УДК 53.072, 53.681.3

Эффективные алгоритмы моделирования переноса излучения в случайно-неоднородных материалах

М. И. Братченко, С. В. Дюльдя

Национальный научный центр «Харьковский физико-технический институт», Украина

Предложены и реализованы в коде Монте-Карло алгоритмы с неклассическими ядрами распространения уравнений переноса излучения, порождаемыми дважды стохастическим процессом его экстинкции в средах с пространственно коррелированной недетерминированной гетерогенностью. Обсуждаются результаты их верификации и перспективные приложения.

Ключевые слова: *перенос излучения, случайно-неоднородные среды, неклассический перенос, обобщенное уравнение Больцмана, ядро распространения, метод Монте-Карло.*

Запропоновані й реалізовані у коді Монте-Карло-алгоритми з некласичними ядрами розповсюдження рівнянь переносу випромінювання, які породжуються подвійно стохастичним процесом його екстінкції в середовищах з просторово корельованою недетермінованою гетерогенністю. Обговорюються результати їх верифікації та перспективні застосування.

Ключові слова: *перенос випромінювання, випадково-неоднорідні середовища, некласичний перенос, узагальнене рівняння Больцмана, ядро розповсюдження, метод Монте-Карло.*

Monte Carlo algorithms with non-classical propagation kernels of radiative transport equations generated by doubly stochastic process of radiation extinction in media having a spatially correlated unresolved heterogeneity have been proposed and implemented programmatically. Discussed are the results of their validation and their prospective applications.

Key words: *radiative transport, stochastically heterogeneous media, non-classical transport, generalized Boltzmann equation, propagation kernel, Monte Carlo method.*

1. Проблема переноса излучений в случайно-неоднородных средах

Многим практически важным средам распространения излучения присуща экспериментально не разрешимая гетерогенность материала на масштабах l, много меньших размера Λ системы, однако сравнимых с характерными длинами свободного пробега (д.с.п.) s. Примерами служат (i) турбулентные среды, (ii) среды с гетерофазными флуктуациями плотности °, (iii) облачные покровы Земли и планет, (iv) мелкодисперсные нейтроно-поглощающие и радиационно-защитные материалы (НПМ и РЗМ), (v) шаровые TRISO-топлива высокотемпературных газоохлаждаемых реакторов с двойной гетерогенностью, (vi) кориум, смеси ОЯТ и РАО, а также (vii) изделия-объекты массированной электрофизической обработки. Структурная неразрешимость таких сред может вызываться внутренней изменчивостью за время измерения (i–iii) или внешними факторами невозможности или нецелесообразности измерений с достаточной точностью (iv–vii). Недоступность детерминистского описания материалов стимулирует их вероятностное описание случайными полями $\mathbf{F}$ с m-точечной мерой $\mathrm{d}P(\mathbf{x}_1,\ldots\mathbf{x}_m)$, где $\mathbf{x}_i$ — вектор состояния среды, определяющий полное макроскопическое сечение Σ и конечное состояние взаимодействия с ней в точке $\mathbf{r}_i \in \Re^3$. Перенос излучения в этом описании дважды стохастичен, и обычное для однородного на атомном масштабе материала экспоненциальное распределение д.с.п. $a^{-1}e^{-s/a}$, где $a = \Sigma^{-1} = \mathbf{M}(s)$, должно искажаться внешними по отношению к имманентной стохастике транспорта флуктуациями $\{\mathbf{x}\}$. Тогда расчет радиационных полей на $\mathbf{F}$ исчерпывается поиском моментов $\langle Y^n \rangle, n \geq 1$, некоторого отклика Y среды на облучение (здесь и далее $\langle \circ \rangle = \int_{\mathbf{X}} (\circ) dP(\{\mathbf{x}\})$ есть оператор усреднения по ансамблю реализаций случайной среды, существование которого постулируется в её модели). В случаях сред (i–vii) $\{\mathbf{x}\}$ пространственно коррелированны, а $m \to \infty$. Отсюда приобретает остроту проблема адекватного моделирования переноса излучения в таких средах методом Монте-Карло (МК).

2. Существующие подходы и постановка задачи оптимизации алгоритма

Стандартные МК-коды моделируют классический перенос излучения в кусочно-однородных на $\mathbf{r} \in \{\Xi\} \subset \Re^3 : \Xi_i \cap \Xi_k = \varnothing, i \neq k$ материалах, численно решая методом статистических испытаний уравнение Больцмана с ядром распространения $I(s|E) = e^{-\Sigma(E)s}$ нейтральных частиц энергии E, отвечающим известному закону экстинкции Бугера-Ламберта-Бэра. Материальные константы $\Sigma(E)$ принято рассчитывать в модели атомной смеси (МАС) компонентов, в которой $\mathrm{d}P \propto \mathrm{d}^3\mathbf{r}$ и $\Sigma = \Sigma_{\mathrm{mix}}(E) = \mathrm{const}(\mathbf{r}, s), \forall \mathbf{r} \in \Xi$. Но во флуктуирующих средах такой «наивной» гомогенизацией игнорируется критически важный эффект их стохастического просветления: на $\forall \mathbf{F}$ в силу неравенства Йенсена $\langle I \rangle(s) > e^{-\Sigma_{\mathrm{mix}} s}, \forall s > 0$ (см. [1]). Поэтому в физике реакторов используется эффективная гомогенизация гетерогенных зон и дисперсных НПМ с факторами самоэкранирования $f_{\mathrm{ss}} < 1$ такими, что $\Sigma \to \langle \Sigma \rangle = \Sigma_{\mathrm{eff}}(E) = f_{\mathrm{ss}}(E) \cdot \Sigma_{\mathrm{mix}}(E)$. Модели f_{ss} по Бондаренко, Данкову, Беллу, Шмакову, Ямамото (см., например, [2]) удовлетворительно описывают нейтронику ряда геометрий активных зон и поглотителей, но не общи. Математическая теория [3] гомогенизации уравнений переноса с быстропеременными и случайными коэффициентами пока не позволяет *a priori* рассчитать f_{ss} для актуальных $\mathbf{F}$. Однако ею с очевидностью доказано, что метод эффективной гомогенизации не применим при $s \sim l$.

Поскольку реализации случайных полей $\mathbf{F}$ по определению неслучайны, имеется и статистически точный *brute-force* метод МК-моделирования переноса излучения на $\mathbf{F}$ — двойной метод Монте-Карло (2-МК), в котором ансамблевое усреднение выполняется кодом явно в ходе последовательного МК-решения классического уравнения переноса в ансамбле из N_2 реализаций среды. Для ряда сред 2-МК имплементирован в нашем МК-коде *RaT* [4] и применялся, в частности, для расчетов f_{ss} НПМ [5]. Но его вычислительная эффективность невелика, в т.ч. из-за накладных затрат времени ЦП и ОП на генерацию $N_2 >> 1$ рандомизованных 3D-геометрий. Обычно его трактуют, лишь как эталонный (*benchmark*) метод, что актуализует поиск новых алгоритмов его оптимизации.

В частном случае марковских бинарных смесей с этой целью разработан алгоритм розыгрыша длин хорд (*Chord Length Sampling* — CLS) [6]. Мы же в настоящей работе предлагаем новый, обобщенный, алгоритмический подход к МК-моделированию транспорта фотонов и нейтронов в случайно-неоднородных средах (пп. 3–5), описываем (п. 6) объектно-ориентированную (ОО) реализацию новых алгоритмов в коде и обсуждаем (п. 7) первые результаты их верификации.

3. Стохастические материалы с неклассическим переносом излучения

Когда среда распространения излучения коррелированна на расстояниях $\sim s$, в ядре распространения уравнения переноса нельзя пренебрегать зависимостью $\Sigma(s)$, и для каждой энергии E и направления $\mathbf{\Omega}$ распространения частиц оно приобретает хорошо известный в оптике неоднородных сред обобщенный вид:

$$I(s) = \exp\left[-{}^{2}(s) \equiv -\int_0^s \Sigma(s')\mathrm{d}s'\right] \quad (1)$$

с не линейной по s оптической длиной ${}^{2}(s)$. С таким обобщением Ларсен [7] недавно вывел т.н. обобщенное уравнение Больцмана (ОУБ) неклассического — в смысле ${}^{2}(s) \neq \Sigma \cdot s$ — переноса в вариабельной среде. Франк и Гудон показали [8], что его решение существует и представимо в виде ряда Неймана по вкладам столкновений нарастающей кратности. Тем самым доказана возможность его решения однократным методом Монте-Карло, в чем и заключается наша задача.

В случайном поле $\mathbf{F}$ на всяком луче распространения $\mathbf{s} = \mathbf{r} + \mathbf{\Omega} \cdot s$ излучения полное сечение $\Sigma(s)$ есть порождаемый $\mathbf{F}$ неотрицательный случайный процесс (СП) по геометрической д.с.п. s. Тогда в (1) ${}^{2}(s)$ и $I(s)$ суть порождаемые им неотрицательные СП, причем ${}^{2}(s)$, как стохастический интеграл, существует для измеримых по Лебегу случайных функций $\Sigma(s)$, а $I(s)$ к тому же ограничен по вероятности: $I(0) = 1, \|I\| \to 0$ при $s \to +\infty$. Введем ансамблевое среднее:

$$\Im(s) = \langle I(s) \rangle = \int I(s|\{\Sigma\})\mathrm{d}P(\{\Sigma\}) = \left\langle \exp\left[-\int_0^s \Sigma(s')\mathrm{d}s'\right]\right\rangle \quad (2)$$

и заметим, что $\Im(s) \subset (0,1]$ есть неслучайная не возрастающая на $s \subset [0,+\infty)$ функция. Поэтому $1 - \Im(s)$ можно принять, как функцию распределения д.с.п. s, и использовать её для розыгрыша д.с.п. из уравнения $1 - \Im(s) = \P$ (или $\Im(s) = \P$), где $\P$ — равномерно распределённое на интервале [0,1) случайное число.

Такова математическая основа предлагаемого нами семейства алгоритмов. Все они полагают осредненное ядро распространения (2) атрибутом модели неразрешимой гетерогенности среды и различаются методикой его расчета для разных СП $\Sigma(s)$. В ОО-дизайне МК-кода все они оперируют с Σ-порожденным <u>стохастическим материалом</u> (СМ) 3D-объектов геометрии, неклассический перенос излучения в котором следует выбранной для СМ модели СП $\Sigma(s)$. Её выбор обусловлен физическими (так, $\forall\Sigma(s) \geq 0$) и феноменологическими соображениями, а также может исходить из данных анализа корреляционных свойств среды при трассировке лучами $\mathbf{s}$ её эталонных 2-МК-моделей.

Поле $\mathbf{F}$ СМ мы полагаем статистически однородным и изотропным (однако мыслимы и очевидные обобщения). Тогда СП Σ сильно стационарен в смысле независимости всех его ограниченных моментов $\left\langle \Sigma^n \right\rangle$ от д.с.п. при $s >> l_{\text{c}}$, где $l_{\text{c}} = \delta\Sigma^{-2}\int_0^\infty C_2(s)\mathrm{d}s$ — длина корреляции, $C_2(s)$ — ковариационная функция СП $\Sigma(s)$, а $\delta\Sigma^2 = C_2(0)$ — его дисперсия (квадрат волатильности $\delta\Sigma$ СМ).

Конечность $\left\langle \Sigma^n \right\rangle$ позволяет откалибровать процесс $\Sigma(s)$ по первым моментам $\left(\langle\Sigma\rangle, \delta\Sigma^2\right)$ и по l_{c} случайной среды, подлежащей моделированию. Не ограничивая общности, полагаем $\langle\Sigma\rangle = \Sigma_{\text{mix}}$. Тогда в отсутствие шума СМ переходит в гомогенизованный по МАС материал. Тройку параметров $\left\{\Sigma_{\text{mix}}, \delta\Sigma, l_{\text{c}}\right\}$ мы считаем минимально феноменологически оцениваемыми в измерениях; доступность высших моментов лишь уточнила бы выбор модели.

4. Осредненные ядра распространения неклассического переноса

Методами теории СП мы построили $\Im(s)$ для ряда моделей СМ: бинарных смесей, точечных процессов Кэмпбелла $\Sigma(s) = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} \cdot\ (s + x_k)$, где $\cdot\ (x) \geq 0$ — неслучайная гладкая чётная функция формы импульсов, локализованных на луче распространения $\mathbf{s}$ в распределенных по Пуассону точках x_k, а также для некоторых СП диффузионного типа, для которых экстинкция излучения описывается системой стохастических дифференциальных уравнений (СДУ):

$$\begin{cases} \mathrm{d}I(s) = -\Sigma(s)\cdot I(s)\cdot \mathrm{d}s, & (3)\\ \mathrm{d}\Sigma(s) = a(\Sigma)\cdot \mathrm{d}s + b(\Sigma)\cdot \delta W. & (4)\end{cases}$$

Здесь (3) — универсальное мультипликативное СДУ осциллятора Коши, для мнимой частоты $i\Sigma$ которого (4) есть модельное СДУ Ито с коэффициентами сноса $a(\Sigma)$, диффузии $b(\Sigma)$ и стандартным винеровским шумом δW.

Важно, что для описания СМ подходит не всякое СДУ вида (4): условие $\Sigma(s) \geq 0$ требует, чтобы $a(\Sigma) \geq 0, b(\Sigma) \to 0$ при $\Sigma \to +0$, а стационарность СП — его эргодичности, или существования 1-точечной плотности распределения $f_1(\Sigma)$: $\operatorname{div} J = \partial_\Sigma\left(a(\Sigma)\cdot f_1(\Sigma)\right) - \tfrac{1}{2}\cdot\partial_\Sigma^2\left(b^2(\Sigma)\cdot f_1(\Sigma)\right) = 0$, где $\partial_x^n(\cdot) = \partial^n(\cdot)/\partial x^n$.

Для системы СДУ (3–4) совместная плотность распределения $f\left(I, \Sigma | s\right)$ удовлетворяет уравнению Фоккера-Планка (УФП):

$$\frac{\partial}{\partial s} f\left(I,\Sigma|s\right) - \frac{\partial}{\partial I}\left[\Sigma\cdot I\cdot f\left(I,\Sigma|s\right)\right] + \frac{\partial}{\partial\Sigma}\left[a(\Sigma) f\left(I,\Sigma|s\right)\right] - \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial\Sigma^2}\left[b^2(\Sigma) f\left(I,\Sigma|s\right)\right] = 0, \quad (5)$$

решая которое с г.у. ограниченности f и н.у. $f\left(I,\Sigma|0\right) = f_1(\Sigma)$ находим искомое осредненное ядро $\Im(s) = \langle I\rangle\big|_s = \int_0^\infty \mathrm{d}\Sigma \int_0^1 \mathrm{d}I'\cdot I'\cdot f\left(I',\Sigma|s\right)$. Решение УФП (5) с н.у. $f\left(I,\Sigma|0\right) = ¢(\Sigma)$ позволяет отыскать и условное ядро распространения $\Im\left(s|\Sigma_{\text{f}}\right)$, необходимое при розыгрыше д.с.п. s из конечного состояния взаимодействия, в котором $\Sigma=\Sigma_f$ уже предопределено историей транспорта, и потому неслучайно.

Продемонстрируем характерные черты неклассического переноса на примере точно решаемой модели СДУ Бесселя с $a(\Sigma)=- \ \cdot(\Sigma-\sim)$, $b(\Sigma)=\pm\cdot\sqrt{\Sigma}$. Её калибровка выполняется по формулам $\ =l_c^{-1}$, $\sim=\Sigma_{mix}$ и $\pm^2=2\delta\Sigma^2/\Sigma_{mix}l_c$.

Описанным выше методом из УФП (5) находим:

$$\Im(s)=\exp\left(-\frac{2}{¢+1}\Sigma_{mix}s\right)\cdot\left\{\frac{(¢+1)^2}{4¢}\cdot\left[1-\left(\frac{¢-1}{¢+1}\right)^2\exp\left(-¢\,\frac{s}{l_c}\right)\right]\right\}^{-¢_\Sigma^{-2}}, \qquad (6)$$

где $¢=\sqrt{1+4¢_\Sigma ¢_c}>1$, а характерные параметры $¢_\Sigma=\delta\Sigma/\Sigma_{mix}$ и $¢_c=\delta\Sigma\cdot l_c$ суть соответственно меры относительной волатильности стохастического материала и его диффузионной вариабельности на масштабе корреляционной длины l_c.

Из формулы (6) и изображенных на рис. 1а данных очевидно стохастическое просветление СМ при $\Sigma_{mix}s>1$, т.е. при д.с.п., превышающих среднюю д.с.п. в эквивалентной по $\circ$ атомной смеси. При $\Sigma_{mix}s<<1$ тривиальность $\Im(s)$ связана лишь с калибровкой стационарного $\Sigma(s)$. Для д.с.п. $s\sim s_c=¢^{-1}l_c$ перенос сильно неклассичен, и ядро $\Im(s)$ неэкспоненциально (на рис. 1а $\Sigma_{mix}s_c\approx 3$).

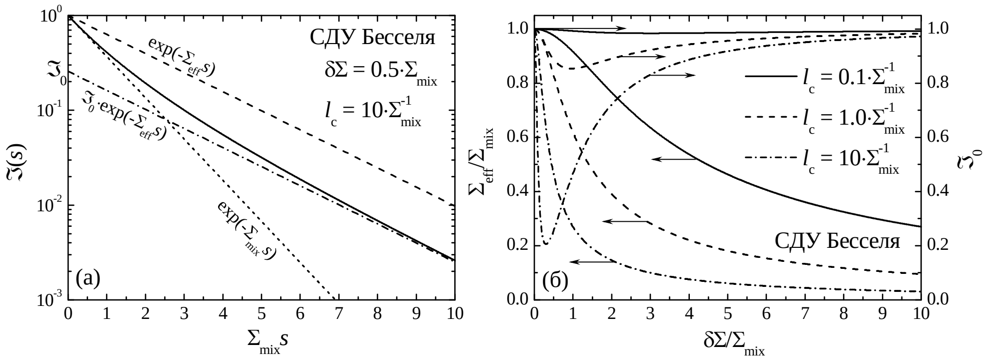

Рис. 1 Осредненное ядро распространения $\Im(s)$ с асимптотиками формулы (6) (а) и зависимости фактора самоэкранирования $f_{ss}=\Sigma_{eff}/\Sigma_{mix}$ и меры классичности переноса $\Im_0$ от относительной волатильности $\delta\Sigma/\Sigma_{mix}$ стохастического материала (б)

При $s>>s_c$ стохастический материал рис. 1а эффективно гомогенизуется до $\Sigma_{eff}=\mathrm{const}(s)$ с фактором самоэкранирования $f_{ss}=\left(1/2+\sqrt{1/4+¢_\Sigma ¢_c}\right)^{-1}$ (см. рис. 1б), что и следует ожидать от эргодического СП. Но так гомогенизованное ядро $\Im(s)\cong\Im_0\cdot e^{-\Sigma_{eff}\cdot s}$ не тривиально, поскольку $\Im_0=\left((1+¢)^2/4¢\right)^{¢_\Sigma^{2}}<1$.

Таким образом полученную величину $\Im_0\subset(0,1]$ можно расценивать, как меру классичности переноса излучения. Из рис. 1б видно, что неклассичности

$\Im_0 << 1$ переноса способствует наличие дальних корреляций $(¢_c >> 1)$ в умеренно $(¢_\Sigma >> 1)$ флуктуирующей среде.

Эти выводы качественно применимы и к другим СМ, исследованным нами иными методами. Так, если $G_\Sigma([k(t)])$ — характеристический функционал СП $\Sigma(s)$, то $\Im(s) = G_\Sigma([k(t) = -i \cdot \Theta(s) \cdot \Theta(s-t)])$, где $\Theta(x)$ — функция Хевисайда. Этим методом были найдены $\Im(s)$ процесса Кэмпбелла и марковской бинарной смеси, описанной дихотомическим СП. Для неё $\Im(s)$ совпал с результатом, полученным в работе [5] с помощью диаграммной техники. Он также следует из расчета в рамках ЛП-теории Помранинга, основанной на СП восстановления.

Приближенные формы осредненных ядер даёт ограниченное суммирование кумулянтного разложения СП $\Sigma(s) - \langle\Sigma\rangle$ методами квантовой оптики. Однако оказывается, что учет конечного числа известных кумулянтов для не малых $¢_\Sigma$ может иметь следствием артефакты нарушения монотонности $\Im(s)$ при $s >> l_c$.

5. Алгоритмы Монте-Карло-моделирования неклассического переноса

Мы предлагаем алгоритмы двух классов; оба реализованы в коде *RaT*:

(i) для аналитических, табулированных и параметризованных представлений $\Im(s)$ и $\Im(s|\Sigma_f)$ находим д.с.п s численным решением уравнения $\Im = ¶$ из п. 3;

(ii) для СДУ общего вида (4) строим по МК с малым шагом $\Delta s = o(l_c)$ реализацию $\Sigma(s)$ — аналитически (например, для expOU — средне-возвратного неотрицательного СП экспоненциального Орнштейна-Уленбека, для которого $a(\Sigma) = - \quad \cdot [\ln(\Sigma/\sim) - 1]$, $b(\Sigma) = \pm \cdot \Sigma$, либо по численным схемам Эйлера-Маруямы или Мильстейна — и накапливаем неубывающий стохастический интеграл $^2(s)$ (1) вплоть до достижения им предопределенной случайной величины $¦ = -\ln ¶$.

Статистическая эквивалентность обоих классов алгоритмов розыгрыша д.с.п прямо вытекает из определения СП ядра распространения $I(s)$, как вероятности частице не испытать взаимодействия на $[0, s)$.

6. Объектно-ориентированная имплементация алгоритмов в коде *RaT* 3.1

Оба класса алгоритмов реализованы на языке *C*++ в МК-коде *RaT* 3.1 [4] на базе ОО-модели (ОМ) библиотек GEANT4 [9] версии 4.9.5. UML-представление потребовавшегося для этого расширения ОМ GEANT4 приведено на рис. 2. Оно нетривиально, т.к. ОМ GEANT4, при всей её общности и расширяемости, жестко ограничивается задачей МК-решения уравнения Больцмана переноса в локально гомогенной среде и потому не содержит абстрактного класса *C*++, функционал которого позволял бы путем его наследования просто заменить классические экспоненциальные распределения д.с.п. их неклассическими обобщениями.

Методы розыгрыша д.с.п. *s* в GEANT4 реализуют один и тот же классический алгоритм, однако рассредоточены по множеству классов физических процессов взаимодействия, наследующих абстрактный класс `G4VProcess`. Из двух его обязательных методов один, `GetPhysicalInteractionLength` сообщает менеджеру `G4TrackManager` трека частицы заказанную процессом д.с.п., а второй, `PostStepDoIt`, формирует конечное состояние взаимодействия, когда менеджер трека решил, что процесс «выиграл» его благодаря минимальности предложенной д.с.п. среди д.с.п. процессов физического списка задачи. Все процессы физического списка считаются в ОМ GEANT4 не зависящими друг от друга, т.е. в статистическом смысле никак между собой не связаны.

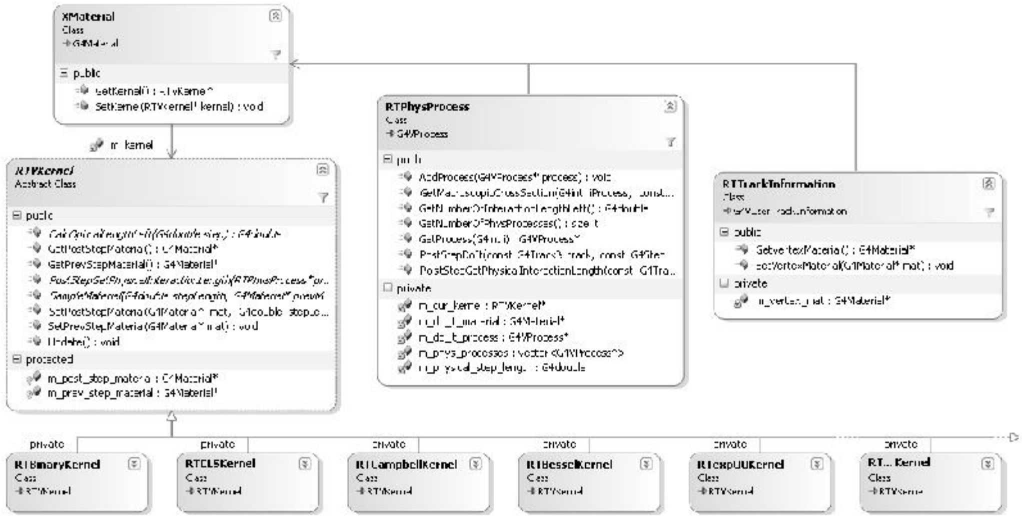

Рис. 2. Объектная UML-модель имплементации алгоритмов в коде RaT 3.1

Это так для классического переноса. Однако при неклассическом транспорте в стохастическом материале частица на шаге моделирования движется в одной и той же невырожденной реализации случайно-гетерогенной среды, и поэтому вероятности осуществления разных процессов не независимы, а коррелируют.

Чтобы воспроизвести эти корреляции, в нашем обобщении ОМ GEANT4 все дискретные физические процессы для данного типа частиц интегрированы, как `vector <G4VProcess> m_phys_processes`, в один физический процесс `RTPhysProcess:G4VProcess`. Он позволяет представить все статистические свойства среды флуктуациями <u>полного</u> макроскопического сечения Σ, а выбор конкретного физического процесса выполнять на шаге <u>после</u> нахождения точки взаимодействия и конкретной реализации материала GEANT4 (объекта класса `G4Material`) в ней. Тем самым удовлетворяется базовое требование ОМ GEANT4 того, что обычный локально гомогенный объект `G4Material` должен однозначно задаваться в точках начала и конца каждого шага моделирования.

Стохастический материал имплементирован дальнейшим наращиванием функциональности класса `XMaterial` (eXtended `G4Material`) ОМ *RaT* [4] и ссылается на имплементации абстрактного класса `RTVKernel` — ядер распространения $\Im$, действующих во всех состоящих из СМ 3D-объектах. Когда невырожденный (`not null`) наследующий `RTVKernel` объект связывается с объектом `XMaterial` 3D-объёма геометрии задачи, контролирующий физику транспорта объект `RTPhysProcess` узнаёт, что в объёме будет моделироваться неклассический перенос. Напротив, `null`-значение оставляет материал объёма обычным гомогенизованным по МАС материалом `XMaterial:G4Material`. Тем самым достигается полная транспарентность неклассического алгоритма по отношению к нестохастическим объектам геометрии задачи и к тем типам частиц и физических процессов, для которых его реализация пока отсутствует.

Процесс `RTPhysProcess` при наличии объекта `RTVKernel` в материале 3D-объёма применяет имплементации его виртуальных методов для розыгрыша физической д.с.п. взаимодействия и — при условии выигрыша — его конечного состояния. Выигравший шаг физический процесс выбирается из списка для данного типа частиц согласно стереотипному МК-алгоритму взвешивания их парциальных макроскопических сечений; для этого в `RTVKernel` предусмотрен метод `GetMacroscopicCrossSection` доступа к свойству процесса.

При рождении частиц в конечных состояниях взаимодействий в СМ объекта с нетривиальным `RTVKernel` информация о текущем материале `G4Material` в точке взаимодействия помещается в объект класса `RTTrackInformation`, который для поддержания корреляции треков каскада в коррелированной среде связывается с объектом `G4Track` трека продукта взаимодействия.

Неклассический перенос реализован в *RaT* 3.1 для рассмотренных в п. 4 СП СМ классами `RTBinaryKernel`, `RTCampbellKernel`, `RTBesselKernel` и `RTexpOUKernel`. Список расширим по мере разработки новых моделей. Для бинарных марковских смесей новая ОМ *RaT* позволила реализовать на *C*++ и стереотипный алгоритм CLS [6] чередования материалов МК-розыгрышем из распределений длин хорд их пересечения (класс `RTCLSKernel`). Результаты моделирования в моделях `RTBinaryKernel` и `RTCLSKernel` статистически одинаковы, но наш алгоритм неклассического переноса эффективнее CLS, т.к. не требует прерывания на каждой границе в смеси и моделирует транспорт с эффективно большим статистически согласованным с CLS средним шагом.

7. Верификация алгоритмов

Мы верифицировали алгоритмы на актуальном примере описания нейтронно-физических характеристик дисперсного НПМ (*n*,~)-типа — карбида бора B_4C в пироуглероде РуС, — рассчитанных ранее [5] двойным методом МК. Строго следуя эталонной постановке задачи [5], кодом *RaT* 3.1 мы рассчитали новыми алгоритмами 1D-кривые поглощения нейтронов с энергией $E_\mathrm{n} = 0{,}0253$ эВ в композитах с различными (50 мкм…1 мм) радиусами R сферических зерен B_4C, случайно упакованных без пересечений в матрице РуС. Параметры ядра распространения $\mathfrak{I}$ неклассического переноса определялись предварительной трассировкой распределений длин хорд пересечения материалов и их МНК-подгонкой экспонентами. Они применялись в обоих алгоритмических версиях 1-МК-моделирования переноса в бинарной смеси — неклассической модели `RTBinaryKernel` и алгоритма CLS, — которые совпали по результату.

Типичный результат такого верификационного расчета приведен на рис. 3 для $R = 350$ мкм. Как видно, эффект стохастического просветления смеси весьма силен [5]. Поэтому задача хорошо подходит для верификации алгоритма.

Согласие данных рис. 3а расчета новым методом с контрольными данными расчета двойным МК более чем приемлемое. Это касается и данных рис. 3б моделирования вторичного эффекта — наработки ^{4}He в реакции ^{10}B(n,~)^{7}Li выгорания изотопа ^{10}B в выгорающем НПМ. Новый алгоритм не хуже, чем эталонный, описывает распределение выгорания в дисперсной системе, включая переходной эффект наличия приповерхностного максимума профиля.

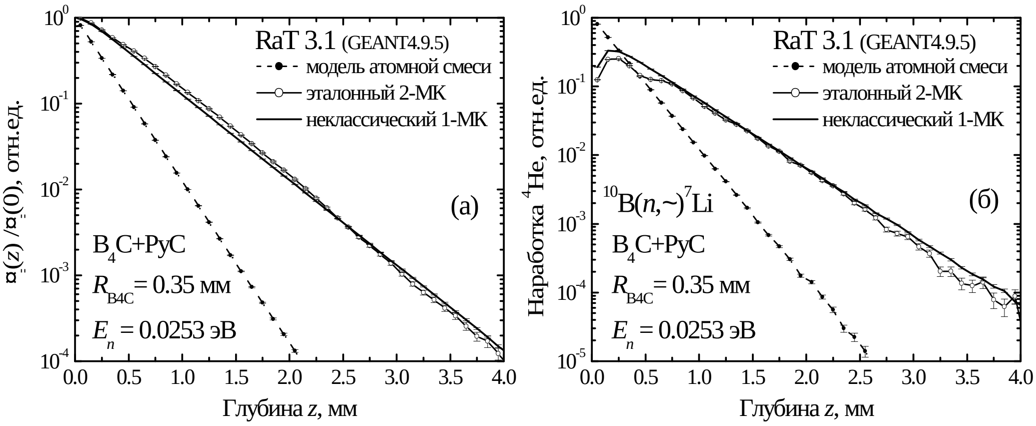

Рис. 3. Кривые ослабления плотности потока ¤ тепловых нейтронов (а) и профили наработки гелия-4 (б) в дисперсном НПМ B_4C+PyC

Таким образом, в рассмотренной актуальной системе новый метод хорошо воспроизводит результаты, полученные эталонным методом моделирования. Время ЦП достижения одинаковой дисперсии ансамблевого среднего при этом значительно (в $10^1 \div 10^2$ раз для разных R) меньше, чем потребное двойному МК. Новый алгоритм реализует однократный метод МК и исключает накладные расходы 2-МК на реализацию среды. Его скорость счета вполне сопоставима с таковой у 1-МК в однородном материале, а её прирост над 2-МК, вообще говоря, неограниченно возрастает с усложнением случайной среды.

8. Выводы и перспективы дальнейших разработок

На основе современных концепций неклассического переноса излучения нами построен, программно реализован и верифицирован МК-кодом *RaT* новый однократный метод Монте-Карло решения обобщенного уравнения Больцмана, описывающего радиационные поля в случайно-неоднородных средах с пространственными корреляциями. Новые алгоритмы на 1…2 порядка более эффективны вычислительно, нежели эталонный двойной метод Монте-Карло.

Отметим в заключение, что они могут применяться и в расчетах кодом *RaT* радиационных полей методом суперпозиции точечных источников (*Point Kernel*), а важнейшим направлением дальнейших разработок является их обобщение на описание неклассического переноса заряженных частиц.

ЛИТЕРАТУРА

1. Братченко М.И., Дюльдя С.В. Эволюция потока и поглощение излучения в слоистых случайных средах: теория и компьютерное моделирование // ВАНТ. Сер. ФРП и РМ. – 2004. – вып. 3(85). – С. 10-18.
2. Yamamoto T., Miyoshi Y., Takeda T. Extension of effective cross section calculation method for neutron transport calculations in particle-dispersed media // Journ. Nucl. Sci. Tech. – 2006. – v. 43, No. 1. – P. 77-87.
3. Bernard E., Golse F., Salvarani F. Homogenization of transport problems and semigroups // Math. Meth. Appl. Sci. – 2010. – v. 33, No. 10. – P. 1228-1234.
4. Дюльдя С.В. Компьютерный эксперимент в физике ресурсосберегающих технологий радиационной обработки материалов // Вісник ХНУ ім. В.Н. Каразіна. № 925. Сер. «Математичне моделювання. Інформаційні технології. Автоматичні системи управління». – 2010. – вип. 14. – С. 53-64.
5. Dyuldya S.V., Bratchenko M.I. Monte Carlo simulation of radiation transport in stochastically heterogeneous absorbers // Proc. 3rd Int. Conf. NPAE-Kyiv2010, June 7–12, 2010, Kyiv, Ukraine. – Kyiv: KINR, 2011. – Part II. – P. 463-467.
6. Donovan T.J., Danon Y. Application of Monte Carlo chord-length sampling algorithms to transport through a two-dimensional binary stochastic mixture // Nucl. Sci. Eng. – 2003. – v. 143, No. 3. – P. 226-239.
7. Larsen E.W. A generalized Boltzmann equation for “non-classical” particle transport // Proc. M&C+SNA-2007, April 15-19, 2007, Monterey, CA, U.S.A. – Available on CD-ROM from Am. Nucl. Soc., LaGrange Park, IL. – 13 pages.
8. Frank M., Goudon T. On a generalized Boltzmann equation for non-classical particle transport // Kinet. Relat. Models. – 2010. – v. 3, No. 3. – P. 395-407.
9. Agostinelli S., Allison J., Amako K., Apostolakis J. et al. Geant4 — a simulation toolkit // Nucl. Instr. Meth. Sec. A. – 2003. – v. 22, No. 3. – P. 250-303.

Надійшла – 14.03.2012.