

АВТОМАТИЧЕСКОЕ ПЕРЕСТРОЕНИЕ ИНТЕРВАЛОВ РАЗБИЕНИЯ СПЕКТРА РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В ПРОЦЕССЕ СЧЕТА В МЕТОДИКЕ САТУРН

А. А. Гаврилова, В. Ю. Резчиков

ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», г. Саров Нижегородской обл.

Введение

Детальное изучение характеристик рентгеновского излучения (направленности, жесткости и пр.) занимает в настоящее время значительное место в расчетно-теоретических исследованиях соответствующих структур Института теоретической и математической физики РФЯЦ-ВНИИЭФ. Интенсификация работ в данном направлении стала возможной в последнее время благодаря выросшим мощностям современных вычислительных систем. Вместе с тем, растущие запросы в плане детализации описания спектра рентгеновского излучения (например, учет линий в коэффициентах поглощения веществ), высокий коэффициент загрузки вычислительных систем, сложившийся к настоящему времени в математическом отделении, оставляют вопрос совершенствования технологий, направленных на сокращение календарного времени расчетного моделирования, по-прежнему актуальным.

Для решения задач распространения рентгеновского излучения (РИ) в многогрупповом кинетическом приближении используется методика САТУРН [1]. Совокупность всех работ по рассчитываемому классу задач показывает, что проводимое моделирование весьма затратно, как в плане календарного времени, так и в плане использования ресурсов ЭВМ (число переменных фазового пространства при использовании многогруппового кинетического приближения достигает в настоящее время величины $3 \cdot 10^{10}$, а количество решаемых переменных за весь расчет может составлять 10^{16}).

В настоящем докладе описан начальный этап создания технологии автоматического перехода с одного энергетического разбиения на другое в расчетах распространения РИ. Предполагается, что создаваемая технология позволит существенно сокращать календарное время проведения многогрупповых расчетов в кинетическом приближении, используя переход с меньшего количества энергетических групп на большее и, наоборот, без существенной потери детализации спектра.

Инструмент для подобного перехода был создан в методике САТУРН ранее. Однако для использования этого инструмента требовалось вмешательство исполнителя расчета (прерывание счета после проведения определенного анализа результатов, включение соответствующего приказа и затем возобновление счета). Авторы, модифицировав имеющийся ин-

струмент, предприняли попытку выработать и опробовать на тестовых расчетах некие критерии, инициирующие смену числа энергетических групп без прерывания счета, что преследует цель сократить влияние человеческого фактора и сократить время простоев при проведении расчетов.

В отчете рассмотрены две задачи переноса излучения: известная задача ФЛЭКА [2] и модификация задачи о распространении тепла в шаровом слое. В первой задаче с использованием критерия анализа энергии излучения в одной из областей автоматически осуществлен переход с 7-группового на 28-групповое приближение, во второй задаче после анализа дифференциальной индикатрисы (окончание изменения жесткой части спектра) выполнен переход с 53 на 33 группы.

Особенности программной реализации автоматического перестроения интервалов разбиения спектра рентгеновского излучения

Совокупность приказов, необходимая для автоматического перехода с одного числа энергетических групп на другое без остановки счета

Для перестроения интервалов разбиения спектра рентгеновского излучения в методике САТУРН был написан приказ, вызов которого происходит в процессе счета после выполнения условия одного из реализованных критериев для перехода (анализ энергии излучения в области, подлежащей контролю; анализ изменения дифференциальной индикатрисы). Данный приказ распараллелен по областям с использованием стандарта MPI. Работа происходит внутри параобласти на процессоре. Для текущей области анализируется пересечение старой и новой энергетических сеток и заполняется массив ALF (ni_old, ni_new), где ni_old – число узловых значений старого энергетического разбиения, ni_new – число узловых значений нового энергетического разбиения. Далее перестраивается массив информации о спектре, массив угловых сеток и пересчитываются массивы, зависящие от числа групп и числа направлений по всем группам.

Переинтерполяция на новую энергетическую сетку производится по формуле:

$$f_j = \frac{1}{\Delta\omega_j} \sum_i f_i \Delta\omega_{i,j} \quad (1)$$

f_i – значения функции на старой энергетической сетке, f_j – значения функции на новой энергетической сетке, $\{\Delta\omega_j\}$ – множество длин интервалов новой энергетической сетки, $\{\Delta\omega_{i,j}\}$ – пересечение старой и новой сеток.

В случае, когда старая сетка содержит непересекающуюся часть ($m-1$ интервал) с новой сеткой, краевое значение функции на новой сетке вычисляется по формуле:

$$f_1 = \sum_{i=1}^m f_i + \sum_{i=m+1} \frac{1}{\Delta\omega_i} f_i \Delta\omega_{i,1} \quad (2)$$

В случае, когда новая сетка содержит непересекающуюся часть ($m-1$ интервал) со старой сеткой:

$$f_1 = \dots = f_{m-1} = 0 \quad (3)$$

Далее более подробно остановимся на некоторых особенностях организации счета с переходом и необходимых параметрах, указываемых в управляющем файле. Для автоматического перехода с одного энергетического разбиения на другое на этапе расчета начальных данных нужно присвоить значение TRUE параметру задачи TRANSFER_SPECTR (по умолчанию задается FALSE). Этот параметр отвечает за возможность проверки выполнения одного из критериев для перехода. Его можно указывать также на этапе счета. Однако в этом случае после смены разбиения в следующем заходе придется установить этому параметру значение по умолчанию, т. к. в настоящее время реализована возможность только одного перехода на другое число групп в процессе расчета задачи.

За применяемый для инициирования перехода критерий отвечает параметр задачи TYPE_TRANSFER_SPECTR (1 – анализируется энергия излучения, 2 – анализируется изменение дифференциальной индикатрисы). Если после проверки одного из критериев условие перехода (а именно, возникновение энергии излучения в одной из областей или прекращение изменения дифференциальной индикатрисы для одной из групп жесткой части спектра) выполнилось, присваивается значение TRUE параметру IS_TRANSFER_SPECTR. Условие на этот параметр задается в режиме счета MODWORK входного языка, где необходимо указать новое энергетическое разбиение и вызвать приказ перестройки энергетической сетки и пересчета величин, зависящих от числа энергетических групп.

Пример входного языка приведен ниже:

```
MODWORK ;
...
IF 'IS_TRANSFER_SPECTR' ;
    SPECTR_NEW 0 0.08 0.3 1.0 2.6 4.5 7.0 15.0 ;
    TRANSFER_SPECTR ;
ENDIF ;
...
ENDMOD ;
```

После того, как переход с одного количества групп на другое осуществлен, параметрам TRANSFER_SPECTR и IS_TRANSFER_SPECTR присваивается логическое значение FALSE. Также в директорию задачи записывается файл transfer_spectr.txt, содержащий сообщение об успешном завершении работы приказа по перестройке энергетической сетки, а также номер общего шага по времени, на котором эта перестройка произошла.

Критерии смены числа энергетических групп и их программная реализация

Скажем несколько слов о выборе критериев смены числа энергетических групп.

Очевидно, что в практически любом расчете присутствуют этапы, на которых описание жесткости спектра РИ может быть промоделировано с различной степенью детализации без сколько-нибудь существенной потери расщотности явления. Рассмотрим, например, расчет распространения РИ в цилиндрическом боксе-конверторе лазерно-физической установки NIF, проведенный для оценки возможности зажигания капсулы с DT-топливом, помещенной в центре бокса. Вполне понятно, что этап конверсии лазерного излучения в рентгеновское и распространения излучения с эффективной температурой, не превышающей 300 эВ, по боксу может быть корректно описан энергетическим разбиением с верхней границей не более, чем в 5 кэВ. После сжатия криогенной капсулы наступает момент ее возможного зажигания и горения, при котором реализуются температуры (вещества) уже в десятки килоэлектронвольт, что требует смещения верхней границы описания спектра в область сотен кэВ, а необходимость детализации спектра можеткратно увеличить число энергетических групп. После выхода сверхжесткой части рентгеновского излучения из мишени (что происходит достаточно быстро, в течение долей наносекунды) количество групп может быть уменьшено, а границы интервалов сужены.

Для инициирования смены числа энергетических групп в расчетах распространения излучения в настоящий момент реализованы два физических обоснованных критерия. Согласно первому из них, в одной из счетных областей анализируется энергия излучения, и в момент, когда она становится больше некоторой заданной величины, происходит переход на другое число групп. Этой величине можно присвоить значение в параметре задачи EPS_SPECTR (значение по умолчанию 0.0001). Во втором критерии анализируется суммарная по всем направлениям дифференциальная индикатриса для одной из внешних линий наружной области, и, если ее изменение по времени становится незначительным (сравнение происходит также с параметром EPS_SPECTR), вызывается приказ перестройки энергетической сетки. За выбор критериев перехода и за возможность их анализа отвечают параметры, описанные в пункте 1.1. Необходимую область, в которой будет осуще-

ствляться проверка одного из критериев, нужно задать с помощью параметра задачи OBL_SPECTR. По умолчанию ему присвоено значение 0, поэтому он является обязательным для указания в управляющем файле задачи, в противном случае расчет будет остановлен с диагностикой о недостающем параметре.

Внутри счетных программ, содержащих реализацию данных критериев, происходит похожий набор действий. Необходимые величины сравниваются с параметром EPS_SPECTR. В случае выполнения условия для параметра IS_TRANSFER_SPECTR, как было описано ранее, устанавливается значение TRUE. Поскольку выполнение критериев проверяется для определенной области, далее с помощью средств MPI происходит рассылка значения IS_TRANSFER_SPECTR по всем процессорам задачи. Это необходимо сделать, т. к. возможность расчета с разным числом групп в разных областях на текущий момент не реализована.

Тестирование реализованных алгоритмов и критериев на модельных задачах распространения излучения в многогрупповом кинетическом приближении

Задача Флэка

Постановка задачи Флэка, которая широко освещена в соответствующей открытой литературе, взята из [2]. В цилиндрическом слое рассчитывается процесс распространения излучения в многогрупповом кинетическом приближении. Газодинамическое движение среды отсутствует, плотность вещества слоя равна $\rho = 1$, процессы рассеяния излучения (комптоновского или томсоновского) не учитывались. Задача численно моделировалась в трехобластной постановке (см. рис. 1).

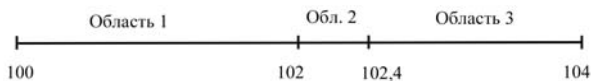


Рис. 1. Геометрия расчета, счетные области. Единицы размера – сантиметры

Сечение поглощения излучения задавалось формулой $\chi_w = A \cdot (1 - \exp(-w/T)) / w^3$. Первая и третья счетные области – оптически прозрачны ($A = 27$), вторая область – оптически плотная ($A = 10000$). Уравнение состояния вещества задавалось по формуле $E = 0,81 \cdot T$. Граничные условия: на поверхность $r = 100$ падает излучение планковского (равновесного) источника с $T_0 = 1$, на поверхности $r = 104$ задано условие свободной поверхности.

Во всех счетных областях пространственная сетка по радиусу задавалась шестнадцатью равномерными интервалами. Все расчеты проводились на одинаковой угловой квадратуре ES_8 .

Всего для тестирования технологии автоматической смены числа групп было проведено три серии расчетов задачи Флэка.

Первая серия проводилась на 7-групповом (далее на рисунках помечена как «7 групп») энергетическом разбиении. Энергетическая сетка задавалась следующим образом {кэВ}: 0-0.08-0.3-1.0-2.6-4.5-7-15.

Вторая серия считалась на 28-групповом энергетическом разбиении (далее на рисунках помечена как «28 групп»). Энергетическая сетка задавалась так {кэВ}: 0-0.02-0.04-0.06-0.08-0.1-0.15-0.2-0.3-0.4-0.5-0.7-1-1.4-1.8-2.2-2.6-3-3.5-4-4.5-5-5.5-6-7-8-10-12-15.

И, наконец, третья серия (далее на рисунках помечена как «переход») заключала в себе переход с 7 на 28-групповое разбиение, осуществленный по критерию выхода излучения из оптически плотной (второй) области в оптически прозрачную (третью). Значение EPS_SPECTR выбиралось равным 0,05. Заметим, что переход осуществился на момент времени 0,0011 ($ct = 3,3$; c – скорость света, равная $3 \cdot 10^{10}$ см/сек).

Все расчеты считались с переменным шагом по времени, выбираемым по критерию оптимального количества в 15 итераций, которые сводились с точностью 0,0001 по интегральной плотности излучения. Для ускорения сходимости итераций использовался КМ-метод.

Ниже на рис. 2–4 представлены пространственные распределения температур вещества и излучения в системе вдоль радиуса на три момента времени: $ct = 6$, $ct = 15$ и $ct = 50$.

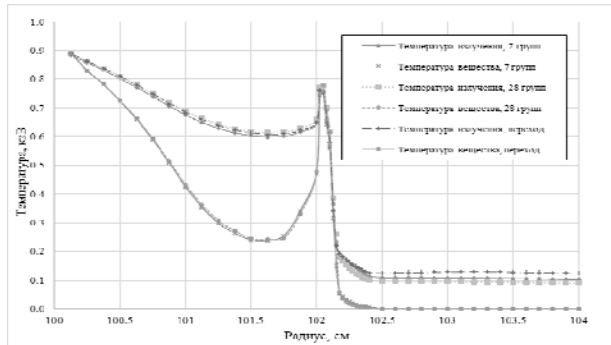


Рис. 2. Пространственные распределения температур на момент времени $ct = 6$

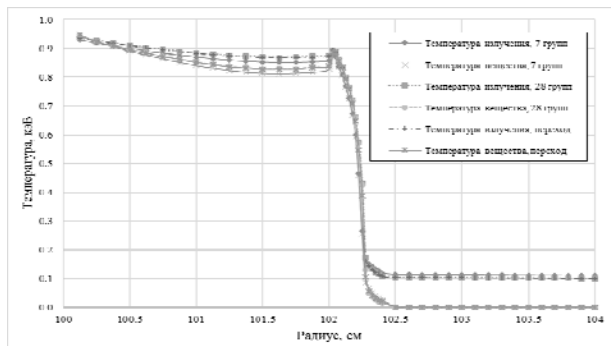


Рис. 3. Пространственные распределения температур на момент времени $ct = 15$

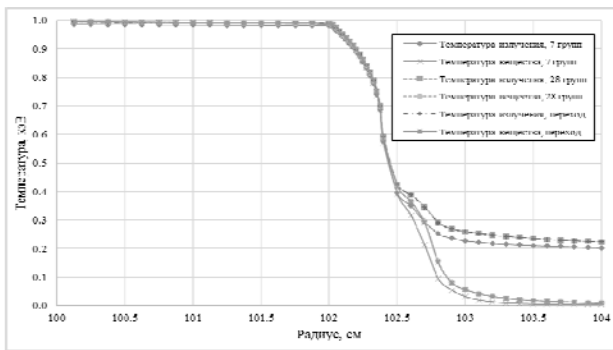


Рис. 4. Пространственные распределения температур на момент времени $ct = 50$

В табл. 1–3 представлены интегральные характеристики проведенных расчетов на различные моменты времени: энергия вещества и излучения в системе (суммарно по всем областям), входящие и выходящие потоки через границы, дисбаланс в расчетах.

Таблица 1

Энергетические характеристики 7-группового расчета

E , 10 МДж	$ct = 6$	$ct = 15$	$ct = 50$
E излучения	491,43	1099,39	1840,18
E вещества	548,66	970,07	1260,06
Вход, поток	1040,04	2070,34	3117,42
Выш. поток	0,14	1,04	17,24
Дисбаланс, %	0,02	0,01	0,00

Таблица 2

Энергетические характеристики 28-группового расчета

E , 10 МДж	$ct = 6$	$ct = 15$	$ct = 50$
E излучения	521,95	1179,62	1905,51
E вещества	554,80	988,90	1282,94
Вход, поток	1076,63	2169,02	3212,52
Выш. поток	0,08	0,66	24,14
Дисбаланс, %	0,02	0,01	0,00

Таблица 3

Энергетические характеристики расчета с переходом

E , 10 МДж	$ct = 6$	$ct = 15$	$ct = 50$
E излучения	510,16	1169,39	1905,05
E вещества	550,04	985,47	1281,66
Вход, поток	1059,98	2155,59	3210,53
Выш. поток	0,20	1,31	24,18
Дисбаланс, %	0,04	0,02	0,01

Прокомментируем полученные результаты.

На все моменты времени температуры как вещества, так и излучения во всех сериях расчетов отлично согласуются друг с другом. Небольшие отличия, наблюдаемые в температурах во внешней оптически прозрачной области на первый и последний моменты времени, находятся в пределах расчетной погрешности, т. к. суммарная энергия этой области к моменту окончания расчета составляет всего 2,8 % от энергетики всей системы. В первой оптически

прозрачной области и второй области температуры вещества и излучения во всех расчетах идеально совпали.

Анализируя энергетические характеристики расчетов, мы видим подобную же картину. В каждом из трех расчетов дисбаланс по полной энергии¹ не превысил 0,04 % (максимальный – в расчете с переходом), причем везде прослеживается легко объяснимая тенденция к падению дисбаланса к моменту окончания расчетов. Отметим также тот весьма логичный факт, что энергии вещества и излучения в расчете с автоматическим переходом лежат между значениями соответствующих энергий 7- и 28-группового расчетов, тяготея к последнему из-за большего времени, посчитанному в 28-групповом приближении.

Задача о распространении тепла в шаровом слое

Рассмотрим задачу на определение поля температур внутри однородного шарового слоя ($0,5 \leq r \leq 1,0$ см) в результате прохождения излучения. На внутренней поверхности ($r = 0,5$) задано граничное условие $T^4 = T_0^4 [1 + \cos\theta]$. На вертикальной оси ($\theta = \pi/2$) задавалось граничное условие $T^4 = T_0^4 [a^*(1/r - b)]$, где θ – угол между осью oz и вектором, соединяющим центр с точкой внутренней поверхности, r – радиус рассматриваемой точки. На внешней поверхности ($r = 1$) задано условие свободной поверхности. Пробег излучения в расчете задавался одинаковым для всех энергий фотонов и равен величине $l = 0,15$ см (оптически прозрачная система).

Задача эта, имеющая аналитическое решение, была ранее численно решена в диффузионном 48-групповом приближении. Авторы модифицировали эту задачу в своих интересах, настроив над шаровым слоем дополнительную протяженную оптически прозрачную область ($1,0 \leq r \leq 10,0$ см) и задав T_0 в граничном условии равным 5 кэВ (в первоисточнике $T_0 = 1$).

Пространственная сетка состояла из 50-ти равномерных интервалов по радиусу для внешней области и 40 равномерных интервалов для шарового слоя. По пространственному углу задавалось 40 равномерных интервалов. Расчеты проводились на угловой квадратуре ES_{16} на различном числе энергетических групп: 53 и 33. Разбиение энергии фотонов по спектру задавалось следующим образом.

53 группы: 0.0-0.3-0.6-1.0-1.5-2.0-2.5-3.0-3.5-4.0-4.5-5.0-5.5-6.0-6.5-7.0-8.0-9.0-10.0-11.0-12.0-13.0-14.0-15.0-16.0-17.0-18.0-19.0-20.0-21.0-22.0-23.0-24.0-25.0-26.0-27.0-28.0-29.0-30-32-34-36-38-40-44-48-52-56-60-70-80-100-150-200.

¹ Дисбаланс по полной энергии рассчитывается как отношение вошедшего полного потока к сумме энергий излучения и вещества системы и вышедшего потока.

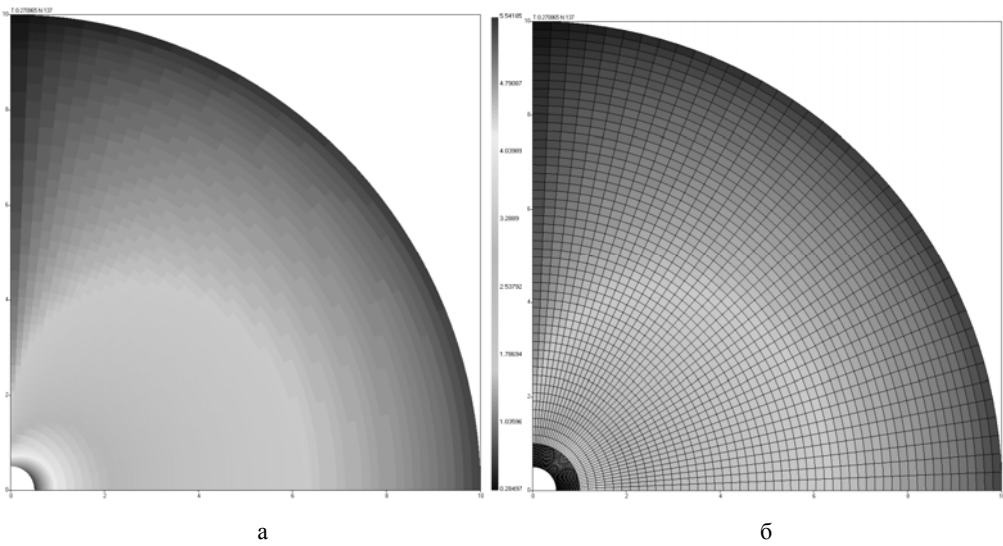


Рис. 5. Температура вещества в системе на момент перехода: а – без наложения пространственной сетки, б – с наложением пространственной сетки

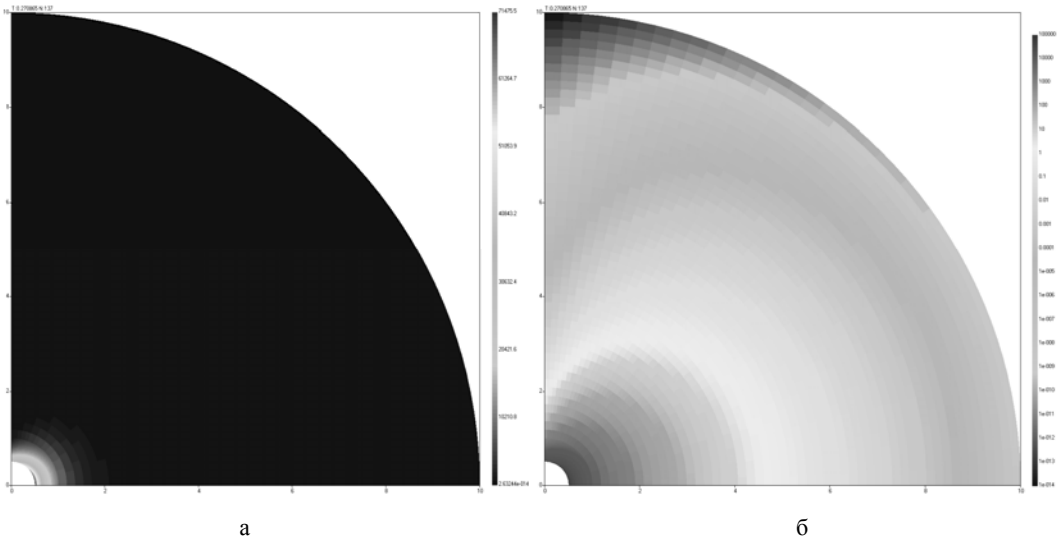


Рис. 6. Плотность излучения в 39-й энергетической группе в системе на момент перехода: а – с энергией больше 30 кэВ, что соответствует сверхжесткому РИ; б – в логарифмическом масштабе

33 групп: 0.0-0.3-0.6-1.0-1.5-2.0-2.5-3.0-3.5-4.0-4.5-5.0-5.5-6.0-6.5-8.0-10.0-12.0-14.0-16.0-18.0-20.0-22.0-24.0-26.0-28.0-30-34-38-44-52-60-100-200.

Как и выше, все расчеты проводились с переменным шагом по времени с использованием КМ-метода ускорения сходимости итераций.

Для осуществления перехода с 53-группового разбиения к 33-групповому в процессе счета использовался критерий малого изменения² дифференциальной индикатрисы РИ, накапливаемой для диапазона от 30 кэВ (39-я группа) на линии вблизи внеш-

ней границы системы (88-я строка). Переход произошел на момент времени $0,27 \cdot 10^{-7}$ сек.

На рис. 5 приведена температура вещества в системе на момент перехода без наложения и с наложением пространственной сетки.

На рис. 6 показана плотность излучения в 39-й энергетической группе на момент перехода.

На рис. 7 приведен спектральный поток излучения, выходящего из системы, для трех расчетов: 53-группового, 33-группового и расчета с переходом на момент окончания расчетов ($2 \cdot 10^{-7}$ сек).

Из рис. 7 видно совпадение потоков для проведенных расчетов.

На рис. 8 приведена интегральная по времени и спектру индикатриса рентгеновского излучения для всех расчетов, выданная на момент времени, наступающий сразу после автоматического перехода.

² Критерий малого изменения: на текущем шаге по времени значение индикатрисы, проинтегрированной по угловым направлениям, отличается от значения на предыдущем шаге меньше, чем $EPS_SPECTR = 0,01$.

Заключение

В отчете описана технология автоматической смены границ энергетических интервалов в процессе счета без его прерывания. Приведены примеры использования технологии, изменения, внесенные в методику для ее реализации. Представлены результаты первых исследований применения автомата перехода.

Предложены два критерия инициирования перехода с одного числа энергетических групп на другое:

- по возникновению энергии излучения в одной из счетных областей;

- по прекращению изменения дифференциальной индикатрисы для одной из групп жесткой части спектра через одну из внешних линий наружной оболочки системы.

Полученные результаты (температуры вещества и излучения, балансные энергетические величины, потоки выходящего излучения) говорят о работоспособности обоих примененных критериев.

По желанию заказчиков расчетов легко могут быть запрограммированы и опробованы любые другие предложенные критерии.

В дальнейшем предполагается дополнить созданную технологию возможностью смены в процессе счета числа угловых направлений.

Ожидается, что созданная технология в случае ее грамотного применения (подбора критериев перехода) поможет существенно сократить календарные сроки проведения расчетов распространения излучения в многогрупповом приближении.

Литература

1. Алексеев А. В., Беляков И. М., Бочков А. И., Евдокимов В. В., Ириничев Е. А., Морозов В. Ю., Москвин А. Н., Нуждин А.А., Пепеляев М. П., Резчиков В. Ю., Сучкова В. В., Шарифуллин Э. Ш., Шемякина Т. В., Шумилин В. А. Методика САТУРН-2005. Математические модели, алгоритмы и программы решения многомерных задач переноса частиц и энергии // Вопросы атомной науки и техники. Серия: Математическое моделирование физических процессов. 2013. Вып. 4. С. 17–30.

2. Fleck J.A., Cummings J. D. An implicit Monte-Carlo scheme for calculating time and frequency dependent nonlinear radiation transport // Journal of Comput. Phys. 1971. Vol. 8, N 3. P. 313–342.

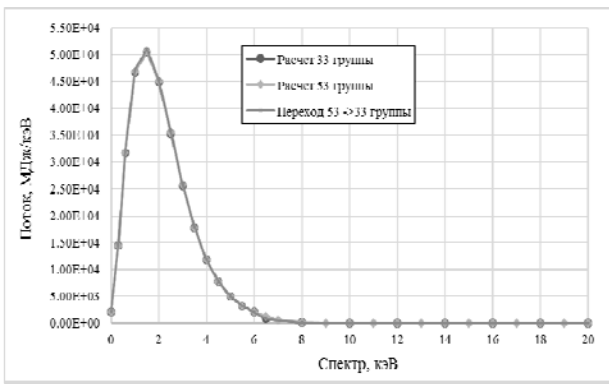


Рис. 7. Спектр потока излучения, выходящего через внешнюю границу области (обрезан до 20 кэВ)

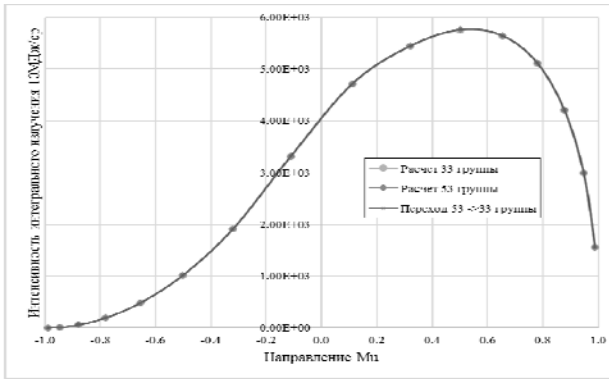


Рис. 8. Индикатриса РИ через 88-ю строку области

Из рис. 8 видно, что индикатрисы для всех расчетов идеально совпали. Это совпадение, по-видимому, объясняется тем, что система в момент перехода уже находилась практически в стационарном состоянии и рассогласования между плотностью излучения при переинтерполяции и температурой вещества не возникло.

Таким образом, по результатам двух расчетов можно сделать вывод о практической возможности применения обоих критериев автоматической смены числа энергетических групп. Также следует добавить, что на данных задачах выигрыш в общем времени решения от использования разного энергетического разбиения на различных этапах счета составил 1,4 раза по сравнению с расчетами на одном числе групп.