

## ПРИМЕНЕНИЕ ПРОГРАММНОГО КОМПЛЕКСА GEANT4 К ЗАДАЧАМ РАДИАЦИОННО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

*М.И. Братченко, С.В. Дюльдя*

*Научно-производственный комплекс*

*“Возобновляемые источники энергии и ресурсосберегающие технологии”*

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

*г. Харьков, Украина, [mbrat@kipt.kharkov.ua](mailto:mbrat@kipt.kharkov.ua)*

Представлені результати пілотних комп'ютерних експериментів щодо застосування пакета *Geant4* для моделювання розподілів дозних полів гамма-випромінювання в гомогенних фантомах. Продемонстровані можливості пакета та створених на його базі програмних модулів для розрахунків тривимірних розподілів поглиненої дози с урахуванням конструкції і геометрії модельних випромінювачів та фантомів.

Представлены результаты пилотных компьютерных экспериментов по применению пакета *Geant4* для моделирования распределений дозных полей гамма-излучения в гомогенных фантомах. Продемонстрированы возможности пакета и созданных на его основе программных модулей для расчетов трехмерных распределений поглощенной дозы с учетом конструкции и геометрии модельных излучателей и фантомов.

The results of pilot computer experiments directed toward the application of *Geant4* package for modeling of gamma radiation dose distributions in homogeneous phantoms are presented. We demonstrate the potential of the package itself and of the developed add-on software modules for the calculations of three-dimensional absorbed dose distributions taking into account the design and geometry of model irradiators and phantoms.

### ВВЕДЕНИЕ

Программный комплекс *Geant4* моделирования взаимодействия излучения с веществом методом Монте-Карло разрабатывается с 1994 года международной коллаборацией под эгидой ЦЕРН [1,2]. Задуманный, прежде всего, как средство моделирования детекторов в физике высоких энергий, он, благодаря своей объектно-ориентированной архитектуре, усилиями международного коллектива разработчиков, координируемого ЦЕРН через Internet, превратился в мультidisциплинарный инструмент, который находит применение, например, в задачах астрофизики, нейтронной и медицинской физики.

*Geant4* обладает развитыми средствами моделирования электромагнитных процессов при взаимодействии электронов и  $\gamma$ -квантов с веществом. Имеется возможность использования как стандартных параметризаций сечений элементарных процессов (применимых при энергиях фотонов выше 1 кэВ), так и [3] расширенной библиотеки сечений, основанной на оцененных данных LLNL (EADL, EEDL и EPDL97) и обеспечивающей транспорт низкоэнергетических фотонов вплоть до энергии в 250 эВ. Разработчики *Geant4* предлагают и изощренные средства создания и комбинирования геометрических объектов, формирующих “виртуальные миры”, в которых разыгрываются моделируемые процессы. Эти средства имеют четко оговоренный интерфейс с современными пакетами автоматизированного проектирования (CAD).

Все это делает пакет *Geant4* весьма привлекательным для использования в актуальных задачах ра-

диационно-технологического моделирования (РТМ), связанных с разработкой физических основ новых  $\gamma$ -радиационных технологий.

Настоящая работа была предпринята в целях создания и тестирования программных блоков моделирования геометрий излучателей и фантомов, отработки возможностей комплекса *Geant4* по расчету радиационно-технологических параметров и оценки быстродействия программы (*benchmarking*) на типичных задачах физики радиационных технологий.

### МЕТОДИКА МОДЕЛИРОВАНИЯ

Общие параметры для всех рассматриваемых ниже постановок задач таковы. В качестве условий моделирования выбраны: вода с плотностью 1 г/см<sup>3</sup> как материал фантома и моноэнергетические  $\gamma$ -кванты с энергией  $E_\gamma = 1.25$  МэВ, вполне характеризующие излучение нуклида <sup>60</sup>Со. Фантомы помещались в воздушную среду с плотностью  $1.2 \cdot 10^{-3}$  г/см<sup>3</sup>.

Использовалась стандартная библиотека сечений электромагнитных процессов *Geant4* (сравнение с результатами для расширенной библиотеки сечений [3] будет опубликовано отдельно). Для достижения разумного компромисса между точностью и скоростью расчета пороговые энергии прослеживания траекторий частиц выбирались программой исходя из длины свободного пробега  $\gamma$ -квантов и пробега электронов, равных 1 мм (что меньше любых характерных размеров рассматриваемых задач). В воде это отвечает энергиям обрезания 2.9 кэВ для фотонов и 347 кэВ для заряженных частиц.

Рассчитывались распределения поглощенной

дозы  $D$ , Гр, в фантоме, нормированные для плоских задач на поток первичных фотонов,  $\text{см}^{-2}$ , а для задач с изотропным источником — на число фотонов. Шаг расчета глубинных распределений дозы составлял 1 см, что отражает характерные размеры дискретизации для радиационно-технологических задач.

Применялась версия 3.0 комплекса *Geant4* дополненная рядом оригинальных программных модулей, обеспечивающих моделирование геометрий эксперимента, подсчет и статистический анализ доз. Компиляция проекта выполнялась с включением всех режимов оптимизации кода. В разных расчетах статистика составляла от одного до 80 миллионов историй первичных фотонов.

Ниже приведены результаты моделирования для ряда типичных задач по мере их усложнения.

### ФАКТОРЫ НАКОПЛЕНИЯ ДОЗЫ ШИРОКОГО ПУЧКА В ТОЛСТОМ СЛОЕ

Отправной точкой поставленных компьютерных экспериментов является типичная одномерная задача — расчет распределений по глубине  $z$  поглощенной дозы  $D(z)$  от широкого параллельного пучка фотонов. В этом расчете размеры фантома составляли  $\Delta x \times \Delta y \times \Delta z = 20 \times 20 \times 1$  м, что более чем достаточно для исключения краевых эффектов и достижения электронного равновесия в латеральной плоскости, но позволяет изучить особенности поведения  $D(z)$  вблизи границ раздела по нормали к поверхности.

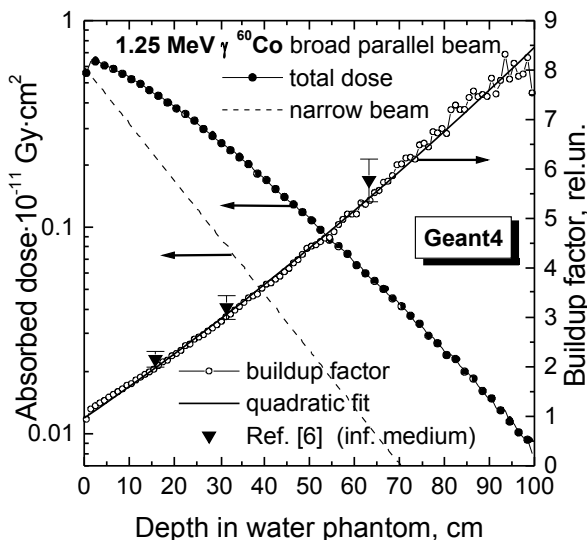


Рис. 1. Глубинные зависимости поглощенной дозы в воде от широкого параллельного (*Geant4*, статистика  $3 \cdot 10^6$  историй) и узкого (расчет по формуле (1)) пучков фотонов, а также дозового фактора накопления и его квадратичной аппроксимации в сравнении со справочными данными [6] для фактора накопления широкого пучка в безграничной среде

Результаты моделирования, приведенные на рис. 1, демонстрируют характерное для широких пучков отличие распределения  $D(z)$  от экспоненциального. Заметны и переходные эффекты (скачки дозы) вблизи границ раздела “вода–воздух”.

Для сравнения на рисунке приведена глубинная

дозовая зависимость для узкого пучка, рассчитанная по известной формуле:

$$D_0(z) = 1.607 \cdot 10^{-10} E_\gamma \frac{\mu_{en}(E_\gamma)}{\rho} \cdot e^{-\mu(E_\gamma)z}, \quad (1)$$

где  $\mu = 0.06323 \text{ см}^{-1}$  и  $(\mu_{en}/\rho) = 0.02965 \text{ г/см}^3$  — линейный коэффициент ослабления и массовый коэффициент поглощения энергии в воде для фотонов с  $E_\gamma = 1.25 \text{ МэВ}$ , рассчитанные по методике [4,5].

Отношение  $B(z) = D(z)/D_0(z)$  представляет собой дозовый фактор накопления (*buildup factor*), описывающий нарастающий с глубиной вклад вторичных заряженных частиц и рассеянных фотонов. Как видно из рисунка, он хорошо аппроксимируется квадратичной функцией

$$B(z) \approx 0.965 + 0.063 \cdot z + 1.25 \cdot 10^{-4} \cdot z^2, \quad (2)$$

где глубина измеряется в сантиметрах. Линейные члены в формуле (2) показывают, что грубой оценкой на не слишком больших глубинах может служить выражение  $B(z) \approx 1 + \mu(E_\gamma)z$ . Тот факт, что при моделировании  $B(0)$  меньше единицы, связан с переходным скачком дозы на границе слоя. Эта же причина — конечность толщины слоя — ответственна и за несколько более медленное возрастание фактора накопления с глубиной в сравнении со справочными данными ([6], с. 219), относящимися к широкому пучку в безграничной среде. С учетом суммарной погрешности данных работы [6] (5...10%) и статистической погрешности расчета (0.1...5% в зависимости от глубины) качественное и количественное согласие достаточно хорошее.

### РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ПОГЛОЩЕННЫХ ДОЗ ИЗЛУЧЕНИЯ ИНКАПСУЛИРОВАННОГО ЦИЛИНДРИЧЕСКОГО ИСТОЧНИКА

#### Постановка задачи

Реальные постановки задач РТМ более сложны, чем рассмотренная выше одномерная задача. Нуклиды протяженных объемных источников излучают изотропно, а активное ядро заключают в технологические оболочки, обеспечивающие герметичность и необходимые механические свойства. Нужно также принимать во внимание конечные размеры фантома (объекта обработки) и геометрию расположения источника относительно него.

Для выяснения возможностей пакета *Geant4* по моделированию этих факторов были предприняты специальные компьютерные эксперименты.

**Источник.** Была выбрана цилиндрическая геометрия модельного источника — наиболее актуальная для технологических излучателей. Пруток из металлического кобальта (плотность  $8.9 \text{ г/см}^3$ ) длиной  $H = 80$  см и диаметром  $\varnothing 8$  мм был помещен в оболочку из железа ( $7.8 \text{ г/см}^3$ ) толщиной 1.5 мм. Реальные источники, разумеется, имеют более сложную конструкцию и элементный состав материалов ядра и оболочек (капсул); однако в этой методической работе задача моделирования конкретных существующих или проектируемых источников нами не ставилась. Моделировался изотропный источник: фотоны излучались равномерно по всем направлениям; од-

нако для увеличения скорости счета использовался метод отказов — рассматривались лишь те из них, которые излучались в обращенную к фантому полу-сферу (вклад других фотонов в поглощенную дозу в фантоме несущественен).

**Фантом** представлял собой прямоугольный параллелепипед размерами  $\Delta x = 2$  м по ширине,  $\Delta y = 80$  см по высоте и  $\Delta z = 80$  см по глубине.

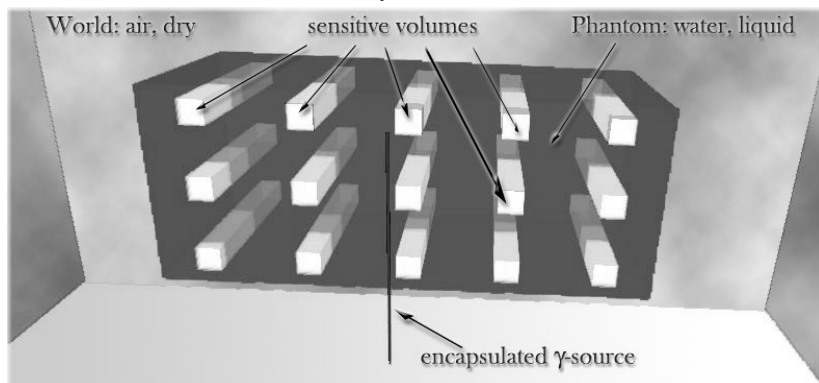


Рис. 2. Геометрия модельного компьютерного эксперимента (VRML-представление). Светлые параллелепипеды — области накопления данных о 3D-распределении поглощенных доз (“детекторы”)

Источник и фантом располагались вертикально и были выровнены по высоте. Ось источника находилась в плоскости симметрии фантома (рис. 2). Расстояние от оси источника до поверхности фантома (source-surface distance —  $SSD$ ) варьировалось от 10 до 90 см.

#### Интегральные распределения дозы

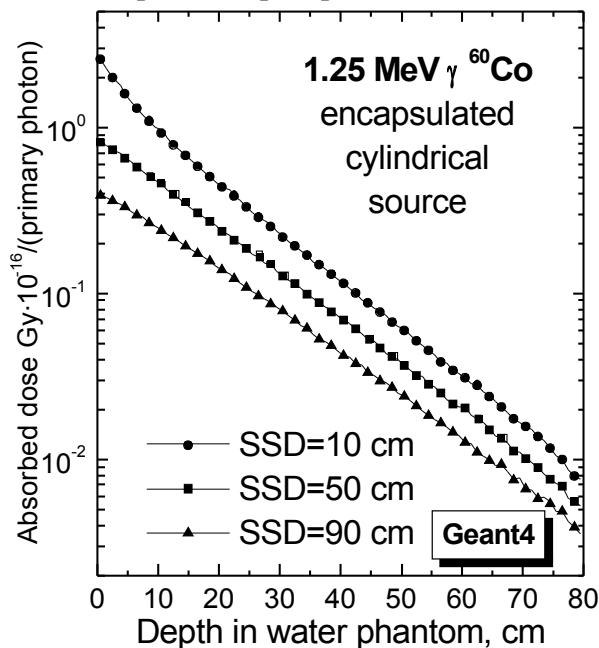


Рис. 3. Глубинные зависимости суммарной по объему фантома поглощенной дозы при различных расстояниях ( $SSD$ ) цилиндрического источника от его поверхности. Статистика —  $1 \cdot 10^6$  историй для  $SSD=10$  см и  $3 \cdot 10^6$  историй для  $SSD=50$  и  $90$  см

На рис.3 представлены интегральные по фантому дозовые кривые  $D(z)$  для источников, находящихся

на различных расстояниях  $SSD$  от его передней стенки. Как видно, увеличение расстояния приводит как к уменьшению коэффициента использования излучения (из-за уменьшения телесного угла видимости фантома), так и к изменению формы кривой глубинной зависимости.

На близких расстояниях  $SSD \ll H$  ввиду того, что источник излучает квазиизотропно, на малых глубинах появляется характерный поверхностный пик, связанный с энерговыделением наклонно падающими фотонами. Это приводит к примерно полторакратному возрастанию дозы вблизи поверхности по сравнению со значением, экстраполированным по наклону средней части кривой.

На больших расстояниях  $SSD > H$  форма кривой стремится к характерной для параллельного широкого пучка, поскольку эффективная область углов падения фотонов на фантом сужается.

На средних расстояниях  $SSD = 50$  см обнаружена компенсация этих эффектов, и кривая практически экспоненциальна с показателем экспоненты, близким к  $(-\mu(E_\gamma) \cdot z)$ .

#### Трехмерные распределения дозы

Интегральные кривые, приведенные на рис. 3, характеризуют усредненные по всему объему фантома дозовые распределения. Однако для более углубленного анализа необходимы данные по трехмерным распределениям дозы.

В следующем эксперименте, выполненном для расстояния  $SSD = 50$  см, распределения поглощенных доз по всей глубине фантома накапливались в наборе прямоугольных “чувствительных объемов” (в терминологии *Geant4* — “детекторов” (см. рис. 2)) с размерами поперечного сечения  $10 \times 10$  см. Эти “детекторы” располагались центрально-симметрично с шагом 40 см по ширине  $X$  и 30 см по высоте  $Y$  фантома. Такая симметрия постановки задачи использовалась для уменьшения дисперсии результатов моделирования путем сложения показаний симметрично расположенных детекторов. Статистика в этих расчетах составила 80 миллионов историй.

На рис. 4 показаны глубинные распределения поглощенной дозы в зависимости от положения детектора. Распределения близки к экспоненциальным (ср. рис. 3 для  $SSD = 50$  см), причем скорость убывания дозы по глубине несколько различается в зависимости от положения детектора в латеральной плоскости. Этот факт, а также значительно более слабо выраженный переходной эффект скачков дозы на малых глубинах отличают изученную конечную геометрию эксперимента с изотропно излучающим цилиндрическим источником от рассмотренной ранее одномерной задачи для параллельного широкого

фотонного пучка (ср. рис. 1).

Латеральные профили поглощенной дозы на глубинах 10, 40 и 70 см в фантоме приведены на рис. 5. Видно, что для уединенного цилиндрического излучателя неоднородность доз в латеральных плоскостях весьма существенна и зависит от глубины  $z$  и высоты  $y$  сечения фантома.

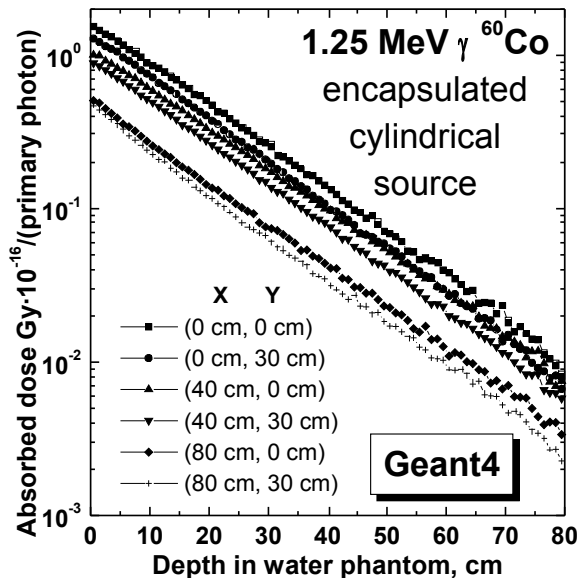


Рис. 4. Распределения поглощенной дозы по глубине на различных расстояниях от центра симметрии фантома. Статистика:  $8 \cdot 10^7$  историй

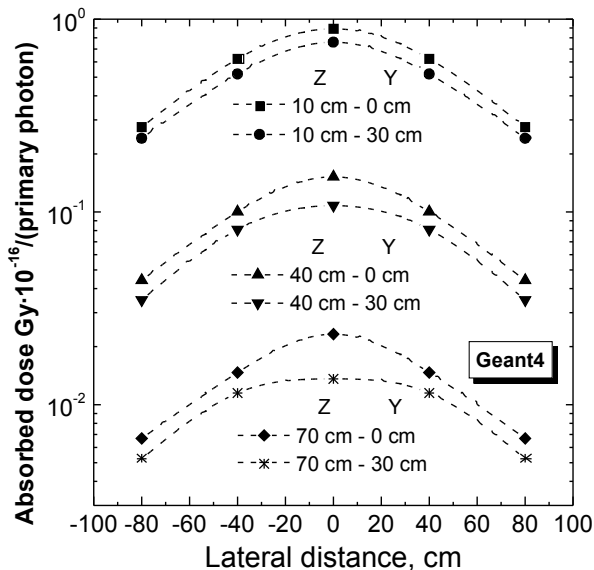


Рис. 5. Латеральные профили поглощенной дозы цилиндрического источника на различных глубинах  $Z$  и различных вертикальных смещениях  $Y$

#### Оценки производительности программы

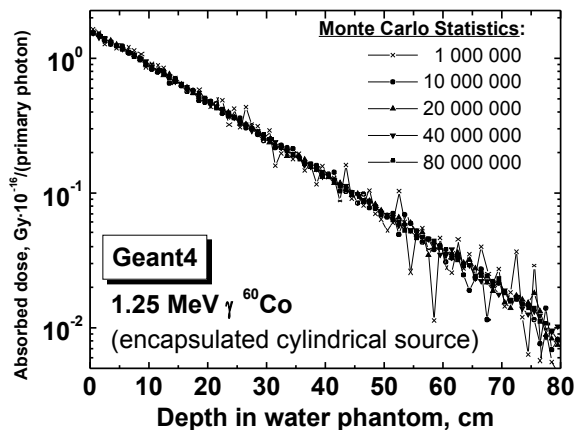


Рис. 6. Влияние статистики счета методом Монте Карло на разброс значений  $D(z)$  на центральной оси фантома  $x=y=0$  см.

Данные рис. 6 характеризуют уменьшение дисперсии результатов с увеличением статистики счета, наиболее заметное на больших глубинах в фантоме, где эффективная плотность потока фотонов мала в силу их поглощения слоями воды. Эти данные с учетом того, что скорость счета на персональном компьютере Intel™ Pentium III 800 MHz составляла около 16 миллионов историй в час процессорного времени, позволяют оценить реальные временные затраты, необходимые для получения статистически достоверных результатов при заданных уровнях точности и характерных параметрах дискретизации облучаемого объекта.

#### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Хотя все приведенные выше постановки задач являются модельными, результаты пилотных компьютерных экспериментов доказывают, что программный комплекс *Geant4* обладает всеми необходимыми средствами для широкого круга применений в целях радиационно-технологического моделирования.

Представляется, что основной областью приложений *Geant4* в этих целях может стать (по аналогии с приложениями в физике высоких энергий) детальное моделирование характеристик радиационных полей для реальных конструкций  $\gamma$ -источников, экспериментальных, пилотных и промышленных  $\gamma$ -радиационных установок.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Украинского научно-технологического центра, проект УНТЦ № 1801 "Розробка фізичних основ радіаційних технологій з використанням гамма-джерел на базі ізоотопів європію".

#### ЛИТЕРАТУРА

1. *The RD44 Collaboration*. CERN/LHCC 98-44, LCB Status Report, 30 November 1998.
2. M.G. Pia. *The Geant4 Object Oriented Simulation Toolkit*. //Proc. of the EPS-HEP99 Conference, Tampere, 1999.
3. J. Apostolakis, S. Giani, M. Maire, P. Nieminen, M.G. Pia, L. Urban. *Geant4 Low Energy Electromagnetic*

*Models For Electrons And Photons.* //CERN-OPEN-99-034 (1999), INFN/AE-99/18 (1999).

4.M.J. Berger, J.H. Hubbell. *XCOM: Photon Cross Sections on a Personal Computer.* NBSIR 87-3597. 1987.

5.J.H. Hubbell. *Tables of X-ray Mass Attenuation Coefficients and Mass Energy-Absorption Coefficients 1 keV to 20 MeV for Elements Z=1 to 92 and 48 Additional Substances of Dosimetric Interest.* NISTIR 5632, 1995.

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.