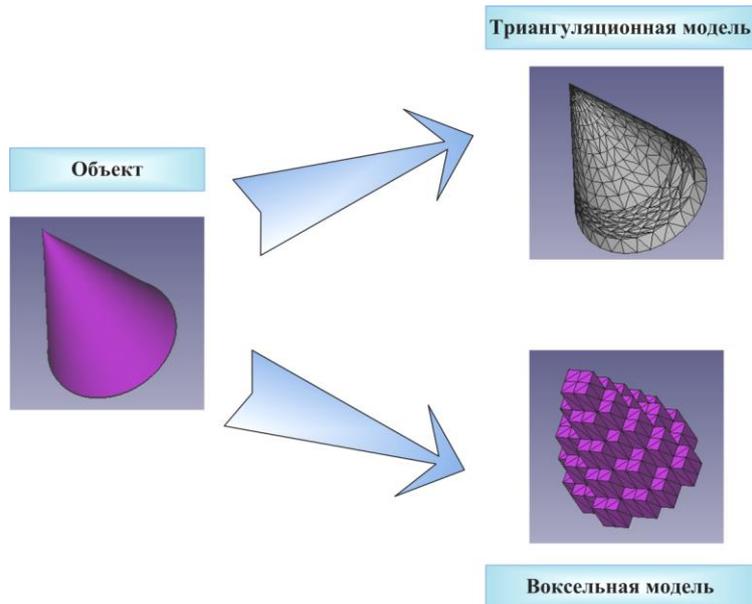


Рис. 9 Подходы к дискретному описанию объекта

Дискретное описание детектирующей системы фактически сводится к построению «воксельной» модели объекта [11,12]. Суть воксельной модели заключается в том, что строится трехмерная пространственная дискретная сетка с требуемой степенью точности описывающая исследуемый объект (рис. 9). Сетка может быть регулярной, нерегулярной, равномерной или нет. Каждый элементарный пространственный элемент такой сетки называется вокселем. Предполагается, что каждый воксел заполнен однородным веществом, свойства которого не меняются в пределах данного вокселя.

Описание воксельной модели объекта сводится к указанию массива из N_v структур (N_v – общее число вокселей), каждая из которых содержит координаты центра вокселя, его размеры по трем направлениям координатных осей и номер материала, которым заполнен данный воксел.

Детекторная система является подмножеством воксельной структуры объекта. Эта структура строится таким образом, чтобы точки, в которых необходимы данные об искомых величинах, совпадали с центрами ячеек воксельной сетки. Из совокупности построенных вокселей выделяется множество D тех элементов, которые будут являться детекторами в процессе переноса излучения. В каждом таком детекторе выделяется раздел памяти для хранения требуемых величин. Если частица испытала столкновение в детекторе, то она дает соответствующий парциальный вклад в общий результат.

Вообще говоря, форма объемных детекторов может быть различной (сфера, прямоугольный параллелепипед и т.д.) в зависимости от постановки и геометрии задачи.

На рис. 10 изображены триангуляционная модель объекта, детекторная система в виде сферических элементов и детекторная система, основанная на прямоугольных ячейках.

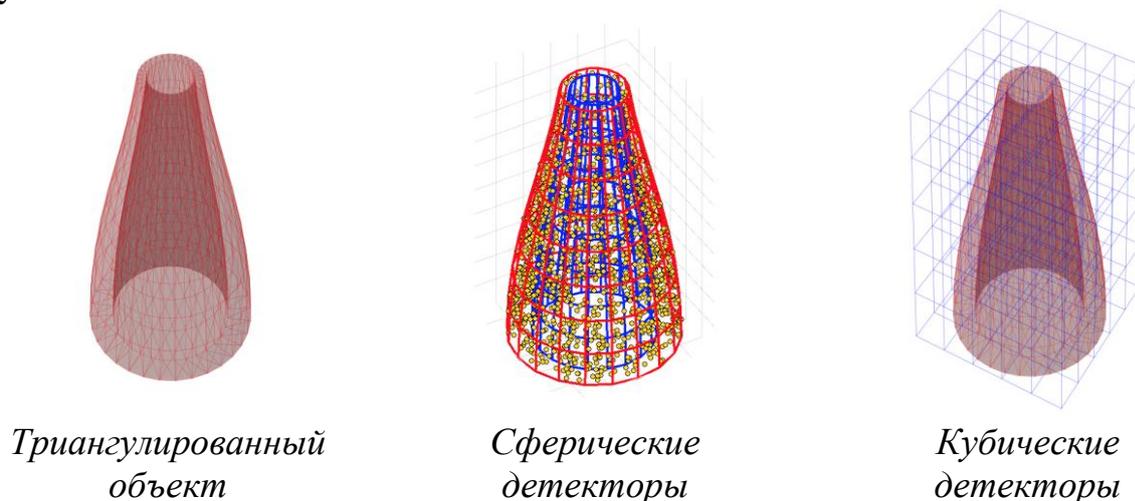


Рис. 10 Объект и детекторные системы

3 Программная реализация алгоритма

Разработанный программный модуль предназначен для статистической оценки энерговыделения нейтронного потока и плотности источников вторичного гамма-излучения. Программа предназначена для запуска на гетерогенных вычислительных кластерах с использованием программно-аппаратной архитектуры параллельных вычислений CUDA.

Количество используемых для расчета вычислительных узлов, а также количество случайных нейтронных траекторий, реализуемых на одном графическом ускорителе, определяется в файле *neutron.ini*.

Моделирование взаимодействия нейтронов с веществом проводится в рамках многогрупповой модели. Статистический алгоритм переноса нейтронов построен на основе весовых модификаций метода Монте-Карло. В частности, поглощение нейтронов учитывается путем мультипликативного уменьшения их «веса» на вероятность «выживания» в столкновении.

Источник излучения описывается в файле *source*. В актуальной версии программы реализовано задание плоского источника, поэтому в файле *source* возможно изменение только нормали к плоскости фронта нейтронного излучения.

По окончании работы солвера формируется файл с результатами расчета – *results*.

Статистический алгоритм моделирования переноса нейтронов в рамках многогрупповой модели взаимодействия нейтронов с веществом построен на основе весовой модификации метода Монте-Карло, когда поглощение нейтронов учитывается путем уменьшения статистического веса частицы на вероятность выживания в столкновении.

Алгоритм моделирования следующий.

1. Розыгрыш начальной энергии нейтрона:

Заданы N энергетических групп $\{G_n\}_{n=1}^N$ нейтронов и «групповой спектр»:

$\{p_n\}_{n=1}^N$, $\sum_{n=1}^N p_n = 1$. В соответствии с распределением $p = \{p_1, \dots, p_N\}$ разыгрывается номер энергетической группы G_n .

2. Розыгрывается направление движения нейтрона Ω в соответствии с индикатрисой рождения частицы.
3. Розыгрыш очередной точки взаимодействия (длины отрезка пути до следующего взаимодействия x):

Каждой энергетической группе соответствует полное макроскопическое сечение взаимодействия μ_{tot}^n . Тогда $x = -\ln \xi / \mu_{tot}^n$, $\xi \in (0, 1)$ – равномерно распределенное случайное число.

4. Уменьшение «веса» нейтрона на вероятность «не поглотиться» $w_n = w_n^0 \cdot p_{sr}$, $p_{rs} = 1 - p_a$; $p_a(\varepsilon_n)$ – вероятность поглощения нейтрона.
5. Розыгрыш перехода в другую энергетическую группу $G_n \rightarrow G_m$, $m \geq n$.

Розыгрывается переход нейтрона в точке взаимодействия из одной энергетической группы в другую (энергия которой не превышает энергию начальной группы) в соответствии с распределением

$\{w_q^q, w_q^{q+1}, \dots, w_q^N\}$, $\sum_{p=q}^N w_q^p = 1$, $\forall p$, w_q^p – вероятность перехода из q -ой группы в p -ую. Нумерация групп такова, что $\varepsilon_p \leq \varepsilon_q$.

6. Розыгрыш потерь энергии нейтроном (энерговыведение).
7. Розыгрыш угла рассеяния нейтрона в соответствии с распределением упругого рассеяния.

Далее переход к пункту 2, в котором вместо индикатрисы *рождения* нейтрона используется индикатриса *рассеяния* нейтрона.

Останов траектории нейтрона происходит по критерию малости его статистического «веса» w_n . На рис. 11 представлена блок-схема алгоритма.

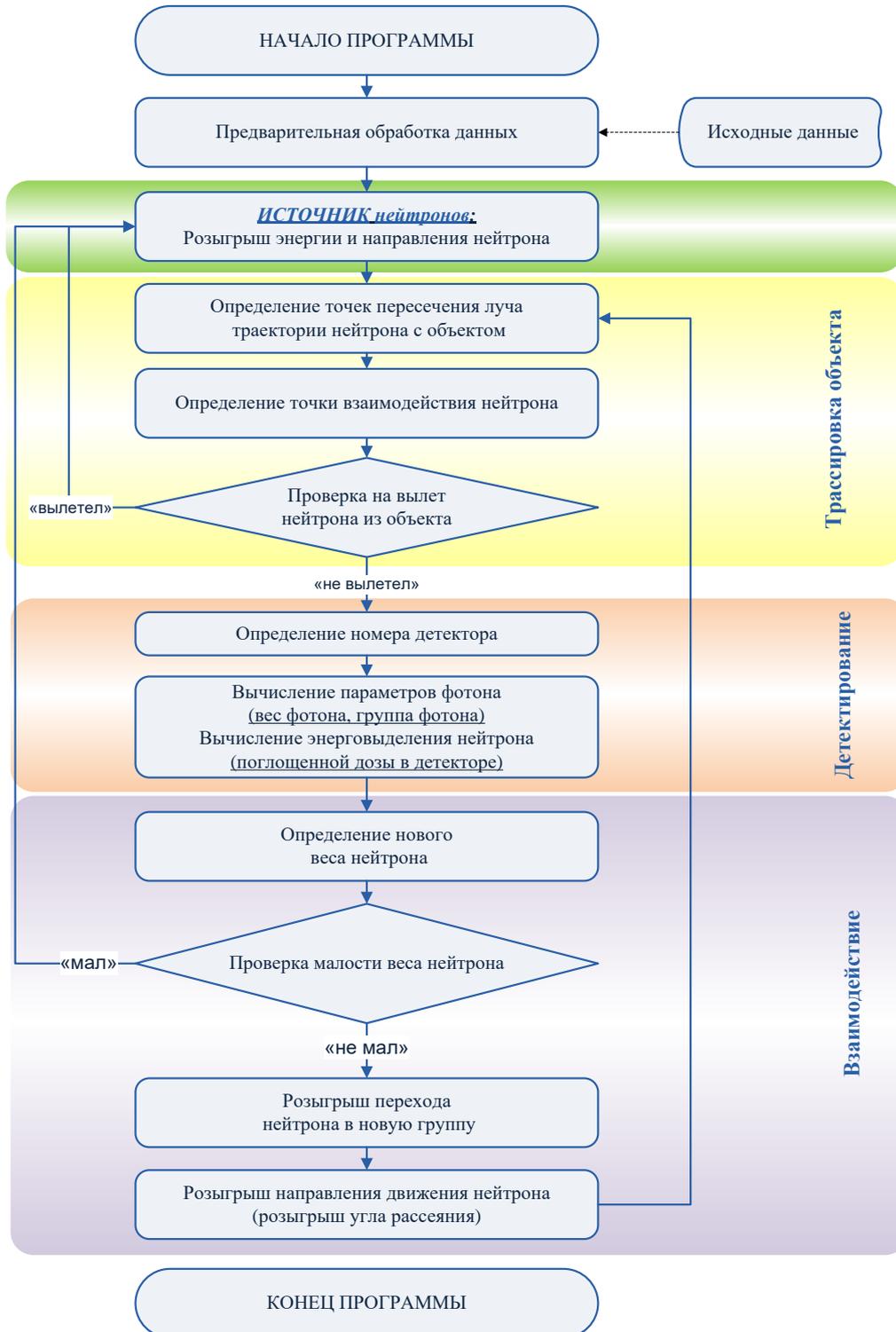


Рис. 11 Схема алгоритма моделирования переноса нейтронов

Разработанный алгоритм моделирования переноса нейтронов ориентирован на гибридную вычислительную технику и использование графических процессоров в качестве арифметических сопроцессоров с помощью технологии Nvidia© CUDA.

Рассмотрим более подробно розыгрыш перехода нейтрона из одной энергетической группы в другую (аналогично определяется и энергетическая группа для вторичных гамма-квантов).

Для розыгрыша можно воспользоваться методом обратной функции, что приводит к последовательному поиску номера группы для заданной случайной величины ξ из интервала $(0,1)$.

Альтернативой этому методу является переход к плотностям вероятности и использование методов построения сбалансированного двоичного дерева или Алиас-метода (метода штрафных функций). Данные методы требуют предварительной обработки исходных данных и некоторого усложнения структуры данных, но в результате способ нахождения нужных величин в процессе реализации алгоритма переноса получается достаточно эффективным.

Также можно перейти к плотностям вероятности и воспользоваться методами построения сбалансированного двоичного дерева или Алиас-методом (или метод штрафных функций). Данные методы требуют предварительной обработки исходных данных и некоторого усложнения структуры данных, но в результате способ нахождения нужных величин в процессе реализации алгоритма переноса получается достаточно эффективным.

Алиас-метод (Walker's alias method) – алгоритм, суть которого заключается в том, что распределение вероятности не изменится, если n диапазонов разрезать на более мелкие поддиапазоны и переставить их местами так, чтобы образовались диапазоны одинаковой длины с 1-2 поддиапазонами внутри. Это называется алиас-таблица, ее нужно строить один раз, и она позволяет выбирать случайный элемент за одно и то же время: нужно два независимых случайных числа (равномерно распределенные в интервале $(0,1)$ независимые случайные величины): первое – для выбора диапазона, а второе – для выбора одного из двух поддиапазонов.

Предварительный анализ показывает, что в случае, когда количество групп невелико (в рассматриваемом модельном примере 28 нейтронных энергетических групп и 15 фотонных), метод обратной функции достаточно эффективен.

В случае, если исходные данные предоставлены в мультигрупповом формате, когда количество групп может превышать 100, применение Алиас-метода может дать значительный выигрыш в эффективности розыгрыша межгрупповых переходов.

Блок-схема данного алгоритма приведена на рис. 12.

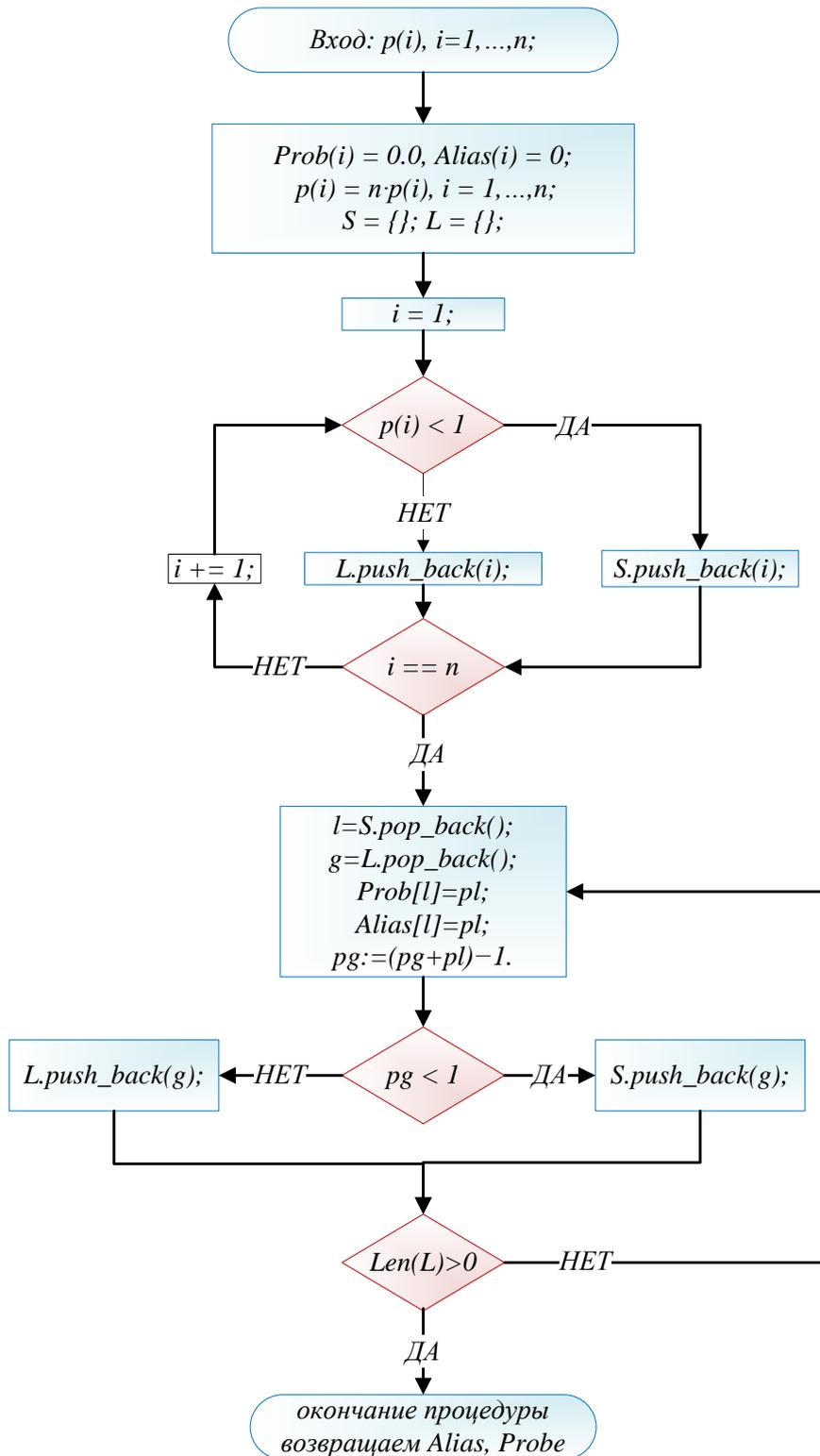


Рис. 12 Блок-схема реализации Walker's alias method

В разработанном программном комплексе реализованы оба варианта розыгрыша межгрупповых переходов. Выбор варианта осуществляется автоматически, в зависимости от исходного количества нейтронных энергетических групп.

4 Модельные примеры расчетов

В данном разделе приведены примеры расчетов энерговыделения и плотности источников вторичного гамма-излучения, проведенных с помощью разработанного программного комплекса.

Расчеты проведены на ГВК К-100 с использованием 32 вычислительных узлов. На рис. 13 изображена схема модельного вычислительного эксперимента.

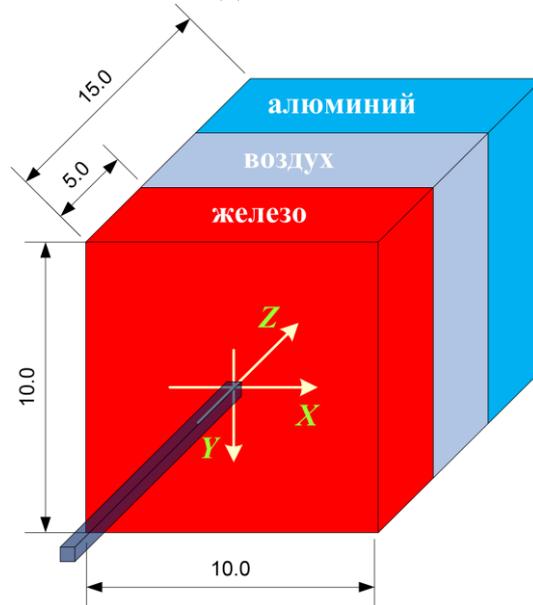


Рис. 13 Схема вычислительного эксперимента

На трехслойный объект (железо-воздух $\rho = 1.2 \text{ г/см}^3$ -алюминий) с внешней стороны железного слоя падает поток нейтронов с энергией 11 МэВ в положительном направлении оси z .

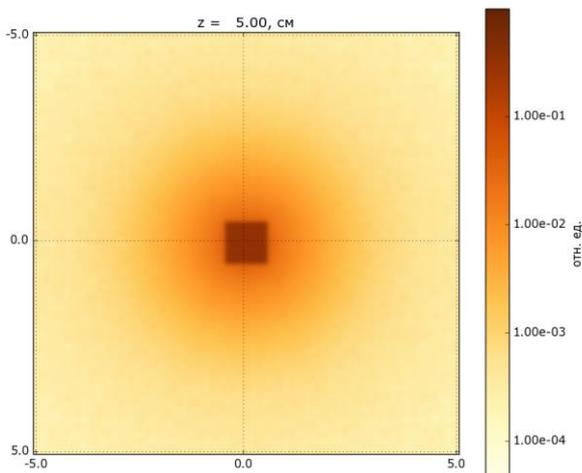


Рис. 14а Распределение энерговыделения вблизи границы железо-воздух

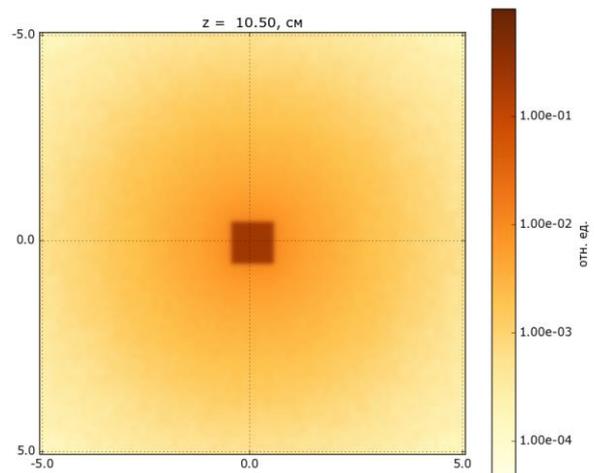


Рис. 14б Распределение энерговыделения вблизи границы воздух-алюминий

На рис. 14а, б изображено пространственное распределение плотности энерговыделения в плоскости $z = \text{const}$.

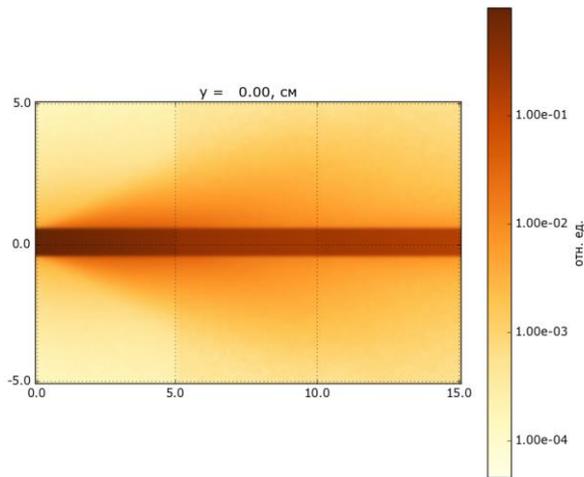


Рис. 15а Распределение энерговыведения в плоскости $y=const$, проходящей через начальный пучок нейтронов

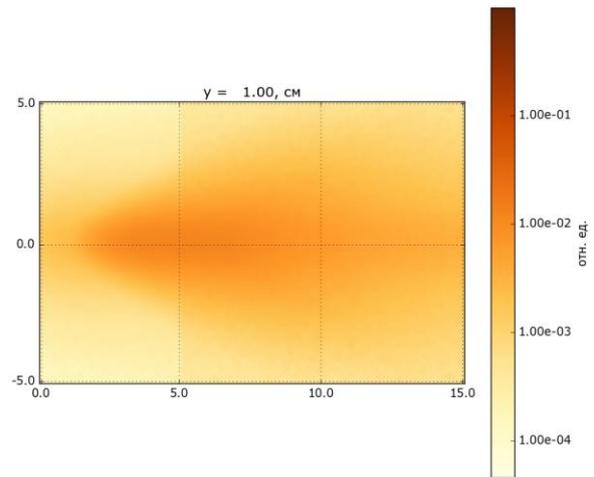


Рис. 15б Распределение энерговыведения в плоскости $y=const$, проходящей вне начального пучка нейтронов

На рис. 15а, б изображено пространственное распределение плотности энерговыведения в плоскости $y=const$.

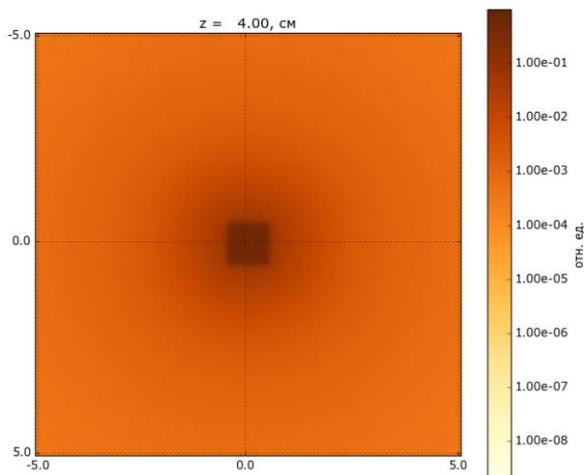


Рис. 16а – Распределение плотности источников гамма-квантов вблизи границы железо-воздух

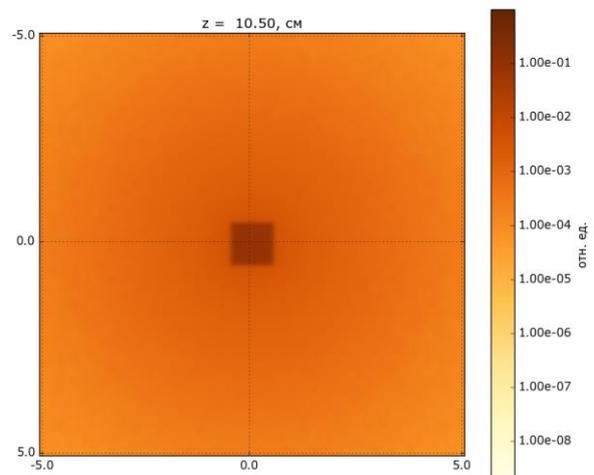


Рис. 16б – Распределение плотности источников гамма-квантов вблизи границы воздух-алюминий

На рис. 16а, б изображено пространственное распределение плотности источников гамма-квантов в плоскости $z = const$.

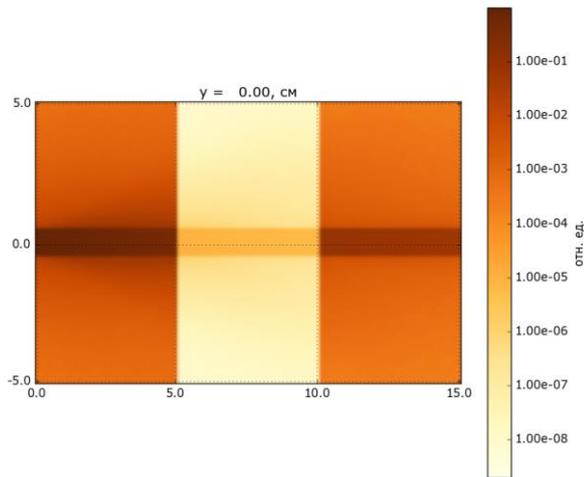


Рис. 17а Распределение плотности источников гамма-квантов в плоскости $y=const$, проходящей через начальный пучок нейтронов

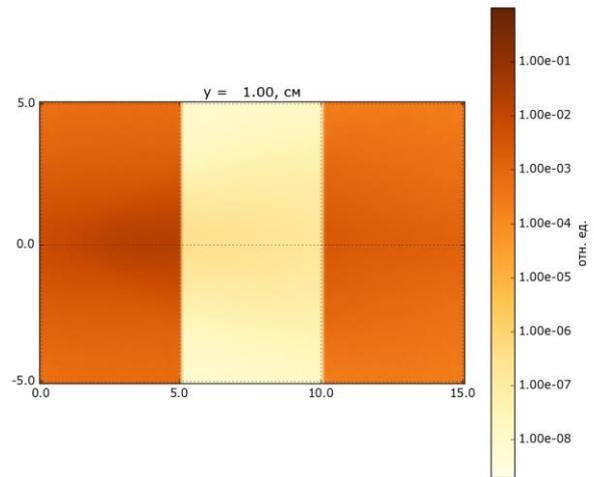


Рис. 17б Распределение плотности источников гамма-квантов в плоскости $y=const$, проходящей вне начального пучка нейтронов

На рис. 17а, б изображено пространственное распределение плотности источников гамма-квантов в плоскости $y = const$.

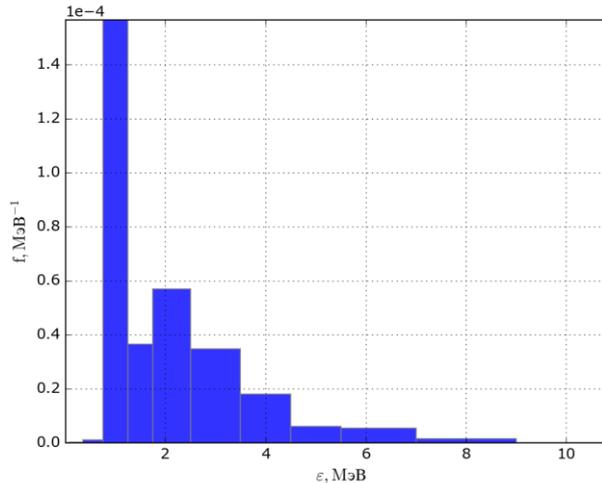


Рис. 18а Распределение плотности источников гамма-квантов в плоскости $y=const$, проходящей через начальный пучок нейтронов

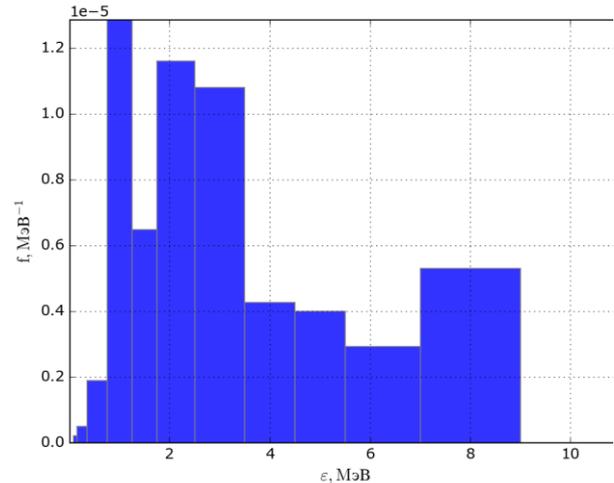


Рис. 18б Распределение плотности источников гамма-квантов в плоскости $y=const$, проходящей вне начального пучка нейтронов

На рис. 18а, б изображены энергетические распределения вторичных гамма-квантов в железе и в алюминии в точках внутри начального пучка нейтронов.

Заключение

Разработан программный комплекс для статистического моделирования на суперкомпьютерах с эктрамассивным параллелизмом переноса нейтронного излучения в сложных многокомпонентных объектах. Комплекс позволяет проводить оценку энерговыделения и плотности источников вторичного гамма-излучения, генерируемого при взаимодействии быстрых нейтронов с веществом.

Реализованные в комплексе алгоритмы основаны на решении интегрального уравнения переноса нейтронов с помощью построенных весовых модификаций метода Монте-Карло и предназначены для реализации на гетерогенных суперкомпьютерах.

Для регистрации искомых величин в процессе моделирования переноса нейтронов используется сочетание дискретного описания объекта с помощью поверхностных оболочек с дискретным заданием детектирующей системы с помощью объемного (воксельного) приближения.

Разработан программный модуль для вычисления макроконстант взаимодействия быстрых нейтронов с веществом композитных материалов и построения вероятностных распределений, требуемых для моделирования случайных траекторий нейтронов в облучаемых объектах и в воздухе.

Библиографический список

- 1 Соболев И.М. Численные методы Монте-Карло. М.: Наука, 1973.
- 2 Михайлов Г.А. Весовые методы Монте-Карло. – Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2000.
- 3 Ермаков С.М. Метод Монте-Карло и смежные вопросы. – М.: Наука, 1971.
- 4 Каргин Б.А., Михайлов Г.А. Интегральное уравнение переноса. Метод и алгоритмы Монте-Карло для задач переноса излучения. // В кн.: Энциклопедия низкотемпературной плазмы. Под ред. Ю.П.Попова. 2008, Том VII-1, Математическое моделирование в низкотемпературной плазме, М.: Янус-К, С. 540-552.
- 5 Ермаков С.М., Михайлов Г.А. Статистическое моделирование. - М.: Наука, 1982.
- 6 Жуковский М.Е., Скачков М.В., Егорушкин А.А. Модификации метода Монте-Карло в задачах о трансформации ионизирующего излучения. // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша РАН, №85, 2005.
- 7 Жуковский М.Е., Усков Р.В. О применении графических процессоров видеоускорителей в прикладных задачах (Часть II Моделирование поглощения гамма-излучения) // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша РАН № 20, 2010.
- 8 Дирнли Дж., Нортроп Д., Полупроводниковые счетчики ядерных излучений. - Пер. с англ., М.: Мир, 1966.
- 9 Кольчужкин А.М., Учайкин В.В. Введение в теорию прохождения частиц через вещество. М.: Атомиздат, 1978.

10 Беллон К. и др. Применение поверхностно ориентированного описания объектов для моделирования трансформации рентгеновского излучения в задачах вычислительной диагностики. // Математическое моделирование. 2004, т.16, №5, С. 103-116.

11 Натерер Ф. Математические аспекты компьютерной томографии. М.: Мир, 1990.

12 Vengrinovich V.L., Denkevich Y.B., Tillack G.-R. and Nockemann C. *Multi-step 3D X-Ray Tomography for a Limited Number of Projections and Views*. Review of Progress in QNDE **16**, ed. By D. Tompson and D. Chimenti, Plenum Press, N.Y., p. 317-323, 1997.