

УДК 004.62:519.6

В.М. Лазурик¹, С. Салах¹, Р.В. Лазурик², А.В. Починок³¹ Харьковський національний університет імені В.Н. Каразіна, Харків² Інститут радіофізики і електроніки НАН України імені А.Я. Усікова, Харків³ Національний університет державної податкової служби України, Ірпінь

ПОДГОТОВКА ЭТАЛОННЫХ НАБОРОВ ДАННЫХ ДЛЯ ОЦЕНКИ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТИ МЕТОДОВ КОМПЬЮТЕРНОЙ ДОЗИМЕТРИИ ЭЛЕКТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Рассмотрены численные методы обработки результатов измерений характеристик электронного излучения, выполненных с помощью дозиметрического клина. Предложена технология получения и хранения результатов моделирования глубинных распределений дозы электронного излучения для использования в качестве эталонных при оценке неопределенности методов обработки результатов дозиметрических измерений. Выбрано программное обеспечение для получения наборов данных и разработана база данных для их хранения. Создана программная оболочка для сохранения и выборки эталонных наборов данных.

Ключевые слова: глубинное распределение дозы, электронное излучение, эталонные наборы данных, моделирование методом Монте-Карло, база данных.

Введение

Постановка проблемы. Радиационная обработка материалов стала сейчас общепринятой технологией во всем мире. Она используется, в частности, для стерилизации медицинского оборудования и фармацевтической продукции, сшивки полимеров, обеззараживания пищевых продуктов и т. п. Для каждого радиационно-технологического (РТ) процесса первоочередными являются задачи выбора оптимальных режимов работы, которые обеспечивают допустимый уровень равномерности дозы излучения в объеме обрабатываемого объекта. Решение этих задач приводит к необходимости совершенствовать имеющиеся и разрабатывать новые методы определения и контроля параметров РТ процессов. Для проведения оценки возможностей существующих методов и развития нового математического обеспечения необходимы эталонные наборы данных. Существующие способы получения эталонных экспериментальных данных на РТ установках требуют значительных затрат.

Актуальной представляется задача создания информационной технологии получения и хранения эталонных наборов данных на основе компьютерного моделирования глубинных распределений дозы.

Анализ последних исследований и публикаций. В практике РТ центров для дозиметрии электронного излучения используют величину E_p – энергию, при которой достигается максимальное значение спектра излучения $S_{max} = S(E_p)$. Эту величину называют наиболее вероятной энергией электронов в пучке и она является важнейшим технологическим параметром процесса облучения. На практике для определения наиболее вероятной энер-

гии электронов используются специальные дозиметрические устройства [1, 2]:

- стек дозиметрических пленок, разделенных слоями какого либо материала;
- полоска дозиметрической пленки в дозиметрическом клине (рис. 1);
- набор детекторов в дозиметрическом клине.

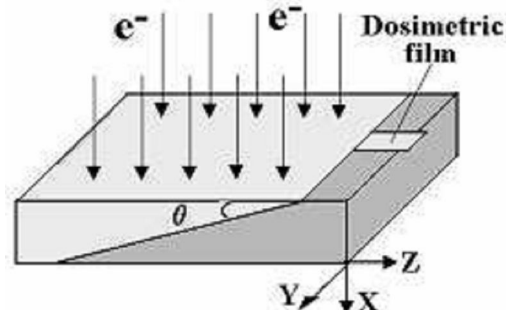
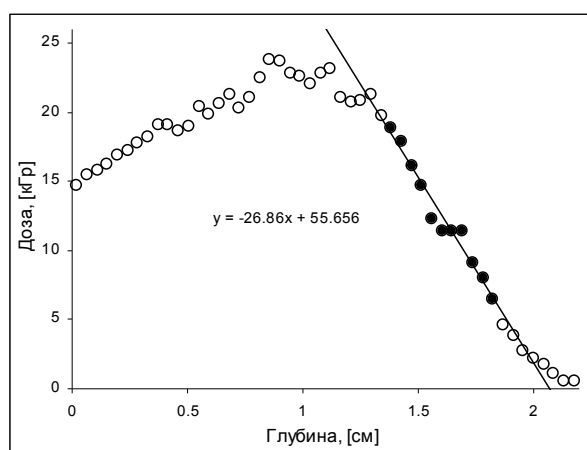


Рис. 1. Модель дозиметрического клина с полоской дозиметрической пленки

В основном, используют дозиметрические устройства стандартных размеров, изготовленные из однородных материалов, таких как алюминий, графит. Процедуры использования дозиметрических устройств и методики определения наиболее вероятной энергии электронов в пучке [3, 4] проводятся в несколько этапов. Вначале устройство облучают на РТ линии электронным пучком, потом из него извлекают дозиметры и проводят их предварительную обработку – определяют значения дозы в различных пространственных точках дозиметрического устройства по измеренным величинам оптической плотности пленок в этих точках. Типичный вид результатов измерений представлен на рис. 2.

Рис. 2. Иллюстрация метода определения R_p

По результатам измерений определяют практический пробег электронов R_p . Для этого строят график зависимости дозы от глубины и на спаде дозы определяют координату точки перегиба на кривой. В точке перегиба проводят касательную к кривой. Величина R_p определяется как точка пересечения касательной с осью X (рис. 2). По величине R_p на основе эмпирических соотношений, полученных для стандартных материалов, определяют значение наиболее вероятной энергии электронов E_p в пучке.

Результаты измерений представляют собой набор дискретных данных. Для вычисления значения R_p требуется вычисление первой производной (величины скорости уменьшения дозы) и второй производной (точки с максимальной скоростью уменьшения дозы). Это является одной из проблем практической дозиметрии, поскольку численное дифференцирование является некорректной математической задачей, и требует разработки специальных вычислительных методов.

В практике радиационно-стерилизационных центров общепринятым методом решения задачи по вычислению значения R_p является использование линейной аппроксимации данных в области, для которой относительная величина дозы спадает от 0,8 до 0,2 максимального значения дозы [3, 4]. Этот метод проиллюстрирован на рис. 2.

Более детальная аппроксимация в той же области данных предложена с использованием полинома четвертой степени [5]. В работах [6, 7] с использованием программного обеспечения «Delen» и «StPolinom», исследовались возможности аппроксимации данных в этой же области спада глубинных распределений полиномами третьей, четвертой и пятой степеней.

В [8, 9] предложен вычислительный метод PFSEM, в котором аппроксимация результатов измерений проводится на основе одно [8] или двух [9] параметрической подгонки методом наименьших квадратов параметров компьютерной реализации полумпирической модели [10].

Расчет погрешностей численных методов для определения энергии электронов в пучке проводится по результатам обработки эталонных глубинных распределений дозы. Для статистической оценки методов требуется большое количество таких эталонных наборов данных. В этой связи целесообразным представляется получение эталонных наборов данных на основе моделирования физических процессов, т. е. проведения компьютерных экспериментов [11].

Цель и задачи исследования. Целью исследований является разработка системы, обеспечивающей получение, накопление и хранение эталонных данных, а также динамический доступ к ним для расчета статистических оценок неопределенностей различных вычислительных методов обработки результатов измерений.

Для достижения поставленной цели необходимо было решить следующие задачи:

- выбрать программное обеспечение для корректного моделирования глубинных распределений дозы в объектах, облучаемых сканирующими/стационарными пучками электронов;
- выбрать систему управления базами данных (СУБД) для хранения результатов компьютерных экспериментов;
- разработать структуру данных, создать базу данных (БД);
- разработать программную оболочку для динамической выборки результатов компьютерных экспериментов в удобной для дальнейшего исследования форме.
- апробировать разработанную систему при решении конкретной физической задачи с определенными параметрами моделирования процесса облучения и мишени.

Технология получения и сохранения результатов компьютерных экспериментов

1. Программное обеспечение для моделирования эталонных данных

Для проведения компьютерных экспериментов было выбрано специализированное программное обеспечение – Радиационно-Технологический Офис (RT-Office) [12].

RT-Office реализует компьютерные технологии на всех этапах выполнения работ на РТ линиях с излучателями в виде электронов, X-ray и γ -ray.

RT-Office – это общая программная оболочка, которая обеспечивает гибкое интеллектуальное взаимодействие между специализированными модулями для оптимального планирования процесса облучения и контроля его проведения.

Возможности RT-Office базируются на:

- разработанных полумпирических моделях распределения поглощенной дозы в пространственно-

неоднородных объектах, облучаемых сканирующими/стационарными пучками электронов и фотонов;

- эффективных программах, моделирующих методом Монте-Карло процессы облучения;

- самосогласованных геометрических и физических моделях основных функциональных элементов и режимов облучения реального радиационного оборудования;

- базах данных о характеристиках оборудования и объектов, используемых в радиационных технологиях;

- компьютерных методах экспертизы и контроля условий проведения облучения;

- компьютерных методах представления, анализа и интерпретации расчетных данных;

- методах валидации теоретических предсказаний на основе сравнения расчетных данных, полученных различными независимыми методами моделирования или/и сравнением с практической дозиметрией.

Для моделирования глубинного распределения дозы в объекте была выбрана специализированная программа ModeRTL (Моделирование РТ линии), входящая в состав RT-Office. ModeRTL включает в себя пять тематических взаимосвязанных блоков, каждый из которых выполняет свои специфические функции.

При решении поставленной задачи был использован аналитический блок для быстрых аналитических оценок, блок для точных вычислений методом Монте-Карло с заданной статистикой и блок для визуализации, анализа и сравнения полученных результатов расчета.

2. Параметры для проведения компьютерных экспериментов

Моделирование проводилось методом Монте-Карло с использованием 10^3 траекторий электронов. Плоскую алюминиевую пластину облучали нормально падающим мононаправленным моноэнергетическим пучком электронов с энергией 10 МэВ. Гистограмма, представляющая глубинное распределение дозы, содержала 50 ячеек.

При таком значении числа моделируемых электронных траекторий и размера ячейки гистограммы глубинного распределения дозы, относительная статистическая погрешность результатов моделирования была на уровне 4 %, что сравнимо с величинами погрешностей результатов измерений.

В качестве иллюстрации эталонных данных на рис. 3 представлены две гистограммы, полученные моделированием 10^3 траекторий электронов. Для сравнения на рисунке приведена сплошная кривая, полученная с использованием 210^8 траекторий. ModeRTL предоставляет возможность сохранить результаты моделирования в текстовом файле.

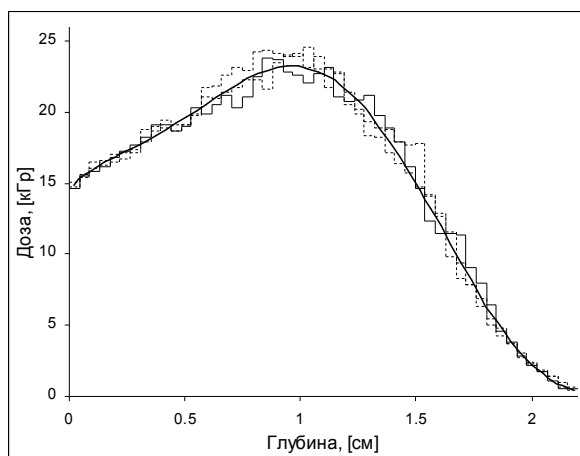


Рис. 3. Глубинные распределения дозы в алюминиевой пластине, облучаемой электронами с энергией 10 МэВ

3. Система управления базой данных, структура данных, язык программирования для разработки программной оболочки

Для разработки БД были проанализированы некоторые системы управления данными. Сравнивались возможности использования MySQL и PostgreSQL серверов баз данных, а также библиотеки SQLite. В связи с тем, что RT-Office содержит однопользовательские десктопные модули, нет необходимости поддерживать сетевой доступ. В результате была выбрана реляционная встраиваемая SQLite [13]. SQLite не представляет собой независимый процесс, с которым взаимодействует программа, а является составляющей программы, и полностью интегрируется в нее. Она хранит всю базу данных в единственном стандартном файле на том компьютере, на котором исполняется программа.

Для разработки клиента к SQLite БД был выбран язык программирования C# [14]. Такой выбор был сделан по причине обширной документации по использованию SQLite в C# проектах, наличия стабильной версии драйвера System.Data.Sqlite - ADO.NET провайдера для SQLite. Для написания приложения использовалась среда разработки Visual Studio C# Express, платформа .Net Framework 4.0.

Структура файла результатов, полученных с использованием ModeRTL, приведена на рис. 4. Для использования в качестве эталонных данных при сравнении вычислительных методов обработки данных, необходимо только глубинное распределение дозы в центре мишени. Программная оболочка «Etaplon», разработанная для получения эталонных данных, запускает выполнение программы ModeRTL, передавая ей параметры, после чего анализирует полученные и сохраненные в файле результаты моделирования, выделяет необходимую часть и сохраняет их в БД. Структура файла результатов моделирования РТ процесса программой ModeRTL приведена на рис. 4.

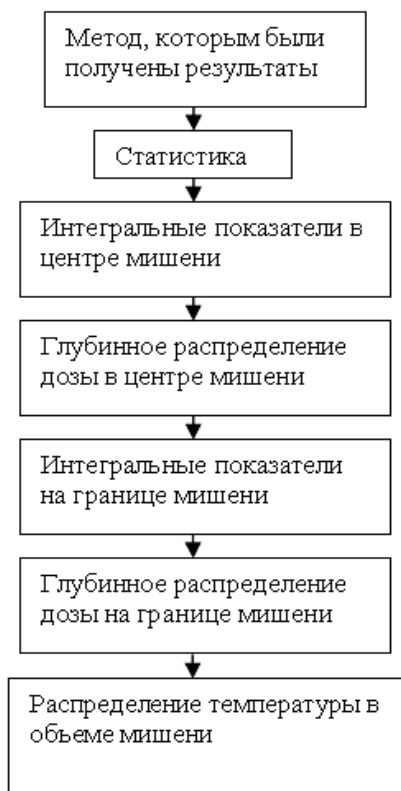


Рис. 4. Структура результатов расчета ModeRTL

На рис. 5 приведена структура данных, представляющих собой глубинное распределение дозы в центре мишени, сохраняемых в SQLite БД.

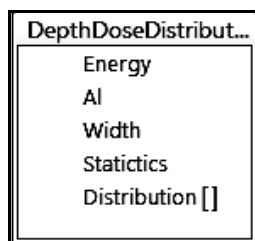


Рис. 5. Структура данных, сохраняемых в БД

Поле Distribution представляет собой массив данных и имеет тип BLOB (массив двоичных данных). «Etalon» обеспечивает сериализацию и десериализацию данных, т.е. процесс преобразования объекта в поток байтов для хранения или передачи его в БД и обратный процесс распаковки данных.

Разработанная программная оболочка «Etalon» позволяет динамически выбрать из БД необходимый набор результатов компьютерных экспериментов.

Выбранные из БД данные могут быть представлены в текстовом формате с возможностью дальнейшего использования в любом инструментальном программном средстве, в котором исследуются различные методы обработки экспериментальных данных.

4. Использование эталонных наборов данных

Пример сравнения некоторых методов аппроксимации глубинного распределения дозы в алюминиевой мишени, облучаемой пучком электронов с энергией 10 МэВ, на основе данных, полученных в компьютерных экспериментах, представлен на рис. 6.

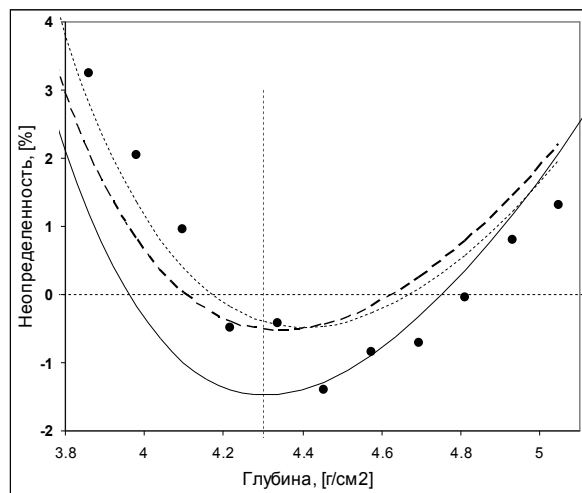


Рис. 6. Неопределенность методов расчета величин практического пробега электронов

На рисунке приведены зависимости неопределенности различных методов расчета величин практического пробега электронов R_p . Маркерами в виде окружностей представлены результаты, полученные на основе данных моделирования глубинного распределения дозы методом Монте-Карло и расчета производных численными методами дифференцирования.

Сплошные кривые – расчет с использованием полуэмпирической модели.

Пунктирные кривые – расчеты на основе данных, полученных методом Монте-Карло с использованием аппроксимации всей области спада дозы полиномом 3-й и 4-й степени и определением производных точными аналитическими методами.

Горизонтальная пунктирная прямая – линейная аппроксимация данных на ограниченном участке между 0.2 и 0.8 от максимального значения дозы в мишени.

Вертикальная пунктирная прямая отмечает координату точки перегиба на кривой глубинной зависимости дозы, которая определена по полуэмпирической модели.

Выводы

Предложена система подготовки, хранения и динамической выборки эталонных данных, которые могут использоваться для статистических оценок неопределенностей различных вычислительных методов обработки результатов измерений.

В работе обсуждаются функциональные элементы системы:

– моделирование глубинных распределений дозы электронного излучения с использованием специализированного программного обеспечения ModeRTL;

– выделение из результатов компьютерного моделирования эталонных данных, сохранение их в SQLite БД;

– выборка эталонных данных из БД и преобразование их к виду, пригодному для проведения статистических оценок характеристик вычислительных методов;

– апробация функциональных элементов разработанной системы при решении практической задачи. Эталонные данные, полученные как результат 26 компьютерных экспериментов с использованием ModeRTL, были использованы для проведения сравнения вычислительных методов аппроксимации глубинных распределений дозы электронного излучения.

Список литературы

1. Москалев В.А. Измерение параметров пучков заряженных частиц / В.А. Москалев, Г.И. Сергеев, В.Г. Шестаков. – М.: Атомиздат, 1980. – 160 с.
2. Miller A. Polystyrene calorimeter for electron beam dose measurements / A. Miller // *Radiation Physics and Chemistry*. – 1993. – Vol. 46. – P. 1243 – 1246.
3. ISO/ASTM Standard 51649, Practice for dosimetry in an e-beam facility for radiation processing at energies between 300 keV and 25 MeV / *Annual Book of ASTM Standards*. – Vol. 12.02 (2005).
4. ICRU REPORT 35. Radiation dosimetry: electron beams with energies between 1 and 50 MeV. – 1984. – 160 с.
5. Lisanti T.F. Calculating electron range values mathematically / T.F. Lisanti // *Radiation Physics and Chemistry*. – 2004. – Vol. 71. – P. 581 – 584.
6. Починок А.В. Моделирование характеристик неопределенности энергии электронного пучка, полученной

методом дозиметрического клина / А.В. Починок, В.М. Лазурик, А.Ю. Баев // *Вестник ХНТУ*. – 2010. – № 3(39). – С. 386 – 390.

7. Починок А.В. Сравнение вычислительных методов определения энергии электронов по результатам дозиметрии / А.В. Починок // *Вісник Харківського національного університету імені В. Н. Каразіна. Серія «Математичне моделювання. Інформаційні технології. Автоматизовані системи управління»*. – 2010. – № 890. – С. 187 – 194.

8. Lazurik V.T. Dosimetry of electrons on the base of computer modeling the depth-dose distribution of irradiation / V.T. Lazurik, A.V. Pochynok // *Journal of Kharkiv University. Mathematical modeling. Information technologies series*. – 2010. – № 925. – P. 114 – 122.

9. Pochynok A.V. The parametric method of the determination of electron energy on the data obtained by the method of a dosimetric wedge / A.V. Pochynok, V.T. Lazurik, G.E. Sarukhanyan // *Bulletin Kherson National Technical University*. – 2012. – Vol. 2(45). – P. 298 – 302.

10. Lazurik V.M. A Database for Electron-Material Interactions / V.M. Lazurik, T. Tabata, V.T. Lazurik // *Radiation Physics and Chemistry*. – 2001. – Vol. 60. – P. 161 – 162.

11. 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. – № 3(49). – P. 201 – 205.

12. Lazurik V.T. Information System and Software for Quality Control of Radiation Processing / / V.T. Lazurik, V.M. Lazurik, G.F. Popov, Yu.V. Rogov, Z. Zimek // *IAEA: Collaborating Center for Radiation Processing and Industrial Dosimetry, Warsaw : Poland*. – 2011. – 220 p.

13. SQLite.NET [Електрон. ресурс]. – Режим доступу: <https://system.data.sqlite.org>.

14. Троелсен Э. С# и платформа .NET. Библиотека программиста. – СПб.: 2004. – 796 с.

Поступила в редколлегию 11.01.2016

Рецензент: д-р техн. наук, проф. В.О. Мищенко, Харьковский национальный университет им. В.Н. Каразина, Харьков.

ПІДГОТОВКА ЕТАЛОННИХ НАБОРІВ ДАНИХ ДЛЯ ОЦІНКИ НЕВИЗНАЧЕНОСТІ МЕТОДІВ КОМП'ЮТЕРНОЇ ДОЗИМЕТРІЇ ЕЛЕКТРОННОГО ВИПРОМІНЮВАННЯ

В.М. Лазурик, С. Салах, Р.В. Лазурик, А.В. Починок

Розглянуті чисельні методи обробки результатів вимірювань характеристик електронного випромінювання, що виконані за допомогою дозиметричного клину. Запропонована технологія отримання та зберігання результатів моделювання глибинних розподілів дози електронного випромінювання щодо використання в якості еталонних при оцінці невизначеності методів обробки результатів дозиметричних вимірів. Вибране програмне забезпечення для одержання наборів даних і розроблена база даних щодо їх зберігання. Створена програмна оболонка для збереження та вибірки еталонних наборів даних.

Ключові слова: глибинний розподіл дози, електронне випромінювання, еталонні набори даних, моделювання методом Монте-Карло, база даних.

PREPARATION OF STANDARD DATA SETS TO ESTIMATE THE UNCERTAINTY OF METHODS OF COMPUTER DOSIMETRY OF ELECTRON RADIATION

V.M. Lazurik, S. Salah, R.V. Lazurik, A.V. Pochynok

Numerical methods for processing results of measurements of electron radiation, with use of dosimetric wedge, is considered. Technology of preparation of standard data sets based on the simulation of the depth-dose distribution of electron beam is proposed. These data sets can be used to estimate the uncertainty of the numerical methods of dosimetry measurements. The software to obtain standard data sets is defined and the data base is developed. Program shell for control of recording and selecting of standard data sets is created.

Keywords: depth-dose distribution, electron radiation, standard data sets, Monte-Carlo simulation, data base.