

Состояние комплекса программ RTS&T

И.И. Дегтярев, О.А. Ляшенко, И.А. Язынин
ГНЦ РФ Институт физики высоких энергий, Протвино, Россия

Основные модификации, отраженные в новой версии комплекса, затрагивают способы описания процессов адронного и фоторождения частиц в области промежуточных энергий, систему представления геометрии. В текущей версии реализована “синтетическая” схема описания геометрии, объединяющая возможности комбинаторного рекурсивного метода и метода поверхностей второго порядка.

Введение. Возросшие требования к качеству прогнозирования полей ионизирующих излучений, обусловленные интенсификацией исследований в областях радиационной терапии онкологических заболеваний, электроядерной энергетики, высокотехнологичного реакторостроения, повлекли за собой совершенствование методологического и константного обеспечения ядерно- и радиационно-физических расчетов, отраженные в новой версии комплекса программ RTS&T [1] — RTS&T-2000 [2].

Моделирование траекторий частиц, оценки функционалов, методы уменьшения дисперсии. Для построения траекторий частиц используется метод группировки взаимодействий по величине передаваемого импульса в единичных актах. Предусмотрен выбор ряда альтернативных схем группировки, обеспечивающих оптимальное соотношение достигаемой точности с ресурсозатратностью в контексте конкретной прикладной задачи. Реализованы основные виды оценок (по столкновениям, поглощениям, пробегам, пересечениям), а также ряд рандомизированных и локальных оценок. При неаналоговом моделировании используются следующие методы уменьшения дисперсии функционалов: экспоненциальное преобразование, форсированные взаимодействия, расщепление-рулетка, весовое окно. Для ускорения приближенных расчетов процессов, сопровождающихся большой множественностью вторичных частиц при эксклюзивной схеме генерации события, применяется метод “thin sampling” [3]. Расчет эффективного коэффициента размножения системы производится методом поколений с использованием метода условных вероятностей или аналоговым образом.

Реализованы следующие виды оценок k_{eff} : основные (по столкновениям, поглощениям, пробегам); простые усредненные оценки; линейные комбинации основных оценок (двойная, тройная), обеспечивающие минимальную дисперсию функционала. При расчете k_{eff} системы учитываются (n, f) -, (p, f) -, (γ, f) -каналы в диапазоне как низких, так и промежуточных энергий.

К числу основных недостатков широко используемых для расчета эффективности сцинтилляционных детекторов программ SCINFUL [11] и CECIL [12] следует отнести сравнительно узкий диапазон рассматриваемых энергий, ограниченность типов частиц и моделируемых каналов реакций (с выборкой характеристик продуктов из полиномиальных параметризаций), а также лимитированность типов геометрий детекторов. В рамках комплекса RTS&T-2000 производится расчет функций чувствительности сцинтилляционных детекторов с учетом всех оцененных каналов рождения заряженных частиц на основе как эмпирических (как правило, для конкретного типа материала сцинтиллятора) наборов коэффициентов световыхода, так и по методике Биркса.

Библиотека интегральных сечений $h(\gamma)N$ - и hA -взаимодействий версии RTS&T-2000 полностью обновлена. Новая компиляция разработана на основе экспериментальных данных библиотеки EXFOR и компиляции с учетом оценок библиотеки LA150 в диапазоне энергий

$E_{inc} \leq 150$ МэВ Б.С. Сычева [4] и параметризаций [4], [13], [14], [15]. Добавлена систематика сечений парциальных каналов (N, f) и (γ, f).

Генераторы неупругих hA -, γA -, AA -взаимодействий. Для описания неупругих (h, γ, A) A -взаимодействий в областях промежуточных и высоких энергий в настоящей версии комплекса используются 4 генератора (по два на диапазон), реализующих альтернативно эксклюзивное или инклюзивное описание события. Предусматривается возможность комбинации схем описания. В области промежуточных энергий используются генераторы, основанные на трехстадийной (внутриядерный каскад, предравновесная, равновесная эмиссия) каскадно-экситонной модели $h(\gamma)A$ -взаимодействий с выделенным каналом бинарного деления и моделью развала Ферми для ядер с $A < 16$ (эксклюзивная схема) или модифицированной [5] эмпирической систематике D2N2 дваждыдифференциальных сечений [4].

В области высоких энергий используется эксклюзивный генератор FRITIOF [7] (альтернативно VNI [8]), модифицированный для учета процессов ядерной релаксации в послекаскадной стадии реакции [9], или инклюзивный генератор, основанный на полуэмпирической систематике одночастичных инвариантных сечений выборочных каналов множественного рождения вторичных частиц. Перенос нуклонов и характеристики вторичных частиц в неупругих γA -взаимодействиях в области энергий ниже 150 МэВ описываются на основе прямого использования библиотек оцененных данных (LA150, JENDL, KAERI, BOFOD и т.д.).

Взаимодействия фотонов. В RTS&T-2000 реализованы 3 альтернативных способа описания дискретных взаимодействий частиц, отличающихся различной степенью детализации, основанных на непосредственном использовании информации библиотек оцененных фотонных (EPDL97), электронных (EEDL) и атомных (EADL) данных; параметризованных представлениях интегральных сечений и нормированных распределений характеристик вторичных частиц; теоретических моделях взаимодействий.

Ионизационные потери энергии тяжелых заряженных частиц. В новую версию комплекса добавлена реализация полуэмпирической методики [10], обеспечивающая погрешность, не превышающую 4% в пике кривой Брэгга, для десятков простых элементов и соединений, используемых в практических, а также возможность использования компиляций рекомендованных ICRU данных. Пакет моделирования флуктуаций текущей версии комплекса включает ряд альтернативных методов моделирования флуктуаций потерь энергии (ионизационных и радиационных) заряженных частиц с возможностью автоматического выбора оптимального распределения в процессе моделирования переноса частицы.

Реализованы выборки из распределений Ландау, Вавилова, Блунка–Лейзеганга, Блунка–Вестфала, распределения Ландау для сверхтонких мишеней, распределения флуктуаций радиационных потерь энергии электронов.

Система представления геометрии. Одним из наиболее значимых факторов, определяющих качество программ переноса реперного класса точности, является эффективность системы представления геометрии исследуемых объектов (функционал степени реалистичности описания и ресурсозатратности). Комплекс RTS&T включает в себя независимый универсальный геометрический модуль GEOMETRY, основанный на методах комбинаторной геометрии и предназначенный для выполнения двух функций: детального описания пространственной геометрии и материального состава исследуемой системы; локализации местонахождения транспортируемой частицы в этой системе, то есть определения, в какой именно дискретной области системы с заранее известными физическими характеристиками она находится. В рамках комбинаторного подхода пространственная геометрия любого физического объекта может быть

предельно точно аппроксимирована системой более простых трехмерных тел, или геометрических областей с однородным материальным составом и постоянным коэффициентом отражения среды, ограниченных замкнутыми поверхностями. Представление геометрии системы как совокупности геометрических областей, в общем случае неоднозначное, является задачей комбинаторной топологии, решаемой в данном случае методом покрытия пространства исследуемого объекта системой множеств — подмножеств евклидова пространства.

В текущей версии программы определено более 30 геометрических примитивов, соответствующих различным типам замкнутых поверхностей. Для описания различных типов поверхностей в рамках комбинаторного подхода используется рекурсивный метод координатных поверхностей. Этот метод позволяет задавать геометрическую поверхность выражениями типа $u = const$, где u — любая из переменных в выбранной системе координат. Таким образом, определение даже очень сложных форм поверхностей не представляет особых трудностей. Каждый примитив характеризуется параметрами, задающими размеры геометрической области, и собственной локальной системой координат. Начало локальной системы координат служит точкой привязки примитива.

Организация дерева вложенностей объектов, методы локализации границ, RTS&T-CAD-интерфейс. Все геометрические области, составляющие исследуемую систему, нумеруются в произвольном порядке числами от 1 до N , где N — общее число областей. Правила расположения областей относительно друг друга определяются с помощью операций булевой алгебры — пересечения и объединения. Особо рассматривается частный случай пересечения, так называемое “вложение”, — такое взаимное расположение областей, при котором одна область полностью размещается внутри другой, “материнской” области. Для каждой области в явном виде указывается номер области, в которую она вложена. Для внешней области системы, содержащей в себе все остальные, этот номер задается нулевым. Пространственное позиционирование области, определенной с помощью геометрического примитива, осуществляется заданием смещения и поворота ее локальной системы координат относительно системы координат материнской области. Смещение и поворот системы координат самой внешней области также могут задаваться относительно некоторой глобальной координатной системы. При определении текущего местонахождения частицы в системе для оптимизации анализа иерархического дерева вложенностей геометрических областей используется информация о предыстории транспортируемой частицы.

Геометрический модуль GEOMETRY использует два альтернативных метода определения координат точки пересечения траектории частицы с поверхностью геометрической области. Первый из которых — *метод итерационной локализации границы* области. Второй подход, аналитический, требует дополнительного определения формы каждого геометрического примитива как комбинации ограничивающих его поверхностей (метод поверхностей второго порядка). Точка пересечения границы области вычисляется в результате совместного решения системы уравнений, описывающих поверхности, ограничивающие область, и уравнений, описывающих прямую, совпадающую с вектором направления движения частицы. Каждый из перечисленных способов локализации обладает рядом известных достоинств и недостатков. При итерационном подходе верхний предел длины транспортного шага ограничивается характеристическими размерами минимальной геометрической области системы.

Аналитический метод локализации границы не имеет геометрического ограничения транспортного шага. Поэтому в ряде случаев (например, при построении траекторий нейтральных частиц в протяженных объектах с мелкими неоднородностями) этот подход более эффективен, чем итерационный метод. Однако при описании геометрической области достаточно сложной формы могут возникнуть трудности в получении аналитического выражения для ограничивающих ее поверхностей, и число уравнений системы может существенно возрасти. В текущей

версии комплекса предусмотрено использование “синтетического” метода локализации границы области, совмещающего возможности итерационного и аналитического подходов.

В состав комплекса входит набор сервисных процедур для автоматического формирования файла исходных данных для задания некоторых типичных геометрий, таких как, например, наиболее часто используемые геометрические конфигурации с периодической структурой, типичные гексагональные ячейки реакторов, математические фантомы и т.д. Задача визуализации геометрии и материального состава исследуемого объекта, траекторий частиц и распределений выходных функционалов решается путем преобразования исходной информации, содержащейся во входном файле модуля GEOMETRY, в формат ASCII DXF (Drawing Interchange Format), разработанный фирмой Autodesk в качестве стандарта для обмена графической информацией между AutoCAD и другими приложениями, поддерживающими операцию импортирования файлов в DXF-формате. Благодаря этому становятся доступными мощные средства популярных САД-систем, предоставляющих возможность визуализации 3D-объектов с произвольным вращением в пространстве экрана, масштабированием изображения, удалением невидимых линий, автоматическим проставлением размеров и т.п., вплоть до получения проектной документации.

Список литературы

- [1] A.I. Blokhin, I.I. Degtyarev et al. Proceed. of the SARE-3 Workshop, KEK, 1997.
- [2] I.I. Degtyarev et al. Low-Energy Hadronic Part of the RTS&T-2000 Code System: algorithms, systematical verification and applications; Intermediate and High Energy Hadronic Part of the RTS&T-2000 Code System: physics models and code verification; Electromagnetic Part of the RTS&T-2000 Code System: physics models and application to high-intensity beam collimator design. – In: Proceed. of MC2000 (Advanced Monte Carlo for Radiation Physics, Particle Transport simulation and Applications) International Conference, Lisbon (2000), Springer.
- [3] W.R. Nelson et al. Report SLAC 265 (1985).
- [4] B.S. Sychev. Cross Sections of Interaction of High Energy Hadrons with Atomic Nuclei, Radiotechnical Institute of Russian Academy of Sciences (1999).
- [5] И.И. Дегтярев и др. Методы описания неупругих $h(\gamma)A$ -взаимодействий в комплексе программ RTS&T (настоящее совещание).
- [6] И.И. Дегтярев, О.А. Ляшенко и др. ВАНТ, Сер. Яд. константы, вып. 2 (1999) с. 124., с.132.
- [7] B. Andersson et al. Z. Phys. C57 (1983) 485.
- [8] K. Geizerю Phys. Rep. 258 (1995) 238.
- [9] V.V. Uzhinskiiю JINR preprint E2-96-192 (1996).
- [10] J.F. Ziegler and J.M. Manoyan. Nucl. Inst. Methods, B35 (1988) 215-228.
- [11] K. Dickens. ORNL-6436 (1988).
- [12] A. Cecil et al. Nucl. Instr. Methods, 161 (1979) 439.
- [13] K. Tripathi. NASA Technical Paper 3656.
- [14] L. Silver et al. Phys. Rev. C47 (3) (1993).
- [15] V.S. Barashenkov. Cross section of Interaction of Particle and Nuclei with Nuclei, Dubna, JINR (1993).