

**МЕТОДЫ КОМПЬЮТЕРНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА  
В ФИЗИКЕ ГАММА-РАДИАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ  
С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ НОВЫХ ИСТОЧНИКОВ ИЗЛУЧЕНИЯ**

*С.В. Дюльдя, В.В. Рожков, М.И. Братченко, П.Г. Власенко*

*Научно-производственный комплекс*

*“Возобновляемые источники энергии и ресурсосберегающие технологии”*

*Национального научного центра “Харьковский физико-технический институт”*

*г. Харьков, Украина, sdul@kipt.kharkov.ua*

Представлено методологічний підхід до застосування математичного моделювання в задачах фізичного обґрунтування нових радіаційних технологій і проектування радіаційно-технологічних установок. Прокласифіковані задачі радіаційно-технологічного моделювання (РТМ), методи їхнього рішення на ЕОМ та відповідні типи програмного забезпечення. Проведено порівняльний аналіз наявних пакетів програм моделювання електромагнітних процесів у речовині методом Монте-Карло з погляду їх застосування у РТМ. Наведені результати апробації програм і прелімінарні дані розрахунків розподілів поглинених доз  $\gamma$ -випромінювання нуклідів традиційних джерел і перспективних  $\gamma$ -джерел на базі ізотопів Європію.

Представлен методологический подход к применению математического моделирования в задачах физического обоснования новых радиационных технологий и проектирования радиационно-технологических установок. Проклассифицированы задачи радиационно-технологического моделирования (РТМ), методы их решения на ЭВМ и соответствующие типы программного обеспечения. Проведен сравнительный анализ имеющихся пакетов программ моделирования электромагнитных процессов в веществе методом Монте-Карло с точки зрения их применения в РТМ. Приведены результаты апробации программ и предварительные данные расчетов распределений поглощенных доз  $\gamma$ -излучения нуклидов традиционных источников и перспективных  $\gamma$ -источников на базе изотопов европия.

Presented is the methodology of computer modeling application for physical substantiation of new irradiation technologies and irradiators design workflow. Modeling tasks for irradiation technologies are structured along with computerized methods of their solution and appropriate types of software. Comparative analysis of available packages for Monte-Carlo modeling of electromagnetic processes in media is done concerning their application to irradiation technologies' problems. The results of codes' approbation and preliminary data on  $\gamma$ -radiation absorbed dose distributions for nuclides of conventional sources and prospective Europium-based  $\gamma$ -sources are presented.

## **ВВЕДЕНИЕ**

В настоящее время в промышленности радиационных технологий (РТ) согласно рекомендациям международных регулирующих организаций (см. <http://www.iaea.org/icgfi>) применяются ускоренные электроны с энергиями до 10 МэВ, рентгеновское излучение и  $\gamma$ -излучение радионуклидных источников. Источники первых двух типов весьма энергоемки, что ставит под сомнение их рентабельность в условиях Украины и повышает конкурентоспособность  $\gamma$ -радиационных технологий ( $\gamma$ -РТ).

Традиционно в  $\gamma$ -РТ используются изотопы  $^{60}\text{Co}$  и  $^{137}\text{Cs}$  с периодами полураспада 5.27 и 30.18 лет соответственно, испускающие квазимонохроматические спектры фотонов (линии 1.33 МэВ и 1.117 МэВ для  $^{60}\text{Co}$  и 0.662 МэВ для  $^{137}\text{Cs}$ ). Их недостатками является высокая цена, обусловленная сложностью производства, и необходимость утилизации отработавших источников, поскольку мировые поставщики, как правило, продают источники без каких-либо дальнейших обязательств. Для Украины по причинам экологического и законодательного характера это практически исключает возможность

импорта и использования традиционных  $\gamma$ -источников.

Однако ведущие ядерные центры бывшего СССР обладают значительным опытом промышленного производства нуклидов, представляющих по своим ядерно-физическим параметрам интерес для  $\gamma$ -РТ. В частности, весьма перспективным видится применение в этих целях изотопов европия  $^{152}\text{Eu}$  с периодом полураспада 13.54 лет и  $^{154}\text{Eu}$  (8.59 лет). Исследования и разработки в этом направлении на протяжении ряда лет ведутся в ГНЦ РФ НИИАР [1].

Перспективные  $\gamma$ -источники на основе смеси изотопов европия являются продуктом утилизации стержней управления и защиты (СУЗ) атомных реакторов [1]. Их уникальной особенностью является возобновимость: в силу больших сечений захвата европием нейтронов технологически приемлемая активность источника может быть восстановлена путем кратковременной экспозиции в реакторе [1]. По этой причине производителю невыгодна продажа источников, и они должны предлагаться заказчику во временное пользование (аренду), что снимает проблему их захоронения в стране-потребителе. Для

Украины это открывает уникальную возможность строительства и модернизации радиационно-технологических установок (РТУ), развития и внедрения новых радиационных технологий.

Однако следует отметить, что в настоящее время изотопы европия не имеют международной сертификации в качестве радиационно-технологических источников  $\gamma$ -излучения. В сравнении с традиционными  $^{60}\text{Co}$  и  $^{137}\text{Cs}$  смеси  $^{154}\text{Eu}$  характеризуются сложными  $\gamma$ -спектрами (набор линий от 122 кэВ до 1.405 МэВ) и сложным изотопным составом. Это обуславливает необходимость фундаментального обоснования использования изотопов европия в  $\gamma$ -радиационных технологиях, которое должно базироваться на развитых теоретических и расчетных методах прогнозирования, проектирования и оптимизации, объединяемых нами в понятие радиационно-технологического моделирования — РТМ.

Среди таких методов, по нашему мнению, особое место занимают методы математического моделирования и компьютерного эксперимента, составляющие предмет обсуждения в настоящей работе.

### ПРЕДМЕТ И ЗАДАЧИ РТМ

Декомпозиция предмета РТМ позволяет выделить два взаимосвязанных класса задач.

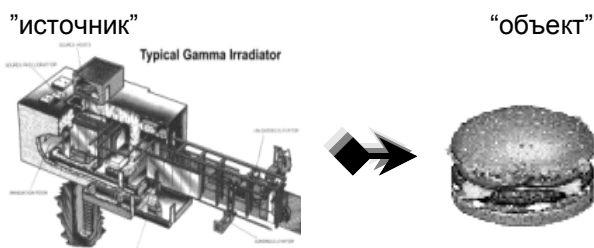


Рис. 1. Модель «источник–объект» постановки задач радиационно-технологического моделирования

**Задачи, ориентированные на источник**, предполагают всестороннюю характеристику радиационной части РТУ на различных уровнях конструкции: активное ядро → источник → сборка (стойка) источников → облучатель в целом. Они включают обоснование требуемой активности, расчеты мощностей экспозиционной дозы (МЭД) и моделирование спектров  $\gamma$ -излучения источника. Необходимо прогнозирование их изменения со временем ввиду изменения изотопного состава активного ядра.

Математическая («виртуальная») модель облуча-

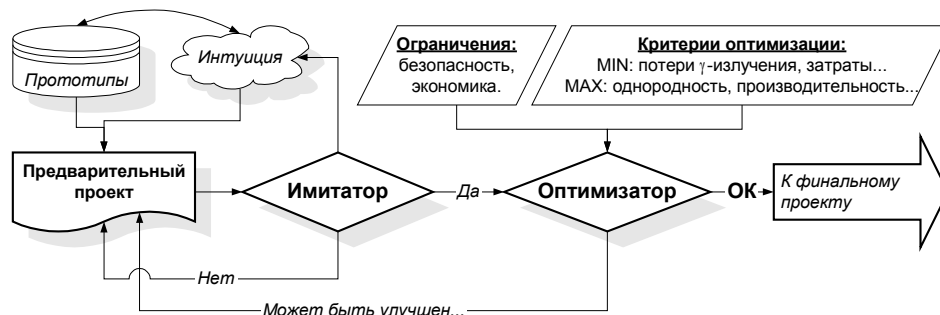


Рис. 2. Роль имитационных («виртуальный облучатель») и оптимизационных компьютерных программ в процессе проектирования РТУ

теля может быть непосредственно внедрена в процессы проектирования РТУ (рис. 2). Он представляет собой итеративную процедуру, в которой имитационный блок программ дает количественное описание заложенных в предварительный проект технических решений и оценивает их соответствие спецификациям РТУ. Обычно предварительный проект имеет много «свободных» параметров, которые влияют на стоимость и конкурентоспособность РТУ. Специальный блок-оптимизатор может обеспечить оптимальное по физическим, техническим и экономическим параметрам содержание финального проекта. В ряде случаев для оптимизационных задач могут быть получены строгие математические формулировки (например, на основе методов исследования операций). Иначе единственным решением может быть метод «грубой силы» («brute-force»), требующий значительных ресурсов ЭВМ.

Важной особенностью методов моделирования является возможность решения обратных задач. Так в случае, если новые  $\gamma$ -источники имеют существенную дисперсию по изотопному составу и плотности активного ядра, моделирование может повысить достоверность этих характеристик, основываясь на косвенно измеренных данных (рис. 3). При этом могут быть использованы строгие методы решения некорректных задач математической физики, методы перебора и искусственного интеллекта [2].

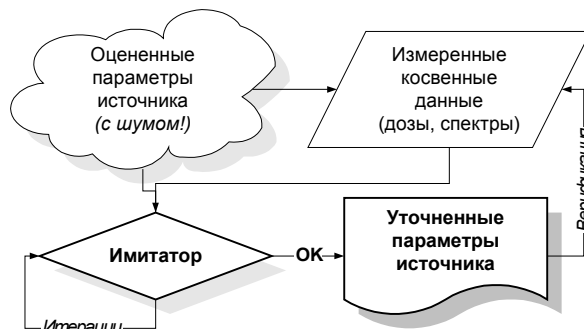


Рис. 3. Методика решения обратных задач оценки параметров  $\gamma$ -источников

**Задачи, ориентированные на объект** облучения, включают в себя, прежде всего, разработку представительных математических моделей объектов, описывающих реальное разнообразие номенклатуры продукции, подвергаемой радиационной обработке. Такие модели предполагают абстрагиро-

вание на физическом и биофизическом уровнях.

На физическом уровне типичные объекты радиационной обработки выглядят как водоподобные среды с варьируемой плотностью и степенью гетерогенности. На этом уровне радиационно-индуцированные эффекты принято считать пропорциональными величине поглощенной дозы, и применимы методы количественной макроскопической дозиметрии [3-6]. Необходимы расчеты дозовых полей в объектах с учетом их гетерогенности с целью оптимизации зоны облучения с точки зрения увеличения коэффициента использования излучения, достижения достоверности и должной однородности распределений поглощенных доз.

Следующий, биофизический, уровень концептуально значительно более сложен. Радиационно-индуцированные эффекты рассматриваются с учетом статистического характера передачи энергии излучения чувствительным микроструктурам (например, микроорганизмам) на молекулярном и атомном уровне, а также с точки зрения кинетики радиационного эффекта с учетом эффектов рекомбинации и репарации. Здесь перспективен микродозиметрический подход [7], включающий в себя как феноменологические кинетические модели, основанные на численном решении нелинейных уравнений баланса (см. например, [8]), так и прямое моделирование энерговыделения в треках вторичных электронов [9]. В результате могут быть построены кривые “доза–эффект”, которые должны служить обоснованием оптимальных технологических режимов радиационной обработки.

### МЕТОДЫ РАСЧЕТА РТУ

Не отвергая в принципе традиционных методик расчета (рис. 4), следует признать, что они не обладают необходимой гибкостью для разработки РТУ и РТ с новыми источниками излучения, и для решения оптимизационных задач альтернативой служат компьютерные технологии проектирования РТУ и РТ. Ограничиваясь рассмотрением процессов взаимодействия  $\gamma$ -излучения с веществом, можно выделить два класса методов их моделирования — детерминистские и стохастические.

**Детерминистские методы** основаны на решении интегродифференциальных уравнений переноса излучения. Математические трудности решения таких транспортных уравнений при учете всех элементарных процессов взаимодействия  $\gamma$ -излучения с веществом для объектов сложной геометрии ранее стимулировали использование множества упрощающих приближений, что ограничивало возможности получения количественных результатов.

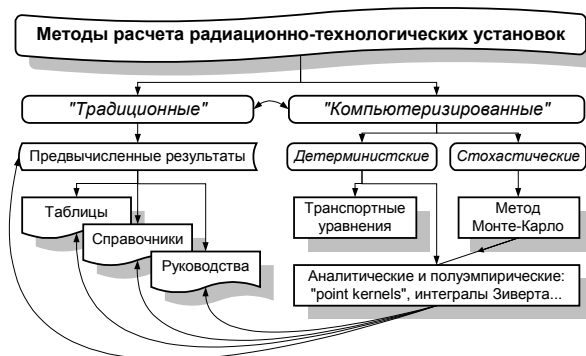


Рис. 4. Классификация методов расчетов РТУ

В обзоре [10] алгоритмов и программ, реализующих детерминистский подход к моделированию транспорта излучения в веществе, подчеркиваются современные тенденции к использованию техники многогрупповых методов ( $S_N$ -методы, методы дискретных ординат) для решения уравнений типа Больцмана и к применению метода конечных элементов для учета 2D- и 3D-геометрии. Однако основные современные программы детерминистского типа (*ANISN*, *ATTILA*, *EVENT*, *TORT-DORT*, *DOORS 3.2*, *CEPXS/ONELD*), к сожалению, труднодоступны для отечественного пользователя.

**Стохастические методы** основаны на технике аналогового метода статистических испытаний — метода Монте-Карло. Постановка задач в рамках этого метода отличается прозрачностью физической концепции и простотой программирования базовых алгоритмов. Метод Монте-Карло является микроскопическим и основан на первых принципах. Достаточно просто учитывается пространственная и композиционная неоднородность облучаемых объектов и 3D-геометрия установки. При наборе достаточной статистики точность расчета определяется только точностью данных о фундаментальных сечениях взаимодействия. Поэтому методы Монте-Карло подразумевают тщательную проработку вопросов адекватности используемых баз данных и весьма требовательны к компьютерным ресурсам.

**Комбинированные методы.** Методы Монте-Карло можно эффективно применять в комбинации с приближенными детерминистскими методами экспрессной оценки параметров радиационных полей излучателей с конечными геометриями. Например, результаты статистического моделирования некоторой дозовой характеристики этих полей  $P$  в точке  $\mathbf{r}$  представимы (с точностью до несущественных множителей) как оценка методом Монте-Карло детерминированного интеграла:

$$P(\mathbf{r}) \propto \sum_{i=1}^N \int \int \int_{V_i} \left( \sum_{E_\gamma} f_i(E_\gamma) \frac{B(E_\gamma, \mathbf{r}, \mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2} \times \exp \left( - \sum_{k=1}^{n(\mathbf{r}, \mathbf{r}')} \mu_{ik}(E_\gamma) \cdot l_k(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \right) d^3 \mathbf{r}' \right), \quad (1)$$

который в принципе можно рассчитать и с помощью эффективных квадратурных численных методов и геометрической техники трассировки лучей.

Внешнее суммирование в формуле (1) производится по несвязным областям  $N$ -компонентного источника, а интеграл вычисляется по объему  $V_i$  компонента. Сумма по  $E_\gamma$  отвечает усреднению по спектру излучения  $f_i$  нуклидов  $i$ -го компонента.

Знаменатель в формуле (1) описывает оптическое ослабление потока фотонов точечного источника ( $\propto 1/r^2$ ), а экспонента — ослабление за счет поглощения в материалах источника и поглотителей. Считается, что материалы-поглотители кусочно-однородны: для каждой точки источника  $\mathbf{r}'_i$  путь до точки наблюдения  $\mathbf{r}$  состоит из  $n_i$  отрезков длинами  $l_k$ , отвечающих пересечениям границ разделов материалов (оболочек источника или интерфейсов гетерогенного объекта), каждый из которых имеет линейный коэффициент ослабления излучения  $\mu_k$ .

Фактор  $B$  — это фактор накопления, феноменологически описывающий вклад вторичного и рассеянного излучения [4–6]. Универсальных формул расчета  $B$  не существует, однако при должной физически обоснованной параметризации возможна аппроксимация  $B(E_\gamma, \mathbf{r}, \mathbf{r}')$  по данным ограниченного набора расчетов методом Монте-Карло.

Таким образом, методы Монте-Карло, будучи оптимальными с точки зрения физической адекватности, в комбинации с приближенными аналитическими и полуэмпирическими методами формируют необходимый набор методов расчета РТУ и РТ и, как видно из рис. 4, могут послужить инструментом для накопления новых реперных данных по использованию новых источников  $\gamma$ -излучения.

## ИЕРАРХИЯ ПРОГРАММ РТМ

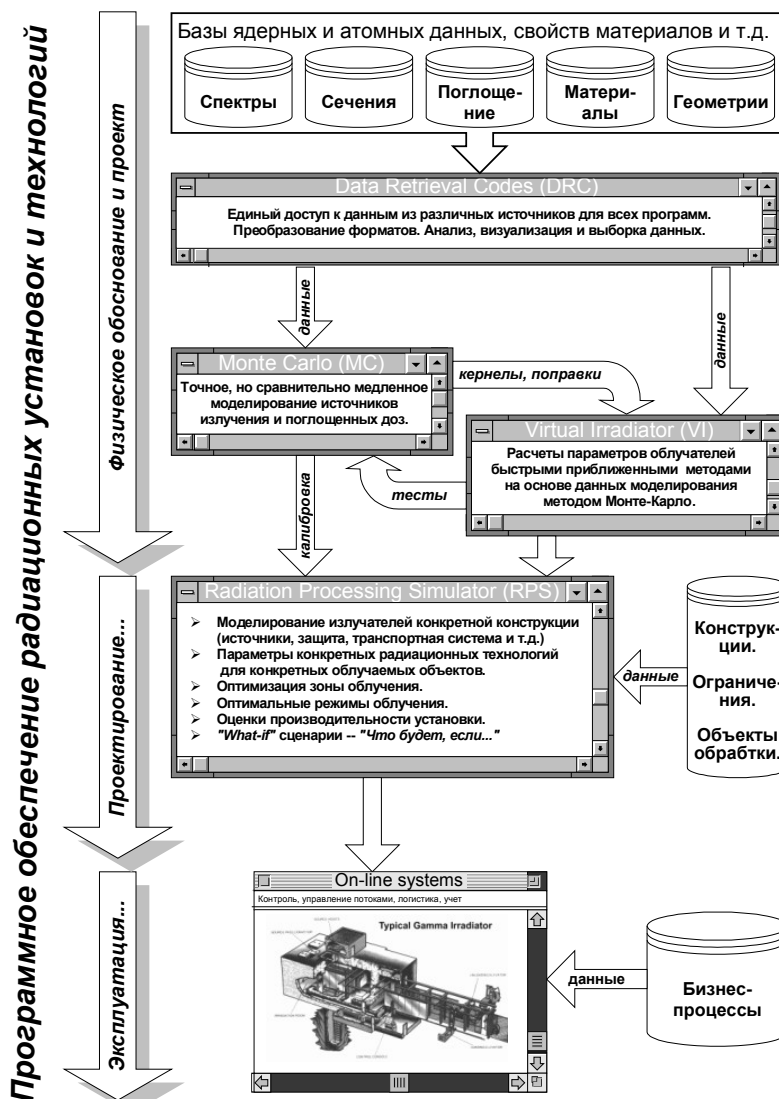
Описанные методы должны быть реализованы в виде подходящего программного обеспечения (ПО) решения задач моделирования и информационной поддержки, возникающих на различных этапах разработки и эксплуатации РТУ и РТ (рис. 5).

Основой для получения количественных результатов моделирования является наличие надежных баз данных по спектрам излучения нуклидов, по сечениям его взаимодействия с веществом, массовым коэффициентам ослабления и поглощения энергии, по стехиометрии используемых материалов. Требуется также накопление библиотек параметризованных геометрических примитивов для создания математических моделей источников излучения, зон облучения и объектов обработки. Использо-

вание этих данных нуждается в промежуточном слое ПО — библиотеках модулей унифицированного доступа к данным (*Data Retrieval Codes — DRC*).

Важным стратегическим решением явилось признание необходимости параллельного использования в расчетах физических характеристик РТУ двух классов программ. Первый из них — пакеты, реализующие метод Монте-Карло (MC), — должен применяться для получения точных калибровочных результатов. Однако быстрдействие MC-программ пока недостаточно для проведения большого комплекса рутинных оптимизационных расчетов для различных вариантов РТУ. Поэтому необходима разработка оригинальных программ второго класса, реализующих детерминистские алгоритмы расчета при условии максимального учета деталей конструкции проектируемых излучателей (геометрия, материалы и т.п.). Такие “виртуальные облучатели” (*Virtual Irradiator, VI*) на 2...3 порядка более быстрдействующие, чем MC-программы, и достаточно точные вследствие использования предварительно насчитанных методом Монте-Карло параметризованных банков данных (*kernels*), должны послужить основным инструментом прогнозирования и оперативного расчета параметров РТУ и РТ.

На этапе рабочего проектирования РТУ и кон-



кретных РТ для них необходима разработка программного комплекса-имитатора процесса радиационной обработки (*Radiation Processing Simulator — RPS*). Он должен моделировать не только излучатель, но и детали конструкции установки в целом, технологические параметры ее будущего функционирования с учетом ограничений технического и экономического характера, обладать средствами решения оптимизационных задач и развитым пользовательским интерфейсом. На этом этапе должны быть накоплены базы данных, относящиеся к вариантам конструкции и размещению РТУ, а также к предпочтительным параметрам ее эксплуатации.

Наконец, для обеспечения безопасной и экономически эффективной эксплуатации построенной РТУ необходима разработка ПО “реального времени” (*on-line systems*), которое на основе апробированных и сертифицированных методов и данных всех упомянутых выше программ обеспечивало бы ее персонал инструментарием оперативной поддержки принятия управленческих решений (принимая во внимание не только техническое состояние и функционирование объекта, но и весь комплекс бизнес-процессов, характеризующих РТУ как коммерческое промышленное предприятие).

## ПАРК ПРОГРАММ МОДЕЛИРОВАНИЯ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

Наиболее важным для целей РТМ является применение программ моделирования методом Монте-Карло. Поэтому возникает задача оптимального выбора комплексов МС-программ, которые: (1) были бы признаны международным научным сообществом и пользовались поддержкой ведущих центров, связанных с радиационными технологиями и смежными областями ядерной и радиационной физики; (2) являлись открытыми системами, допускающими расширение постановок задач; (3) обладали лицензионной чистотой; и (4) предоставляли возможности развертывания и исполнения на имеющемся в ННЦ ХФТИ парке вычислительной техники.

В таблице и комментариях к ней приведены основные алгоритмические, технические и эксплуатационные характеристики пяти доступных нам комплексов программ, удовлетворяющих приведенным выше критериям, которые планируются к использованию для решения задач РТМ.

Все указанные программные комплексы реализуют аналоговый метод Монте-Карло моделирования транспорта нейтральных и заряженных частиц в неоднородных многокомпонентных материалах и для случая моделирования низкоэнергетических электромагнитных процессов в веществе учитывают сходный набор физических механизмов взаимодействия. Детали реализации моделирования этих процессов варьируют от программы к программе. Отметим, что их применение к проблематике РТУ и РТ требует адаптации каждой из программ путем разработки блоков описания геометрии источника и облучаемых объектов, спектров излучения, а также ста-

тистической обработки и визуализации результатов (попытки адаптации программ *DPM* и *Geant4* к этим задачам выполняются нами впервые в мире).

Данные таблицы и наш опыт применения позволяют проклассифицировать эти программы по ряду критериев использования, среди которых наиболее важными представляются следующие.

**Полнота учета физических процессов.** При сопоставимом по точности учете базовых физических процессов преимущество для задач РТМ имеют *EGSnrc* и *Geant4*. Первый характеризуется высоким уровнем апробации на аналогичных задачах медицинской физики; второй представляет интерес полнотой банка данных, расширяемостью и развитыми возможностями моделирования сложных геометрий и неоднородных сред.

**Производительность.** С большим отрывом лидирует *DPM* благодаря новому высокоэффективному алгоритму учета многократного рассеяния. Однако практическая ценность этого лидерства ограничена узким интервалом адекватности постановки задач по энергиям и геометриям. Другие программы, сильно отставая от *DPM*, показывают сравнимое быстродействие. Следует отметить, что *EGSnrc* и *Geant4* обладают встроенными средствами уменьшения дисперсии результатов (*Variance Reduction Technique*), позволяющими для ряда задач повышать эффективное быстродействие в десятки раз.

**Удобство использования.** С точки зрения программирования прикладных задач *Geant4* и *EGS Nova*, написанные на языках C++ и C и обладающие хорошо документированным интерфейсом программирования, имеют явное преимущество перед фортранскими программами (особенно перед использующими архаичный препроцессор MORTRAN пакетами *EGS4* и *EGSnrc*). Для *EGSnrc* рутинное программирование стандартных постановок задач, не требует особо высокой квалификации пользователя-физика, однако существенное расширение его функций, затрагивающее ядро пакета, выглядит затруднительным. Все программы используют консольный интерфейс, что для большинства приложений следует признать достаточным. Графические интерфейсы подготовки данных и визуализации результатов имеются для *EGS4*, *EGSnrc* и *Geant4*, однако область их применимости, удобство использования и степень отладки весьма ограничены.

**Легальность применения.** По этому (весьма критичному) параметру все программы допускают свободное использование в исследовательских целях, что является достаточным для задач разработки физических основ РТ. Однако на этапе, когда результаты разработок могут найти непосредственное коммерческое применение, безусловное предпочтение следует отдать программам *DPM* и *EGSNova*, для которых такие применения явно оговорены в лицензионном соглашении, а также, по всей видимости, комплексу программ *Geant4*.

Таким образом, можно сформулировать следую-

щие выводы о предпочтительных областях применения перечисленных выше программ для радиационно-технологических задач.

Программы *EGSnrc* и (несколько устаревшую) *EGS4*, являющиеся “золотым стандартом” в данной области, можно рекомендовать для постановки задач, характеризующихся плоскими или цилиндрическими геометриями, а также использовать в качестве эталона для тестирования других программ.

Программы *DPM* и *EGS Nova* (при условии их полной апробации) предпочтительны в качестве элементов “встраиваемых” программных систем с развитым пользовательским интерфейсом, ориентированных в том числе и на коммерческие применения. Такие применения оправдывают затраты на расширение функциональности этих программ.

Комплекс *Geant4* наиболее универсален и может использоваться на всех стадиях РТМ.

## Характеристики Монте-Карло-программ для использования в целях радиационно-технологического моделирования

	EGS4 <sup>1</sup>	EGSnrc <sup>2</sup>	EGS Nova <sup>3</sup>	DPM <sup>4</sup>	Geant4 <sup>5</sup>
Текущая версия	3.1	1.0	0.1.1	1.1	3.2
Поддержка	SLAC(США), КЕК(Япония)	IRS Group, NRCC (Канада)	J.C. Satterthwaite	Alex F. Bielajew	CERN (коллаборация)
Первичные частицы	$e^{\pm}, \gamma$	$e^{\pm}, \gamma$	$e^{\pm}, \gamma$	$e^{\pm}, \gamma$	$e^{\pm}, \gamma, n^0, \mu^{\pm}$ , ионы и.т. д.
Диапазон энергий	10 кэВ ... 100 ГэВ	1 кэВ ... 100 ГэВ	10 кэВ ... 100 ГэВ	100 кэВ ... 20 МэВ	100 эВ ... 100 ТэВ
Физические процессы	Для фотонов — фотоэффект, комптоновское и рэлеевское рассеяние и рождение пар. Для заряженных частиц — тормозное излучение, резерфордское рассеяние, $\delta$ -электроны, аннигиляция позитронов, ионизационные и радиационные потери энергии, многократное рассеяние.				плюс: процессы физики элементарных частиц, ядра и высоких энергий;
Материал	любой	любой	любой	любой	любой
Базы данных сечений э.-м. процессов	Storm&Israel [11]	Storm&Israel [11], PHOTX, EADL, EPDL	Storm&Israel [11]	параметризация [12]	Storm&Israel [11], EPDL97, EEDL, EADL, ENDF/B-VI
Сложные спектры <sup>6</sup>	да	да	нет	нет	нет <sup>7</sup>
Выходные данные <sup>6</sup>	доза, керма, флюенс	доза, керма, флюенс	доза, керма	доза	нет <sup>7</sup>
Тип кода	библиотека ядра и совместно компилируемые проблемно-ориентированные коды пользователя (User Codes)		библиотека функций	пакет	библиотека классов
Языки реализации	MORTRAN/Fortran	MORTRAN/Fortran, Korn Shell	ANSI C/C++	Fortran 77	C++
ОС	Unix, DOS, Win32, Mac	Unix, Win32 <sup>8</sup>	Unix, Win32	Unix, Win32	Unix, Win32
Геометрия	XYZ, RZ	XYZ, RZ	XYZ	воксельная	произвольная
Variance Reduction <sup>6</sup>	да	да	нет	нет	да
Интерфейс	входной файл; имеется графический интерфейс его подготовки на Tcl/Tk Для ОС Unix имеется графическая система <i>EGS Windows</i>	входной файл	входной файл; имеется графический интерфейс его подготовки на Tcl/Tk	входной файл	входной файл; программируемые макросы; графические интерфейсы пользователя на Tcl/Tk и Java
Условия распространения	Свободное в исследовательских целях и для лечебных учреждений. Для коммерческого использования требуется явное лицензирование в NRCC (и, возможно, в SLAC) на условиях, не определенных в лицензионном соглашении.		Свободное использование в рамках GNU Public License (GPL)	Свободное для некоммерческого и коммерческого использования	Свободное для некоммерческого использования. Условия коммерческого использования явно не оговорены.

<sup>1</sup><http://ehssun.lbl.gov/egs> — классическая версия, соответствующая стереотипному описанию [13]. Версия EGS4-KEK отличается улучшенным банком данных и алгоритмами транспорта низкоэнергетических фотонов [14], однако плохо документирована и сложна в эксплуатации. <sup>2</sup><http://www.irs.inms.nrc.ca/inms/irs/EGSnrc> — наиболее современная версия *EGS4* [15-17]. В сравнении с *EGS4*<sup>1</sup> обладает рядом расширений: абсолютная стабильность алгоритма транспорта заряженных частиц; новая модель многократного рассеяния; учет релятивистских спиновых поправок к сечениям рассеяния, комптоновского рассеяния на связанных электронах, атомной релаксации и флуоресцентных фотонов от *K*-, *L*- и *M*-оболочек, а также оже-электронов. <sup>3</sup><http://www.nemc.org/nova> — по возможностям соответствует стереотипному *EGS4*<sup>1</sup>, кроме реализации алгоритма PRESTA. <sup>4</sup><http://www-personal.engin.umich.edu/~bielajew/DPM> — узко специализированная система, основанная на алгоритмах *EGSnrc*<sup>2</sup> и *PENELOPE* [12] и предельно оптимизированная по быстродействию для планирования радиационной терапии в медицинской физике. <sup>5</sup><http://wwwinfo.cern.ch/asd/geant4/> — универсальный комплекс, обладающий наиболее представительным банком данных. <sup>6</sup>Встроенные средства и методы, входящие в стандартно распространяемый через Internet дистрибутив пакета. <sup>7</sup>Программируется пользователем. <sup>8</sup>Портирование комплекса *EGSnrc* с предлагаемой разработчиками Unix-версии на более доступную, дружелюбную и эффективную по быстродействию генерируемого кода платформу Win32 впервые в мире было выполнено в 2000 г. авторами настоящей работы С.В. Дюльдя и М.И. Братченко).

### АПРОБАЦИЯ ПРОГРАММ

Апробация программ моделирования — сравнение результатов расчетов для

модельных объектов, выполненных с помощью этих программ, между собой и с опубликованными данными — является обязательным этапом применения любо-

го программного обеспечения в научных расчетах. В целях апробации нами использовалась простая плоская геометрия и начальные условия широкого параллельного пучка первичных частиц (т.е. задача сводилась к одномерной). Такая постановка задачи является стандартной для каждой из перечисленных выше программ. В качестве фантома рассматривалась вода. Рассчитывалась наиболее важная для задач РТМ величина — поглощенная доза  $D_I$ :

$$D_I[\Delta V(\mathbf{r})] = \frac{1}{m \cdot I} \cdot \sum_{\Delta V} E_{dep}(\mathbf{r} \in \Delta V), \quad (2)$$

где  $E_{dep}$  — поглощенная локально в элементе объема  $\Delta V$  энергия, отнесенная к массе этого объема  $m$  и нормированная на поток первичных частиц  $I$ .

Типичные примеры результатов апробационных расчетов приведены на рис. 6 и 7 для случаев гамма- и электронного облучения соответственно.

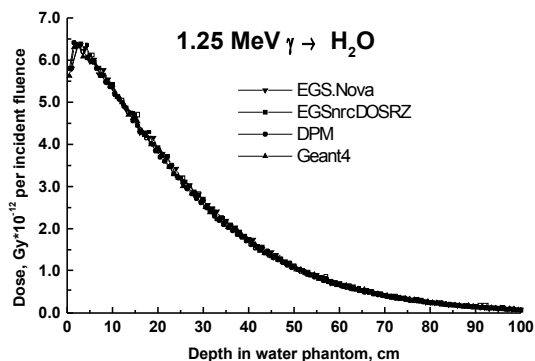


Рис 6. Распределение поглощенной дозы по глубине в воде при облучении широким пучком  $\gamma$ -квантов с энергией 1.25 МэВ. Статистика: EGS Nova –  $10^6$ , EGSnrc –  $10^5$ , DPM –  $10^6$ , Geant4 –  $2 \cdot 10^5$  историй

Вывод, следующий из комплекса проведенных апробационных расчетов, заключается в том, что все испытанные программы демонстрируют близкие результаты с точностью не хуже 5...10%, приемлемой для задач РТМ. Таким образом, с физической точки зрения ограничений на выбор программы для конкретных применений не обнаружено.

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОГЛОЩЕННЫХ ДОЗ ИЗЛУЧЕНИЯ ИЗОТОПОВ $^{60}\text{Co}$ и $^{154}\text{Eu}$

С помощью комплекса EGSnrc нами выполнены расчеты распределений поглощенной дозы и флюенса  $\gamma$ -излучения изотопов кобальта и европия в воде

— представительном объекте для задач РТМ. Цель моделирования состояла в предварительной оценке параметров  $\gamma$ -источников, содержащих смесь изотопов Eu с возможными добавками изотопа  $^{60}\text{Co}$ . Использовалась геометрия широкого пучка и данные по спектрам излучения изотопов из работы [1]. На рис. 8 приведены кривые дозовых распределений для традиционного кобальтового источника, а также данные для двух наиболее распространенных и предполагаемых к использованию в перспективных источниках изотопов европия —  $^{152}\text{Eu}$  и  $^{154}\text{Eu}$ .

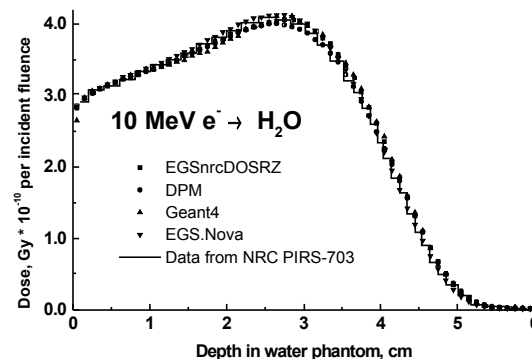


Рис. 7. Распределение поглощенной дозы по глубине в воде при облучении широким пучком электронов с энергией 10 МэВ. Статистика: EGSnrc –  $5 \cdot 10^4$ , DPM –  $10^6$ , Geant4 –  $10^4$ , EGS Nova –  $10^5$ .

Гистограмма — данные работы [17]

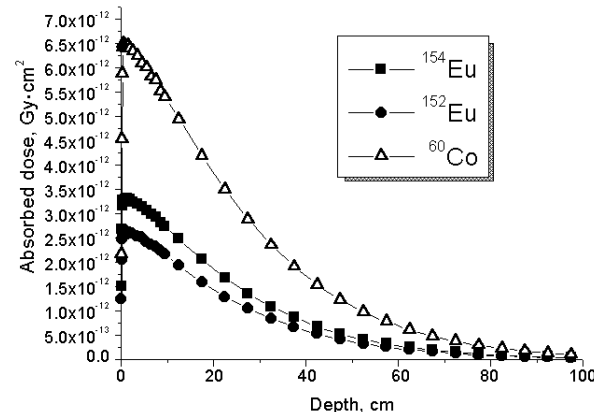


Рис. 8. Зависимости поглощенной дозы от глубины для излучения нуклидов с различными  $\gamma$ -спектрами



Более жесткий спектр изотопа  $^{60}\text{Co}$  дает большие величины поглощенной дозы, причем отношение доз Co/Eu линейно растет с глубиной от двукратного до трехкратного (рис. 9).

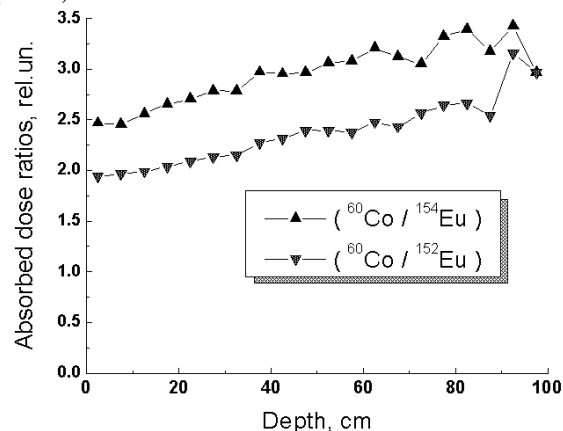


Рис. 9. Соотношения между поглощенными дозами излучения  $^{60}\text{Co}$  и  $^{15x}\text{Eu}$  на различных глубинах

Такое поведение относительной эффективности облучения объясняется особенностями поглощения на малых глубинах сравнительно низкоэнергетических фотонов, доля которых для изотопов  $^{15x}\text{Eu}$  (в отличие от  $^{60}\text{Co}$ ) достаточно велика.

Это подтверждается моделированием флюенса фотонов от  $^{152}\text{Eu}$  на различных глубинах, проведенным с помощью *FLURZnrc* — прикладного модуля *EGSnrc* (рис. 10). Как видно, низкоэнергетическая часть спектра ( $E_\gamma < 300$  кэВ) демонстрирует наиболее сильную зависимость от глубины, падая примерно вдвое в интервале глубин от 8 до 28 см.

Аналогичное поведение спектрального распределения флюенса вторичных заряженных частиц на различных глубинах в фантоме иллюстрируется данными рис. 11.

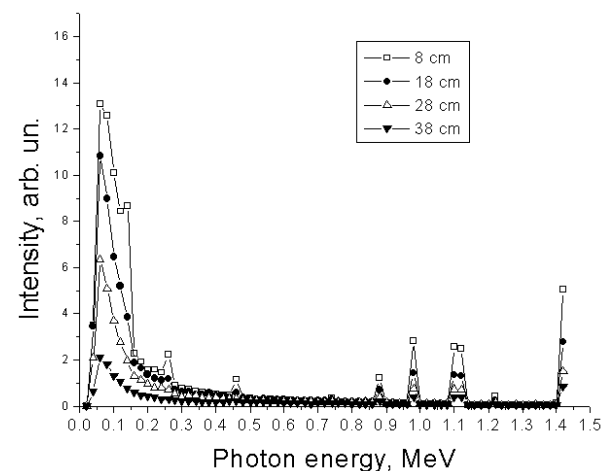


Рис. 10. Спектральные распределения флюенса фотонов изотопа  $^{152}\text{Eu}$  на различных глубинах в воде

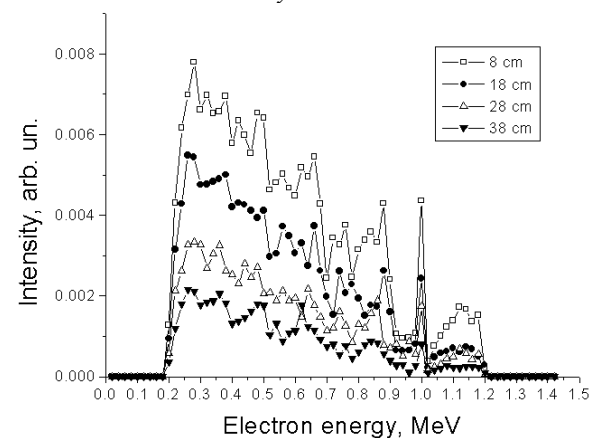


Рис. 11. Спектральные распределения флюенса вторичных заряженных частиц от излучения изотопа  $^{152}\text{Eu}$  на различных глубинах в воде

## ВЫВОДЫ

Компьютерное моделирование представляет собой мощный инструмент для физического обоснования новых радиационных технологий и проектирования новых радиационно-технологических установок и должно рассматриваться как неперемнная составляющая организации работ по проектированию РТУ и РТ,

основанных на новых источниках  $\gamma$ -излучения.

В настоящее время авторы располагают необходимым комплексом расчетных методов и парком программ моделирования, которые — при условии расширения их функциональности и адаптации к специфическим задачам РТМ — позволяют эффективно использовать их для научных исследований и разработок в этом направлении.

Работа выполнена при финансовой поддержке Украинского научно-технологического центра, проект УНТЦ № 1801 “Розробка фізичних основ радіаційних технологій з використанням гамма-джерел на базі ізотопів Європію”.

### ЛИТЕРАТУРА

1. В.Д. Рисованный, Е.П. Клочков, В.Б. Пономаренко, А.В. Захаров. *Европий в ядерной технике*. Димитровград: ГНЦ РФ НИИАР, 1997, 149 с.
2. P.E. Keller, L.J. Kangas, G.L. Troyer, S. Hashem, R.T. Kouzes. Nuclear Spectral Analysis via Artificial Neural Networks for Waste Handling // *IEEE Trans. on Nucl. Sci.* 1995, v. **42**, No 4, p. 709-715.
3. В.И. Иванов *Курс дозиметрии: Учебник для вузов*. М.: “Энергоатомиздат”, 1988, 400 с.
4. *Прикладная дозиметрия*. /Под ред. К.А. Аглинцева. М.: “Госатомиздат”, 1962, 245 с.
5. Г.В. Горшков *Проникающее излучение радиоактивных источников*. Л.: “Наука”, 1967, 395 с.
6. R.G. Jaeger (ed.). *Engineering Compendium on Radiation Shielding, Vol. 1. Shielding Fundamentals and Methods*. Berlin, Heidelberg, New York: Springer-Verlag, 1968, 537 p.
7. В.И. Иванов, В.Н. Лысцов, А.Т. Губин. *Справочное руководство по микродозиметрии*. М.: “Энергоатомиздат”, 1986, 184 с.
8. R.D. Stewart, J.K. Shultis, and B.A. Montelone. *A Kinetic Biological Effects Model for Quiescent Cells*. Richland, WA 99352: Pacific Northwest National Laboratory Report PNNL-13258. May 30, 2000.
9. W.E. Wilson, D.J. Lynch, K. Wei. Microdosimetry of a 25 keV Electron Microbeam // *Radiat. Res.* 2001, v. **155**, p. 89-94.
10. R.A. Price. *Deterministic Methods for Radiation Transport*. London: Contribution to NPL report ISBN 0 946754 32 2 (Ed. by H. Tagziria), 1999.
11. E. Storm, H. I. Israel. Photon Cross Sections from 1 KeV to 100 MeV for Elements Z=1 to Z=100 // *Atomic Data and Nucl. Data Tables*. 1970, v. **7**, p. 565-681.
12. J. Baro, J. Sempau, J.M. Fernandez-Varea and F. Salvat. PENELOPE: An algorithm for Monte Carlo simulation of the penetration and energy loss of electrons and positrons in matter. // *Nuclear Instruments and Methods*. 1995, v. **B100**. p. 31 – 46.
13. W.R. Nelson, H. Hirayama, D.W.O. Rogers. *The EGS4 Code System*. Stanford Linear Accelerator Center Report SLAC-265 (Stanford CA), 1985.
14. Y. Namito, H. Hirayama, S. Ban. Improvements of Low-energy Photon Transport in EGS4 // *Radiat. Phys. and Chem.* 1998, v. **55**, p. 283-294.
15. I. Kawrakow, D.W.O. Rogers. *The EGSnrc Code System: Monte Carlo Simulation of Electron and Photon Transport*. NRCC Report PIRS-701, 2000
16. D.W.O. Rogers, I. Kawrakow, J.P. Seuntjens, B.R.B. Walters. *NRC User Codes for EGSnrc (incomplete draft)*. NRCC Report PIRS-702, 2000.
17. B.R.B. Walters, J. Treurniet, D.W.O. Rogers, I. Kawrakow. *QA tests of the EGSnrc System and Comparison with EGS4*. NRCC Report PIRS-703, 2000.