

© 2011 В. В. Кобычев^{1,2}¹Інститут ядерних досліджень НАН України, Київ²Факультет фізики і астрономії, Сеульський національний університет, Сеул, Корея**ПРОГРАММА SIMOURG ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ФУНКЦИЙ ОТКЛИКА
ГАММА-ДЕТЕКТОРОВ С ПРОСТОЙ ГЕОМЕТРИЕЙ**

Описывается программа Simourg (*Simulator of Usually Requested Geometries*), основанная на пакете Geant4 и предназначенная для моделирования методом Монте-Карло ядерно-физических спектрометрических гамма-детекторов с простой осесимметричной геометрией, типичных для задач исследования распадов долгоживущих ядер и измерения радиоактивности природных объектов. Программа позволяет выполнять быстрые оценки эффективности и функции отклика детектора по отношению к моноэнергетическим гамма-квантам в области энергий от килоэлектрон-вольт до нескольких мегаэлектрон-вольт.

Ключевые слова: физическое моделирование, метод Монте-Карло, детекторы гамма-квантов.

Введение

Измерения абсолютной активности гамма-источников требуют определения эффективности и функции отклика используемого детектора. Эти параметры можно измерить с помощью калибровочных источников для ряда дискретных энергий гамма-квантов. Однако на стадии планирования эксперимента и при проектировании измерительной установки экспериментальные измерения функции отклика еще недоступны. При изменении геометрии установки калибровку по эффективности приходится проводить заново. Расположение калибровочного источника в установке обычно более или менее отличается от расположения измеряемого источника, а значит, эффективности тоже могут отличаться. Перечисленные проблемы решаются с помощью компьютерного моделирования экспериментальной установки методом Монте-Карло. Существует ряд программных пакетов и библиотек для численной симуляции распространения частиц и моделирования функций отклика ядерно-физических детекторов методом Монте-Карло. В качестве примера можно привести такие пакеты, как Geant4, EGS4, MCNP и т. д. Однако для работы с ними от пользователя, кроме понимания физических процессов, происходящих в моделируемом детекторе, требуется достаточно трудозатратное изучение особенностей функционирования используемого программного пакета, а также языка программирования, на котором этот пакет реализован. Для моделирования нового детектора или даже для небольшого изменения геометрических и физических параметров существующей модели, как правило, необходимо скомпилировать программу заново. Однако в действительности для моделирования детекторов с простой геометрией (в большинстве случаев) пользователю не нужны многие функциональные

возможности, заложенные в вышеупомянутых пакетах.

В экспериментальной неускорительной физике элементарных частиц (а также при исследовании редких ядерных процессов и измерении малых активностей, в том числе гамма-активности природных объектов) типичной является задача построения функции отклика для спектрометрического детектора (например, сцинтилляционного, полупроводникового или криогенного болометрического) по отношению к гамма-квантам с энергией не более нескольких мегаэлектрон-вольт, излучаемых источником, который расположен внутри защиты вблизи детектора. Другая типичная задача в этих приложениях – определение фона от гамма-квантов, которые излучаются источником, равномерно распределенным в одном из конструктивных элементов установки (например, в стекле фотоумножителя или в защите). При этом элементы установки обладают, как правило, осесимметричной геометрией и коаксиальны.

В связи с этим была поставлена задача создания программы для моделирования методом Монте-Карло, позволяющей с минимальными усилиями со стороны пользователя построить модель простого детектора гамма-квантов и просчитать его функцию отклика по отношению к моноэнергетическому гамма-источнику. Типичным примером такого детектора является цилиндрический активный объем (сцинтиллятор, полупроводниковый детектор, криогенный болометр и т.п.), находящийся внутри массивной защиты и облучаемый гамма-квантами от точечного или цилиндрического источника. Взаимодействие пользователя с программой должно сводиться к заданию простого текстового конфигурационного файла, включающего в себя геометрические характеристики деталей детектора (размеры, координаты), их физические свойства

(состав, плотность), расположение гамма-источника (точечного или распределенного), энергию гамма-квантов и ряд вспомогательных параметров, относящихся к выводу полученных результатов.

Характеристики разработанной программы

Для решения поставленной задачи была разработана программа Simourg (*Simulator of Usually Requested Geometries*). Программа основана на библиотеке классов Geant4 [1], созданной в ЦЕРН и предназначенной для моделирования методом Монте-Карло ядерно-физического эксперимента; в версии Simourg v1.0 использована версия Geant4 v9.2.patch-01. Программа Simourg может функционировать на всех платформах, на которых реализован Geant4, т. е. Linux, MacOSX, SunOS и MS Windows XP/Vista. Для установки Simourg на первых трех платформах необходима предварительная установка Geant4 и компиляция исходного текста программы с подключением библиотек Geant4; для использования в среде Windows доступен для загрузки скомпилированный исполняемый файл. Программу, ее исходный текст и описание можно загрузить со страницы <http://lpd.kinr.kiev.ua/kobychhev/Simourg>. Во время исполнения программа использует библиотеку G4EMLOW (необходима версия 6.19 или более поздняя) для параметров электромагнитных взаимодействий частиц с веществом при низких энергиях. Эта библиотека бесплатно распространяется ЦЕРНом [2]. Она должна быть предварительно установлена на компьютере пользователя; при

запуске Simourg ищет ее по пути, указанному в переменной окружения G4LEDDATA. При работе в среде Windows необходимо наличие на компьютере установленной программы Microsoft .NET Framework версии 3.0 или выше (может быть свободно загружена с сайта производителя [3]), однако в большинстве случаев она уже установлена на компьютере пользователя, так как используется многими прикладными программами.

Модель включает в себя только электромагнитные взаимодействия фотонов и электронов (позитронов) в веществе: комптоновское и рэлеевское рассеяние, тормозное излучение, рождение электрон-позитронных пар, аннигиляция позитронов, фотоэффект и ионизация (с последующей эмиссией атомом Оже-электронов и флуоресцентных фотонов). Сечения неупругих ядерных реакций при рассматриваемых энергиях являются пренебрежимо малыми и не учитываются. За корректное моделирование перечисленных физических процессов отвечает Geant4, надежно отработанная и многократно проверенная прямым сравнением с экспериментом [5].

Особенности функционирования

Для запуска программы пользователь должен задать в конфигурационном текстовом файле как минимум один физический объем (собственно детектор), а также расположение источника гамма-квантов и их энергию. Кроме того, пользователь задает некоторые вспомогательные параметры, в частности, описывающие вывод полученных результатов (рис. 1).

<pre> /user/reset # Parameters of the Detector volume /user/D_Det 50.00 mm /user/ZL_Det 40.00 mm /user/Z_Det 0.00 mm /user/MaterialDetDensity 8.0 g/cm3 /user/MaterialDetElementName Cd /user/MaterialDetFormulaNum 1 /user/MaterialDetElementName W /user/MaterialDetFormulaNum 1 /user/MaterialDetElementName O /user/MaterialDetFormulaNum 4 # Parameters of the Source volume /user/XL_Src 1.00 mm /user/YL_Src 1.00 mm /user/ZL_Src 1.00 mm /user/Z_Src 3.50 cm </pre>	<pre> # Parameters of the simulation /user/EGamma 2614.5 keV /user/FWHM1 0.0 /user/FWHM2 2.0 /user/Threshold 1.0 keV /user/ELowLimit 1.0 keV /user/DELowLimit 1000.0 nm /user/DGLowLimit 1000.0 nm /user/ChannelWidth 1.0 keV /user/numberOfRuns 1000000 /user/Step 1000 /user/RandomSeed 90115037 /user/WaitCommand 0 /user/VerboseAll 0 /user/DoPicture 0 /user/showAll </pre>
---	--

Рис. 1. Пример минимального конфигурационного файла.

В приведенном конфигурационном файле задан объем Det – цилиндрический детектор

CdWO₄ с диаметром D_Det = 50 мм и высотой ZL_Det = 40 мм, находящийся в начале отсчета

($Z_Det = 0$ мм). Плотность материала детектора $MaterialDetDensity = 8,0$ г/см³. Химический состав материала задается посредством химической формулы с указанием входящих в него элементов (не более 20) и количества соответствующих атомов в брутто-формуле вещества. Поскольку окружающие объемы в явном виде не заданы, они по умолчанию считаются заполненными вакуумом. Источник – виртуальный, т. е. не обладающий физически выделенным материалом, объем Src в форме куба со стороной $XL_Src = YL_Src = ZL_Src = 1$ мм, по которому равномерно распределены начальные вершины генерируемых гамма-квантов с изотропно распределенными по направлению начальными импульсами. Центр источника расположен на оси Z на расстоянии $Z_Src = 3,5$ см от центра детектора (координаты X_Src и Y_Src в примере не заданы явно и по умолчанию принимаются равными нулю; однако, в отличие от прочих объемов, центр источника не обязан лежать на оси Z – главной оси установки).

В данном примере в процессе работы программа сгенерирует $numberOfRuns = 1\,000\,000$ гамма-квантов с энергией $E_{Gamma} = 2614,5$ кэВ и изотропно распределенным направлением начального импульса. Спектр поглощенной в детекторе энергии записывается в файл `SpectrumRaw.dat`, ширина канала в спектре задается параметром `ChannelWidth` (в примере он равен 1 кэВ). Этот файл может быть использован, в частности, для определения эффективности детектирования в пике полного поглощения. Если известна зависимость энергетического разрешения детектора от энергии (эта зависимость обычно имеет вид

$$R(E) = (a_1 + a_2 \cdot E)^{1/2}, \quad (1)$$

где E – энергия, R – разрешение, FWHM), то пользователь может задать параметры a_1 и a_2 (в виде FWHM1, кэВ², и FWHM2, кэВ), и программой будет создан спектр, «размазанный» по энергетическому разрешению, в файле `SpectrumBlur.dat`. Перед записью в этот спектр для каждого события, связанного с ненулевым энерговыделением в детекторе, поглощенная энергия будет смещена на случайную величину, распределенную по нормальному закону с нулевой медианой и с полушириной, зависящей от энергии по формуле (1). Файлы спектров представляют собой двухколоночные ASCII-файлы, каждая строка которых соответствует каналу энергетического спектра (в ней содержится два числа: центральная энергия канала и количество отсчетов в канале).

Каждая строка в конфигурационном файле представляет собой определенную команду, по которой задается тот или иной параметр либо выполняется определенное действие. Полный список пользовательских команд и их описание приведены в файле `help.txt`, прилагающемся к программе.

Кроме уже упомянутых обязательных геометрических объемов (физического `Det` и виртуального `Src`), пользователь может опционально задать несколько дополнительных физических объемов путем указания их диаметров, координат центра, плотности и химического состава материала.

Объем `Core` представляет собой оболочку объема `Det` (детектора). Если он задан, то `Det` должен быть полностью погружен в него, в противном случае будет выдано сообщение об ошибке. Если параметры объема `Core` не заданы в конфигурационном файле, он создается со следующими параметрами: все размеры на 0,001 мм больше, чем размеры `Det`; координаты центра объема совпадают с координатами `Det`; материал совпадает с материалом защиты (т. е. объема `Shield`, см. ниже). Таким образом, если объем `Core` не задан явно, он практически не оказывает влияния на результаты моделирования. Этот объем, в частности, может описывать мертвый слой полупроводникового детектора или полость в защите, где расположен детектор.

Объем `Shield` описывает пассивную защиту детектора и представляет собой самый внешний из всех объемов, использующихся в программе; все прочие объемы должны находиться внутри него, в противном случае будет выдано сообщение об ошибке. Если параметры объема `Shield` не заданы в конфигурационном файле, он создается с размерами, позволяющими вместить все прочие объемы, и координатами центра объема, совпадающими с началом отсчета. Объем `Shield` по умолчанию заполнен вакуумом. При выходе частицы из этого объема наружу она уничтожается.

Объем `Cavity` расположен внутри объема `Det`. Если `Cavity` полностью или частично выходит за пределы `Det`, будет выдано сообщение об ошибке. Этот объем предназначен для описания внутренней полости, характерной для полупроводниковых детекторов или для сцинтилляторов с колодцем. Если в конфигурационном файле нет описания этого объема, то последний не создается.

Объемы `Top1`, `Top2`, `Top3`, `Bot1`, `Bot2`, `Bot3` предназначены для описания, например, фотомножителей и световодов в сцинтилляционных детекторах, хладопроводов в ППД и прочих подобных деталей установки. Все эти объемы расположены вне объема `Core`, но внутри объема

Shield. Если любой из них лежит внутри другого физического объема (кроме объема Shield) или пересекается с другим физическим объемом, будет выдано сообщение об ошибке. Любой из этих объемов создается лишь в случае его явного описания в конфигурационном файле.

Иерархию вложенности физических объемов можно представить в виде древесного ориентированного графа на рис. 2; ребра графа показывают отношения вложенности. Все объемы, кроме виртуального Src, должны быть коаксиальны; их общая ось совпадает с осью Z координатной системы. Все они являются цилиндрами, за исключением Src, Core и Det (эти объемы могут быть цилиндрами либо прямоугольными параллелепипедами; в последнем случае вместо диаметра, например D_Src, задаются размеры по

осям X и Y, например XL_Src и YL_Src, и боковые грани создаваемых объемов перпендикулярны соответствующим осям). Пересечение границ любых двух физических объемов не допускается. Виртуальный объем Src может располагаться произвольным образом, поскольку он не связан с физическим телом, состоящим из конкретного вещества, а представляет собой лишь геометрическое место, где распределены точки генерации начальных гамма-квантов. В частности, он может (но не обязан) совпадать с каким-либо из физических объемов или пересекаться с ним. Однако, как и любой другой объем, он должен полностью находиться внутри объема Shield. На рис. 3 представлен пример геометрии, включающей все допустимые физические объемы.

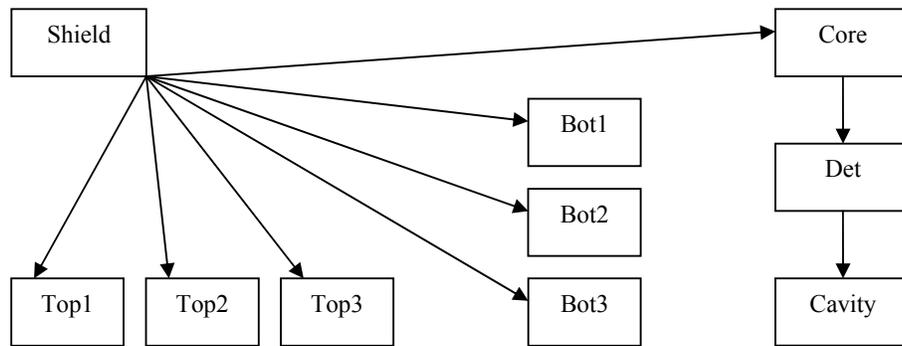


Рис. 2. Иерархия вложенности физических объемов.

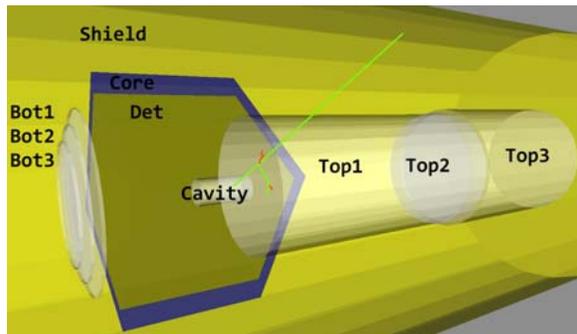


Рис. 3. Пример геометрии, созданной для моделирования программой Simourg. Показан трек гамма-кванта, провазимодействовавшего с веществом детектора.

Программа Simourg является консольной, т. е. не использует графический пользовательский интерфейс (GUI) и запускается из командной строки. Например, запуск программы в среде Windows выполняется в окне DOS. Единственным параметром командной строки является имя конфигурационного файла. Пример команды, запускающей программу Simourg в командной строке DOS:

```
C:\Sim>Simourg_1.exe CdW04.mac >log.txt
```

При выполнении этой команды программа запускается на исполнение с конфигурационным файлом CdW04.mac, и ее стандартный поток вывода перенаправляется в файл log.txt. Степень подробности диагностических сообщений, выдаваемых программой в стандартный поток вывода, управляется параметром VerboseAll (от 0 до 2, по умолчанию 0).

Для контроля правильности описываемой геометрии программа может создавать файлы трехмерной интерактивной векторной графики в формате VRML (см. рис. 3). Их просмотр осуществляется с помощью любого VRML-браузера или плагина к веб-браузеру (Cortona, Flux и т. п.). Для создания таких файлов необходимо установить в конфигурационном файле параметр DoPicture в 1 (значение по умолчанию – 0). Тогда при каждом генерировании начального гамма-кванта в директории запуска будет создаваться один VRML-файл (всего не более 100 шт.), в котором будут представлены существующие объемы установки и траектории первичной и вторичных час-

тиц. Режим работы с созданием графических файлов используется только для отладки геометрии и для контроля. При запуске программы в основном режиме (для получения модельных спектров) параметр DoPicture должен быть установлен в 0.

На рис. 4 показаны спектры, полученные при моделировании детектора с цилиндрическим сцинтиллятором CdWO_4 диаметром 50 и высотой 40 мм для точечного источника гамма-квантов с энергией 2614,5 кэВ (^{208}Tl), расположенного на высоте 15 мм над центром торцевой поверхности сцинтиллятора. Нижняя линия – спектр энергии, поглощенной в сцинтилляторе; верхняя линия – спектр с учетом конечного энергетического разрешения, смещен вверх умножением на 10 для большей наглядности. Кроме пика полного поглощения, в спектре видны пики одиночного и двойного вылета на комптоновском плато.

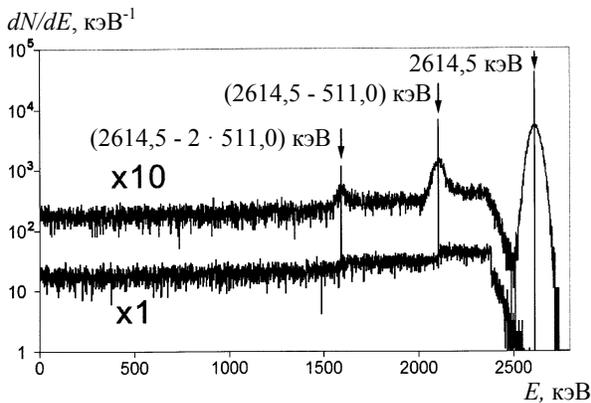


Рис. 4. Спектры, полученные при моделировании сцинтилляционного детектора CdWO_4 для источника гамма-квантов с энергией 2614,5 кэВ (см. текст).

Заключение и перспективы

Программа Simourg (*Simulator of Usually Requested Geometries*), основанная на пакете

Geant4 и предназначенная для моделирования ядерно-физических спектрометрических гамма-детекторов с простой геометрией, характерных для задач исследования распадов долгоживущих ядер и измерения радиоактивности природных объектов, позволяет получать функцию отклика детектора по отношению к моноэнергетическим гамма-квантам в области энергий от нескольких килоэлектрон-вольт до нескольких мегаэлектрон-вольт. Особенностью программы является простое управление геометрией моделируемой установки. В статье кратко описана первая версия программы. В следующих версиях предполагается ввести возможность использования в качестве исходных данных, кроме моноэнергетических гамма-квантов, также распады радиоактивных изотопов с начальной кинематикой частиц (электронов, позитронов, гамма-квантов и альфа-частиц), сгенерированные с помощью программы Decay4 [4] или с помощью модуля RadioactiveDecay, являющегося частью Geant4; таким образом, появится возможность построить функции отклика детектора по отношению к распадам радионуклидов с учетом их бета- и альфа-спектров (что важно, в частности, для радионуклидов, инкорпорированных в детектор). Кроме того, планируется расширить набор возможных вариантов геометрии объемов, включив в него часто используемую в реальных конструкциях элементов установок прямую призму с правильным многоугольником в поперечном сечении, цилиндр с осевым сквозным отверстием для коллимации частиц, а также форму сосуда Маринелли.

Работа была частично поддержана программой «Космомикрофизика» НАН Украины и программой Brain Pool of Korean Federation of Science and Technology Societies.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Agostinelli S., Allison J., Amako K. et al. GEANT4: A Simulation toolkit // Nucl. Instrum. Meth. - 2003. - Vol. A 506. - P. 250; Allison J., Amako K., Apostolakis J. et al. Geant4 developments and application // IEEE Trans. Nucl. Sci. - 2006. - Vol. 53. - P. 270.
2. <http://geant4.web.cern.ch/geant4/support/source/G4EMLOW.6.19.tar.gz>
3. <http://www.microsoft.com/net/>
4. Ponkratenko O.A., Tretyak V.I., Zdesenko Yu.G. Event generator DECAY4 for simulation of double-beta processes and decays of radioactive nuclei // Phys. Atom. Nuclei. - 2000. - Vol. 63. - P. 1282.
5. Apostolakis J., Bagulya A., Elles S. et al. Validation and verification of Geant4 standard electromagnetic physics // J. Phys.: Conf. Ser. - 2010. - Vol. 219. - P. 032044.

В. В. Кобичев

ПРОГРАМА SIMOURG ДЛЯ МОДЕЛЮВАННЯ ФУНКЦІЙ ВІДГУКУ ГАММА-ДЕТЕКТОРІВ З ПРОСТОЮ ГЕОМЕТРІЄЮ

Описано програму Simourg (Simulator of Usually Requested Geometries), яка заснована на пакеті Geant4 і призначена для моделювання методом Монте-Карло ядерно-фізичних спектрометричних гамма-детекторів із простою осесиметричною геометрією, типових для задач дослідження розпадів довгоживучих ядер і вимірювання

радіоактивності природних об'єктів. Програма дозволяє виконувати швидкі оцінки ефективності та функції відгуку детектора по відношенню до моноенергетичних гамма-квантів в області енергій від кілоелектрон-вольт до декількох мегаелектрон-вольт.

Ключові слова: фізичне моделювання, метод Монте-Карло, детектори гамма-квантів.

V. V. Kobychew

**THE PROGRAM SIMOURG FOR SIMULATING THE RESPONSE FUNCTIONS
OF GAMMA DETECTORS WITH SIMPLE GEOMETRIES**

The program Simourg (Simulator of Usually Requested Geometries) is based on the Geant4 toolkit and aimed for Monte Carlo simulation of gamma-ray spectrometric nuclear detectors with a simple axial symmetric geometry, which is typical for many tasks of studying the decay of long-lived nuclei and measuring the radioactivity of natural objects. The program is designed for quick estimation of the effectiveness and the response function of the detector to monoenergetic gamma quanta in the energy range from kiloelectronvolts to several megaelectronvolts.

Keywords: physical modeling, Monte Carlo method, detectors of gamma quanta.

Поступила в редакцію 13.04.11,
после доработки - 26.07.11.