

УДК 519.876.5

А.Н. Дудин, В.В. Нешименко

**НИЗКОЭНЕРГЕТИЧЕСКАЯ ЭЛЕКТРОМАГНИТНАЯ ФИЗИКА В GEANT4**

*Электромагнитный пакет Geant4 – Low Energy предлагает множество моделей, описывающих электромагнитные процессы электронов и позитронов, фотонов, заряженных адронов и ионов с учетом подробных особенностей. Данные модели находят применение в экспериментальных областях – таких как астрофизика, космические и биомедицинские исследования, что позволяет провести новые симуляционные исследования, используя приложения Geant4.*

*Ключевые слова: Geant4, низкоэнергетический, электромагнитный пакет, моделирование, физические модели.*

**LOW ENERGY ELECTROMAGNETIC PHYSICS IN GEANT4**

*Electromagnetic package Geant4 – Low Energy, offers a variety of models describing electromagnetic processes, electrons and positrons, photons, charged hadrons, and obtained with detailed attributes. Model data that allows for new simulation studies using Geant4 allows for new simulation studies using space and biomedical research.*

*Key words: Geant4, low energy, electromagnetic package, modeling, physical models.*

**Введение**

Точное моделирование электромагнитных взаимодействий частиц с веществом является критическим требованием в различных экспериментальных областях. В радиотерапии, например, требуется очень точное моделирование потери энергии как налетающих частиц, так и их вторичных частиц. Чтобы максимизировать безопасность пациента, необходимы точные знания трехмерного распределения дозы облучения в небольших объемах, что подразумевает низкие пороги производства энергии и небольшую длину шага при отслеживании частиц. С другой стороны, в космической аппаратуре уменьшение размера компонентов привело к более высокой восприимчивости к так называемым разовым событиям. Эти явления обусловлены прежде всего падающими протонами и ионами, характеризующимися большими отложениями энергии в небольших чувствительных объемах, особенно вблизи конца трека частиц. Такие явления обычно приводят к разрыву бит-флип памяти, могут способствовать либо временному операционному сбою прибора в космическом аппарате, либо, в худшем случае, к выходу из строя и провалу всей миссии. Детальное моделирование вторичных эффектов – таких как атомная релаксация, возникающая из-за вакансии атомов, оставленных процессами первичного взаимодействия, – требуется в различных областях, где исследуется состав материала из спектров их характерных рентгеновских лучей. Более того, точное моделирование электромагнитных процессов полезно для точных исследований детекторов слежения при экспериментах в области высоких энергий и ядерной физики.

Цель статьи – продемонстрировать устройство низкоэнергетического электромагнитного пакета, который в свою очередь предоставляет более точные результаты для моделирования взаимодействия частиц с веществом до низких энергий; показать области его применения и особенности работы с некоторыми типами частиц.

### Geant4 (GEometry ANd Tracking)

Инструмент моделирования Geant4 [1] представляет собой объектно-ориентированный пакет программ, предназначенных для моделирования прохождения элементарных частиц через вещество. Встроенные средства Geant4 позволяют полностью описать физический эксперимент: геометрию детектора, химический состав образующих его материалов, типы частиц, участвующих в эксперименте, а также все возможные физические процессы. Geant4 располагает обширной библиотекой программ на языке C++, включающей описание всех известных физических процессов, протекающих при взаимодействии излучения с веществом.

Набор инструментов моделирования Geant4 включает в себя серию пакетов для моделирования электромагнитных взаимодействий частиц с веществом, специализированных для разных типов частиц [2], энергетического диапазона или подхода в физическом моделировании. Модели и процессы для описания электромагнитных взаимодействий, представленные в Geant4, сгруппированы в несколько пакетов (таблица). Среди них Low Energy Electromagnetic package (Низкоэнергетический электромагнитный пакет) [3] обеспечивает реализацию физических процессов для электронов, фотонов, заряженных адронов и ионов, распространяющихся до более низких энергий ( $< 1$  кэВ), чем те, которые включены в так называемый стандартный пакет Geant4

#### Модели и процессы для описания электромагнитных взаимодействий

Пакеты	Описание
Стандартный	$\gamma$ , $e^-$ , адроны, ионы до 100 ТэВ.
Мюонный	Мюонны до 1 ПэВ. Пропагатор потерь энергии.
Рентгеновские лучи	Производство рентгеновских и оптических фотонов.
Высокие энергии	Процессы при высоких энергиях ( $E > 10$ ГэВ). Физика экзотических частиц.
Поляризация	Моделирование поляризованных пучков.
Оптический	Оптические взаимодействия фотонов.
Низкоэнергетичный	Ливерморская библиотека $\gamma$ , $e^-$ от 250 эВ до 1 ГэВ. Ливерморская библиотека процессов поляризации. Переписанный код PENELOPE для $\gamma$ , $e^-$ , $e^+$ от 100 эВ до 1 ГэВ. Адроны и ионы до 100 ГэВ. Атомное девозбуждение (флюоресценция и Ожэ).
Geant4-DNA	Модели микродозиметрии для радиобиологии от 1 эВ до $\sim 100$ МэВ.

Как и другие универсальные коды Монте-Карло, Geant4 может работать с электромагнитными взаимодействиями до 1 кэВ. Стандартный пакет, реализующий электромагнитные процессы до 1 кэВ, был выпущен как часть инструментария Geant4 в своей первой публичной версии в 1998 г. Специализированные коды моделирования электромагнитных взаимодействий при низких энергиях были доступны для научного сообщества; однако, помимо ограничения типов частиц, которые они используют, эти специализированные системы не обладают возможностями моделирования детектора и широкими функциональными возможностями, предлагаемыми системами имитационного моделирования общего назначения.

Низкоэнергетический электромагнитный пакет Geant4 представляет собой значительное улучшение по сравнению с другими симуляторами электромагнитных взаимодействий, доступными экспериментальному сообществу: он предлагает точное физическое моделирование, типичное для специализированных кодов моделирования в системе общего назначения Монте-Карло. Кроме того, архитектура инструментария Geant4 позволяет пользователю выбирать компоненты, необходимые для

его конкретного приложения, из всех доступных в наборе инструментов, не накладывая никакой ненужной сложности для небольших приложений; поэтому мощность точных электромагнитных моделей становится доступной для гибкого моделирования простых экспериментальных конфигураций, а также для сложных симуляционных систем больших масштабных экспериментов.

### Архитектура и общие характеристики

Архитектура низкоэнергетического электромагнитного пакета использует возможности, предлагаемые гибкими методами Geant4 и объектно-ориентированной технологией.

Конструкция Geant4 делает отслеживание частиц независимым от физических процессов, на которые распространяются частицы. Все процессы обрабатываются путем явного отслеживания через абстрактный интерфейс G4VProcess. Поэтому благодаря объектно-ориентированной технологии можно расширять возможности физики Geant4, обеспечивая новые процессы или новые модели данного физического процесса как классы, наследуемые от класса G4VProcess, без влияния на ядро Geant4 или существующие пользовательские приложения. Низкоэнергетический электромагнитный пакет, обеспечивающий новые реализации электромагнитных процессов, был разработан как дальнейшее расширение первого выпуска Geant4, первоначально охватывающего стандартные электромагнитные процессы.

Geant4 выделяет два базовых класса: G4VDiscreteProcess и G4VContinuousDiscreteProcess, оба из G4VProcess, относящиеся к электромагнитным процессам. G4VDiscreteProcess выступает в качестве базового класса для описания аннигиляции позитронов и взаимодействия фотонов: фотоэлектрический эффект, комптоновское (некогерентное) и рэлеевское (когерентное) рассеяние, рождение пар.

G4VContinuousDiscreteProcess представляет собой базовый класс для процессов, описывающих взаимодействия заряженных частиц, – ионизацию и тормозное излучение.

Архитектура низкоэнергетического электромагнитного пакета показана на рис. 1.

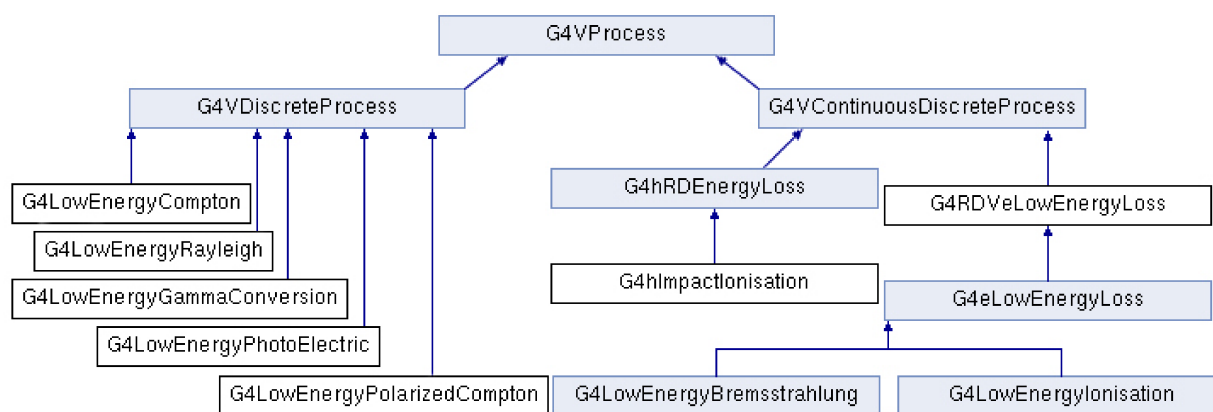


Рис. 1. Архитектура низкоэнергетического электромагнитного пакета.

Низкоэнергетический электромагнитный пакет Geant4 управляет физическими процессами фотонов (фотоэлектрический эффект, комптоновское рассеяние, рэлеевское рассеяние и парное образование), электронов (ионизация и тормозное излучение) и позитронов (аннигиляция, ионизация и тормозное излучение).

Предусмотрены два разных подхода к моделированию для электронных и фотонных процессов: модели, основанные на оцененных библиотеках данных и аналитических моделях. Позитроны обрабатываются только аналитическими моделями.

В состав рассматриваемого пакета входят следующие модели: Ливермор, Пенелопа, ионная модель, микродозиметрия и нанодозиметрия, атомное девозбуждение, обработка данных и интерполяция.

**Моделирование взаимодействия фотонов, электронов и позитронов.****Параметризованные модели**

Параметризованные модели для процессов взаимодействия фотонов и электронов основаны на использовании оцененных библиотек данных, EEDL (Evaluated Electrons Data Library) [4] и EPDL97 [5] (Evaluated Photons Data Library), которые предоставляют данные для определения поперечных сечений и выборки конечного состояния.

Эти библиотеки предоставляют следующие данные, относящиеся к моделированию, для элементов с атомным номером от 1 до 99: полные сечения фотоэлектрического эффекта, комптоновское рассеяние, эффект Рэлея и тормозное излучение; интегрированные поперечные сечения субоболочки для фотоэлектрического эффекта и ионизацию; энергетические спектры вторичных частиц для электронных процессов; функции рассеяния для эффекта Комптона; форм-факторов для эффекта Рэлея.

Диапазон энергий, покрываемый библиотеками данных, простирается от 1 эВ до 100 ГэВ для эффектов Рэлея и Комптона; до самой низкой энергии связи – для каждого элемента для фотоэлектрического эффекта; до 10 эВ – для тормозного излучения и вплоть до самой низкой энергии связи субоболочки для каждого элемента при ионизации. Текущая реализация электронов и фотонов низкой энергии в принципе применима в том же диапазоне энергий, который покрывается библиотеками данных; однако из-за ухудшения точности самой библиотеки и собственных пределов моделирования свойств материалов при более низких энергиях рекомендуется использовать его для энергий выше 250 эВ.

Все процессы включают в себя две различные фазы – расчет сечений взаимодействия и генерация конечного состояния.

Для каждого процесса полное сечение при заданной энергии  $E$  получается путем интерполяции данных, предоставленных библиотекой, согласно логарифмическому алгоритму интерполяции. По соображениям производительности процессы строят и хранят в таблицах поиска в памяти для расчета свободного пробега частиц, которые более грубы, чем библиотеки данных. Точность интерполяции через эти переформатированные таблицы по отношению к исходным данным выше 1%.

Полученными из оцененных данных конечных продуктов состояния процессов определяются в соответствии с четырехимпульсом. Энергетическая зависимость параметров, характеризующих распределение выборки, учитывается либо путем интерполяции данных, доступных в библиотеках напрямую, либо путем интерполяции значений, полученных из подгонки к данным.

Особое внимание уделяется воспроизведению точных окончательных распределений состояний, которые особенно актуальны при низких энергиях.

При комптоновском рассеянии энергия рассеянного фотона рассчитывается по формуле Клейна – Нишины [6], умноженной на функцию рассеяния. Функция рассеяния  $F(q)$  при переданном импульсе  $q = E \cdot \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)$  соответствует энергии  $E$ , вычисленной по значениям, доступным в библиотеке данных EPDL97. Из этой же процедуры получается угловое распределение рассеянных фотонов.

В процессе рэлеевского рассеяния угловое распределение рассеянного фотона описывается по формуле  $F(E, q) = [1 + \cos^2(q)]$ , где  $q = E \cdot \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)$  – переданный импульс, соответствующий энергии  $E$  и  $F(q)$ , является формфактором.

Формфактор берется из данных библиотеки EPDL97; его зависимость от передачи импульса учитывается путем интерполяции данных библиотеки.

**Моделирование взаимодействия фотонов, электронов и позитронов.****Аналитические модели**

Полный набор моделей физики, первоначально реализованных в FORTRAN Monte Carlo Code Penelope [7], был реинжинирован в низкоэнергетический электромагнитный пакет Geant4, за исключением процесса многократного рассеяния, для которого Geant4 предоставляет оригинальную, усовершенствованную модель в стандартном электромагнитном пакете. Простое включение этих моделей в пакет демонстрирует универсальность объектно-ориентированных технологий, которые облегчают предоставление альтернативных физических подходов в связи с явными инструментами обработки с помощью одних и тех же абстрактных интерфейсов, не затрагивая существующий код.

Аналитические модели комптоновского рассеяния дают две дополнительные особенности относительно соответствующей параметризованной модели – доплеровское уширение и атомную релаксацию, возникающую из вакансии, создаваемой первичным рассеянием.

**Моделирование взаимодействий заряженных адронов и ионов**

При относительно высоких энергиях среднее значение непрерывных потерь энергии определяется ограниченной формулой Бете – Блоха [8]. Для скорости заряженного адрона  $\beta < 0,05$ , что соответствует примерно 1 МэВ для протонов, формула Бете – Блоха становится неточной. В этом случае скорость падающего адрона сравнима со скоростью атомных электронов.

При очень низких энергиях, когда  $\beta < 0,01$ , модель свободных электронов предсказывает, что тормозящая сила пропорциональна скорости адрона, но она не столь точна, как формализм Бете – Блоха при более высоких энергиях.

Промежуточная область  $0,01 < \beta < 0,05$  не покрывается точными теориями; этот энергетический интервал имеет значение для эффектов, происходящих в детекторах и дозиметрии, так как здесь встречается брэгговский пик ионизационных потерь. В обзорах [9 – 12] были установлены процедуры оценки существующих экспериментальных данных и определения функций подгонки в зависимости от нескольких феноменологических параметров, которые описывают тормозную способность для протонов от 1 кэВ до 1 ГэВ.

Низкоэнергетический электромагнитный пакет Geant4 использует гибкий подход к моделированию и учитывает совокупность знаний, имеющихся в этой области. Конструкция физики адронов в низкоэнергетическом электромагнитном пакете продемонстрирована на рис. 2.

Процесс G4hEnergyIosiation обрабатывает ионизацию адронов и ионов. Он использует разные модели в зависимости от энергетического диапазона и заряда частиц. В области высоких энергий ( $E > 2$  МэВ) применяется формула Бете – Блоха и в низкоэнергетической ( $E < 1$  кэВ для протонов) – модель свободного электрона. В диапазоне промежуточных энергий реализованы параметризованные модели, основанные на экспериментальных данных из ICRU73 [12], где внесены поправки, связанные с молекулярной структурой материалов и влиянием ядерной тормозной способности. Учитывается эффект Баркаса, реализована специализированная модель квантового гармонического осциллятора для отрицательных заряженных адронов, допустимая до 50 кэВ.

**Моделирование атомной релаксации**

Компоненты низкоэнергетического электромагнитного пакета отвечают за атомную релаксацию. Они обрабатывают атомное девозбуждение процессов с образованием рентгеновской флуоресценции и оже-электронов. Моделирование атомной релаксации в Geant4 подробно описано в работе [13].

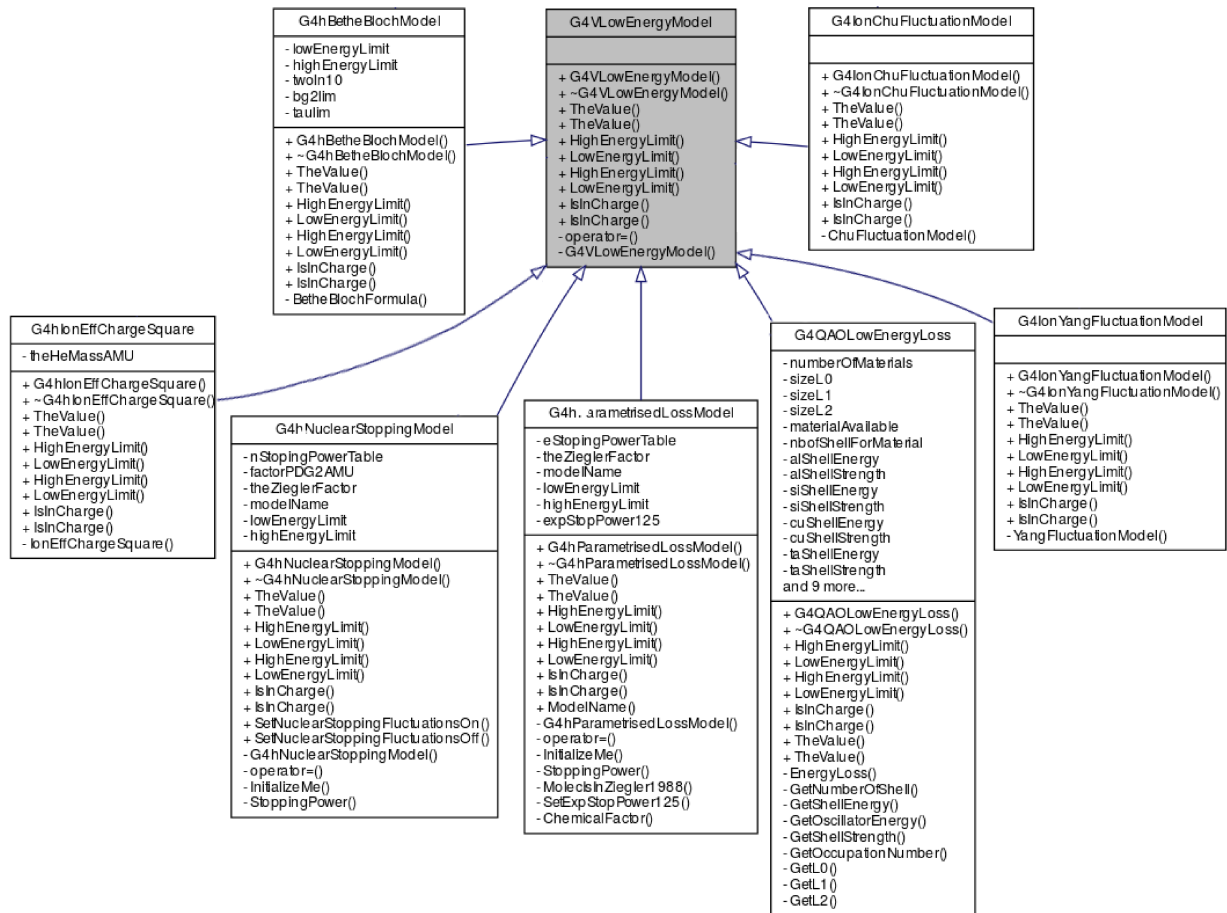


Рис. 2. Объектно-ориентированное моделирование физики адронов в низкоэнергетическом электромагнитном пакете Geant4.

### Программный процесс

Строгий подход к разработке программного обеспечения играет фундаментальную роль в низкоэнергетическом электромагнитном пакете Geant4. В Geant4 приняты общие принципы и оптимизирован процесс разработки программного обеспечения.

Пользовательские требования официально собраны, систематически пересматриваются и обновляются в соответствии с стандартами PSS-05. Принимая объектно-ориентированные методологии и методы обеспечения качества, можно утверждать, что со временем качество кода не будет ухудшаться.

Процесс разработки программного обеспечения дополняется целенаправленным управлением проектами. Взаимодействие с сообществом пользователей варьирует – от сбора требований до аннулирования работы имитационных моделей и кода путем сравнения с экспериментальными данными.

### Тестирование и проверка

Процедуры тестирования широко применяются как на детальном единичном уровне, так и на уровне интеграции. Проверка физики выполняется путем сравнения с экспериментальными данными в более широком наборе вариантов использования. Проверка низкоэнергетического электромагнитного пакета Geant4 подробно описана в работе [14].

### Выводы

Пакет низкоэнергетической электромагнитной физики Geant4 обеспечивает мощные и универсальные инструменты для моделирования взаимодействия частиц с веществом до низких энергий.

Для расчета сечений физических процессов и генерации конечных распределений состояний доступны точные модели, специализированные для типов частиц и энергетического диапазона. Объектно-ориентированная парадигма, принятая для разработки пакета, демонстрирует важный инструмент для обеспечения альтернативных и дополнительных физических моделей в рамках одного и того же пакета. Строгий программный процесс гарантирует качество программного обеспечения; обширные проверки достоверности демонстрируют поведение имитационных моделей.

1. Официальный сайт Geant4. – Режим доступа: <https://geant4.web.cern.ch>. – 12.12.2018.
2. Book for Application Developers. – Режим доступа: <http://geant4-userdoc.web.cern.ch/geant4-userdoc/UsersGuides/ForApplicationDeveloper/fo/BookForAppliDev.pdf>. – 12.12.2018.
3. Chauvie, S. Geant4 low energy electromagnetic physics / S. Chauvie et al. // Proceedings of CHEP. – 2001. – 337-340 p.
4. Cullen, D.E. Tables and Graphs of Electron Interaction Cross 10 eV to 100 GeV Derived from the LLNL Evaluated Electron Data Library (EEDL),  $Z = 1 - 100$  / D.E. Cullen, S.T. Perkins, S.M. Seltzer // Lawrence Livermore National Laboratory. – 1991. – Vol. 31. – 505 p.
5. Cullen, D.E. EPDL97: the Evaluated Photon Data Library, '97 Version // Lawrence Livermore National Laboratory. – 1997. – Vol. 6. – 36 p.
6. Linnemann, J. The Compton Effect // Course Web Page List. – 2013. – Режим доступа: [https://web.pa.msu.edu/people/huston/phy192\\_s08/compton](https://web.pa.msu.edu/people/huston/phy192_s08/compton). – 12.12.2018.
7. PENELOPE2014, A Code System for Monte-Carlo Simulation of Electron and Photon Transport. – 2014. – Режим доступа: <https://www.oecd-nea.org/tools/abstract/detail/nea-1525>. – 12.12.2018.
8. Bethe, H. Zur Theorie des Durchgangs schneller Korpuskularstrahlen durch Materie // Annalen der Physik. – 1930. – Vol. 397. – P. 325-400.
9. Ziegler, J.F. SRIM the Stopping and Range of Ions in Matter / J.F. Ziegler, J.P. Biersack, M.D. Ziegler. – SRIM Company, 2008. – 683 p.
10. Ziegler, J.F. The Stopping Powers and Ranges of Ions in Solids / J.F. Ziegler, J.P. Biersack, U. Littmark // Pergamon Press. – 1985. – Vol. 1. – 486 p.
11. Официальный сайт SRIM-2003. – Режим доступа: <http://www.srim.org>. – 12.12.2018.
12. Low energy Electromagnetic Physics – ICRU73. – Режим доступа: <https://geant4.web.cern.ch/node/1622>. – 12.12.2018.
13. Guatelli, S. Geant4 Atomic Relaxation / S. Guatelli et al. — IEEE Transactions on Nuclear Science, 2007. – 9 p.
14. Amako, K. Validation of Geant4 Electromagnetic Physics against Protocol Data / K. Amako et al. — IEEE Nuclear Science Symposium 2004 Conference Record, 2004. – 5 p.