

На правах рукописи

Багаев Кирилл Александрович



**МЕТОД 3D-МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОХОЖДЕНИЯ
ГАММА-КВАНТОВ И ЭЛЕКТРОНОВ ЧЕРЕЗ ВЕЩЕСТВО И
ЕГО ПРИМЕНЕНИЕ В ФИЗИЧЕСКИХ ЭКСПЕРИМЕНТАХ**

01.04.16 физика атомного ядра и элементарных частиц

Автореферат диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Санкт-Петербург – 2012

Работа выполнена в федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего профессионального образования «Санкт-Петербургский государственный политехнический университет» (ФГБОУ ВПО «СПбГПУ»).

Научный руководитель: кандидат физико-математических наук,
доцент
Козловский Станислав Станиславович

Официальные оппоненты: Лощаков Игорь Иванович,
доктор физико-математических наук,
профессор,
ФГБОУ ВПО «СПбГПУ», зав. каф. атомных и
тепловых энергетических установок

Серебряков Александр Сергеевич,
кандидат физико-математических наук,
ФГУП НПО "Радиовый институт им.
В.Г. Хлопина", начальник лаборатории

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное
учреждение Петербургский институт
ядерной физики им. Б.П.Константинова

Защита состоится 30 мая 2012 г. в 16 часов 00 минут
на заседании диссертационного совета Д 212.229.29 при ФГБОУ ВПО «Санкт-Петербургский государственный политехнический университет» по адресу: 195251, Санкт-Петербург, Политехническая ул. 29, II уч. корпус, ауд. 265.

С диссертацией можно ознакомиться в фундаментальной библиотеке
ФГБОУ ВПО «Санкт-Петербургский государственный политехнический университет».

Автореферат разослан __ апреля 2012 г.



Ученый секретарь
Диссертационного совета к.ф.-м.н., доц.

Ермакова Наталья Юрьевна

Актуальность темы работы

Изучение прохождения различных частиц через вещество является одной из важнейших задач физики атомного ядра и элементарных частиц. В настоящее время знания о процессах взаимодействия электронов и гамма-квантов с веществом достигли такого уровня, который позволяет без проведения дорогостоящих экспериментальных исследований получить все необходимые данные путём компьютерного моделирования транспорта частиц для решения как фундаментальных, так и прикладных задач.

Компьютерное моделирование транспорта частиц используется для количественного анализа в электронной спектроскопии поверхностей, позитронной спектроскопии, электронной микроскопии, электронно-зондовом микроанализе. Моделирование применяется при проектировании систем детектирования и калибровки детекторов, при выборе источников излучения для радиографического метода неразрушающего контроля. Применение компьютерного моделирования является наиболее точным методом оценки влияния излучения на организм человека. Даже хороший фантом априори является менее точным способом оценки дозы, так как в нём находится множество детекторов, которые оказывают влияние на поле излучения. Моделирование транспорта частиц позволяет вычислить величину активности вещества по экспериментальному спектру излучения, что является одним из самых точных способов вычисления активности.

В настоящее время существует несколько программных комплексов, которые с высокой точностью моделируют прохождение излучения через вещество в трёхмерной геометрии. Это программы «ETRAN», «PENELOPE», «ITS3», «EGS4», «EGSnrc», «MCNP», «GEANT4», результаты их работы находятся в хорошем согласии с экспериментом.

Однако вышеперечисленные программы обладают рядом недостатков:

1. Невозможность использования программ моделирования пользователями, не обладающими навыками физика, программиста и математика. Для использования этих программ необходимо отобрать необ-

ходимые библиотеки исходных данных для моделирования и скомпилировать их в расчётную программу.

2. Неудобство создания расчётной модели и её визуализации. Для задания геометрической модели эти программы обычно используют файл описания модели, содержащий уравнения и константы. Пользователь должен хорошо разбираться в аналитической геометрии, знать уравнения квадратичных поверхностей, геометрических преобразований, уметь записывать эти данные в файл специального формата. Практика показывает, что корректность задания геометрической модели в той же степени определяет точность результатов расчёта, что и адекватность эксперименту алгоритмов моделирования процессов взаимодействия.
3. Программы не используют все возможности современной компьютерной техники, которые заложены в модели многопоточного и многопроцессорного программирования.
4. Большинство программ используют предварительно подготовленные базы данных по взаимодействию излучения с веществом. Поэтому в случае уточнения и обновления этих баз необходимо проводить работу по переработке данных и внедрению их в программы.

Современные персональные компьютеры обладают ресурсами, достаточными для решения задач моделирования транспорта частиц. Однако вышеперечисленные недостатки сильно ограничивают число пользователей программ моделирования.

В связи с этим актуальным является разработка метода 3D-моделирования прохождения гамма-квантов и электронов через вещество и создание на его основе соответствующего современного комплекса, в котором были бы устранены недостатки, присутствующие в уже существующих комплексах.

Цель работы

Целью работы является создание метода 3D-моделирования прохождения гамма-квантов и электронов через вещество, который не уступает мировым аналогам, а в некоторых важных аспектах и превосходит их.

Этот метод должен удовлетворять следующим требованиям:

1. Метод должен быть максимально приближен к условиям проведения физических экспериментов и мог бы стать основой для создания программного комплекса 3D-моделирования транспорта частиц в веществе.
2. Комплекс должен:
 - 2.1. адекватно эксперименту описывать процессы взаимодействия гамма-квантов, электронов и позитронов с веществом в диапазоне энергий от 1 кэВ до 10 МэВ. Результаты моделирования должны совпадать с экспериментальными данными в пределах единиц процентов.
 - 2.2. обладать интерфейсом, позволяющим использовать его оператором с начальной компьютерной подготовкой и отсутствием специальных знаний в области математики. Должна быть максимально упрощена процедура создания трёхмерной модели эксперимента. Необходимо создать интерфейс просмотра и проверки корректности модели.
 - 2.3. эффективно использовать преимущества современной компьютерной техники.
 - 2.4. иметь единый механизм максимально простого обновления базы данных о взаимодействиях излучения с веществом и осуществляться по команде оператора без вмешательства разработчиков программы.
 - 2.5. иметь методически завершённый вид, позволяющий использовать его в качестве учебного пособия для студентов соответствующих специальностей.

Научная новизна диссертации заключается в том, что:

1. Впервые предложен метод прямого использования баз данных в формате ENDF (EEDL, EPDL97, EADL) для моделирования прохождения из-

лучения через вещество. Это позволяет любому пользователю обновлять физические базы данных по сечениям взаимодействия непосредственно загружая их из Интернета.

2. Впервые предложена методика вычисления масштабированного сечения тормозного излучения на основе современной базы данных EEDL для элементов с атомным номером от 1 до 92. Моделирование процесса тормозного излучения реализовано с использованием этих сечений.
3. Впервые реализован алгоритм расчёта каскада атомной релаксации, позволяющий проводить моделирование со степенью детализации, определяемой базой данных EADL и энергетическим порогом, который задаёт пользователь.
4. Впервые реализован алгоритм моделирования каскадного излучения радиоактивных источников (включая и характеристическое излучение атомов) со степенью детализации, определяемой современными базами данных по распаду радиоактивных изотопов.
5. Впервые реализован алгоритм моделирования объёмных радиоактивных источников сложной формы. При этом любой физический объект может быть представлен как объёмный источник излучения.
6. Впервые предложена расчётная модель “идеального” детектора. Это поверхность, которая может быть установлена как внутри, так и снаружи объекта. С помощью “идеального” детектора может быть измерен истинный поток излучения в любом объекте, так как такой детектор не оказывает влияния на поле излучения.
7. Впервые реализован механизм физического моделирования сложных систем детектирования излучений. Экспериментальная установка может содержать любое число детекторов, которые могут быть включены как на совпадение, так и на антисовпадение, с определённым энергетическим порогом регистрации излучения.

8. Впервые предложен метод преобразования расчётного энергетического спектра в функцию отклика реального детектора, с учётом его энергетического разрешения.

Практическая и научная ценность диссертации

Предложенный метод 3D-моделирования взаимодействия частиц с веществом и созданный на его основе программный комплекс представляют собой мощный инструмент, который позволяет:

1. Моделировать широкий круг физических экспериментов, использующих ионизирующее излучение.
2. На основе набора экспериментальных данных вычислять характеристики, которые невозможно напрямую измерить. К примеру, программный комплекс позволяет вычислять активность объектов, «мертвый» слой детекторов и т.п.
3. Вычислять ослабление потоков излучения и рассчитывать защиты от ионизирующего излучения.
4. Обучать пользователей основам взаимодействия частиц с веществом, излучения радионуклидов и детектирования частиц.

Основные положения, выносимые на защиту

1. Предложен метод 3D-моделирования прохождения гамма-квантов и электронов через вещество, на основании которого создан программный комплекс «МСС 3D» (*Monte Carlo Calculation 3D*) для компьютерного анализа и расчёта взаимодействия излучения с веществом, не уступающий, а по некоторым аспектам превосходящий мировые образцы.
2. Комплекс предоставляет набор инструментов для создания геометрической модели, расчёта транспорта частиц, излучения радионуклидов, детектирования излучений.

3. Комплекс с точностью порядка 1% описывает процессы взаимодействия гамма-квантов, электронов и позитронов с веществом в диапазоне энергий от 10 кэВ до 10 МэВ.
4. Реализованные в комплексе алгоритмы и интерфейсы делают его конкурентоспособным в сравнении с зарубежными аналогами, а по многим параметрам и предпочтительным по отношению к ним.

Вклад автора

Автор разработал и реализовал метод анализа сечений и спектров взаимодействия гамма-квантов, электронов и позитронов с веществом, на основании которого была создана математическая модель и построены расчётные алгоритмы. Были предложены эффективные математические решения поиска пересечений траекторий частиц с поверхностями различной формы, создан графический интерфейс программы «МСС 3D». Автор провёл моделирование экспериментов, результаты которых приведены в диссертации. Как соавтор работ принимал самое активное участие в подготовке публикаций по теме диссертации. В процессе работы над диссертацией соискатель участвовал во всероссийских и международных конференциях, где докладывал результаты своих исследований.

Апробация работы

Результаты работы были доложены на конференциях и семинарах:

- 1) Международная конференция «Стратегия безопасности использования атомной энергии», Санкт-Петербург Россия 25-29 сентября 2006. Доклад: «Программа для имитационного трёхмерного моделирования систем детектирования ионизирующего излучения на базе развитого графического интерфейса».
- 2) XIII ежегодный семинар «Спектрометрический анализ. Аппаратура и обработка данных на ПЭВМ», Обнинск, Россия 20-24 ноября 2006. Доклад: «Программа для имитационного трёхмерного моделирования систем де-

- тектирования ионизирующего излучения на базе развитого графического интерфейса». Содокладчики Козловский С.С. и Новиков И.Э.
- 3) «XXXV Неделя науки СПбГПУ», 22 ноября 2006. Доклад «Проблемы моделирования человеческого тела при расчёте доз облучения методом Монте-Карло».
 - 4) 10-ое международное совещание “Проблемы прикладной спектрометрии и радиометрии” ППСР –2007, пос. Колонтаево, Россия 2007 г. Доклад: «Программа для имитационного трехмерного моделирования в реальной геометрии систем детектирования ионизирующих излучений на базе развитого графического интерфейса». Содокладчики Козловский С.С. и Новиков И.Э.
 - 5) Политехнический симпозиум «Молодые учёные – промышленности Северо-Западного региона» 2006. Доклад: «Расчёт функции отклика детектора в бесконечной излучающей среде».
 - 6) Политехнический симпозиум «Молодые учёные – промышленности Северо-Западного региона» 2007. Доклад: «Оптимизация режима работы рентгеновской трубки по времени экспозиции с помощью компьютерного моделирования». Был награждён грамотой за лучший доклад.
 - 7) Всероссийский форум студентов, аспирантов и молодых учёных «Наука и инновации в технических университетах», Санкт-Петербург, 10-12 октября 2007. Доклад «Расчёт активности источника по поглощённой в детекторе дозе с помощью компьютерного моделирования».

Структура и объем диссертации

Диссертация состоит из Введения, 5 глав, Заключение, 6 Приложений и списка используемой литературы. Объем диссертации составляет 187 страниц, в том числе 60 рисунков и 1 таблица. Список литературы включает 91 наименование.

Краткое содержание работы

Во введении обоснована актуальность темы диссертации. Представлен обзор современных методов моделирования прохождения излучения через вещество. Приведены цели диссертации, а также её результаты и выводы. Обоснована научная новизна и практическая ценность. Приведён список семинаров и конференций, где была апробирована работа.

В первой главе описаны методы моделирования процессов взаимодействия гамма-квантов с веществом и атомной релаксации. Приведены алгоритмы моделирования фотоэлектрического поглощения, когерентного и некогерентного рассеяния, процесса рождения пар. Для когерентного и некогерентного рассеяния представлены графики с результатами моделирования. Описаны базы данных EPDL97 и EADL. Приведена блок-схема генерации релаксационного каскада.

Во второй главе описаны методы моделирования процессов взаимодействия электронов и позитронов с веществом. Приведена методика вычисления тормозных способностей и пробегов электронов и позитронов в веществе на основе сечений и спектров из базы данных EEDL. Представлены графики сравнения тормозных способностей, вычисленных «МСС 3D» и экспериментальных данных.

Описана схема разделения актов взаимодействия электронов на «жёсткие» и «мягкие». Приведены схемы моделирования тормозного излучения, упругого и неупругого рассеяния, а также многократного рассеяния электронов.

В третьей главе описаны принципы геометрического построения расчётной модели. Обосновывается применение этих принципов. Приведен обобщённый алгоритм транспорта частиц через материальные объекты и поверхности.

Выполнен подробный анализ всех геометрических примитивов, которые используются при конструировании модели.

В четвертой главе описаны методы создания источников и детекторов излучений, реализованные в «МСС 3D». Описаны физические принципы моделирования распада нуклидов. Выполнен детальный анализ физических и математических моделей различных источников – моноэнергетических, линейчатых, каскадных и с непрерывным спектром. Представлена методика простейшего моделирования транспорта тяжёлых заряженных частиц, которые могут испускаться каскадными источниками. Описаны точечные и объёмные источники.

Во второй части главы анализируется методика детектирования излучений. Описаны различные типы детекторов – «реальные» детекторы-тела и «идеальные» детекторы-поверхности, многодетекторные системы. Последний раздел главы посвящён детектированию излучений по схеме совпадений и антисовпадений.

В пятой главе приведены сравнения результатов моделирования с помощью «МСС 3D» и экспериментами. Представлено сравнение результатов расчётов с экспериментальными данными для сцинтилляционных и полупроводниковых детекторов при регистрации гамма-квантов от объёмных и точечных источников.

Приведено сравнение результатов моделирования транспорта электронов с экспериментальными данными и результатами расчётов других программами моделирования. За основу взяты экспериментальные данные коэффициентов обратного рассеяния электронов для диапазона энергий от 1 кэВ до 10 МэВ для четырёх элементов (Be, Cu, Al, U).

Представлены смоделированные коэффициенты выхода электронов из мишеней под действием гамма-квантов, проведено их сравнение с экспериментальными данными.

Описан способ ускорения расчёта, реализованный в «МСС 3D», использующий современные многопроцессорные и многоядерные компьютеры.

В заключении изложены основные результаты и выводы проведенных исследований.

Результаты, полученные в работе

1. Создан метод 3D-моделирования взаимодействия гамма-квантов, электронов и позитронов с веществом, не уступающий зарубежным аналогам, а в некоторых аспектах их превосходящий.
2. Разработан программный комплекс «МСС 3D»:
 - 2.1 Комплекс использует современные базы данных по процессам взаимодействия гамма-квантов, электронов и позитронов с веществом, релаксационным каскадам и радионуклидам. Все базы данных могут быть автоматически обновлены через сеть Интернет. Старые файлы с сечениями взаимодействия при этом заменяются на новые, никаких изменений в собственно программном комплексе не требуется.
 - 2.2 Комплекс позволяет создавать трёхмерную геометрическую модель эксперимента с помощью простого и доступного интерфейса. Модель эксперимента выводится на экран с помощью технологии трёхмерной векторной графики OPEN GL. Наличие трёхмерной модели в совокупности с максимально дружелюбным интерфейсом позволяет использовать комплекс широкому кругу лиц, от которых не требуется знание программирования и доскональное знание физики процессов взаимодействия. Это является существенным преимуществом комплекса в сравнении с зарубежными аналогами.
 - 2.3 Комплекс используется на кафедре ЭЯФ СПбГПУ в качестве учебного пособия для студентов, а также как средство для планирования физических экспериментов.
 - 2.4 Комплекс написан на современном языке программирования – C++. Использована объектно-ориентированная модель создания программного обес-

печения, что предоставляет гибкий механизм для дальнейшего усовершенствования комплекса и применения имеющихся программных наработок к моделированию взаимодействия частиц других типов.

Выводы

1. Предложенный и реализованный метод 3D-моделирования взаимодействия гамма-квантов, электронов и позитронов с веществом не уступает по своей результативности мировым образцам, а в некоторых аспектах и превосходит их.
2. 3D-моделирование с использованием надёжных экспериментальных и теоретических данных является в настоящее время наиболее перспективным методом для анализа прохождения гамма-квантов, электронов и позитронов через вещество в условиях проведения физических экспериментов. 3D-моделирование может служить альтернативой традиционным экспериментальным и теоретическим исследованиям.
3. Предложенная методика моделирования транспорта частиц в веществе и реализованный на её основе программный комплекс позволяют с высокой точностью описывать взаимодействие излучения с веществом. Результаты моделирования находятся в согласии с экспериментальными данными с точностью 5% в пределах энергий от 100 эВ до 10 кэВ, с точностью 1% в пределах энергий от 10 кэВ до 10 МэВ. Программный комплекс «МСС 3D» прошёл метрологическую аттестацию во ВНИИМ им. Менделеева. Получен соответствующий сертификат (№ С – 2011 – 001 от 27.11.07), удостоверяющий, что «МСС 3D» адекватно описывает процессы взаимодействия гамма- и электронного излучения с веществом в диапазоне энергий частиц от 50 кэВ до 2 МэВ.

Все результаты, полученные в диссертации, новые и опубликованы в реферируемых журналах.

В настоящее время комплекс «МСС 3D» нашёл практическое применение и используется для планирования экспериментов в различных научных и производственных организациях. В ЦНИИ РТК комплекс «МСС 3D» применяется для калибровки детекторов в водной среде без использования радиоактивной среды. Во ВНИИМ им. Менделеева «МСС 3D» применяется для измерения характеристик детектирующих систем, планирования эксперимента, вычисления активности образцов для сравнения с экспериментальными данными. НТЦ «РАДЭК» использует «МСС 3D» для калибровки детектирующей аппаратуры.

Комплекс «МСС 3D» также нашёл своё применение в коммерческих организациях, таких как ЗАО «Юнитест-Рентген» и ООО «Ньюком-НДТ», работающих в сфере неразрушающего контроля. «МСС 3D» используется для планирования экспериментов, выбора оптимальных режимов работы рентгеновского оборудования, наиболее эффективного использования фосфорных рентгеновских запоминающих пластин, вычисления радиационной защиты.

По теме диссертации опубликованы следующие работы

- 1) Багаев К.А., Козловский С.С., Новиков И.Э. Программа для имитационного трёхмерного моделирования систем детектирования и регистрации ионизирующего излучения на базе развитого графического интерфейса. // Журнал «Анри» 2007. №4. с.35 - 40.
- 2) Козловский С.С., Багаев К.А. Выбор типа рентгеновской трубки и времени экспозиции с помощью компьютерного моделирования // Журнал «В мире НК» 2008. № 1 (39). с. 61 - 62.
- 3) Козловский С.С., Багаев К.А. Оценка времени работы томографической системы с помощью компьютерного моделирования // Журнал «Контроль. Диагностика» 2009. № 2. с. 28 - 32.

- 4) Багаев К.А., Козловский С.С. Применение компьютерного моделирования для калибровки детекторов в водной среде // Журнал «Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки» 2011. № 2 (122). с. 106 - 111.