



Обобщенный метод переноса электронов Больцмана Фоккера-Планка (GBFP)

*Брайан С. Франк
Леонард Дж. Лоренс
Сандийские Национальные лаборатории*

*Анил К. Принджа
Университет штата Нью Мексико*

*Совместная Российско – Американская
конференция пяти лабораторий по
вычислительной математике/физике*

*Вена, Австрия
Июнь 19–23, 2005
SAND2005–3228C*



Sandia is a multiprogram laboratory operated by Sandia Corporation, a Lockheed Martin Company, for the United States National Nuclear Security Administration and the Department Energy under contract DE-AC04-94AL85000.





Обзор

GBFP Аппроксимация углового рассеяния

- Дискретная
- Гибридно – дискретная
- Гибридно – экспоненциальная

Алгоритмы ускоренной эволюции (Condensed History - CH)

3-х мерное моделирование (2-х мерные результаты) с интерфейсом материалов

- Высокоэнергетические электроны в материалах с низким Z
 - » Сильное анизотропное рассеяние
- Низкоэнергетические электроны в материалах с высоким Z
 - » Слабое анизотропное рассеяние



Мотивация

- **Современные алгоритмы переноса электронов по методу Монте Карло являются алгоритмами СН**
 - Эта схема используется в Сандийской электронно-фотонной программе по методу Монте Карло, ITS или *Integrated-TIGER series*.
 - Объединение множества взаимодействий рассеяния в ступень без переноса или линейное смещение
 - Известные недостатки, особенно при пересечении границ
- **Предложить альтернативный вариант для использования в производственной программе ITS взамен алгоритма СН**



Алгоритмы СН и переноса по методу Монте Карло

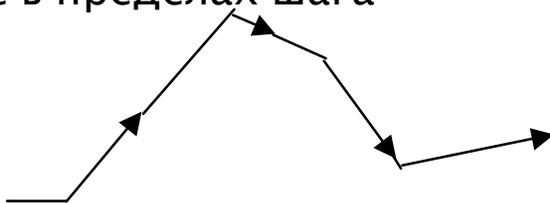
Алгоритм СН

Использовать угловое решение для бесконечной среды и алгоритм аппроксимации пространственного смещения.

- Модели ETRAN, ITS, MCNPI: рассеяние частиц в конце шага



- Модель случайной петли: частицы рассеиваются в случайно выбранной точке в пределах шага



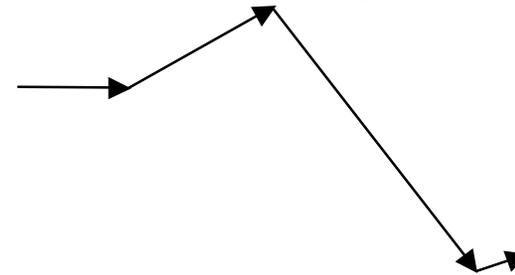
- Угловая выборка из множественного распределения рассеяния

4

Алгоритм переноса

Решить уравнение переноса Больцмана с аппроксимацией сечения.

- Случайное расстояние до соударения выбирается из экспоненциального распределения



- Угловая выборка из аналитического, множественного, дискретного или другого распределения рассеяния



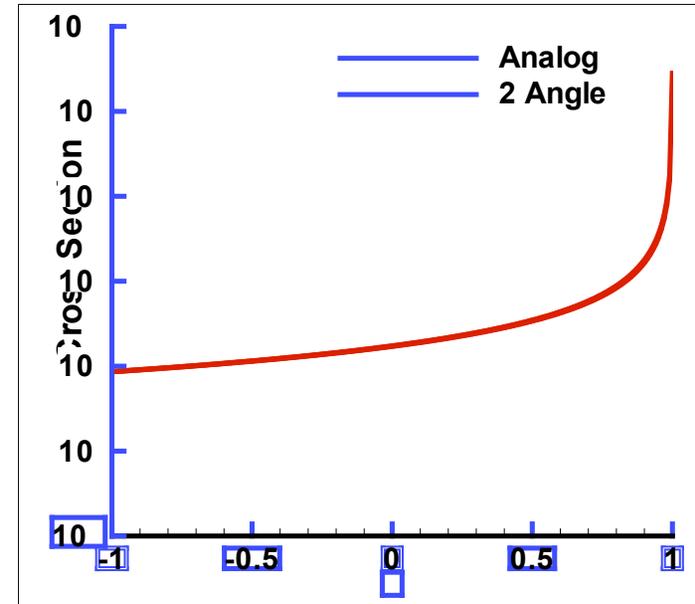
Модель дискретного углового рассеяния для упругого рассеяния электронов

Дискретное рассеяние:

$$\tilde{\sigma}_s(\vec{r}, \mu_0) = \sum_{n=1}^N \frac{\alpha_n(\vec{r})}{2\pi} \delta[\mu_0 - \xi_n(\vec{r})]$$

α_n – амплитуды

ξ_n – косинусы рассеяния



α_n и ξ_n сохраняют импульс $2N$ передачи моментов (σ_n , $n=1, \dots, 2M$) и позволяют получить нелинейную алгебраическую систему.

Решение методом итерации Ньютона и методом Слоуна дает аналогичные результаты.



Гибридно/дискретная модель упругого рассеяния электронов

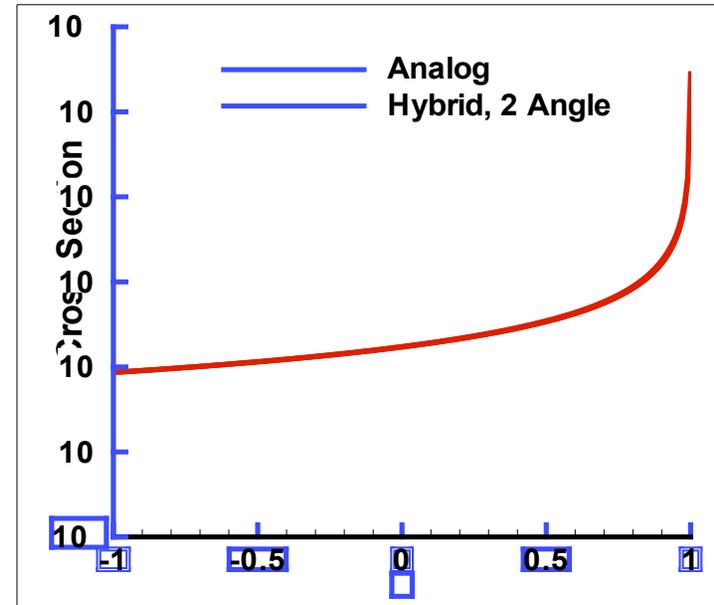
Гибридно/дискретное рассеяние:

$$\tilde{\sigma}_s(\vec{r}, \mu_0) = \sum_{n=1}^N \frac{\alpha_n(\vec{r})}{2\pi} \delta[\mu_0 - \xi_n(\vec{r})] + \frac{\sigma_{s0}(\vec{r})}{2\pi} \frac{2\eta(\vec{r})\{1 + \eta(\vec{r})\}}{\{1 + 2\eta^*(\vec{r}) - \mu_0\}^2}$$

α_n – амплитуды

ξ_n – косинусы рассеяния

параметр экранирования η^* больше аналоговой величины, η



α_n и ξ_n сохраняют остаточный импульс $2N$ передачи моментов (σ_n , $n=1, \dots, 2M$) и позволяют получить нелинейную алгебраическую систему.

Для решения используется метод Слоуна.

6

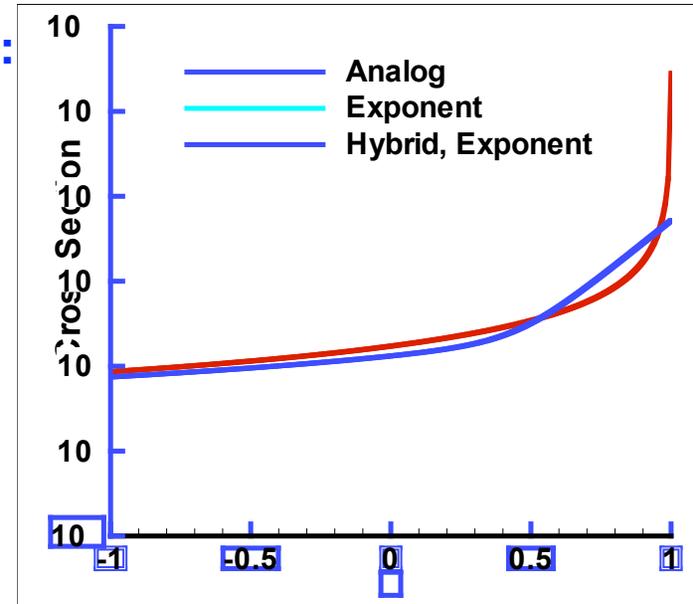
Sloan, D.P., "A New Multigroup Monte Carlo Scattering Algorithm for Neutral and Charged-Particle Boltzmann and Fokker-Planck Calculations," Technical Report SAND83-7094, Sandia National Laboratories (1983).



Гибридно/экспоненциальная модель упругого рассеяния электронов

Гибридно/экспоненциальное рассеяние:

$$\tilde{\sigma}_s(\vec{r}, \mu_0) = \frac{A(\vec{r})}{2\pi} \exp[-B(\vec{r})(1 - \mu)] + \frac{\sigma_{s0}(\vec{r})}{2\pi} \frac{2\eta(\vec{r})\{1 + \eta(\vec{r})\}}{\{1 + 2\eta^*(\vec{r}) - \mu_0\}^2}$$



параметр экранирования η^* больше аналоговой величины, η

A и B вычисляются таким образом, чтобы сохранить два остаточных импульса передачи моментов



Упрощение этих методов

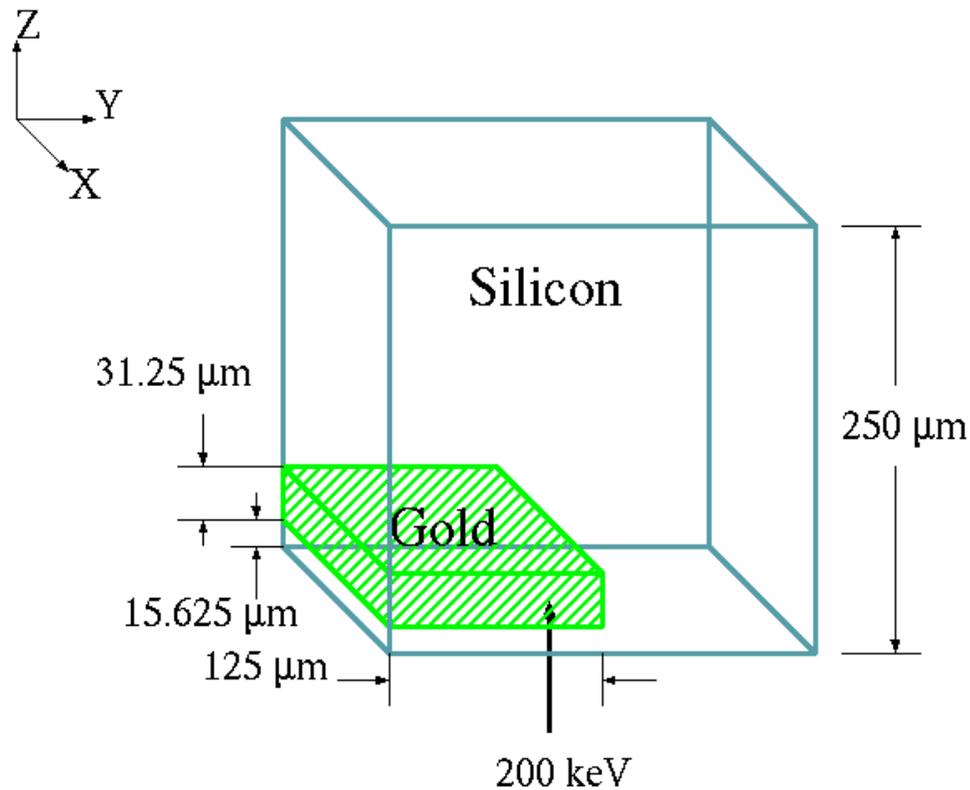
Упрощения для всех наших расчетов:

- **Постоянное замедление энергии(CSD)**
- **Только электронное моделирование, без учета вторичных электронов**
- **Экранирование углового сканирования по методу Резерфорда**
- **Эти упрощения не требуются для GBFP. Они необходимы для того, чтобы устранить эффект приближений.**
- **Для этих методов мы использовали алгоритм простого перехода границ .**
 - **Для GBFP и аналогов мы сохраняем расстояние в виде среднего свободного пути между взаимодействиями, что является корректным решением процессов переноса.**
 - **Для СН мы сохраняем дробный шаговый размер между взаимодействиями, что является приближением.**



Случай карандашного луча в блоке золота, вплавленного в силикон, электроны 200 кэВ

Обычно случай карандашного луча рассматривается в середине дна блока.

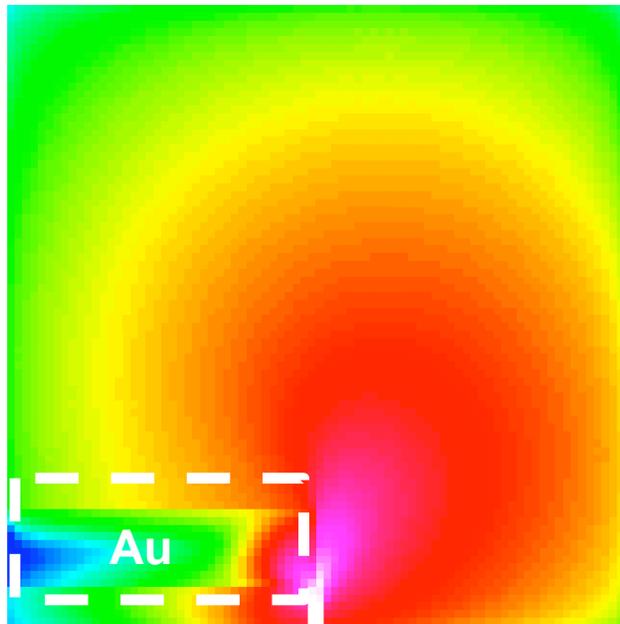




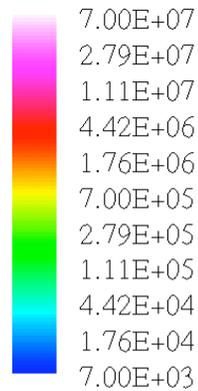
Случай электронов 200 кэВ силикон и золото

Относительная разница с эталоном

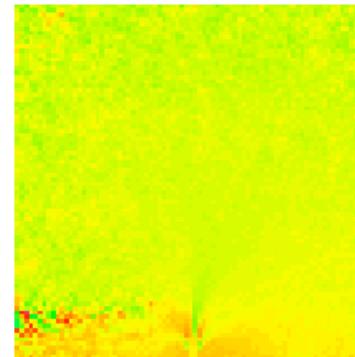
Аналоговая эталонная доза



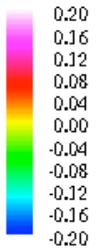
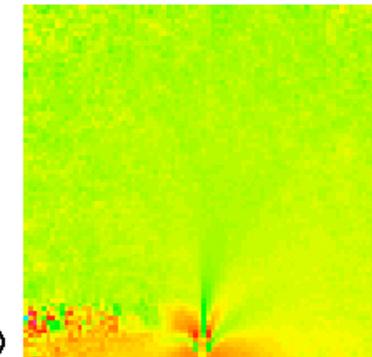
(keV/g)



Гибридно/дискретный

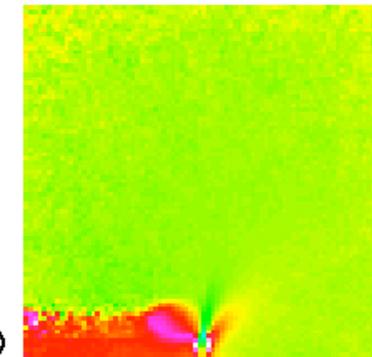
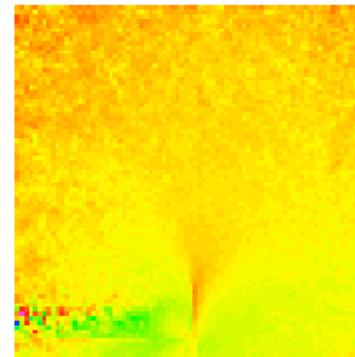


Гибридно/экспоненциальный



(a)

(b)



(c)

(d)

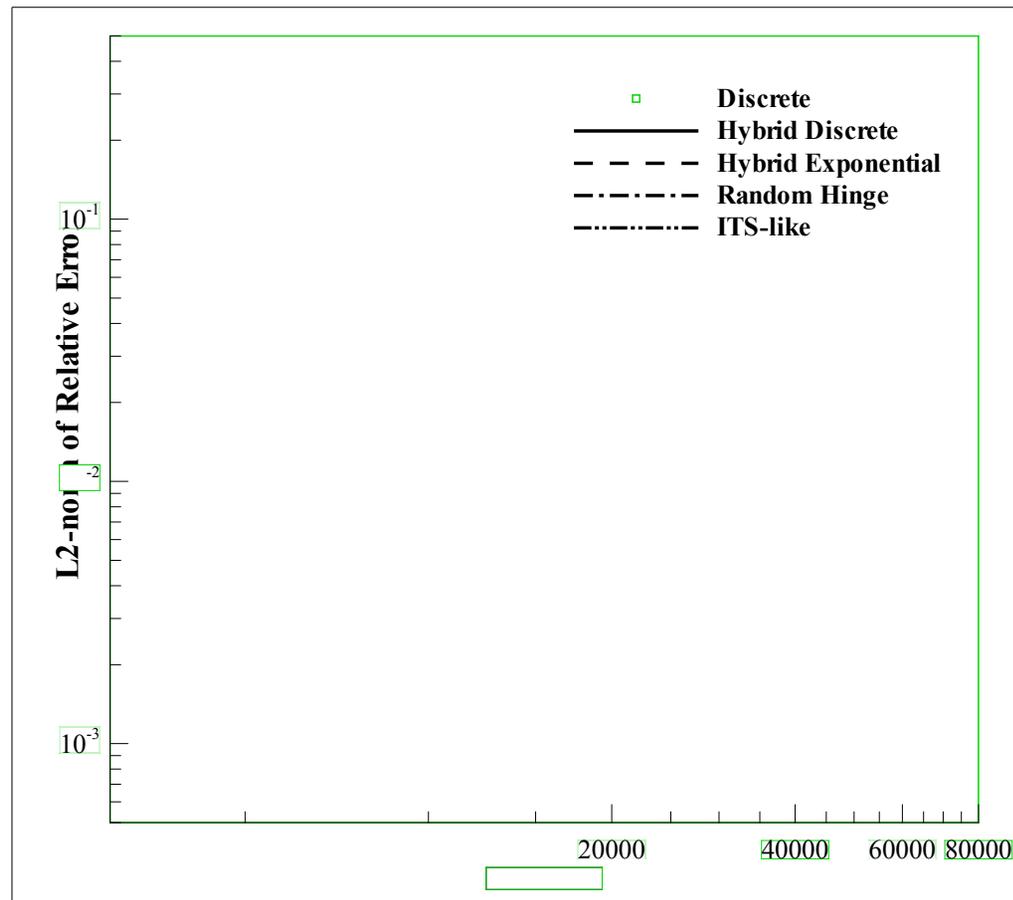
Случайная петля

Алгоритм типа ITS



Случай электронов 200 кэВ СИЛИКОН И ЗОЛОТО

Зависимость относительной ошибки от времени процесса

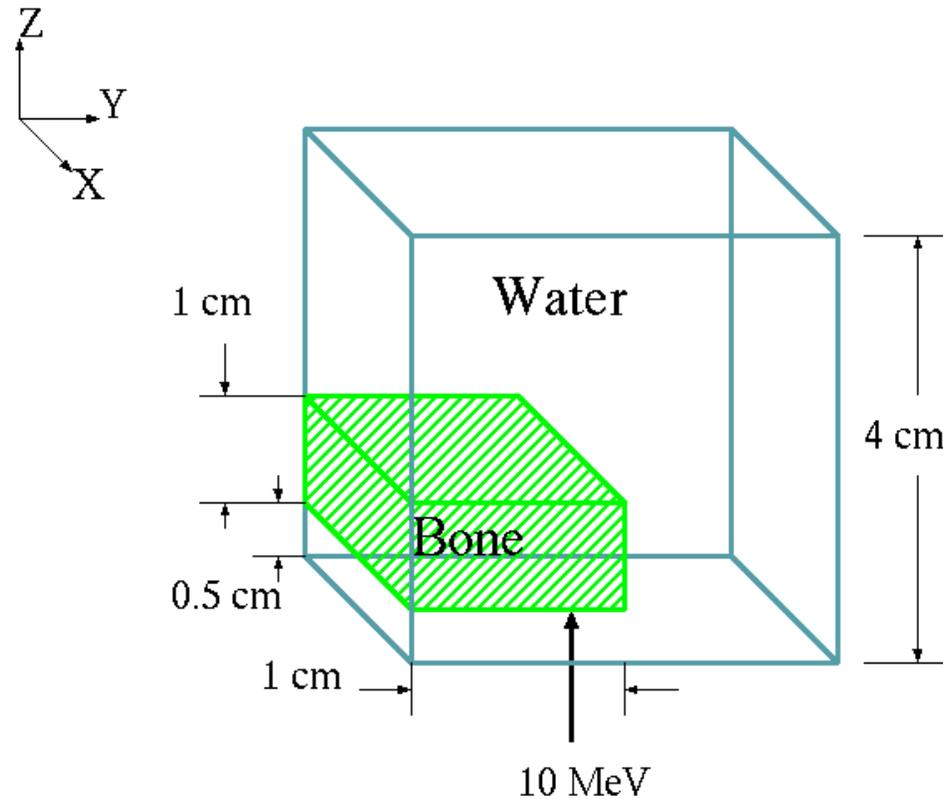


Параметр варьировался для каждого метода аппроксимации для повышения точности и увеличения времени процесса (т.е. размера шага, дискретных углов, сглаживания среднего свободного пробега).



Карандашный луч в блоке, органический материал (кость), погруженная в воду, электроны 10 МэВ

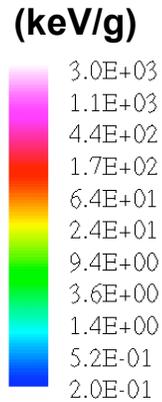
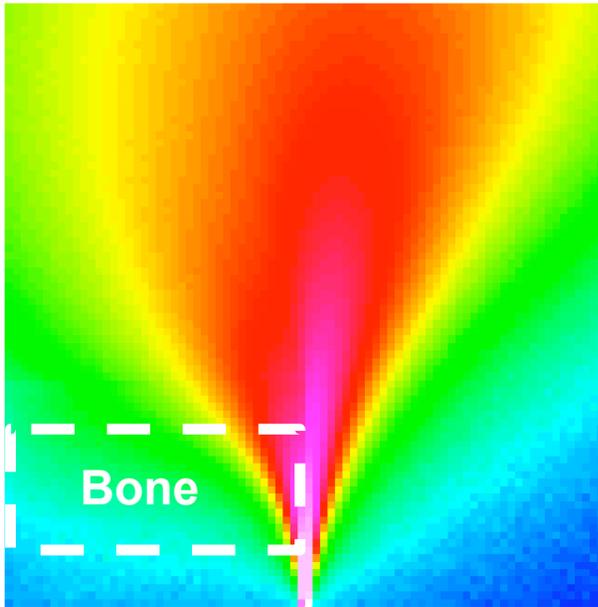
Карандашный луч обычно рассматривается в середине дна блока.





Случай электронов 10 МэВ Вода и органический материал (кость)

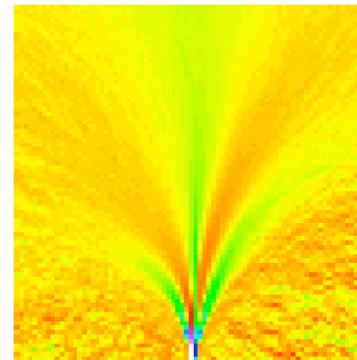
Аналоговая эталонная доза



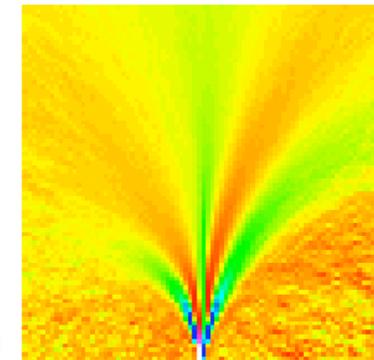
Относительная разница с эталоном

Гибридно/дискретный

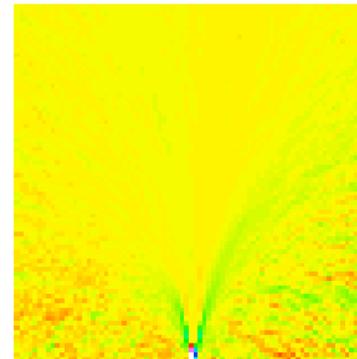
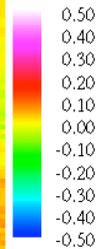
Гибридно/экспоненциальный



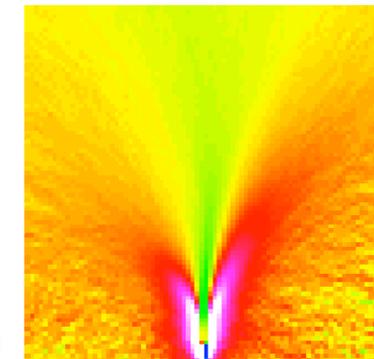
(a)



(b)



(c)



(d)

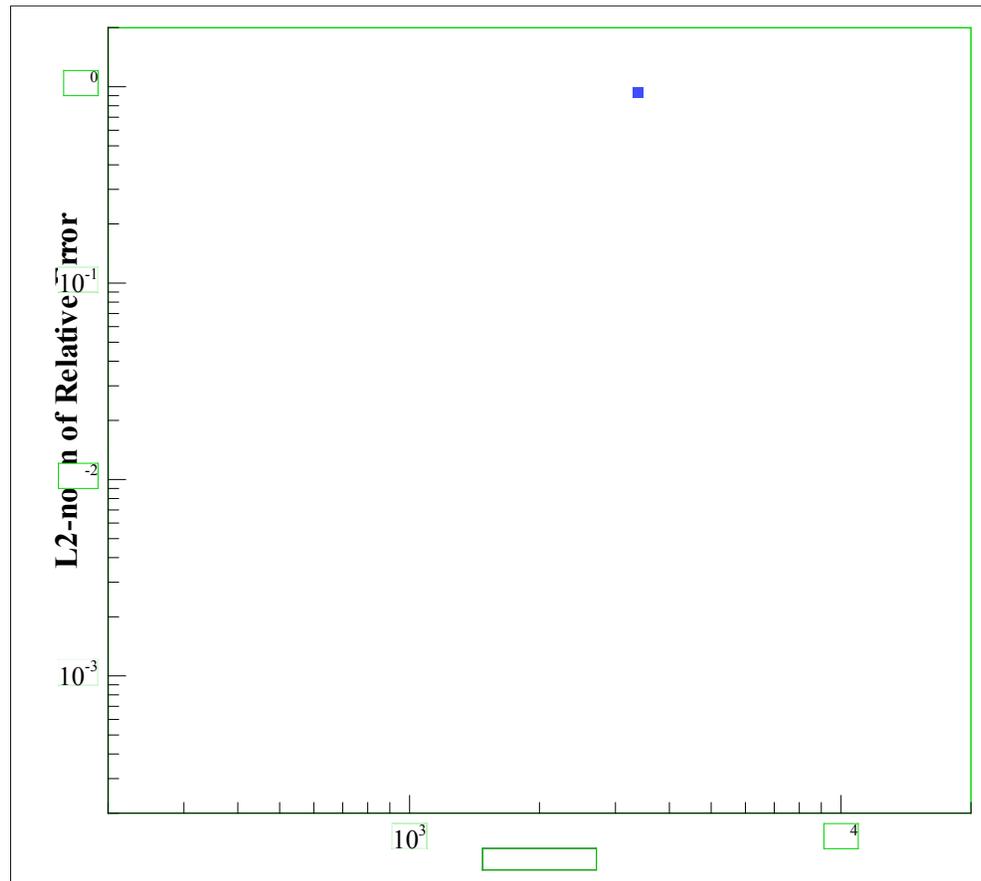
Случайная петля

Алгоритм типа ITS



Случай электронов 10 МэВ Вода и органический материал (кость)

Зависимость относительной ошибки от времени процесса



Параметр варьировался для каждого метода аппроксимации для повышения точности и увеличения времени процесса (т.е. размера шага, дискретных углов, сглаживания среднего свободного пробега).



Выводы /направление работ

- GBFP является удовлетворительной заменой СН
- Внедрение GBFP в ITS для общего использования
 - Пользователь сможет выбирать между GBFP и СН
 - Обработка с энергетическими потерями
 - » Можно применить аналогичный подход
 - » Ли Хардинг и Анил Принджа занимаются их разработкой.
 - Использование более реальных физических процессов
 - » Мы разрабатываем угловое рассеяние для гибридных методов
 - » Вопрос генерации вторичных частиц (т.е. bremsstrahlung) необходимо связать с GBFP для общего использования.