

УДК 519.245+539.12

ГЕОМЕТРИЧЕСКИЕ ВОПРОСЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ ТРАЕКТОРИЙ ЧАСТИЦ В МЕТОДИКЕ С-007

В. И. Рослов, А. Г. Малькин, А. В. Горбунов
(ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области)

Дается описание принципов задания геометрических объектов в методике С-007, предназначенной для решения методом Монте-Карло линейных задач переноса. Описан способ построения геометрии задачи. Указаны типы используемых геометрических блоков. На примере осесимметричного блока показан вывод формул расчета расстояния до поверхностей. Особое внимание уделено расчету расстояния до тора.

Ключевые слова: метод Монте-Карло, геометрия, расстояние до тора.

Введение

Методика С-007 [1] предназначена для решения различных задач переноса нейтронов, гамма-квантов и заряженных частиц. Спектр таких задач очень широк. Среди них расчеты:

- полей излучений и защиты от излучений;
- критических параметров систем (в частности, параметров критических сборок);
- задач физики реакторов;
- задач ядерной безопасности;
- характеристик ускорителей электронов;
- тока, заряда и поглощенной энергии в детекторах ионизирующих излучений при их облучении

и многие другие. Современная практика расчетов показывает, что большинство этих задач обладают весьма сложной геометрией.

Решение задач переноса частиц методом Монте-Карло, который используется в методике С-007, осуществляется посредством моделирования процесса прохождения этих частиц через совокупность областей, составляющих геометрию задачи. Область обычно представляет собой замкнутую часть пространства с границей, состоящей из ряда фрагментов поверхностей. Процесс моделирования траектории движения частицы состоит главным образом из расчета свободного пробега моделируемой частицы и поиска расстояния до границы области вдоль направления полета частицы. Алгоритм расчета расстояния до границы области сводится к вычислению расстояния до каждого из фрагментов ограничивающих поверхностей и последующему выбору минимального из этих расстояний. Поскольку граница области состоит в среднем из 5–10 фрагментов, а иногда это число достигает нескольких десятков, расчет расстояния до границы области составляет значительную долю процесса моделирования траекторий движения частиц.

Большинство упомянутых выше задач требуют детального описания довольно сложных трехмерных геометрических систем, поэтому способ описания геометрии, а также структура формируемых в памяти геометрических данных играют существенную роль для построения эффективного алгоритма моделирования траекторий движения частиц.

Приведенные в статье средства формирования геометрии задач не являются оригинальными. Похожие методы используются и в других программах (см., например, [2, 3]).

Построение геометрической модели

Основным объектом в задании геометрических данных является геометрический блок. Для иллюстрации этого понятия приведем следующий пример. Рассмотрим задачу, геометрия которой представляет собой контейнер, содержащий некоторое количество объектов. Пусть для примера контейнер — это комната, а объекты — стулья. Описать данную геометрию можно двумя способами. При первом подходе комната и ее содержимое рассматриваются как единое целое — используется один блок. Во втором случае комната и стул описываются как отдельные объекты, а вся геометрия получается размещением внутри комнаты нужного количества стульев. Здесь используются два блока. Таким образом, блок — это такой фрагмент геометрии, который имеет самостоятельное значение, например, описывает какой-то предмет.

Как видно из примера, блоком может быть и вся геометрия задачи (тогда это единственный блок). Однако второй подход, состоящий в выделении части геометрии (стула) в виде отдельного блока, очевидно, рациональнее, так как в отличие от первого способа использует только одно описание стула для задания всего содержимого комнаты.

Таким образом, процесс описания геометрии можно разделить на два этапа. Сначала геометрия задачи разбивается на части, которые описываются как блоки, а затем производится обратная операция — из блоков формируется исходная геометрия. Блоки рассматриваются как независимые "строительные" элементы. Правильно размещенные друг относительно друга они и составляют требуемую геометрию. В качестве исходного вместилища рассматривается пустое пространство, обладающее лишь системой координат (его можно рассматривать как всегда существующий блок 0-го уровня вложенности). В нем размещаются блоки (1-й уровень вложенности), которые, в свою очередь, могут содержать в себе другие блоки (2-й уровень), и т. д.

На рис. 1, *а* схематично изображена геометрия, полученная из трех различных блоков: квадрат изображает блок 1 (внутренняя структура блоков для данного примера не важна), круг — блок 2, треугольник — блок 3. На рис. 1, *б* представлен результат вложения трех экземпляров блока 3 в блок 2, причем каждое вложение имеет свою ориентацию. Наконец, рис. 1, *в* показывает, что представляет собой геометрия в окончательном виде после двукратного вложения блока 2 в блок 1. Отметим, что оба экземпляра блока 2 содержат все, что в него было вложено.

Теперь обратимся к видам используемых блоков. Если фрагмент геометрии обладает определенной симметрией (например, осевой, сферической и т. п.), то для его описания используется соответствующий тип блока. Различаются блоки следующих типов:

- *плоский*: в нем поверхности — это набор параллельных плоскостей, области — слои между ними;
- *сферический*: поверхности есть концентрические сферы, области — сферические слои между ними;

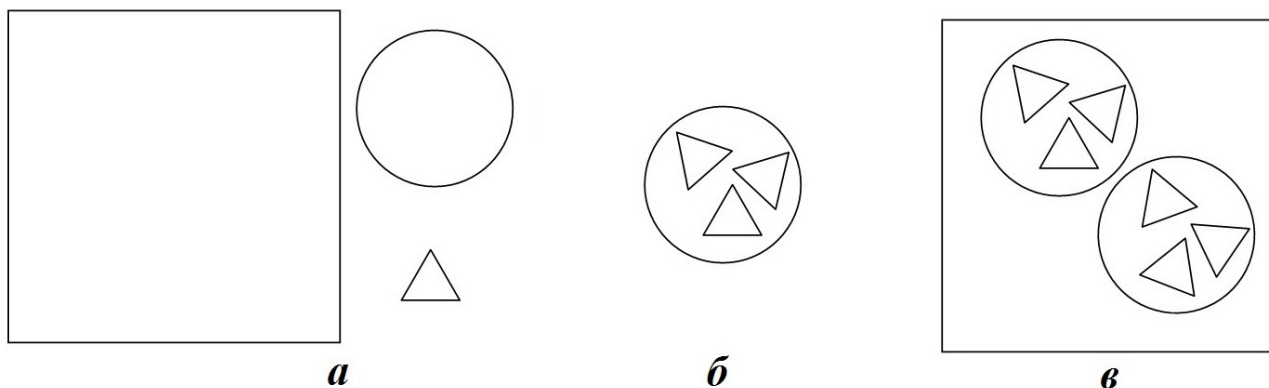


Рис. 1. Иллюстрация возможностей построения геометрии посредством вложений: *а* — исходные блоки; *б* — геометрия 1-го уровня вложенности; *в* — окончательная геометрия

- *осесимметричный*: поверхности и области есть соответственно поверхности вращения и тела вращения вокруг некоторой оси;
- *цилиндрический*: поверхности являются прямыми цилиндрами (иногда такой блок называют телом вытяжения).

Есть еще один тип блока, который называется *трехмерным* и не обладает никаким видом пространственной симметрии (отсюда и название типа).

Любой блок можно описать как трехмерный, однако, если он обладает какой-либо из указанных выше симметрий, его рациональнее задать как блок с данной симметрией. Это позволяет при описании блока использовать меньше символов, что облегчает задание геометрических данных задачи на входном языке. Кроме того, моделирование траекторий движения частиц производится с использованием более простых формул, что сокращает затраты времени ЭВМ на моделирование каждой траектории процесса блуждания частицы.

Есть еще тип блока, который используется в основном для разметки пространства. Подробно о нем — в следующем разделе.

Ячеистые структуры

Среди задач, решаемых с использованием методики С-007, можно выделить расчеты критических параметров активных зон импульсных исследовательских и промышленных реакторов. Особенною этих задач является их геометрия.

Расположение тепловыделяющих элементов (ТВЭлов) внутри тепловыделяющих сборок (ТВС) имеет регулярную структуру. Обычно они располагаются в узлах правильной треугольной или, реже, прямоугольной сетки. Количество ТВЭлов в одной сборке обычно составляет ~ 200 – 300 штук. Аналогичная картина наблюдается и в расположении ТВС, которые представляют собой прямые правильные шестиугольные или четырехугольные призмы. В активной зоне реактора насчитывается порядка 10^2 сборок, и они также образуют правильную структуру. Таким образом, становится актуальной проблема сравнительно простого и удобного задания регулярного расположения одинаковых геометрических объектов в рамках одной задачи.

Простейшая модель реактора представляет собой цилиндрический стакан с многослойной боковой стенкой и двумя крышками. Внутренность стакана — активная зона — заполнена ТВС, которые содержат наборы стержней. Стержни подразделяются на регулирующие (поглощающие), конструкционные и ТВЭлы (рис. 2). ТВЭлы составляют подавляющее число стержней в ТВС. Количество ТВЭлов в одном ТВС может составлять от нескольких десятков до нескольких сотен штук. В свою очередь, в активной зоне могут находиться порядка 10^2 ТВС (рис. 3). Таким образом, реактор может содержать $\sim 10^4$ ТВЭлов, и это обстоятельство определяет главные трудности при задании исходных данных реактора.

Стандартные возможности методики С-007 позволяют выполнить это задание, например, следующим образом. Описываем все типы стержней в виде осесимметричных блоков. Для описания ТВС используем возможности, предусмотренные для трехмерных блоков. Затем, используя предварительно вычисленные координаты расположения стержней в ТВС, размещаем в ней нужное количество экземпляров блоков, описывающих соответствующие типы стержней. Аналогичная процедура осуществляется при размещении требуемого количества ТВС внутри области блока, представляющего

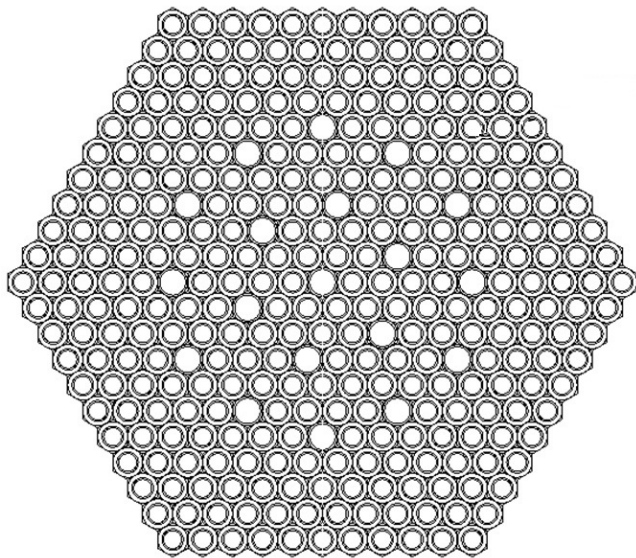


Рис. 2. Совокупность стержней внутри ТВС

оболочку активной зоны, которую можно описать в виде осесимметричного блока. Однако, поскольку исходные данные в программе С-007 задаются в виде текстового файла, запись информации о расположении нескольких сотен стержней в ТВС и, в свою очередь, расположении всех ТВС внутри активной зоны становится довольно трудоемким делом.

Чтобы справиться с подобными проблемами, в геометрии методики существует еще один вид блока — решетка. Он представляет собой двумерный массив одинаковых прямых призм. Основаниями призм могут служить либо правильные шестиугольники, либо прямоугольники. На рис. 4 изображен пример блока, составленного из шестиугольных призм, и показано положение локальной системы координат. Расстояние между центрами шестиугольников есть так называемый шаг решетки, и он является единственным параметром, характеризующим ее структуру. Для прямоугольной решетки таких параметров два — шаги по длине и ширине прямоугольника. Для законченного описания блока еще требуется указать, какие ячейки (они же области блока) входят в его состав, и определить верхнюю и нижнюю границы, т. е. максимальную и минимальную Z -координаты.

Теперь, чтобы описать ТВС, достаточно будет "расставить" твэлы и другие стержни по ячейкам блока, не занимаясь расчетом координат их центров. Аналогичным способом можно будет разместить ТВС в активной зоне.

Конечно, использовать блок-решетку можно не только для задач, связанных с реакторными расчетами, но и там, где в геометрии задачи есть большое количество объектов, расположение которых позволяет применять структуру решетки.

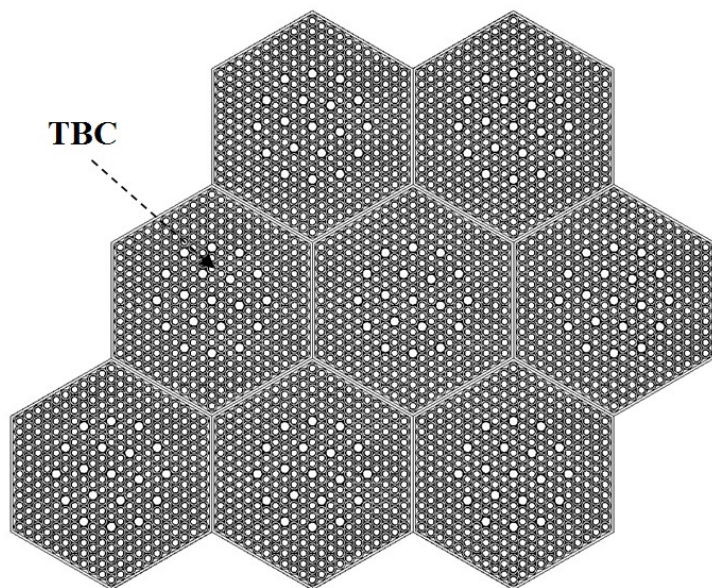


Рис. 3. Фрагмент активной зоны, содержащий несколько ТВС

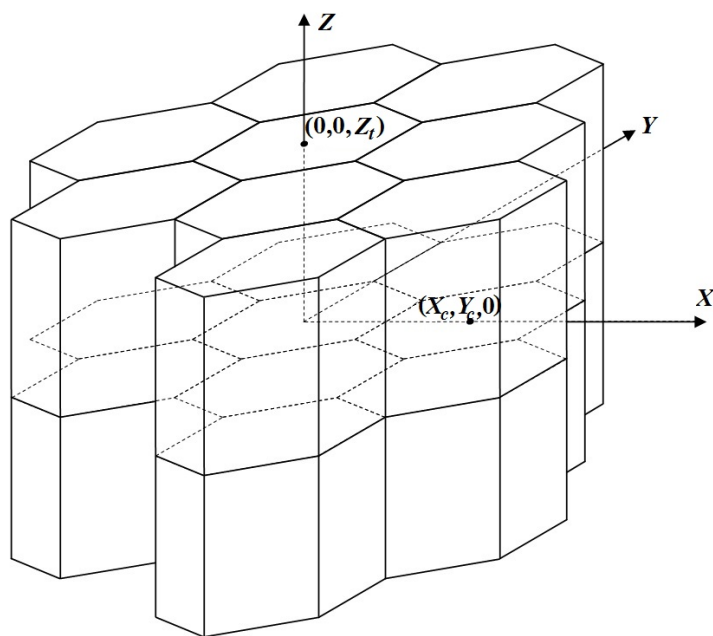


Рис. 4. Пример блока, составленного из шестиугольных призм

Моделирование траектории частицы

Траектория частицы представляет собой набор отрезков в пространстве фазовых координат, определяющих состояние частицы. Концы отрезков, составляющих траекторию, — это события (моменты остановки траектории) в жизни частицы, которые заключаются в столкновениях и пересечениях границ между областями; сами же отрезки представляют собой пробег частицы между событиями.

ми. Одним из основных компонентов алгоритма моделирования траектории является определение длины пробега частицы до границы области.

Состояние моделируемой частицы от момента ее "рождения" определяется набором фазовых координат, среди которых есть ряд чисто геометрических параметров, характеризующих положение частицы в пространстве и направление ее движения:

N_{bl} — номер блока;

N_{pat} — номер экземпляра блока;

N_{reg} — номер области в блоке;

N_{sur} — номер поверхности, на которой находится частица в момент остановки (если этот момент — столкновение, то $N_{sur} = 0$);

x, y, z — декартовы координаты частицы в системе координат данного блока;

α, β, γ — направляющие косинусы вектора, вдоль которого движется частица.

Среди геометрических параметров есть несколько вспомогательных, которые используются для определения новых фазовых координат при пересечении частицей поверхности. К ним относятся:

N_{sur_nxt} — номер поверхности, до которой долетит частица за следующий отрезок траектории;

$N_{bl_nxt}, N_{pat_nxt}, N_{reg_nxt}$ — номер блока, расположенного за поверхностью N_{sur_nxt} , номер его экземпляра и номер области в этом блоке;

$N_{bl_pr}, N_{pat_pr}, N_{sur_pr}$ — номер блока, номер его экземпляра и номер поверхности в этом блоке, на которой находилась частица в момент предыдущей остановки (если этот момент — столкновение, то значения данных величин равны нулю).

Формулы, используемые для расчета расстояния в области для разных типов блоков, приводятся ниже. Здесь же рассматривается ситуация, когда требуется найти расстояние до границы вложенного в область блока.

В структурах данных для каждого блока содержится информация о том, как система координат данного блока расположена относительно системы координат объемлющего блока, а именно заданы координаты центра системы (x_c, y_c, z_c) и матрица направляющих косинусов для координатных осей, где

c_{11}, c_{21}, c_{31} — направляющие косинусы оси x ;

c_{12}, c_{22}, c_{32} — направляющие косинусы оси y ;

c_{13}, c_{23}, c_{33} — направляющие косинусы оси z .

Когда в области присутствует вложенный блок, то для определения расстояния до него выполняется преобразование координат частицы и вектора направления ее полета в систему координат вложенного блока с использованием вышеупомянутых данных этого блока. Формулы преобразования стандартные и приводятся только для полноты картины:

$$x' = c_{11}(x - x_c) + c_{21}(y - y_c) + c_{31}(z - z_c);$$

$$y' = c_{12}(x - x_c) + c_{22}(y - y_c) + c_{32}(z - z_c);$$

$$z' = c_{13}(x - x_c) + c_{23}(y - y_c) + c_{33}(z - z_c),$$

где штрихами обозначены координаты в системе вложенного блока. По аналогичным формулам определяется вектор направления полета. Если частица действительно направляется к вложенному блоку, то, помимо расстояния до него, определяются и дополнительные параметры: $N_{bl_nxt}, N_{sur_nxt}, N_{reg_nxt}$. Кроме того, определяется N_{pat_nxt} по следующей формуле:

$$N_{pat_nxt} = (N_{pat} - 1) K_{dbl} + N_{pat_l},$$

где K_{dbl} — количество размещений блока N_{bl_next} в текущем блоке; N_{pat_l} — порядковый номер размещения этого блока.

Преобразования координат частицы и вектора ее полета производятся также в ситуации, когда частица вышла на границу блока и требуется перейти в объемлющий блок. Пересчет делается по обратным формулам:

$$x = c_{11}x' + c_{12}y' + c_{13}z' + x_c;$$

$$y = c_{21}x' + c_{22}y' + c_{23}z' + y_c;$$

$$z = c_{31}x' + c_{32}y' + c_{33}z' + z_c,$$

где штрихами обозначены координаты в текущем блоке, без штрихов — координаты в объемлющем блоке; параметры системы координат взяты из структуры данных вложенного блока. Перейдя в объемлющий блок, частица оказывается в состоянии *внутри области*, т. е. $N_{sur} = 0$. Кроме того, в этой ситуации важную роль играют вспомогательные параметры: предыдущие номера блока, экземпляра блока и поверхности, с помощью которых осуществляется возможность снова попасть в только что покинутый блок.

Определение расстояния до границы области

Алгоритм поиска расстояния от точки, принадлежащей области, вдоль вектора направления движения частицы до границы области состоит в переборе всех поверхностей, составляющих границу, и выборе той из них, расстояние до которой минимально. В ряде случаев, не вычисляя до конца расстояние, удастся определить, что оно больше минимума из уже найденных расстояний, и это позволяет сократить объем вычислений.

Расчет расстояния до поверхностей плоского и сферического блоков не составляет сложности. Интерес представляют случаи до поверхностей осесимметричного и трехмерного блоков.

Далее будем полагать, что точка имеет координаты $\vec{r}_0 = (x_0, y_0, z_0)$, а направляющий вектор есть $\vec{\omega} = (\alpha, \beta, \gamma)$. Расстояние от точки \vec{r}_0 до поверхности по направлению $\vec{\omega}$ обозначим как t .

Расстояние в осесимметричном блоке. В качестве оси симметрии выбрана ось z декартовой системы координат, поэтому уравнения поверхностей осесимметричного тела могут быть записаны в виде

$$f(x, y, z) = F(\rho, z) = 0, \quad (1)$$

где $\rho = \sqrt{x^2 + y^2}$. В плоскости $\{\rho, z\}$ уравнение (1) определяет образующую, вращением которой вокруг оси z и получена поверхность.

Уравнение прямой, выходящей из точки (x_0, y_0, z_0) с направляющим вектором (α, β, γ) , можно записать в виде

$$x = x_0 + \alpha t; \quad y = y_0 + \beta t; \quad z = z_0 + \gamma t. \quad (2)$$

В координатах (ρ, z) уравнения этого луча будут иметь вид

$$\rho^2 = \rho_0^2 + 2t(x_0\alpha + y_0\beta) + (1 - \gamma^2)t^2; \quad z = z_0 + \gamma t, \quad (3)$$

где $\rho_0^2 = x_0^2 + y_0^2$. Чтобы найти точки пересечения луча с поверхностью, надо подставить формулы (2) в уравнение поверхности (1)

$$f(x(t), y(t), z(t)) = \Phi(t) = 0 \quad (4)$$

и решить полученное уравнение относительно параметра t .

В программе для описания осесимметричных тел используются следующие типы поверхностей: круговой конус, цилиндр, плоскость $z = \text{const}$, сфера, эллипсоид. Это поверхности второго порядка, и уравнение (4) для них (кроме плоскости) является обычным квадратным уравнением

$$A_0 t^2 + A_1 t + A_2 = 0,$$

решение которого не представляет особого труда.

Кроме того, допустимо использование тороидальных поверхностей, для которых уравнение (4) имеет четвертый порядок. По этой причине расчет расстояния до этих поверхностей становится довольно сложной задачей. Рассмотрим ее более подробно.

Круговой тор получается вращением окружности с центром в точке (ρ_c, z_c) и радиусом R

$$(\rho - \rho_c)^2 + (z - z_c)^2 = R^2$$

вокруг оси z . Эллиптический тор получается вращением эллипса с центром в точке (ρ_c, z_c) и полуосями a и b

$$\frac{(\rho - \rho_c)^2}{a^2} + \frac{(z - z_c)^2}{b^2} = 1$$

вокруг оси z . Здесь не приводится уравнение тора в декартовых координатах, так как в дальнейшем оно не требуется.

Для расчета расстояния от точки (x_0, y_0, z_0) до тора воспользуемся уравнением луча в плоскости $\{\rho, z\}$ вида (3). Чтобы упростить дальнейшие выкладки, введем следующие переменные:

$$\rho' = \frac{\rho}{a}; \quad z' = \frac{z - z_c}{b}.$$

Для кругового тора $a = b = R$.

В новых переменных уравнение тора имеет вид

$$(\rho' - \rho'_c)^2 + z'^2 = 1, \quad (5)$$

а уравнения для луча есть

$$\rho'^2 = \rho'_0{}^2 + 2\frac{\alpha x_0 + \beta y_0}{a}t' + (1 - \gamma^2)t'^2; \quad z' = z'_0 + \frac{a}{b}\gamma t', \quad (6)$$

где $t' = t/a$. Подставляя второе уравнение из (6) в уравнение тора (5), получаем систему уравнений для нахождения точек пересечения тора и луча:

$$\begin{aligned} (\rho' - \rho'_c)^2 + \left(z'_0 + \frac{a}{b}\gamma t'\right)^2 &= 1; \\ \rho'^2 &= \rho'_0{}^2 + 2\frac{\alpha x_0 + \beta y_0}{a}t' + (1 - \gamma^2)t'^2. \end{aligned}$$

Введем обозначения $\hat{\gamma} = \frac{a}{b}\gamma$ (для кругового тора $\hat{\gamma} = \gamma$) и $A_{\alpha\beta} = \frac{\alpha x_0 + \beta y_0}{a}$. Тогда, опуская штрихи, получаем систему уравнений в виде

$$\begin{aligned} (\rho - \rho_c)^2 + (z_0 + \hat{\gamma}t)^2 &= 1; \\ \rho^2 &= \rho_0^2 + 2A_{\alpha\beta}t + (1 - \gamma^2)t^2. \end{aligned} \quad (7)$$

Ниже воспользуемся еще одним обозначением: $F_\gamma = 1 - \gamma^2 + \hat{\gamma}^2$.

Заменяем второе уравнение в системе (7) разностью уравнений. В полученной разности исчезает член с ρ^2 , что упрощает исследование точек пересечения. Преобразованная система уравнений имеет вид

$$\begin{aligned} \rho^2 + \hat{\gamma}^2 t^2 - 2\rho\rho_c + 2t\hat{\gamma}z_0 + (z_0^2 + \rho_c^2 - 1) &= 0; \\ t^2 F_\gamma - 2\rho\rho_c + 2t(\hat{\gamma}z_0 + A_{\alpha\beta}) + (z_0^2 + \rho_c^2 + \rho_0^2 - 1) &= 0. \end{aligned} \quad (8)$$

Умножив второе уравнение системы на $-\lambda$ и сложив его с первым, получим уравнение пучка кривых второго порядка

$$\rho^2 + (\hat{\gamma}^2 - \lambda F_\gamma)t^2 + 2\rho\rho_c(\lambda - 1) + 2t[\hat{\gamma}z_0(1 - \lambda) - \lambda A_{\alpha\beta}] + [(z_0^2 + \rho_c^2 - 1)(1 - \lambda) - \lambda\rho_0^2] = 0. \quad (9)$$

Ясно, что если система (8) имеет решения, т. е. соответствующие кривые пересекаются, то и любая кривая пучка (9), задаваемая каким-либо численным значением λ , проходит через все эти точки пересечения. Будем искать в пучке вырожденную кривую, которая в данном случае является парой действительных прямых [4].

Матрица кривой пучка имеет вид

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & \rho_c(\lambda - 1) \\ 0 & \hat{\gamma}^2 - \lambda F_\gamma & \hat{\gamma}z_0(1 - \lambda) - \lambda A_{\alpha\beta} \\ \rho_c(\lambda - 1) & \hat{\gamma}z_0(1 - \lambda) - \lambda A_{\alpha\beta} & (z_0^2 + \rho_c^2 - 1)(1 - \lambda) - \lambda\rho_0^2 \end{pmatrix}.$$

Второй и третий инварианты кривой пучка есть соответственно

$$I_2(\lambda) = \hat{\gamma}^2 - \lambda F_\gamma;$$

$$I_3(\lambda) = (\hat{\gamma}^2 - \lambda F_\gamma) [(z_0^2 + \rho_c^2 - 1)(1 - \lambda) - \lambda\rho_0^2] - [\hat{\gamma}z_0(1 - \lambda) - \lambda A_{\alpha\beta}]^2 - \rho_c^2 (\hat{\gamma}^2 - \lambda F_\gamma) (1 - \lambda)^2.$$

Для вырожденности кривой пучка необходимо, чтобы третий инвариант был равен нулю, т. е. чтобы λ являлась корнем уравнения $I_3(\lambda) = 0$. А чтобы эта кривая пучка была парой действительных прямых, требуется выполнение условия $I_2(\lambda) \leq 0$. Подставляя в это неравенство выражение для $I_2(\lambda)$, получаем следующее условие для λ :

$$\lambda \geq \frac{\hat{\gamma}^2}{1 - \gamma^2 + \hat{\gamma}^2} = \lambda_*.$$

Отметим, что $0 \leq \lambda_* \leq 1$.

Вычислим значения третьего инварианта в точках $0, \lambda_*, 1$:

$$I_3(0) = -\hat{\gamma}^2 \leq 0; \quad I_3(\lambda_*) = -[\hat{\gamma}z_0(1 - \lambda_*) - \lambda_* A_{\alpha\beta}]^2 \leq 0;$$

$$I_3(1) = (1 - \gamma^2) \rho_0^2 - A_{\alpha\beta}^2 = (x_0\beta - y_0\alpha)^2 \geq 0.$$

Отсюда следует, что инвариант имеет по крайней мере один корень на интервале $[\lambda_*, 1]$. Перепишем его в виде полинома третьего порядка

$$I_3(\lambda) = \lambda^3 + a_2\lambda^2 + a_1\lambda - c, \quad (10)$$

где

$$a_2 = \frac{F_\gamma(z_0^2 + \rho_0^2 - 1) - \rho_c^2(F_\gamma + \hat{\gamma}^2) - (\hat{\gamma}z_0 + A_{\alpha\beta})^2}{\rho_c^2 F_\gamma};$$

$$a_1 = \frac{(1 - \gamma^2)\rho_0^2 - A_{\alpha\beta}^2 - \rho_c^2 F_\gamma + \hat{\gamma}^2 - a_2}{\rho_c^2 F_\gamma}; \quad c = \frac{\hat{\gamma}^2}{\rho_c^2 F_\gamma} > 0.$$

Для оценки поведения полинома (10) потребуется его дискриминант D , для чего преобразуем полином к приведенному виду, сделав замену переменной $\lambda = x - a_2/3$. Получим

$$I(x) = x^3 + 3px + q,$$

где

$$p = \frac{a_1}{3} - \left(\frac{a_2}{3}\right)^2; \quad q = 2\left(\frac{a_2}{3}\right)^3 - a_1\frac{a_2}{3} - c.$$

Теперь дискриминант можно вычислить:

$$D = \left(\frac{q}{2}\right)^2 - p^3.$$

Нетрудно получить значения приведенного полинома $I(x)$ и его производных при $x = 0$, что даст соответствующие значения для полинома $I_3(\lambda)$ в точке $\lambda = -a_2/3$:

$$I_3\left(\frac{-a_2}{3}\right) = q; \quad I_3'\left(\frac{-a_2}{3}\right) = 3p; \quad I_3''\left(\frac{-a_2}{3}\right) = 0.$$

Отсюда следует, что точка $\lambda = -a_2/3$ является точкой перегиба для полинома, и этот факт будет использован для выбора начального приближения в итерационном процессе поиска корня.

Известно, что если $D > 0$, то у кубического уравнения есть только один действительный корень. Вспоминая, что у полинома $I_3(\lambda)$ корень на отрезке $[\lambda_*, 1]$ обязательно есть, получаем, что этот корень единственный. В этом случае в пучке есть пара действительных прямых и, следовательно, возможны точки пересечения луча с тором.

При $D \leq 0$ у кубического уравнения имеется три действительных корня. В этом случае пересечение тора с лучом возможно, если каждому корню соответствует пара действительных прямых в пучке (9), т. е. все корни не меньше λ_* . Напомним правило знаков Декарта для полинома: *число положительных корней равно числу N перемен знака в последовательности коэффициентов полинома или меньше N на четное число*. Отсюда следует, что, когда $a_2 \geq 0$ или $a_1 \leq 0$, полином (10) имеет только один положительный корень, так как в последовательности коэффициентов есть только одна смена знака. Следовательно, есть корни, меньшие λ_* , и поэтому точек пересечения нет.

Таким образом, пересечение луча с тором возможно только при условии $a_2 < 0$ и $a_1 > 0$. В этом случае все корни полинома — положительные, и остается выяснить, имеются ли корни, меньшие λ_* . Для этого запишем полином (10) по степеням $(\lambda - \lambda_*)$:

$$I(\lambda - \lambda_*) = (\lambda - \lambda_*)^3 + (\lambda - \lambda_*)^2 d_2 + (\lambda - \lambda_*) d_1 + I_3(\lambda_*),$$

где

$$d_2 = 3\lambda_* + a_2; \quad d_1 = (3\lambda_* + 2a_2)\lambda_* + a_1.$$

Снова применяя правило Декарта, видим, что все корни исходного полинома будут не меньше λ_* только при $d_2 < 0$ и $d_1 > 0$ и, следовательно, только в этом случае возможны пересечения луча с тором.

При условии пересечения луча с тором подходящий корень полинома предлагается вычислять методом Ньютона. При этом начальное приближение к корню удобно выбирать так, чтобы процесс итераций сходил к корню монотонно.

Если $D > 0$, то имеется один корень и начальное приближение λ_0 выбирается следующим образом (вспомним значение полинома в точке перегиба):

$$\lambda_0 = \begin{cases} \lambda_*, & \text{если } q \geq 0; \\ 1, & \text{если } q < 0. \end{cases}$$

При первом значении λ_0 процесс сходится монотонно к корню слева, а при втором — справа.

При $D \leq 0$ имеется три подходящих корня, причем один из корней может быть кратным или почти кратным. Поскольку метод Ньютона сходится медленно при поиске такого корня, то следует искать простой корень. Для поиска простого корня начальное приближение выбирается следующим образом. Если $D \geq -\varepsilon$ (ε — достаточно малое число) и $q \leq 0$, в качестве начального приближения λ_0 берем выражение [3]

$$\lambda_0 = \frac{-a_2}{3} + 2\sqrt{-p},$$

которое является оценкой сверху максимального корня. При этом итерационный процесс будет сходиться монотонно к простому корню слева. Если $D < -\varepsilon$ или $q > 0$, то в качестве λ_0 берем λ_* , и в этом случае итерационный процесс сходится монотонно к простому корню справа. Процесс сходимости к корню можно заметно ускорить, если воспользоваться методом Ньютона второго порядка [5].

Пусть теперь λ — найденный выше корень. Тогда из равенства нулю инварианта $I_3(\lambda)$ получаем

$$(z_0^2 + \rho_c^2 - 1)(1 - \lambda) - \lambda\rho_0^2 = \frac{[\hat{\gamma}z_0(1 - \lambda) - \lambda A_{\alpha\beta}]^2}{\hat{\gamma}^2 - \lambda F_\gamma} + \rho_c^2(1 - \lambda)^2. \quad (11)$$

Используя это равенство в уравнении пучка (9), получаем

$$[\rho - \rho_c(1 - \lambda)]^2 = \left[\sqrt{\lambda F_\gamma - \hat{\gamma}^2 t} - \frac{\hat{\gamma}z_0(1 - \lambda) - \lambda A_{\alpha\beta}}{\sqrt{\lambda F_\gamma - \hat{\gamma}^2}} \right]^2.$$

Извлекая квадратный корень из обеих частей, получаем уравнения пары прямых

$$\rho = \pm \sqrt{\lambda F_\gamma - \hat{\gamma}^2 t} + \rho_c(1 - \lambda) \mp \frac{\hat{\gamma}z_0(1 - \lambda) - \lambda A_{\alpha\beta}}{\sqrt{\lambda F_\gamma - \hat{\gamma}^2}}.$$

Так как $\lambda_* = \hat{\gamma}^2/F_\gamma$, то при $\lambda = \lambda_*$ в уравнениях есть особенность. Чтобы избавиться от нее, воспользуемся равенством (11). Тогда уравнения прямых приобретут вид

$$\rho = \pm \sqrt{\lambda F_\gamma - \hat{\gamma}^2 t} + \rho_c(1 - \lambda) \mp s \sqrt{(1 - \lambda) [z_0^2 + (\rho_0 - \rho_c)^2 - 1] - [\rho_0 - \rho_c(1 - \lambda)]^2},$$

где $s = \text{sign}(\hat{\gamma}z_0(1 - \lambda) - \lambda A_{\alpha\beta})$.

Подставляя поочередно полученные выражения в первое уравнение системы (8), получаем два квадратных уравнения для определения значений t в момент пересечения луча с тором. Поскольку решение проводилось для переменных со штрихами, окончательное значение расстояния от точки (x_0, y_0, z_0) до тора получается умножением t на a .

Стоит отметить, что метод получения корней посредством выделения вырожденной кривой в пучке кривых второго порядка взят из [6].

Расстояние в трехмерном блоке. Трехмерный блок используется для задания геометрии объектов, которые не описываются иным способом. Геометрия блока описывается с помощью элементарных объемов. Элементарный объем — это часть пространства, ограниченная поверхностью второго или первого порядка, лежащая с отрицательной стороны от поверхности*, а области блока задаются посредством теоретико-множественных операций, производимых над элементарными объемами. Это не вполне традиционное использование стороны поверхности в теоретико-множественном описании области: обычно со знаком плюс в описываемый объем входит часть пространства, лежащая с положительной стороны от поверхности. Однако используемый подход имеет свои достоинства: так, элементарный объем, задаваемый сферой, является шаром, цилиндр определяет свою внутренность и т. д.

Расстояние до поверхности, ограничивающей область блока, определяется подобно тому, как это делается в случае осесимметричного блока. Подстановка уравнения траектории частицы $\vec{r} = \vec{r}_0 + \vec{\omega}t$ в уравнение поверхности $F(\vec{r}) = 0$ приводит к квадратному уравнению

$$At^2 + 2Bt = F_{sur},$$

решение которого дает искомое расстояние. Проверка его пригодности производится с помощью теоретико-множественной формулы, задающей данную область. Отметим смысл коэффициентов квадратного уравнения: B есть скалярное произведение вектора внешней нормали к поверхности на направление полета $\vec{\omega}$; $F_{sur} = F(\vec{r}_0)$.

*Подстановка координат точки данной части пространства в уравнение поверхности вида $F(\vec{r}) = 0$ дает отрицательное значение.

Заключение

Приведенный в статье способ задания геометрии, принятый в методике С-007, неплохо себя зарекомендовал. Особенно отчетливо проявляются его достоинства, когда проводятся расчеты серии задач, геометрия которых отличается расположением какого-либо фрагмента, описанного в виде блока. В таких случаях изменения в исходных данных разных задач оказываются минимальными.

Надеемся также, что метод получения точек пересечения прямой с тором посредством выделения вырожденной кривой из пучка представит интерес для читателя.

Список литературы

1. Житник А. К., Донской Е. Н., Огнев С. П., Рослов В. И., Субботин А. Н., Иванов Н. В., Семёнова Т. В., Малькин А. Г., Горбунов А. В., Залялов А. Н. Методика С-007. Решение методом Монте-Карло связанных линейных уравнений переноса нейтронов, гамма-квантов, электронов и позитронов // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2011. Вып. 1. С. 17–24.
2. MCNP — A General Monte Carlo N-Particle Transport Code. Version 4a / Ed. by J. F. Briesmeister. Los Alamos National Laboratory, 1993.
3. Kandiev Y. Z., Kashaeva E. A., Khatuntsev K. E. et al. PRIZMA status // Proc. "Joint Int. Conf. on Supercomputing in Nuclear Applications and Monte Carlo". Paris, France, 27–31 October 2013.
4. Корн Г., Корн Т. Справочник по математике для научных работников и инженеров. М.: Наука, 1970.
5. Березин И. С., Жидков Н. П. Методы вычислений. Т. 2. М.: Физматгиз, 1962.
6. Стародетко Е. А. Элементы вычислительной геометрии. Минск, 1986.

Статья поступила в редакцию 15.01.18.

GEOMETRIC PROBLEMS OF SIMULATING PARTICLE TRAJECTORIES IN THE C-007 CODE / V. I. Roslov, A. G. Mal'kin, A. V. Gorbunov (FSUE "RFNC-VNIIEF", Sarov, N. Novgorod region).

The paper describes the principles of setting geometric objects in the C-007 code for solving linear transport problems with the Monte Carlo method. The way of constructing the problem geometry is described and the geometric block types are given. The derivation of formulas to calculate the distance to a surface is shown by the example of an axially symmetric block. Special attention is paid to the calculation of the distance to torus.

Keywords: the Monte Carlo method, geometry, the distance to torus.
