

УДК 004.942:519.6

Дозиметрия электронов на основе компьютерного моделирования глубинного распределения дозы излучения

В. Т. Лазурик, А. В. Починок

Харьковский национальный университет им. В.Н. Каразина, Украина

Предложен новый численный метод определения энергии электронов использующий полуэмпирическую модель дозы (ПМД) электронного излучения для аппроксимации дискретного набора результатов измерений. Разработан алгоритм и создано программное обеспечение EnergyDet реализующее метод ПМД. На основе компьютерного моделирования процесса получения результатов измерений, проведен сравнительный анализ вычислительного метода ПМД и комбинированной вычислительной схемы (КВС) реализующей метод в соответствии с ASTM E 1649-94. Показано, что метод ПМД более надежный и имеет меньшую статистическую неопределенность результатов. Отмечается ряд уникальных возможностей для решения оптимизационных задач конструирования дозиметрических устройств.

Ключевые слова: полуэмпирическая модель дозы, комбинированная вычислительная схема, численный метод, EnergyDet.

Запропоновано новий чисельний метод визначення енергії електронів, що використовує напівемпіричну модель дози (НМД) електронного випромінювання для апроксимації дискретного набору результатів вимірювань. Розроблено алгоритм і створено програмне забезпечення EnergyDet, що реалізує метод НМД. На основі комп'ютерного моделювання процесу отримання результатів вимірювань, проведено порівняльний аналіз обчислювального методу НМД та комбінованої обчислювальної схеми, що реалізує метод відповідно до ASTM E 1649-94. Показано, що метод НМД більш надійний і має меншу статистичну невизначеність результатів. Відзначається ряд унікальних можливостей для вирішення оптимізаційних задач конструювання дозиметричних пристроїв.

Ключові слова: напівемпірична модель дози, комбінована обчислювальна схема, чисельний метод, EnergyDet.

The new numerical method of the determination of electron energy using a semi-empirical model of the electronic radiation doze (SMD) for the approximation of a discrete set of the results measurement is offered. The algorithm is developed and the software EnergyDet realizing the method of the SMD is created. On the basis of computer modeling of process of obtaining of results measurement the comparison analyze of the SMD numerical method and the composite numerical scheme (realizing the method within ASTM E 1649-94) is performed. It is shown that the method of the SMD is more reliable and has lower statistical uncertainty of results. A number of unique opportunities for solving optimization problems of designing of dosimetric devices are pointed out.

Key words: empirical model of the electronic radiation doze, composite numerical scheme, numerical method, EnergyDet.

1. Введение

Одной из проблем контроля рабочих параметров радиационно-технологических процессов является определение энергии электронного излучения. Обсуждаемые ранее [1-4] методики получения наиболее вероятной энергии электронов в пучке, являются реализацией процедуры определенной

стандартами [5, 6] дозиметрического контроля. Эта процедура может быть представлена в виде трех этапов:

1. Измерение глубинной зависимости дозы излучения с использованием одного из стандартных дозиметрических устройств;

2. Определение практического пробега электронов по результатам измерений;

3. Определение значения наиболее вероятной энергии электронов в пучке по величине практического пробега на основании эмпирических соотношений полученных для набора стандартных материалов.

Анализ погрешностей процедуры получения наиболее вероятной энергии электронов в пучке показывает, что все перечисленные выше этапы могут вносить существенный вклад в неопределенность результатов.

Как правило, процедуры измерения глубинной зависимости дозы излучения с использованием одного из стандартных устройств хорошо установлены и описаны в технической документации этих устройств. При этом существенное место в описаниях занимает обсуждение погрешности методов измерений. В этой связи, можно полагать, что на первом этапе получают значения дозы излучения и определяют значения погрешностей проведенных измерений величины дозы.

Второй этап стандартизированной процедуры предполагает решение не корректной математической задачи – вычисление производных от эмпирических зависимостей, заданных в виде дискретного набора данных. Псевдорешения для таких задач принято получать, используя процедуры интерполяции и аппроксимации дискретных данных функциями, производные которых легко могут быть определены аналитически [7-10]. В этом случае, анализ производных проводится аналитическими методами, и необходимые информационные параметры из эмпирических зависимостей могут быть успешно извлечены. На этом этапе погрешности методов определения величины практического пробега электронов по результатам измерений связаны с произволом, как в выборе вида функции, так и выборе поднабора данных для проведения аппроксимации. Необходимость использования лишь части дискретного набора результатов измерений (поднабора данных) связана с отсутствием простых аналитических выражений, позволяющих описать весь набор результатов измерений. В этой связи, следует разделять составляющие погрешности – погрешности за счет вида аппроксимирующей функции (ВАФ) и за счет положения и размера области аргументов и значений аппроксимируемой зависимости (ОАЗ).

Расчет значений наиболее вероятной энергии электронов в пучке по величине практического пробега проводится в соответствии с набором аналитических формул, полученных эмпирическим путем и с использованием метода Монте-Карло [11]. Приведенный в стандартах [5,6] набор аналитических формул применим лишь к ограниченному набору материалов и ограниченной области энергий электронов. Несмотря на то, что в нескольких международных стандартах приводятся и обсуждаются вопросы использования формул, однако, нет никаких сведений о точности получаемых результатов. Более того, это аналитическое описание имеет скачки значений на границах областей энергии электронов, в которых проводилась полиномиальная аппроксимация данных

[9,10]. В этой связи, оценка погрешностей завершающего этапа процедуры получения наиболее вероятной энергии электронов в пучке по результатам измерения глубинной зависимости дозы излучения представляет большие трудности.

Таким образом, из приведенного выше анализа становится понятной проблема оценки погрешности вычислительных методов в стандартизированной процедуре дозиметрического контроля энергии электронов в пучке.

В настоящей работе развит и реализован численный метод определения энергии электронов по результатам измерений глубинного распределения дозы электронного излучения. Особенностью метода является использование полуэмпирической модели дозы (ПМД) электронного излучения для аппроксимации дискретного набора результатов измерений. Поэтому метод свободен от произвола в выборе аппроксимирующей функции и области аппроксимируемых данных и не содержит неопределенностей связанных с аппроксимацией эмпирических зависимостей. Проведен сравнительный анализ предложенного вычислительного метода и стандартизированной процедуры для дозиметрического контроля энергии электронов в пучке.

2. Метод определения энергии электронов на основе полуэмпирической компьютерной модели

Новый метод определения энергии электронного излучения основывается на аппроксимации данных в рамках полуэмпирической компьютерной модели. Пусть имеется дискретный набор данных (x_i, D_i) , описывающий N точек глубинной зависимости дозы электронного излучения. Пары значений (x_i, D_i) могут быть результатами измерений дозиметром и/или компьютерного моделирования. Поэтому проводится нормировка данных методом трапеций, вследствие чего значения дозы преобразовываются $D_i \rightarrow D_i^*$.

$$D_i^* = D_i / S, \quad \text{где} \quad S = \sum_{i=1}^{N-1} ((D_i + D_{i+1}) / 2 * (x_{i+1} - x_i)). \quad (2.1)$$

Определяются интервал в значениях энергии электронного излучения $[a, b]$, в котором работал электронный ускоритель, и точность (StepQ) искомого значения величины наиболее вероятной энергии электронов в пучке (E_p). На рисунке 2.1 показан полный перечень параметров необходимый для расчета значения E_p .

Parameters of the modeling material

Materials :

Atomic number : 13 Atomic weight : 26.98

Space scale of the depth dose-direction : 0.37

Parameter for fitting :

Interval : a : 7 b : 15 Accuracy : 0.01

Save

Рис. 2.1. Перечень параметров математической модели процесса определения энергии электронов на базе полуэмпирической компьютерной модели

В диапазоне энергий $[a, b]$ и с заданной точностью («Accuracy») методом золотого сечения [9] определяется значение величины E_p . При этом аргументами функции в методе золотого сечения являются значения E_p , а ее значениями – рассчитанные методом наименьших квадратов минимальные отклонения смоделированных и отнормированных значений дозы полуэмпирической модели от экспериментальных данных. Численные значения дозы электронного излучения D_i^* в точках x_i для моделирования получаются, используя полуэмпирическую модель глубинного распределения дозы электронного излучения в полубесконечной среде с плоской границей раздела [12-15], обобщенную на случай пространственно-неоднородных потоков излучения. На рисунке 2.2 приведена иллюстрация результата обработки глубинной зависимости дозы электронного излучения в алюминиевом клине при энергии излучения 10 МэВ и абсолютной погрешностью измерений 5% предложенным методом.

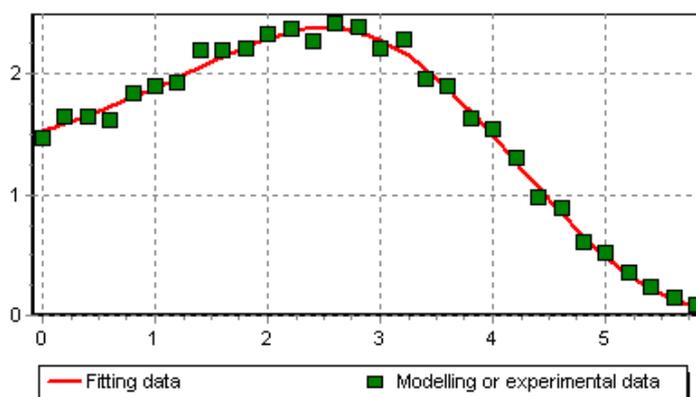


Рис. 2.2. Результат обработки дозы электронного излучения методом определения энергии электронов на основе полуэмпирической компьютерной модели

3. Сравнительный анализ методов определения энергии электронов на основе полуэмпирической компьютерной модели и компьютерной вычислительной схемы

Проведен сравнительный анализ [16,17] метода определения энергии электронов на основе полуэмпирической модели с предложенной ранее комбинированной вычислительной схемой (КВС), обеспечивающей меньшие значения неопределенностей результатов расчета энергии электронов, чем стандартные широко применяемые методы. Для сравнения методов использовался предложенный в работе [3] подход к оценке погрешностей методов определения энергии электронов в пучке. Выбран соответствующий набор метрик: мера адекватности математической модели метода обработки, значения систематической и случайной ошибок, смещение значения величины, полученного в результате применения метода, относительно истинного значения, и значение неопределенности искомой величины зависящей от способа выборки данных из набора результатов измерений.

Создано программное обеспечение EnergyDet, которое позволяет рассчитывать специальный набор метрик для оценки погрешностей методов. EnergyDet основывается на модифицированной математической модели процесса измерений глубинной зависимости дозы электронного излучения, проведенных с использованием различных дозиметрических устройств. Вид главной формы EnergyDet показан на рисунке 3.1. В программном обеспечении предусмотрена когнитивная визуализация входных данных и результатов их обработки после применения к ним вычислительных методов. EnergyDet обеспечивает визуальный сравнительный анализ полученных значений E_p .

Программное обеспечение EnergyDet оттестировано на наборах данных, полученных методом Монте-Карло в компьютерных экспериментах с использованием программного модуля ModeDW радиационно-технологического офиса RT-Office [14-15].

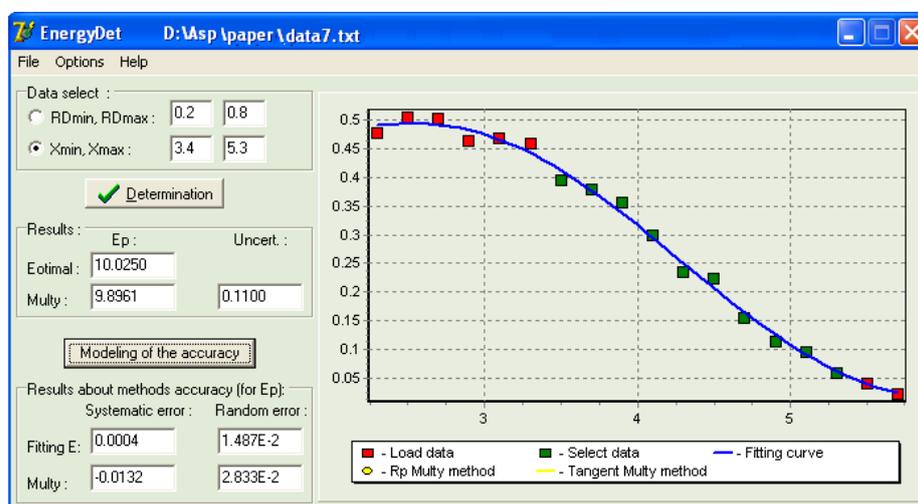


Рис. 3.1. Вид главной формы EnergyDet после моделирования точности реализованных методов

При проведении имитационных экспериментов с помощью EnergyDet, выбраны типичные характеристики модельных параметров для дозиметрического алюминиевого клина при энергии излучения 10 МэВ, абсолютная погрешность результатов дозиметрии 5%, выборка задана в 100000. Значения метрик исследуемых методов, полученные с помощью программного обеспечения EnergyDet, сведены в таблицу 3.1 и представлены в безразмерных единицах.

Таблица 3.1. Результаты сравнения методов обработки при выборке 100000.

| Метрики | Методы обработки результатов измерений | |
|--|--|---------------------|
| | Метод КВС | Метод на основе ПМД |
| 1. Мера неадекватности модели (W) | <0.03 | <0.00001 |
| 2. Систематическая ошибка | < 0.02 | <0.0002 |
| 3. Коэффициент трансформации (случайной ошибки δ) | 0.6102 | 0.1569 |
| 4. Смещение рез-тата относительно аналитически рассчитанного значения (ΔR_p) | <0.19 | <0.0015 |

Для расчета коэффициента трансформации случайной ошибки выбран диапазон реальных ошибок измерений дозиметрии: от 0.1% до 10%. В ходе исследования метода КВС обнаружена линейная зависимость коэффициента трансформации от входной погрешности. Под входной погрешностью подразумевается трансформированная погрешность – погрешность, возникающая за счет погрешности измерений дозы электронного излучения. Замечено уменьшение значения коэффициента трансформации с увеличением входной погрешности практически в 2 раза. При обработке данных методом определения энергии электронов на основе полуэмпирической модели коэффициент трансформации придерживается константы в среднем значении 0.157. Это свидетельствует о том, что увеличение трансформированной погрешности не влияет на ширину разброса значений энергий электронного пучка в применении метода определения энергии электронов на основе полуэмпирической модели к результатам дозиметрии.

Наряду с приведенными в таблице 3.1 метриками получены гистограммы распределения искомой величины наиболее вероятной энергии E_p каждого из методов и показаны на рисунке 3.2.

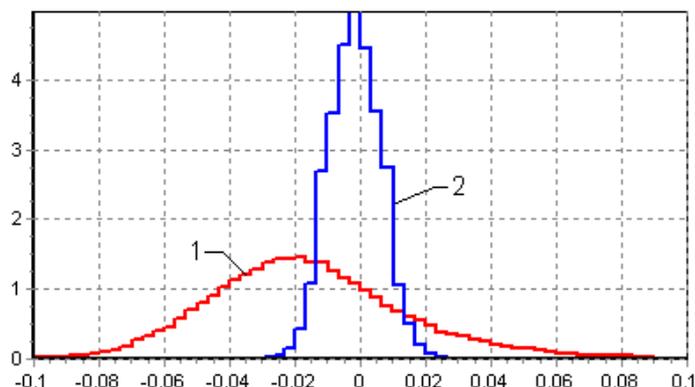


Рис. 3.2. Распределения величины E_p .

Гистограмма 1- по комбинированной вычислительной схеме; гистограмма 2- методом определения энергии электронов на основе полуэмпирической компьютерной модели.

Из рисунка 3.2 (гистограмма - 1) видно, что комбинированная вычислительная схема имеет смещение максимального значения распределения относительно точного значения. Отметим, что с увеличением входной погрешности данных, максимальное значение распределения относительно точного значения все больше смещается в область меньших значений. Наблюдается некоторая асимметрия распределения, вытянутость в область меньших значений. Как следует из данных, приведенных в таблице 3.1, математическая модель метода в 3% случаев неадекватна физической модели результатов дозиметрии. Определены систематические и случайные составляющие погрешности комбинированной вычислительной схемы. Наблюдается статистическое смещение значения искомой величины.

Как видно из гистограммы - 2 (см. рис. 3.2) распределение величины E_p , полученной методом определения энергии электронов на основе полуэмпирической компьютерной модели, в отличие от метода КВС, практически не имеет смещения максимального значения относительно точного значения, не содержащего погрешностей, даже при увеличении входной погрешности данных. С помощью метода определения энергии электронов на основе полуэмпирической компьютерной модели избавились от возникновения неустранимых по отношению к вычислительному методу погрешностей физической и математической моделей. Математическая модель метода корректно описывает глубинную зависимость дозы электронного излучения, так как является максимально приближенным (аналитическим) описанием реального процесса. Значения систематической и случайной погрешностей мало, как и статистического смещения значения искомой величины.

5. Заключение

Развит новый вычислительный метод определения энергии электронов на основе полуэмпирической компьютерной модели, который свободен от

произвола в выборе аппроксимирующей функции и области аппроксимируемых данных. Не содержит неопределенностей эмпирических зависимостей наиболее вероятной энергии электронов в пучке от величины практического пробега. Принципиально новым с точки зрения технических решений является возможность использования предлагаемого вычислительного метода для произвольных химических составов и плотностей рабочего вещества дозиметрических устройств при измерении глубинной зависимости дозы излучения. В частности, предоставляет уникальные возможности для решения оптимизационных задач конструирования дозиметрических устройств (клиньев и стеков) для специализированных источников электронного излучения (широкий спектр, широкое угловое распределение пучка).

Разработан алгоритм метода определения энергии электронов на основе полуэмпирической компьютерной модели, который реализован в виде независимого модуля программного обеспечения EnergyDet. С помощью EnergyDet проведен сравнительный анализ методов определения энергии электронов на основе полуэмпирической компьютерной модели и комбинированной вычислительной схемы. Статистический анализ неопределенностей результатов обработки данных показал, что новый метод является уникальным по сравнению с уже используемыми в практике.

Созданное программное обеспечение EnergyDet может быть эффективно использовано в практической деятельности радиационно-технологических центров для повышения точности и надежности дозиметрического контроля энергии электронного излучения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Lisanti Thomas F. Calculating electron range values mathematically // *Radiation Physics and Chemistry*, Vol. 71. – 2004. – P. 581-584.
2. Верещака В.В., Лазурик В.Т., Починок А.В. Компьютерное моделирование процесса определения энергии электронного пучка // *Вестник ХНТУ*. – 2009. - №2(35). – С. 136 – 140.
3. А.В. Починок. Сравнение вычислительных методов определения энергии электронов по результатам дозиметрии // *Вестник Харьковского национально университета имени В.Н. Каразина, Серия «Математическое моделирование. Информационные технологии. Автоматизированные системы управления»*, №890, Харьков, 2010 г., С. 187-194.
4. А.В. Починок. Статистический анализ методов определения энергии электронов по результатам измерений глубинного распределения дозы // *Сборник научно-технической конференции с международным участием «Компьютерное моделирование в наукоемких технологиях» (КМНТ-2010)*, Харьков, 18-21 мая 2010, С. 288-291.
5. Standard practice for dosimetry in an electron beam facility for radiation processing at energies between 300 keV and 25 MeV. ASTM Standards. Designation: E 1649-94.
6. ICRU REPORT 35. Radiation dosimetry: electron beams with energies between 1 and 50 MeV. – 1984.

7. Bevington P.R. Data reduction and error analysis for the physical sciences // Case Western Reserve University. – 1989. – P. 336.
8. Михлин С. Г. Некоторые вопросы теории погрешностей // Л.: Издательство ЛГУ. – 1988. – С. 334.
9. Н.Н. Калиткин Численные методы М.: Наука, 1980 г. – 512 стр.
10. Н.С. Бахвалов, Н.П. Жидков, Г.М. Кобельков Численные методы. – М.: Наука, 1989 г. – 632 стр.
11. Бусленко Н.П. Метод статистических испытаний (метод Монте-Карло) / Н.П. Бусленко, Д.И. Голенко, И.М. Соболев, В.Г. Срагович, Ю.А. Шрейдер // М.: Физматлит. – 1962. – С. 322.
12. Tabata T., Andreo P. and Shinoda K. An algorithm for depth-dose curves of electrons fitted to Monte Carlo data // Radiation Physics and Chemistry. – 1998. – Vol. 53. – P. 205-215.
13. Tabata T., Lazurik V.T., Lazurik V.M. EMID: Electron Material Interaction Database // Bulletin IRPS. – 2000. – Vol. 14, Nos. 2/3. – P. 6.
14. Lazurik V.T., Lazurik V.M., Popov G.F., Rogov Yu.V. Modeling of processes of an irradiation for industrial technologies // Вісник Харківського національного університету. – 2003. – № 605, серія Мат. модел. Інформ. технології. Автоматизовані системи управління, вип. 2. – С. 72-89
15. Lazurik V.T. Integration of computation methods in dosimetry of radiation processing. / V.T. Lazurik, V.M. Lazurik, G.F. Popov, Yu.V. Rogov // Problems of atomic science and technology. Series: Nuclear Physics Investigation – 2008. – N3(49). – P. 201-205.
16. Идье В. Статистические методы в экспериментальной физике. Перевод с англ. / В. Идье, Д. Драйард, Ф. Джеймс и др. // М.: Атомиздат. – 1976. – С. 336.
17. Э. Леман Проверка статистических гипотез // М.: Наука, главная редакция физ.-мат. литературы. – 1979. – С. 408.