

УДК 53.072 : 53.681.3

## Компьютерный эксперимент в физике ресурсосберегающих технологий радиационной обработки материалов

С. В. Дюльдя

*Национальный научный центр "Харьковский физико-технический институт"  
(ННЦ ХФТИ) Национальной академии наук Украины, Украина*

Представлены и обсуждаются объектно-ориентированная архитектура и возможности созданных на базе библиотеки классов GEANT4 (ЦЕРН) программ *RaT* и *Виртуальный Облучатель*, реализуемые ими некоторые новые алгоритмы статистического моделирования транспорта излучений в гетерогенных средах, а также избранные результаты их применения к задачам радиационного материаловедения и технологий.

*Ключевые слова: радиационные технологии, электроны, гамма-кванты, нейтроны, компьютерное моделирование, метод Монте-Карло.*

Представлені й обговорюються об'єктно-орієнтована архітектура та можливості створених на базі бібліотеки класів GEANT4 (ЦЕРН) програм *RaT* і *Виртуальний Опромінювач*, впроваджені у ці коди деякі нові алгоритми статистичного моделювання транспорту випромінювань в гетерогенних середовищах, а також вибрані результати їх застосування до задач радіаційного матеріалознавства та технологій.

*Ключові слова: радіаційні технології, електрони, гама-кванти, нейтрони, комп'ютерне моделювання, метод Монте-Карло.*

Presented and discussed are the object-oriented architecture and capabilities of the CERN GEANT4 class library based codes *RaT* and *Virtual Irradiator*, certain new algorithms of Monte Carlo modeling of radiation transport in heterogeneous media that are implemented in these codes, and selected results of their application to R&D tasks of radiation material science and irradiation processes.

*Key words: irradiation processes, electrons, gamma-quanta, neutrons, computer simulation, Monte Carlo method.*

### 1. Актуальность и постановка задачи

Промышленные радиационные технологии ионного, нейтронного, гамма- и электронного облучения (см., например, [1]) широко применяются для создания материалов с новыми свойствами, ресурсосбережения и охраны окружающей среды. В целях оптимизации конструкции, повышения безопасности и производительности радиационно-технологических установок (РТУ) в мире неотъемлемым этапом и стандартной практикой [2] их проектирования и эксплуатации становится компьютерное моделирование взаимодействия ионизирующего излучения с веществом, зарекомендовавшее себя ранее ценным инструментом физики высоких энергий, ядерно-физических исследований и прогнозирования радиационной стойкости реакторных материалов.

Многообразие ветвящихся процессов радиационного каскада в материале и их чувствительность к условиям облучения делает задачу количественного прогнозирования радиационных эффектов нетривиальной даже в том случае, когда физические механизмы элементарных актов взаимодействия вполне известны. Ныне доступны надежные оцененные данные по сечениям и вторичным продуктам электромагнитных и ядерных процессов, с которыми

оперируют радиационные технологии. Однако отклик материала на облучение может существенно зависеть от сложной и варьируемой геометрии РТУ, гетерогенности структуры, химического и изотопного состава облучаемых материалов, а также от деталей технологического режима работы источника излучения и установки. Именно эти факторы представляют ключевой интерес для конечного пользователя, проектирующего или оптимизирующего РТУ или технологию облучения. Их детерминистское — аналитическое или численное — описание в рамках теории переноса излучения ограничено задачами с высокой симметрией и с другими упрощающими физику процессов и конструкцию системы предположениями. С ростом её сложности требуемая степень детальности характеристики системы (вкладываемая нами в определение компьютерного эксперимента, призванного количественно описать эксперимент натуральный) достижима лишь путем применения имитационного моделирования методом статистических испытаний (методом Монте-Карло — МК).

Настоящая работа посвящена описанию методологии и результатов новых разработок ННЦ ХФТИ по развитию программного обеспечения (ПО) МК-моделирования для решения актуальных проблем физики ресурсосберегающих радиационных технологий и радиационного материаловедения. Конкретная задача разработчика заключалась в создании отечественного многоцелевого и расширяемого кода расчетной поддержки фундаментальных и прикладных исследований по физической и реакторной дозиметрии, радиационному материаловедению и технологиям путем имитационного МК-моделирования функционирования облучательных стендов и РТУ.

## 2. Методология разработок

Сформулированные исходные требования к коду включали в себя:

- (i) апробированность используемых физических моделей и данных;
- (ii) универсальность (как гибкость постановки задач моделирования);
- (iii) легкость сопровождения и расширения функциональности кода;
- (iv) наличие интерфейса конечного пользователя-физика или инженера;
- (v) автономность как независимость от наличия у пользователя средств разработки ПО и опыта прикладного программирования;
- (vi) кросс-платформную переносимость и лицензионную чистоту.

Решение этой задачи требовало адекватного выбора платформы разработки.

Преобладавшая в прошлом практика создания кода “с чистого листа” в данном случае сталкивается с проблемами исключительной сложности и разнообразия моделируемых систем, что влечет за собой неприемлемые для локальных групп трудозатраты на разработку, тестирование и верификацию всех программных блоков, а в перспективе — на расширение функциональности и поддержание при этом целостности и надежности усложняющегося кода.

Подход прямого использования применяемых в критически важных приложениях атомной энергетики или ядерной медицины и поддерживаемых ведущими ядерными центрами мира интегрированных пакетов (*MCNP(X)*, *TART*, *MCBEND*, *MCU*, *SCALE*, *FLUKA*, *EGSnrc* и др.) сводил задачу к разработке интерфейса. Однако он сталкивается с проблемой сложности расширения их функциональности при решении нестандартных исследовательских задач,

вытекающей из декларируемых в лицензионных соглашениях ограничений на модификацию исходного кода, коммерческого статуса и ограниченности распространения многих из них, их закрытой и подчас архаичной архитектуры.

Выбранный нами компромиссный подход оказался осуществимым на основе свободно распространяемого международной коллаборацией под эгидой ЦЕРН (<http://geant4.cern.ch>) ПО нового поколения — библиотеки классов C++ и банков атомных и ядерных данных GEANT4 *OO Toolkit* [3]. Её разработка, с одной стороны, строго следует современным принципам объектно-ориентированного программирования (ООП) больших систем и, с другой стороны, отвечает концепции открытого ПО и стимулирует разработку приложений, тестирование и совершенствование кода открытым сообществом пользователей GEANT4.

На этапе проектирования разработчиками GEANT4 впервые создана объектная модель (ОМ) МК-моделирования транспорта излучений различных видов в трехмерных (3D) гетерогенных геометриях. Подход ООП позволил, во-первых, реализовать защищенный код свойств и поведения сущностей ОО-модели, использование открытых интерфейсов которого абстрагирует пользователя от деталей его реализации и упрощает разработку надежных приложений. Во-вторых, в рамках ОМ GEANT4 геометрия среды распространения излучения, алгоритмы построения траекторий частиц радиационного каскада и физика элементарных актов взаимодействия выступают как независимые сущности. Так, физика инкапсулируется абстрактным классом физического процесса взаимодействия, поставляющим сечение его протекания в материале и конечные состояния продуктов. Наследующие класс реализации применимы к частицам определенного типа и, в зависимости от их энергии, используют различные теоретические, параметризованные и управляемые оцененными данными физические модели. GEANT4 содержит расширяемый набор таких моделей, в основном совместимый по алгоритмам и данным с используемыми в упомянутых выше коммерческих МК-пакетах. Адекватную приложению физику позволяют выбрать predetermined в GEANT4 классы физических списков, дополняемых при необходимости оригинальными физическими моделями пользователя. Очевидно, что такая гибкость постановки задач недостижима при процедурном подходе, где подобные модификации кода чреваты ошибками и полной потерей функциональности.

### 3. МК-код *RaT*

Выбор GEANT4 в качестве платформы разработки позволил в короткие сроки создать приложения, удовлетворяющие указанным в разделе 2 требованиям.

Разработанный нами МК-код *RaT* [4] является исполняемым приложением, написанным на C++ в строгом соответствии с принятыми в GEANT4 соглашениями. Он предназначен для широкого круга дозиметрических расчетов с последующим статистическим оцениванием физических и инженерных параметров отклика облучаемых материалов. *RaT* согласованно моделирует первичные (плотности потока — флаксы  $\Phi$  частиц) и вторичные эффекты облучения материалов (энерговыведение  $E_{dep}$ , накопление поглощенной дозы  $D$ , радиационное повреждение в атомных смещениях на атом — с.н.а) при

совместном транспорте (рассеянии, торможении, ядерных реакциях) лептонов, ( $e^\pm$ ), фотонов ( $\gamma$ ) и адронов ( $p, n, d, t, a, {}^3\text{He}$ , ионы...) в гетерогенных геометриях.

Текущая версия 3.1 кода *RaT* основана на версии GEANT4.9.3. *RaT* не вторгается в исходный код библиотек GEANT4, обеспечивая тем самым его защиту от внесения ошибок. *RaT* расширяет функциональность GEANT4 путем ОО-наследования базовых классов GEANT4 в рамках собственной ОМ, ориентированной на: (i) интерфейс формирования задания на моделирование; (ii) реализацию новых физических процессов и моделей; (iii) реакцию на predeterminedенные в GEANT4 события для МК-подсчета функционалов транспорта частиц, и (iv) обработку и интерфейс вывода результатов моделирования. Взаимосвязь ОМ GEANT4 и *RaT* проиллюстрирована на Рис. 1.

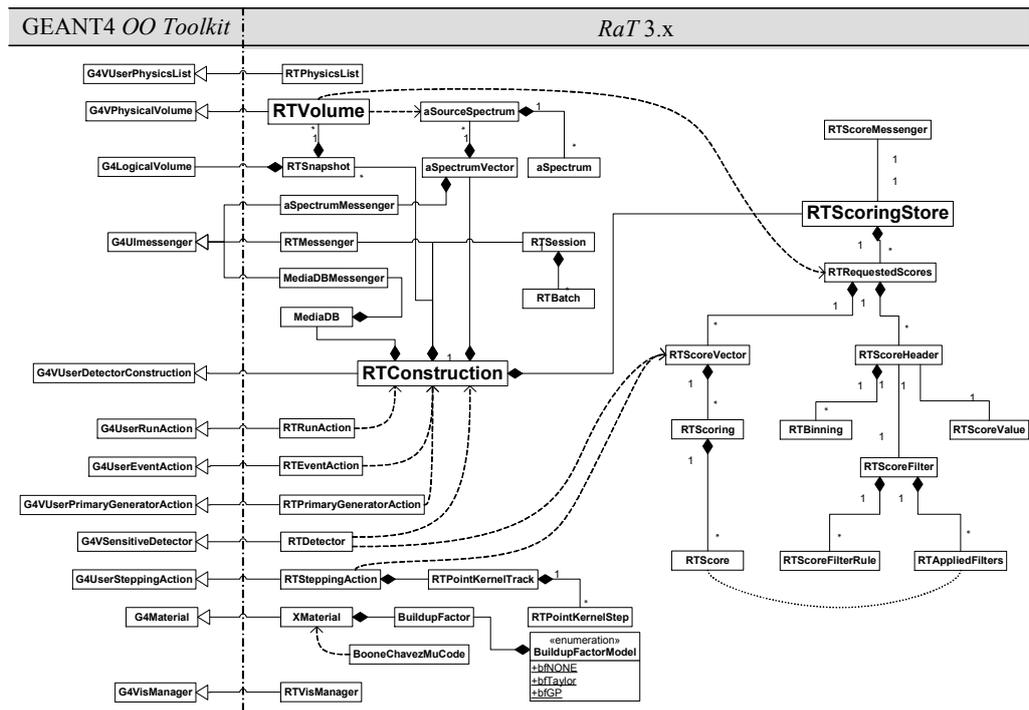


Рис. 1. UML-диаграмма C++-классов основных подсистем кода *RaT*.

Физическая модель конкретной задачи моделирования специфицируется файлом, написанном на директивном языке управления заданиями *RaT* и в начале сеанса моделирования транслируемом во внутреннее ОО-представление GEANT4, тем самым избавляя пользователя от компиляции C++-приложения.

Конструкцию РТУ задаёт объект типа *RTConstruction*, представляющий один или несколько миров моделирования. Геометрии *RaT* строго иерархичны и состоят из объектов *RTVolume* — именованных вложенных 3D-примитивов Constructive Solid Geometry (CSG) и их булевых комбинаций. Упорядоченные геометрии создаются путем линейных, угловых и радиальных репликаций, генерации воксельных решеток и произвольного клонирования объектов.

Материалы объектов 3D-миров *RaT* — это наследующие базовый класс GEANT4 `G4Material` расширенные проблемно-ориентированными свойствами (например, используемыми в дозиметрии модельными функциями факторов накопления — `BuildupFactor`) объекты `XMaterial` — бесструктурные композиции элементов и/или изотопов, характеризующиеся плотностью и температурой. *RaT* содержит расширяемую базу из более чем 1000 материалов.

Источники первичного излучения характеризуются множеством типов испускаемых частиц, их энергетическими спектрами (`aSourceSpectrum`), угловыми и пространственными распределениями, воспроизводящими произвольное фазовое пространство источника. В частности, на базе процесса GEANT4 `G4RadioactiveDecay` возможно моделирование радионуклидных  $\gamma$ -источников, а с помощью банка оцененных нейтронных данных `G4NDL3.13` — источников реакторных нейтронов. Существенно, что в качестве источников излучения могут быть выбраны произвольные объекты 3D-модели задачи.

Детекторы (`RTDetector`) радиационных эффектов также могут быть произвольные объекты 3D-геометрии — как «реальные» объекты конструкции, так и специально введенные в геометрию «фиктивные» чувствительные объемы. В детекторах *RaT* подсчитывает функционалы динамических переменных частиц радиационного каскада, включая их энергетические спектры и угловые распределения. 3D-карты пространственных распределений обеспечиваются сетками детекторов, налагаемыми на реальную геометрию задачи.

Развитая ОО-подсистема онлайн-анализа (*scoring*) и представления результатов МК-моделирования (см. Рис. 1), реализующая SQL-подобный язык запросов и динамическое формирование объектов подсчета физических величин, является ключевым расширением функциональности *RaT* в сравнении с базовой функциональностью библиотек GEANT4, используемых в физике высоких энергий лишь в режиме генератора событий (*event generator*).

Функция подсистемы анализа состоит в расчете статистических средних физических величин в детекторах и оценке статистических погрешностей метода Монте-Карло для этих средних. Её представляет главный объект-синглтон `RTScoringStore`, вмещающий коллекцию `RTRequestedScores` объектов подсчетов, заказанных для объемов геометрии, которые объявлены детекторами. Набор анализируемых физических величин и условий их подсчета инкапсулируется включенной в неё коллекцией объектов `RTScoreHeader`, а коллекция `RTScoreVector` накапливает результаты подсчета во всех реплицированных копиях детектора с данным именем. Входящий в объект `RTScoreHeader` объект `RTScoreValue` вычисляет физическую величину на уровне шага моделирования по данным, доступным от ядра GEANT4. Для вывода он также задает её нормировку в заданных пользователем единицах измерения. Объект `RTBinning` определяет параметры сетки при подсчетах плотностей распределения, например, по энергиям частиц, полярному и азимутальному углам 3-импульса, а также по энергии первичной частицы, инициировавшей текущую историю (*event*) радиационного каскада. В *RaT* реализованы линейные, логарифмические и заданные пользователем сетки, а коллекция объектов `RTBinning` позволяет подсчитывать распределения произвольной размерности.

Объект `RTScoreFilter` задает условия подсчета и содержит коллекцию объектов-правил `RTScoreFilterRule`, объединенных по умолчанию логическим оператором “AND”. Каждое правило соответствует условию на один из predetermined параметров (например, тип или имя частицы, номер шага, определивший текущий шаг процесс взаимодействия, пересечение частицей границы объекта геометрии и т.д.). Аппарат правил легко расширяется путем написания двух коротких методов этого класса. В его объектах также содержатся разрешенные фактические параметры условия, которые могут интерфейсно задаваться списками или интервалами и интерпретируются как соединенные оператором “OR”. По аналогии с языком SQL, правила могут быть групповыми (GROUP) или суммарными (SUM). Первые группируют значения физической величины по значениям всех разрешенных фактических параметров, а суммарные правила лишь ограничивают условия подсчета заданным множеством значений или диапазонов фактических параметров.

Механизм правил позволяет организовать сложные динамические подсчеты. Так, для расчетов изотопного состава трансмутируемой в ядерных реакциях или в ходе радиоактивного распада мишени достаточно заказать подсчет количества событий в детекторе с нижним ограничением по массе продукта реакции и группировкой по его имени, в GEANT4 специфицирующем изотоп. Тем самым при появлении в радиационном каскаде ядер с новым именем для подсчета выхода трансмутации будет заведен новый объект сохранения данных подсчета. Содержащаяся в `RTScoreFilter` коллекция `RTAppliedFilters` хранит карту осуществленных ассоциаций фактических параметров правил с данными, подсчитанными в детекторе. Это позволяет коду в каждом текущем событии эффективно принимать или отвергать решение на выделение памяти.

Объект `RTScore` является объектом нижнего уровня, содержащем текущий результат подсчета данной величины в данном детекторе при данных значениях условий (фильтров). Он также отвечает за выделение памяти и расчет статистической погрешности результата. Коллекция объектов `RTScore`, объект класса `RTScoring`, содержит их для разных комбинаций групповых условий.

Интерфейс пользователя подсистемы подсчетов реализуется классом `RTScoreMessenger`, интерпретирующим соответствующие предложения входного макроязыка формирования заданий *RaT*. На Рис. 2 приведен конкретный пример фрагмента такого задания для задачи расчетов глубинных дозовых зависимостей при электронном облучении материала.

Первые два предложения определяют 3D-объект `product` в виде цилиндра радиуса  $R$  (предопределенная в начале задания переменная) из содержащегося в базе данных *RaT* материала `EFF_SYRINGE` стандартной плотности, а также его размеры и позицию в мире моделирования (`world`). Третье предложение реплицирует элементарный объект в направлении оси  $z$ , что обеспечит построение глубинных зависимостей. Клаузы 04–06 определяют подсчет полной поглощенной дозы  $D$  облучения как выделенной энергии  $E_{\text{dep}}$ , нормированной на массу объекта, а также на площадь основания цилиндра, т.к. моделирование предполагается вести в геометрии широкого пучка электронов. В строке 05 заказан вывод абсолютной (а не относительной — в %) погрешности результата.

Аналогічно, клаузы 07–09 специфікують підрахунок щільності потоку енергії випромінювання (`energy_flux`) в системі. Його потрібно отримати окремо для  $\gamma$ -квантів, електронів і позитронів, тому введено правило групування підрахунку по цим типам частинок. Таким чином, визначені два іменовані підрахунки: DOSE і FLUX. Далі в рядку 10 об'єкт `product` оголошено детектором, з яким в рядках (11–12) асоційовані ці підрахунки.

```
01: /construction/add_cylinder product world EFF_SYRINGE ↗
           ↘0 g/cm3 0 {R} 0.25 cm
02: /construction/set_position product 0.0 0.0 0.125 cm
03: /construction/replicate product 462 0.0 0.0 0.25 cm
04: /score/define DOSE edep kGy*cm2/s
05: /score/normalize_by DOSE mass 1.0/pi/{R}/{R} 1/cm2
06: /score/set_error_type DOSE abs
07: /score/define FLUX energy_flux MeV/s ↗
           ↘GROUP(particle=gamma,e-,e+)
08: /score/normalize_by FLUX volume 1.0/pi/{R}/{R} 1/cm2
09: /score/set_error_type FLUX abs
10: /construction/set_detector product -1
11: /score/set product DOSE
12: /score/set product FLUX
```

Рис. 2. Фрагмент завдання на входному макроязичі *RaT* (см. пояснення в тексті).

Як видно з Рис. 2, директивний макроязык управління завданнями *RaT* прозорно реалізує типову парадигму постановки і аналізу результатів задач МК-моделювання, а ОО-підсистема підрахунків дозволяє користувачеві уникнути низкоуровневого програмування конкретних задач і повністю зосередитися на фізичних і технологічних аспектах проблеми.

Код *RaT* розробляється під Win32 в середі MS Visual Studio Express Edition. Він представляє собою консольне застосування з файловим введенням-виводом і, як і GEANT4, портирує на ОС Linux під gcc. Т.к. МК-моделювання тривіально распараллеливается, такою мінімалізм інтерфейсу забезпечує розподілені вирахування в гетерогенній локальній мережі. Для цього реалізовані засоби серіалізації і десеріалізації сеансів моделювання з об'єднанням результатів і оцінкою їх ітогової статистичної погрешності.

#### 4. Оригінальні методи і алгоритми коду *RaT 3.1* і їх застосування

Для коду *RaT* нами розроблені ряд специфічних методів і алгоритмів, розвиваючих функціональність коду в порівнянні з базовими можливостями GEANT4 і інших інтегрованих пакетів МК-моделювання. Вони повністю підтримуються інтерфейсом мови управління завданнями *RaT*, а їх ОО-реалізація абстрагує їх від деталей конкретних геометрій моделювання.

Для виконання експресних дозиметричних розрахунків поряд з детальним МК-моделюванням радіаційного каскаду код *RaT* здатний виконувати моделювання методом суперпозиції точкових джерел (*point kernel*). Це легко досягається в рамках ОМ *RaT* шляхом відключення всіх фізичних

процессов, кроме процесса *G4Transportation*, отвечающего за трассировку прямолинейной траектории частицы с гарантированной обработкой событий пересечения границ 3D-объемов. Дозиметрические величины — плотность потока и керма фотонного и нейтронного облучения — рассчитывается в детекторах объектами *RTPointKernelStep* (см. Рис. 1) на каждом шаге моделирования по базе данных коэффициентов ослабления  $\mu$  и поглощения энергии  $\mu_{en}$  в материалах (объект *BooneChavezMuCode*) с учетом таблиц факторов накопления (объект *BuildupFactor*). При этом описание 3D-геометрии задачи унифицировано, и такой расчет верифицируем сравнением с результатами более точного (но и более затратного) МК-моделирования.

Для задач радиационного материаловедения нами реализованы основанные на стандартах реакторной дозиметрии методы оценки скоростей радиационного повреждения материалов ( $e^-$ ,  $\gamma$ ) и нейтронным облучением. Они применены для оптимизации условий имитационных экспериментов по изучению коррозионной стойкости материалов жидкосольевых реакторов (ЖСР) IV поколения под электронным облучением [5] и для анализа соответствия этих условий радиационному нагружению материала в активной зоне ЖСР [6].

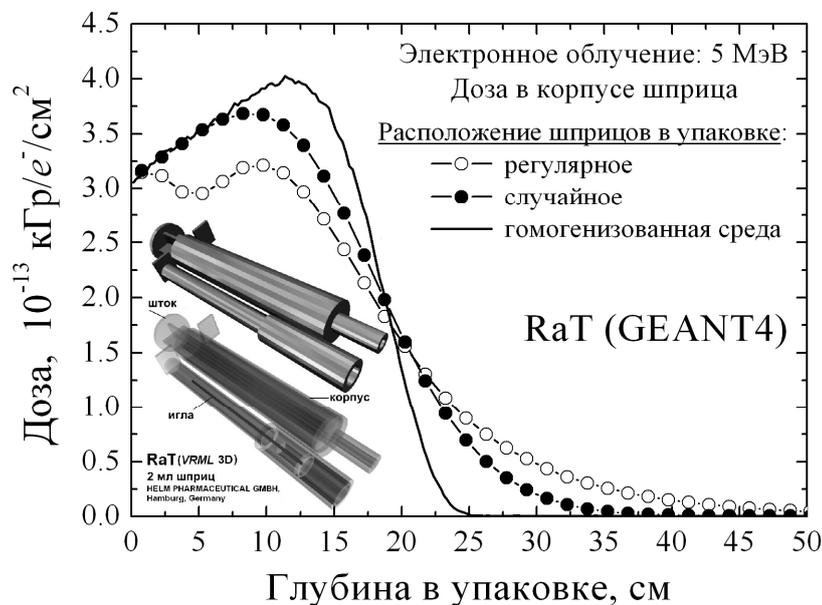


Рис. 3. Влияние гетерогенности и случайных факторов расположения одноразовых шприцов под электронным облучением на глубинные зависимости поглощенной дозы.

С помощью кода *RaT* возможно решение «дважды стохастических» задач МК-моделирования транспорта излучения в случайно-гетерогенных средах. Это достигается с помощью реализации «двойного» метода Монте-Карло, в котором внутренняя структура объявленных стохастическими частей иерархической 3D-геометрии случайно разыгрывается по заданному закону при розыгрыше каждой истории транспорта первичной частицы.

В коде реализованы два алгоритма двойного МК. Первый использует аппарат параметризованных 3D-объемов GEANT4, материал которых может быть изменен динамически в процессе исполнения. Он применялся нами для моделирования транспорта  $\gamma$ -квантов в случайных слоистых средах [7], а его вырожденный детерминистский вариант использован в версии *CT-RaT* кода, предназначенной для решения задач радиационной онкологии путем моделирования дозовых распределений в вокселизованных томографических фантомах.

Более общий алгоритм реализуется классом `RTRandomMediaManager` случайных трансляций и вращений непересекающихся 3D-объектов внутри материнского объема иерархической геометрии. С его помощью двойные МК-методы позволили выявить влияние случайной гетерогенности объектов облучения (одноразовых шприцов в упаковках) на производительность электрофизических процессов стерилизации ([8], см. Рис. 3), изучить эффективность гетерогенных радиационных защит и дисперсных поглотителей нейтронов. Они также применимы для моделирования эффектов «двойной гетерогенности» топлив в расчетах реакторов типа HTGR и RBMR.

Наряду с общепринятыми методами МК-моделирования в фиксированных 3D-геометриях большое внимание в алгоритмическом обеспечении кода *RaT* уделено методам решения нестационарных (4D) и нелинейных задач изучения временной эволюции радиационного каскада на разных масштабах времени  $t$  и моделирования систем с движущимися или изменяющими свои свойства под облучением источниками и/или детекторами излучения. Так, временную динамику подкритических нейтроно-мультиплицирующих систем, важную для проектирования источников нейтронов на основе управляемых импульсными ускорителями электронов подкритических сборок, удастся проанализировать (см. [9]) уже с помощью базовых алгоритмов GEANT4. Однако *RaT* расширяет возможности GEANT4 с помощью оригинальной реализации алгоритмов 4D-транспорта во множественных 3D-геометриях. Они, осуществляют параллельное моделирование радиационных каскадов в наборе 3D-миров моделирования, характеризуемых статистическими весами — вероятностями реализации. Миры могут описывать временную эволюцию динамической системы или отвечать иным физически значимым вариациям геометрий и/или материалов. В OM *RaT* (см. Рис. 1) миры представлены «кадрами» (`RTSnapshot`), а синглетон `RTConstruction` конструкции моделируемой системы оперирует с вектором кадров, число элементов которого ограничено лишь объемом доступной памяти ЭВМ. Важно, что миры могут содержать разные или одни и те же именованные детекторы, причем в последнем случае подсистема подсчетов обеспечивает автоматическое усреднение их показаний по вариациям миров.

Особый интерес такой подход представляет для моделирования РТУ с непрерывным циклом облучения продуктов, которые перемещаются по траекториям  $r(t)$  в неоднородном радиационном поле. За время  $T$  цикла облучения полная доза  $D(R, T)$  в локальной точке  $R$  объекта, очевидно, определяется интегрированием мощности дозы  $\dot{D}$  по времени  $t$ , что эквивалентно интегрированию по траектории объекта  $r(t)$  или по длине пути  $s$ :

$$D(\mathbf{R}, T) = \int_0^T \dot{D}[\mathbf{R} + \mathbf{r}(t)] dt = \oint_C \dot{D}(\mathbf{R} + \mathbf{r}) \frac{\mathbf{v}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r}}{|\mathbf{v}(\mathbf{r})|^2} = \int_0^S \dot{D}[\mathbf{R} + \mathbf{r}(s)] \frac{ds}{v(s)}, \quad (1)$$

где  $v$  — скорость перемещения объекта. Метод *RaT* использует тот факт, что интеграл по времени может быть заменен интегралом по пространству состояний системы. Заданную режимом работы РТУ траекторию  $r(t)$  *RaT* дискретизует множеством  $N_\Psi$  кадров  $\{\Psi_k\}$ ,  $k = 1, \dots, N_\Psi$ . Тогда оценка (1) может быть выполнена с помощью простейшей квадратурной формулы:

$$D(\mathbf{R}, T) \cong \sum_{k=1}^{N_\Psi} w_k \cdot \dot{D}(\mathbf{R} + \mathbf{r}_k) \cdot \Delta t_k, \quad \left( w_k = \frac{s_k}{v_k \cdot \Delta t_k} \approx \frac{|\Delta \mathbf{r}_k|}{|\mathbf{v}_k| \cdot \Delta t_k} \right), \quad (2)$$

и задача сводится к расчету весов  $w_k$  по закону движения и генерации кадров.

Их число  $N_\Psi$  либо предопределено режимом работы РТУ, либо должно подбираться исходя из требуемой точности дискретизации. После этого дозиметрический расчет может быть выполнен в одном сеансе МК-моделирования.

Задача генерации кадров проблемно-зависима и может быть как тривиальной (например, для прямолинейного движения объектов на конвейере), так и весьма не тривиальной (например, в многопроходных  $\gamma$ -радиационных облучателях). В последнем случае её естественно возложить на проблемно-ориентированный препроцессорный код, генерирующий текстовый файл задания для кода *RaT*.

Эта стратегия отвечает использованию кода *RaT* в качестве вычислительного модуля прикладных пакетов, обладающих развитым интерфейсом пользователя. Она была реализована в пакете *Виртуальный Облучатель (Virtual Irradiator 1.0)* разработанном нами на языке VB.Net для поддержки задач проектирования перспективных РТУ с  $\gamma$ -источниками на базе радионуклидов европия.

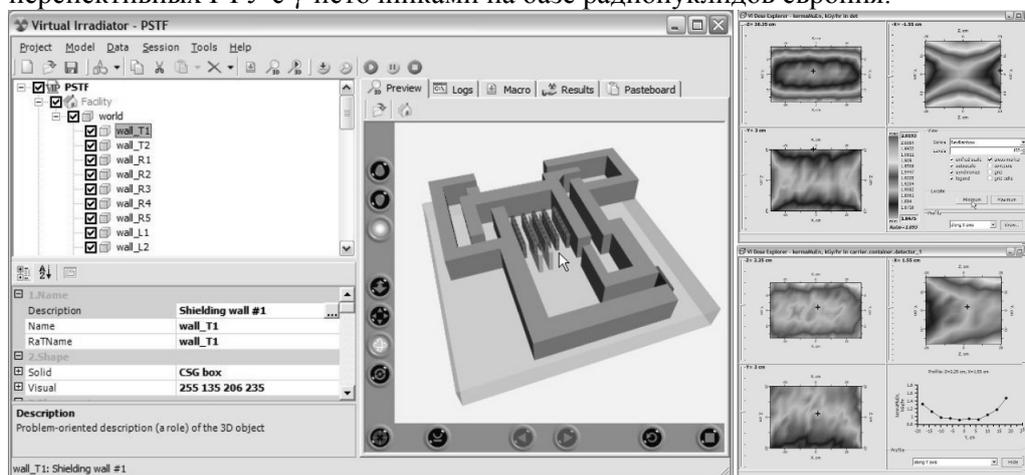


Рис.4. Пакет *Virtual Irradiator 1.0* в задаче картирования дозовых полей в продуктах, облучаемых в гамма-радиационной установке с непрерывным циклом облучения.

Графический интерфейс пакета (см. Рис. 4) обеспечивает интерактивную генерацию заданий и сопровождение сеансов моделирования в локальной сети, VRML-отладку 3D-моделей и 4D-представлений технологического цикла облучения, а также интерактивный анализ статических и динамических карт дозовых полей в объектах облучения и расчеты стандартных параметров контроля качества радиационной технологии — неоднородности дозового поля, производительности РТУ и т. п. Рисунок 4 иллюстрирует его применение в задаче оптимизации камеры облучателя пилотной европейской  $\gamma$ -радиационной установки с непрерывным циклом облучения. Для этого использованы 4D-методы моделирования, позволившие предсказывать и изучать неоднородность и симметрию дозовых полей как в штатном 4-проходном режиме облучения, так и при различных переходных и нештатных сценариях функционирования РТУ.

### 5. Выводы

Разработанные на основе открытой объектно-ориентированной платформы библиотек классов GEANT4 *OO Toolkit* новый многоцелевой Монте-Карло-код *RaT* и пакет *Виртуальный Облучатель* предоставляют возможности постановки и решения широкого круга исследовательских задач моделирования физических процессов взаимодействия излучений с веществом, детального имитационного моделирования конструкций и режимов функционирования облучательных стенов и РТУ, а также применения методологии компьютерного эксперимента при проектировании и оптимизации источников и технологий облучения.

В перспективе эти программы могут рассматриваться в качестве прототипа национальных кодов расчетной поддержки исследований и разработок ядерных и радиационных ресурсосберегающих технологий в Украине.

### ЛИТЕРАТУРА

1. Базалеев Н.И., Клепиков В.Ф., Литвиненко В.В. Электрофизические радиационные технологии, – Харьков: Акта, 1998. – 206 с.
2. ASTM E2232-02. Standard Guide for Selection and Use of Mathematical Methods for Calculating of Absorbed Dose in Radiation Processing Applications, – ASTM Int.: 100 Barr Harbor Drive, PO Box C700 West Conshohocken, PA 19428-2959, USA, 2002. – 16 p.
3. Agostinelli S., Allison J., Amako K. et al. Geant4 — a Simulation Toolkit // Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. Sec. A. – 2003. – v. 22, No. 3. – P. 250–303.
4. Дюльдя С.В., Братченко М.И., Скоробогатов М.А. Новые методы и программные средства статистического моделирования в физике радиационных явлений и технологий. – Труды XVII Межд. конф. по физ. радиац. явлений и радиац. материаловедению. Алушта, Крым, 4-9 сентября 2006 г. – Харьков: ННЦ ХФТИ, 2006. – С. 30-31.
5. Bakai A.S., Bratchenko M.I., Dyuldy S.V. Electron Beams Transport and Energy Deposition in Heterogeneous Assemblies of the Hastelloy Samples Embedded into the Molten Fluorides Mix // Problems of Atomic Science and Technology. Special issue “Materials for molten salt reactors”. Guest eds. A.S. Bakai and F.A. Garner. – 2005. – No. 4. – P. 24-31.

6. Bakai A.S., Dyuldya S.V. Construction Materials for Molten Salt Reactor: Design and Tests under e-irradiation. – Book of Extended Synopses of International Conference on Fast Reactors and Related Fuel Cycles — Challenges and Opportunities (FR09), December 7–11, 2009, Kioto, Japan. – P. 417.
7. Братченко М.И., Дюльдя С.В. Эволюция потока и поглощение излучения в слоистых случайных средах: теория и компьютерное моделирование // Вопросы атомной науки и техники. Сер.: физика рад. повреждений и рад. материаловедение. – 2004. – №3(85). – С.10-18.
8. Dyuldya S.V., Bratchenko M.I. Effect of Heterogeneity of Subjects of Industrial Irradiation Processes on Spatial Distributions of Absorbed Doses upon Electron Beam, X-ray and Gamma Irradiation // Problems of Atomic Science and Technology. Ser.: Nuclear Physics Investigations. – 2007. – №5(48). – P. 81–90.
9. Bratchenko M.I., Dyuldya S.V., Gann V.V. Space-time Dynamics of Subcritical Systems Driven by Pulse Electron Accelerators. – Proc. of the 2nd Int. Conf. “Current Problems in Nuclear Physics and Atomic Energy” (NPAE-Kyiv2008), June 9-15, 2008, Kyiv, Ukraine. – Kyiv: KINR, 2009. – Part II. – P. 523-528.