

ВЫБОР И ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МЕТОДОВ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ РАДИАЦИОННО-ЗАЩИТНЫХ МАТЕРИАЛОВ

В. В. МОРГУНОВ¹, Н. В. ДИДЕНКО², Р. М. ТРИЩ¹

¹ УИПА, Харьков, УКРАИНА

² ХНАДУ, Харьков, УКРАИНА

*email: volodymyr.morgunov@gmail.com

АННОТАЦИЯ В статье обоснован выбор программного комплекса для проведения численного моделирования прохождения ионизирующего излучения через вещество, приведено обоснование выбора корректного метода расчета дозы и мощности дозы при проведении численного моделирования прохождения ионизирующего излучения через вещество. Предложена методика подбора аппроксимирующей кусочно-непрерывной функции для расчета массового коэффициента ослабления гамма-излучения, необходимого при расчете поглощенной и эквивалентной доз.

Ключевые слова: ионизирующее излучение, численное моделирование, GEANT4, поглощенная и эквивалентная доза, мощность дозы.

CHOICE AND USE OF MATHEMATICAL METHODS TO DETERMINE THE TECHNOLOGICAL PARAMETERS OF RADIATION-SHIELDING MATERIALS

V. MORGUNOV¹, N. DIDENKO^{2*}, R. TRISHCH¹

¹ UEPA, Kharkov, UKRAINE

² KhNAHU, Kharkov, UKRAINE

ABSTRACT Ionization radiation is everywhere: cosmic rays, nuclear energy, medicine and etc. One of the main tasks during work with the ionization radiation – human safety. There are a lot of radiation protected clothes. To define their protective characteristics two way are possible: experimental and simulation. The numerical simulation allows to speed up experiments and cheapen them. There are a lot of software toolkit for ionization radiation pass through the matter simulation. The article is devoted to following tasks: selection of software toolkit for numerical simulation of ionization irradiation passage through the matter; correct way of dose and dose rate calculation as dose rate should be calculated at the point; correct way of mass energy-absorption coefficient approximation by piecewise continuous function. For numerical simulation GEANT4 software toolkit was chosen. The GEANT4 is written in modern programming language: C++. GEANT4 is well documented, has a good support and free open software. To calculate dose and dose rate calculation should be made for the point. The absorbed dose calculation method which is used in GEANT4 can not be used for dose rate calculation. Proper mathematical method for absorbed dose calculation was chosen and was described in the article.

Keywords: ionization radiation, numerical simulation, GEANT4, absorbed and equivalent dose, dose rate.

Введение

Расчет защитных свойств радиационно-защитных материалов требует проведения большого количества экспериментов. Значительно сократить этот объем работы и времени позволяет использование математических методов.

Использование методов численного моделирования широко используется для расчета технологических параметров различных процессов. Особенно активно эти методы применяются в области моделирования прохождения ионизирующего излучения через вещество. Это обусловлено следующими факторами: ростом вычислительной мощности компьютерной техники и развитием программного обеспечения; существуют ситуации, когда невозможно измерить физические величины, относящиеся к ионизирующему излучению (например, радиационная обработка музейных

экспонатов, расчет эквивалентной поглощенной дозы внутренних органов); численное моделирование дополняет дозиметрические измерения, позволяет проводить большое количество вычислительных экспериментов, что способствует удешевлению и ускорению разработки новых радиационных технологий и материалов и т.д.

Цель работы

Для моделирования прохождения ионизирующего излучения применяются эмпирические, полумпирические, стохастические и детерминистические методы. Также, существуют различные способы расчета поглощенной дозы. Выбор соответствующего математического метода и способа расчета поглощенной дозы для расчета радиационно-защитных свойств материалов является целью данной статьи.

Описание математических методов расчета прохождения ионизирующего излучения через вещество

Авторами предложен радиационно-защитный материал и получен на него патент на полезную модель [1]. Для определения области применения данного материала требуется знать его радиационно-защитные свойства. Одним из возможных способов определения радиационно-защитных свойств является математические методы. В стан дарте-руководстве [2] описывается выбор и использование математических методов для проведения расчетов в области радиационных приложений. Как было сказано ранее существуют четыре метода для моделирования прохождения ионизирующего излучения через вещество: метод Монте-Карло, детерминистические, полуэмпирические и эмпирические методы.

При вычислениях методом Монте-Карло производится моделирование траекторий конечного числа частиц, приводящих к ионизации и происходит расчет различных физических величин, таких как, поглощенная доза, энергия частицы, ее координаты и многое другое. Преимуществом этого метода является, то, что в отличие от других методов, метод Монте-Карло, в принципе, может промоделировать все треки частиц и их взаимодействие с веществом, получить реалистическую картину актуальных столкновений и потери энергий при столкновениях. Все компоненты вклада в потерю энергии частицами могут быть учтены. В дополнение, метод Монте-Карло - метод, который может предоставить наиболее полную информацию в трехмерном измерении. Недостатком этого метода является то, что электроны с энергиями в диапазоне от 50 кэВ до 10 МэВ претерпевают огромное количество столкновений, точное моделирование всех треков не выполнимо или представляется затруднительным. Вместо этого, используются методы Монте-Карло со конденсированной историей (condensed history Monte Carlo methods).

Детерминистические методы используют уравнения, описывающие прохождение излучения в веществе и напрямую вычисляющие общее радиационное поле, поглощенную дозу и другие величины. Преимуществом детерминистических методов является, то что скорость работы программного обеспечения, основанного на этом методе, может быть быстрее по сравнению с методом Монте-Карло. Недостатком данного метода является то, что этот метод может быть чувствителен к осциллирующим решениям и ошибкам скорости сходимости решений.

Эмпирические и полуэмпирические методы основаны на статистических соотношениях измерений для конкретной системы. Преимуществом данных методов является их скорость и не требуют данных по сечениям, учета вторичных электронов и фотонов. Но недостатком таких методов есть, то, что

для каждого случая моделирования необходимо определять эмпирические зависимости. Также, такие методы могут вызвать затруднения в случаях, при которых присутствуют сложная геометрия.

В [2] перечислены следующие критерии выбора математического метода:

- спецификация типа источника и его геометрии;
- спецификация установки (объекта): геометрическое описание биологической защиты (камеры облучения), описание конвейера, вспомогательных элементов;
- спецификация материала облучаемого объекта и его геометрия.

На данный момент нет опубликованных методов выбора программного обеспечения для выбора в том или ином случае. Однако, главные критерии выбора следующие:

- эмпирические уравнения могут быть разработаны, сравнены с экспериментальными результатами, и в случае совпадения результатов расчетов с экспериментальными могут быть приняты и применены;
- если эмпирические методы не удовлетворяют критериям, которые определил пользователь, то следует использовать детерминистические или стохастические методы. На основании результатов вычислений с помощью детерминистических и/или стохастических методов могут быть выведены эмпирические соотношения, которые могут использоваться в дальнейших расчетах.

Во всех случаях необходимо провести валидацию результатов с использованием реальных экспериментальных данных. Сравнительная характеристика различных математических методов моделирования прохождения ионизирующего излучения через вещество приведена в табл. 1.

Таблица 1 – Сравнительный анализ математических методов моделирования прохождения ионизирующего излучения через вещество.

| Параметр | Метод Монте-Карло | Детерминистические методы | Полу- и эмпирические методы |
|---------------------------------|-------------------|---------------------------|-----------------------------|
| Размерность | 3-D | 3-D | - |
| Электроны | Да | Да | Да |
| Гамма-, рентгеновское излучение | Да | Да | Да |
| Скорость расчетов | Медленная | Средняя | Быстрая |
| Оценка точности | Да | - | - |
| Необходимость верификации | Да | Да | Да |

На основании рекомендаций и в связи с тем, что требуется оценивать точность и производить моделирование прохождения нейтронов через вещество для изучения радиационно-защитных свойств был выбран метод Монте-Карло.

Среди программного обеспечения, реализующего моделирование прохождения ионизирующего излучения был выбран программный комплекс GEANT4 [3, 4]. Обоснование выбора данного программного комплекса было рассмотрено в [5], где было проведено сравнение с другими пакетами, позволяющими моделировать прохождение ионизирующего излучения через вещество методом Монте-Карло [6 - 9].

Выбор и обоснование методики расчета поглощенной дозы и мощности дозы

В выбранном программном комплексе GEANT4 - большой перечень физических явлений и величин, которые могут быть промоделированы и рассчитаны: момент и кинетическая энергия частиц и фотонов, координаты и время шага, поглощенная доза, различная геометрическая информация и многое другое. Для расчета мощности дозы и мощности эквивалентной дозы простое деление поглощенной дозы и эквивалентной дозы на время обработки (экспозиции) не подходит, так как поглощенная доза и эквивалентная поглощенная доза рассчитывается для конечных объемов, и величина этих объемов могут быть значительными. Мощность поглощенной дозы и эквивалентной дозы имеет смысл в случаях, когда рассчитаны в точке и за короткий промежуток времени, т. е. равна dD/dt . Корректный расчет мощности поглощенной дозы и эквивалентной дозы предлагается выполнять следующим образом. Поглощенная доза в точке гамма излучения рассчитывается по следующей формуле:

$$dD = \psi \frac{\mu_{en}}{\rho}, \quad (1)$$

где dD - поглощенная доза, Гр; ψ - флюенс энергии гамма излучения, МэВ/см²; $\frac{\mu_{en}}{\rho}$ - массовый коэффициент ослабления, см²/г.

Для расчета эквивалентной дозы применяется дополнительный множитель W_R - взвешивающий коэффициент, зависящий от типа излучения (для гамма и рентгеновского излучения, электронов - 1, для нейтронов множитель зависит от их энергии, для протонов - 2).

Мощность поглощенной (эквивалентной) дозы при численных расчетах равна поглощенной (эквивалентной) дозе, рассчитанной по формуле (1) и деленной на время t в течении которого тело поглощает эту дозу:

$$\dot{D} = \frac{dD}{dt}. \quad (2)$$

Таким образом, мощность поглощенной (эквивалентной) дозы будет рассчитана в точке, для которой производится моделирование и такой подход может быть применен для корректного моделирования радиационно-защитных характеристик предложенного материала.

Для расчета массового коэффициента ослабления $\frac{\mu_{en}}{\rho}$, входящего в формулу (1) данные взяты из [10]. На рис. 1 приведены зависимость массового коэффициента ослабления для воды от энергии гамма кванта (обозначены точками). Отображенные на рис. 1 данные в источнике приведены в табличном виде, с большим шагом между соседними значениями энергий гамма кванта, поэтому для расчета поглощенной (эквивалентной) дозы необходимо табличные данные аппроксимировать. С этой целью нами применялся программный комплекс ROOT [11]. В связи с тем, что с увеличением энергии гамма кванта значение массового коэффициента ослабления быстро уменьшается подобрать аппроксимирующую функцию на весь диапазон энергий не удалось. Для решения этой проблемы диапазон энергий разбивался на малые интервалы энергий гамма кванта, и для каждого интервала подбиралась аппроксимирующая функция.

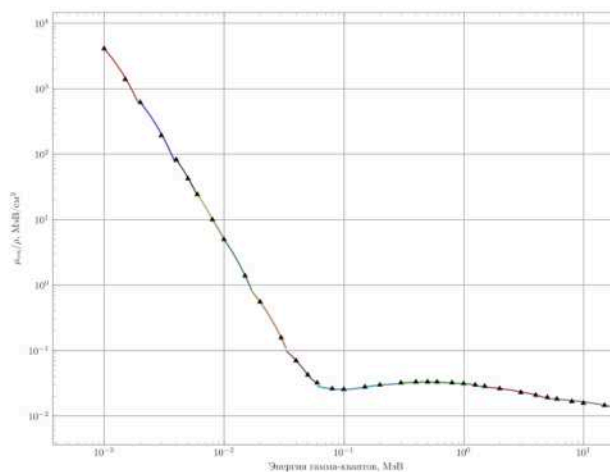


Рис. 1 – Зависимость массового коэффициента ослабления для воды от энергии гамма кванта. ▲ - табличные данные зависимости коэффициента массового ослабления для воды.

Результаты подбора аппроксимирующих функций приведены в табл. 2.

Таблиця 2 – Зависимость коэффициентов аппроксимирующих функций от диапазона энергий гамма-кванта.

| Диапазон энергий, МэВ | Вид функции | p ₀ | p ₁ | p ₂ | p ₃ | p ₄ | p ₅ | p ₆ | p ₇ |
|-----------------------|-------------|----------------|----------------|----------------|----------------|----------------|----------------|----------------|----------------|
| 0,0÷0,002 | эсп. | 10,371 | -2063,95 | | | | | | |
| 0,002÷0,004 | эсп. | 8,64225 | 6,9475 | | | | | | |
| 0,004÷0,006 | эсп. | -1111,52 | -636,505 | | | | | | |
| 0,006÷0,008 | эсп. | 5,83839 | -443,043 | | | | | | |
| 0,008÷0,01 | эсп. | 5,07754 | -347,937 | | | | | | |
| 0,01÷0,016 | эсп. | 4,15907 | -256,09 | | | | | | |
| 0,016÷0,03 | | 1,927770,347 | -126,253 | | | | | | |
| 0,032÷0,06 | полином. | 0,34753 | -10,3335 | 84,65 | | | | | |
| 0,06÷0,3 | полином. | 0,06051 | -0,98887 | 9,59759 | -34,3428 | -5,00379 | 347,751 | -835,313 | 621,782 |

| | | | | | | | | | |
|----------|----------|----------|------------|-----------|-----------|----------|-----------|-----------|--|
| 5.0÷20.0 | эсп. | -3,8712 | -0,0238322 | | | | | | |
| 1.5÷5.0 | эсп. | -3,40742 | -0,115632 | | | | | | |
| 0.3÷1.5 | полином. | 0,022611 | 0,0318272 | 0,0640415 | -0,358006 | 0,511662 | -0,309909 | 0,0689375 | |

В случае, когда в таблице указана вид функции - «эсп.» вид функции соответствует экспоненциальной функции: $y = \exp(p_0 + p_1 \cdot x)$; «полином.» соответствует полиномиальной функции: $y = p_0 + p_1 \cdot x + p_2 \cdot x^2 + p_3 \cdot x^3 + \dots$ причем порядок полиномиальной функции соответствует индексу коэффициента p_r , для которого указано значение.

Часть работы выполнена в рамках научно-исследовательского контракта МАГАТЭ № 18685.

Выводы

В ходе работы был выбрана математический метод моделирования прохождения ионизирующего излучения через вещество и способ расчета поглощенной (эквивалентной) дозы и мощности поглощенной (эквивалентной) дозы в точке, что более корректно позволяет проводить вычисления. Обоснован математический подход расчета поглощенной (эквивалентной) дозы и мощности поглощенной (эквивалентной) дозы.

Приведены результаты аппроксимации табличных данных зависимости массового коэффициента поглощения от энергии ионизирующего излучения для воды. Это позволит внедрить в программное обеспечение расчет массового коэффициента ослабления в зависимости от энергии излучения для значений энергий, лежащих в промежутке между табличными данными.

Список литературы

- 1 Пат. Україна 94166, МПК G21F 1/00 Радіаційно-захисний матеріал / Р. М. Трищ, В. В. Моргунов, Н. В. Диденко, М. В. Денисенко / заявл. 15.08.2014; опубл. 27.10.2014. – бюл. № 20. – 4 с.
- 2 E2322, ASTM Standard. 02-“Standard Guide for Selection and Use of Mathematical Methods for Calculating Absorbed Dose in Radiation Processing Applications”. *ASTM, Conshohocken, PA.* – 2002.
- 3 Agostinelli, S. GEANT4 – a simulation toolkit / S. Agostinelli, J. Allison, K. Amako, J. Apostolakis, H.

- Araujo, P. Arce, M. Asai, D. Axen, S. Banerjee, G. Barrant, et al.** // *Nuclear instruments and methods in physics research section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*. – 2003. – 506(3). – P. 250-303. – doi:10.1016/S0168-9002(03)01368-8.
- 4 **Allison, J.** GEANT4 developments and applications / **J. Allison, K. Amako, J. Apostolakis, H. Araujo, P. A. Dubois, M. Asai, G. Barrant, R. Capra, S. Chauvie, R. Chytracek, et al.** // *IEEE Transactions on Nuclear Science*. – 2006. – 53(1). – P. 270-278. doi:10.1109/TNS.2006.869826.
- 5 **Моргунів, В. В.** Численне моделювання визначення радіаційно-захисних показувачів матеріалів для створення робочої одягу / **В. В. Моргунів, Е. Н. Черняк, Н. В. Діденко** // *Комунальне господарство міст*. – 2015. – № 120(1). – С. 42-49.
- 6 **Battistoni, G.** The FLUKA code: Description and benchmarking / **G. Battistoni, F. Cerutti, A. Fasso, A. Ferrari, S. Muraro, J. Ranft, P. R. Sala** // *In Hadronic Shower Simulation Workshop(AIP Conference Proceedings – Volume 896)*. – 2007. – Vol. 896. – P. 31-49. – doi:10.1063/1.2720455.
- 7 **Pelowitz, D. B.** MCNPX user's manual version 2.5. 0. / **D. B. Pelowitz** // *Los Alamos National Laboratory*. – 2005. – 76 p.
- 8 **Mokhov, N. V.** Recent MARS15 developments: nuclide inventory, DPA and gas production. *arXiv preprint arXiv:1202.2383*. – 2012.
- 9 **Tatsuhiko Satoa** Particle and heavy ion transport code system, PHITS, version 2.52 / **Tatsuhiko Satoa, Koji Niitab, Norihiro Matsudaa, Shintaro Hashimotoa, Yosuke Iwamotoa, Shusaku Nodaa, et al.** // *Journal of Nuclear Science and Technology*. – 2013. – 50(9). – P. 913-923. – doi:10.1080/00223131.2013.814553.
- 10 **Hubbell, J. H.** 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 / **J. H. Hubbell, S. M. Seltzer** // *Tech. rep., National 110 Inst. of Standards and Technology-PL, Gaithersburg, MD (United States). Ionizing Radiation Div.* – 1995. – 114 p.
- 11 **Antcheva, I.** ROOT-A C++ framework for petabyte data storage, statistical analysis and visualization / **I. Antchevaa, M., Ballintijna, B. Bellenota, M. Biskupa, R. Bruna, et al.** // *Computer Physics Communications*. – 2009. – 180(12). – P. 2499-2512. – doi:10.1016/j.cpc.2009.08.005.
- 2 **E2322, ASTM Standard.** 02-“Standard Guide for Selection and Use of Mathematical Methods for Calculating Absorbed Dose in Radiation Processing Applications”. *ASTM, Conshohocken, PA, 2002.*
- 3 **Agostinelli, S., Allison, J., Amako, K., Apostolakis, J., Araujo, H., Arce, P., Asai, M., Axen, D., Banerjee, S., Barrant, G. et al.** GEANT4 – a simulation toolkit. *Nuclear instruments and methods in physics research section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 2003, **506(3)**, 250-303, doi:10.1016/S0168-9002(03)01368-8.
- 4 **Allison, J., Amako, K., Apostolakis, J., Araujo, H., Dubois, P. A., Asai, M., Barrant, G., Capra, R., Chauvie, S., Chytracek, R., et al.** GEANT4 developments and applications. *IEEE Transactions on Nuclear Science*, 2006, **53(1)**, 270-278, doi:10.1109/TNS.2006.869826.
- 5 **Morgunov, V., Tchernyak, E., Didenko, N.** Numerical simulation for radiation protective characteristics definition of work clothes [Numerical simulation of determining radiation protection performance materials to create workwear] *Komunakl'ne gospodarstvo mist [Utilities city]*, 2015, **120(1)**, 42-49.
- 6 **Battistoni, G., Cerutti, F., Fasso, A., Ferrari, A., Muraro, S., Ranft, J., Sala, P. R.** The FLUKA code: Description and benchmarking. *In Hadronic Shower Simulation Workshop(AIP Conference Proceedings Volume 896)*, 2007, **896**, 31-49, doi:10.1063/1.2720455.
- 7 **Pelowitz, D. B.** MCNPX user's manual version 2.5. 0. *Los Alamos National Laboratory*, 2005, 76 p.
- 8 **Mokhov, N. V.** Recent MARS15 developments: nuclide inventory, DPA and gas production. *arXiv preprint arXiv:1202.2383*, 2012.
- 9 **Tatsuhiko Satoa, Koji Niitab, Norihiro Matsudaa, Shintaro Hashimotoa, Yosuke Iwamotoa, Shusaku Nodaa, et al.** Particle and heavy ion transport code system, PHITS, version 2.52. *Journal of Nuclear Science and Technology*, 2013, **50(9)**, 913-923. doi:10.1080/00223131.2013.814553.
- 10 **Hubbell, J. H., Seltzer, S. M.** 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. *Tech. rep., National 110 Inst. of Standards and Technology-PL, Gaithersburg, MD (United States). Ionizing Radiation Div.*, 1995, 114 p.
- 11 **Antcheva, I., Ballintijna, M., Bellenota, B., Biskupa, M., Bruna, R., et al.** ROOT-A C++ framework for petabyte data storage, statistical analysis and visualization. *Computer Physics Communications*, 2009, **180(12)**, 2499-2512, doi:10.1016/j.cpc.2009.08.005.

Bibliography (transliterated)

- 1 **Patent 94166 Ukraine, МПК G21F 1/00** Radiation-protective material [Radiation-protective material] **R. Trishch, V. Morgunov, N. Didenko, M. Denisenko**, 27.10.2014, **20**, 4 p.

Сведения об авторах (About authors)

Моргунів Володимир Вікторович – кандидат технічних наук, Українська інженерно-педагогічна академія, доцент кафедри фізики, теоретичної і загальної електротехніки; г. Харків, Україна; e-mail: volodymyr.morgunov@gmail.com.

Volodymyr Morgunov – Ph. D., Docent, Ukrainian Engineering Pedagogics Academy, Kharkiv, Ukraine; e-mail: volodymyr.morgunov@mail.ua.

Тришч Роман Михайлович – доктор технічних наук, Українська інженерно-педагогічна академія, професор кафедри охорони праці, стандартизації і сертифікації; г. Харків, Україна; e-mail: trich_@ukr.net.

Roman Trishch – Doctor of Technical Sciences, Professor, Ukrainian Engineering Pedagogics Academy, Kharkiv, Ukraine; e-mail: trich_@ukr.net.

Диденко Наталья Викторовна – Харьковський національний автомобільно-дорожній університет, асистент кафедри метрології та БЖД, г. Харків, Україна; e-mail: natalya.v.didenko@gmail.com.

Natalya Didenko – Assistant lecturer, Kharkiv National Automobile and Highway University, Kharkiv, Ukraine; e-mail: natalya.v.didenko@gmail.com.

Пожалуйста ссылайтесь на эту статью следующим образом:

Моргунов, В. В. Выбор и использование математических методов для определения технологических параметров радиационно-защитных материалов / **В. В. Моргунов, Н. В. Диденко, Р. М. Трищ** // *Вестник НТУ «ХПИ», Серия: Новые решения в современных технологиях.* – Харьков: НТУ «ХПИ». – 2016. – № 12 (1184). – С. 56-61. – doi:10.20998/2413-4295.2016.12.08.

Please cite this article as:

Morgunov, V., Didenko, N., Trishch, R. Choice and use of mathematical methods to determine the technological parameters of radiation-shielding materials. *Bulletin of NTU "KhPI". Series: New solutions in modern technologies.* – Kharkiv: NTU "KhPI", 2016, **12** (1184), 56-61, doi:10.20998/2413-4295.2016.12.08.

Будь ласка посилайтесь на цю статтю наступним чином:

Моргунов, В. В. Вибір і використання математичних методів для визначення технологічних параметрів радіаційно-захисних матеріалів / **В. В. Моргунов, Н. В. Диденко, Р. М. Трищ** // *Вісник НТУ «ХПИ», Серія: Нові рішення в сучасних технологіях.* – Харків: НТУ «ХПИ». – 2016. – № 12 (1184). – С. 56-61. – doi:10.20998/2413-4295.2016.12.08.

АНОТАЦІЯ У статті обґрунтовано вибір програмного комплексу для проведення чисельного моделювання проходження іонізуючого випромінювання через речовину, наведено обґрунтування вибору коректного методу розрахунку дози і потужності дози при проведенні чисельного моделювання проходження іонізуючого випромінювання через речовину. Запропоновано методіку підбору апроксимуючої кусково-неперервної функції для розрахунку масового коефіцієнта ослаблення гамма-випромінювання, необхідного при розрахунку поглинутої та еквівалентної доз.

Ключові слова: іонізуюче випромінювання, чисельне моделювання, GEANT4, поглинена і еквівалентна доза, потужність дози.

Поступила (received) 11.02.2016