

Т.В. МАЛИХІНА, ст. викл., ХНУ ім. В.Н. Каразіна, Харків;
М.Г. СТЕРВОЄДОВ, к. т. н., доцент, ХНУ ім. В.Н. Каразіна, Харків

МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОХОДЖЕННЯ ЕЛЕКТРОНІВ ЧЕРЕЗ ШАР РЕЧОВИНИ ЯК СКЛАДОВА ЧАСТИНА ВІРТУАЛЬНОГО ЛАБОРАТОРНОГО ПРАКТИКУМУ З ЯДЕРНОЇ ФІЗИКИ

Представлено комп'ютерні програми, які входять до складу віртуального лабораторного практикуму, що розроблюється в Харківському національному університеті ім. В.Н. Каразіна на факультеті комп'ютерних наук сумісно з провідними спеціалістами фізико-технічного факультету. Віртуальний лабораторний практикум являє собою комплекс комп'ютерних програм, що використовує сучасні засоби математичного моделювання процесів взаємодії випромінювання з речовиною. Програми розроблені мовою C++ в середовищі операційної системи Linux SLC 4.8. Віртуальний лабораторний практикум планується використовувати в процесі навчання студентів старших курсів фізико-технічного та фізико-енергетичного факультетів.

Представлены компьютерные программы, которые входят в состав виртуального лабораторного практикума, разрабатываемого в Харьковском национальном университете им. В.Н. Каразина на факультете компьютерных наук совместно с ведущими специалистами физико-технического факультета. Виртуальный лабораторный практикум представляет собой комплекс компьютерных программ, использующих современные средства математического моделирования процессов взаимодействия излучения с веществом. Программы разработаны на языке C++ в среде операционной системы Linux SLC 4.8. Виртуальный лабораторный практикум планируется использовать в процессе обучения студентов старших курсов физико-технического и физико-энергетического факультетов.

The Virtual laboratory practicum environment is presented. It was developed at the V.N. Karazin Kharkiv National University at the Faculty of Computer Science. This practicum is developed together with leading experts of the Faculty of Physics and Technology. Virtual laboratory practicum is a complex of computer programs that use a modern toolkit of the mathematical simulation of the passage of particles through matter. These programs developed in the environment of the Linux SLC 4.8 operating system using C++ language. Virtual laboratory classes will be used to train students of the Faculty of Physics and Technology as well as the Faculty of Energy Physics.

Постановка проблеми. В теперішній час набули подальшого розвитку програмно-апаратні комплекси, «Віртуальні лабораторії», спрямовані на удосконалення методик дистанційної освіти. В той же час, деякі лабораторні роботи неможливо виконати, не маючи спеціального устаткування. До таких лабораторних робіт можливо віднести практикуми з ядерної фізики і радіаційних технологій, з фізики елементарних частинок тощо. Навіть за наявності унікального устаткування в учбових закладах існує проблема обмеженого доступу до такого обладнання, зумовлена коштовністю проведення експерименту або шкідливими чи небезпечними умовами цього експерименту.

В багатьох галузях людської діяльності використання комп'ютерних технологій дозволяє істотно оптимізувати виробничі процеси й покращити якість результату цієї діяльності. Одним з напрямків розвитку інформаційних

технологій є розробка програмних засобів для моделювання різноманітних процесів, що дозволяє економити ресурси, знижує енерговитрати, людські ресурси, а також дозволяє оптимізувати керівництво виробничими процесами. Зокрема, при використанні інформаційних технологій в науці стає можливим проведення модельного експерименту без використання коштовного обладнання, витрат матеріалів, без значних витрат електроенергії тощо, та без притягнення великої кількості персоналу лабораторій.

Важливою перевагою віртуальної лабораторії є можливість наочної імітації реального фізичного експерименту, а також можливість використання раніш отриманих експериментальних даних.

В Інституті високих технологій Харківського національного університету ім. В.Н. Каразіна на факультеті комп'ютерних наук сумісно з провідними спеціалістами фізико-технічного факультету ХНУ ім. В.Н.Каразіна розроблюється комплекс віртуальних лабораторних робіт з вивчення процесів взаємодії випромінювання з речовиною.

Необхідність розробки віртуального лабораторного практикуму обумовлена наявністю в учбовій програмі фізико-технічного і фізико-енергетичного факультетів відповідних предметів з фізики елементарних частинок, фізики високих енергій тощо, та проблемою обмеженого доступу до коштовного обладнання, наприклад, прискорювачів заряджених частинок і т. ін. Також відіграє важливу роль економічна складова: проведення віртуального експерименту набагато дешевше, ніж експеримент реальний.

Передумовою створення віртуального лабораторного практикуму з вивчення процесів взаємодії випромінювання з речовиною є наявність попереднього досвіду [1 – 3] з комп'ютерного моделювання процесів проходження іонізуючого випромінювання через різні шари речовини та моделювання різних типів детекторів випромінювання.

Головною метою створення віртуального лабораторного практикуму була оптимізація та інтенсифікація навчального процесу серед студентів Інституту високих технологій, який складається з трьох факультетів ХНУ ім. В.Н.Каразіна: фізико-технічного, фізико-енергетичного та факультету комп'ютерних наук. Під час проведення віртуальних лабораторних робіт студенти фізичних спеціальностей мають можливість наочно імітувати реальний експеримент, отримати важливі результати та провести їх цифрову обробку.

Математичне моделювання енергетичних втрат електронів. Математичне моделювання проходження електронів через різні речовини враховує іонізаційні та радіаційні втрати енергії, тобто повні втрати енергії електронів ΔE в речовині обчислюються як сума іонізаційних та радіаційних втрат енергії: $\Delta E = \Delta E_{ion} + \Delta E_{rad}$, де ΔE_{ion} – іонізаційні втрати енергії, ΔE_{rad} – радіаційні втрати енергії, які обчислюються за формулами:

$$\Delta E_{ion} = \int_{E_{min}}^{E_0} \left(\frac{dE_{ion}}{dx} \right) dx, \quad \Delta E_{rad} = \int_{E_{min}}^{E_0} \left(\frac{dE_{rad}}{dx} \right) dx, \quad (1)$$

де $\frac{dE_{ion}}{dx}$, $\frac{dE_{rad}}{dx}$ – відповідно питомі іонізаційні та питомі радіаційні втрати енергії.

Іонізаційні втрати енергії частинок обчислюються як ймовірні втрати енергії за *методом Ландау* з використанням *формул Бете – Блоха* [4] розрахунку середніх іонізаційних втрат.

$$-\frac{dE_{ion}}{dx} = -0.3 \frac{z}{A} \cdot \frac{mc^2}{\beta^2} \cdot \left[\ln \frac{mc^2 E}{2I^2} + \ln \left(\frac{\beta^2}{1-\beta^2} \right) - 2(\sqrt{1-\beta^2} - 1 + \beta^2) \cdot \ln 2 + 1 - \beta^2 + \frac{1}{8}(1 - \sqrt{1-\beta^2}) - \delta \right], \quad (2)$$

де z – атомний номер (для простих речовин) або ефективний атомний номер (для сполук); A – атомна маса (для простих речовин) або ефективна атомна маса (для сполук); $mc^2 = 0.511$ MeV – маса спокою електрона; I – потенціал іонізації речовини, який для речовин з атомним номером $z > 13$ обчислюється за формулою:

$$I = [9.76 + 58.6 \cdot z^{(-1.19)}] \cdot z \cdot 10^{-6} \text{ MeV}, \quad (3)$$

а для сполук:

$$I_{ef} = \exp \left(\sum_{j=1}^n k_j z_j \ln(I_j) / \sum_{j=1}^n k_j z_j \right) \text{ MeV}, \quad (4)$$

де k_j – кількість атомів j -го простого елементу в молекулі сполуки; z_j – атомний номер j -го простого елементу в молекулі сполуки; I_j – потенціал іонізації j -го простого елементу в молекулі сполуки, що обчислюється за формулою (3);

Для сполук ефективний атомний номер та ефективна атомна маса обчислюються за формулами:

$$z_{ef} = \sqrt[3]{\left(\sum_{i=1}^n k_i z_i^4 \right) / \sum_{i=1}^n (k_i z_i)}, \quad A_{ef} = \sqrt[3]{\left(\sum_{i=1}^n k_i z_i A_i^3 \right) / \sum_{i=1}^n (k_i A_i)} \quad (5)$$

Іонізаційні втрати енергії обчислюються з урахуванням поправки на ефект густини δ , засновані на *методі Штернхеймера* [4]:

$$\delta = \begin{cases} 0, & \text{при } x < x_0 \\ x \cdot 2 \ln 10 + C + a \cdot (x_1 - x)^m, & \text{при } x_0 \leq x \leq x_1, \\ x \cdot 2 \ln 10 + C, & \text{при } x_1 < x \end{cases} \quad (6)$$

$$\text{де } x = \ln \left(\left(\frac{E}{0.511} \right)^2 - 1 \right) / 2 \ln 10, \quad m = 3; \quad C = (-1) \cdot \left(1 + 2 \ln \left[\frac{I}{28.8 \cdot 10^{-6} \cdot \sqrt{\rho \cdot n0}} \right] \right);$$

$$a = 2 \cdot \ln 10 \cdot \frac{(-1) \cdot C / (2 \cdot \ln 10) - x_0}{(x_1 - x_0)^m}; \quad n0 = \frac{\sum_i n_i z_i}{\sum_i n_i A_i} - \text{для сполук}; \quad n0 = z / A - \text{для}$$

простих речовин, ρ – густина речовини.

Питомі втрати енергії на випромінювання обчислюються згідно з формулами *Бете – Гайтлера* [4]. Втрати енергії на гальмівне випромінювання істотно залежать від ступені екранування ядра атомними електронами:

$$-\frac{dE_{rad}}{dx} = 4 \cdot \frac{N_A z(z-1)}{A} \cdot \alpha r_e E \left(\ln \frac{2E}{mc^2} - \frac{1}{3} \right), \quad \text{при } mc^2 \ll E \ll 137 \cdot mc^2 \cdot z^{-1/3}, \quad (7)$$

$$-\frac{dE_{rad}}{dx} = 4 \cdot \frac{N_A z(z-1)}{A} \cdot \alpha r_e E \left(\ln(183 \cdot z^{-1/3}) + \frac{1}{18} \right), \quad \text{при } E \gg 137 \cdot mc^2 \cdot z^{-1/3}, \quad (8)$$

де $N_A = 6.22 \cdot 10^{23} \text{ моль}^{-1}$ – число Авогадро; $mc^2 = 0.511 \text{ МеВ}$; $\alpha \approx 1/137$ – постійна тонкої структури; $r_e \approx 2.818 \cdot 10^{-13} \text{ см}$ – класичний радіус електрона. Формула (7) використовується для обчислення втрат енергії на гальмівне випромінювання без урахування екранування, формула (8) – для випадку повного екранування,

Електрони, проходячи через речовину, відчувають велику кількість зіткнень, внаслідок чого змінюється напрямок їхнього руху. Траєкторія руху електронів з невеликою початковою енергією змінюється залежно від процесів багатократного розсіювання електронів, обумовленого сумарним ефектом малих відхилень, та розсіювання на великі кути, викликаного окремими близькими зіткненнями. Статистичний характер процесу іонізації електронів (за рахунок процесів багатократного розсіювання) призводить до значних флуктуацій іонізаційних втрат енергії. Тому доцільно в програмах, що розроблюються, використовувати статистичні методи, зокрема, бібліотеку класів Geant4, що використовує *метод Монте-Карло*.

Математичне моделювання за допомогою Geant4. Geant4 – це бібліотека класів, які використовуються при розробці комп'ютерних програм, що призначені для моделювання процесів проходження іонізуючого випромінювання через речовину. Geant4 забезпечує повну систему інструментальних засобів для моделювання ядерно-фізичних процесів взаємодії випромінювання з речовиною: створення геометрії детекторів і установки в цілому, опис частинок і фізичних процесів; транспорт частинок і слідування за ними; відгук детектора; моделювання подій, керування треком тощо. Бібліотека класів Geant4 має великий набір службових функцій, генераторів випадкових величин і т. ін., а також надає можливість використовувати різні модулі візуалізації [4].

Колаборація Geant4 надає підтримку користувачів та повний комплект необхідної документації. Документація має в своєму складі довідку з інсталяції, документацію кінцевого користувача та довідники, а також ряд підручників, що призначені для широкого кола користувачів – від початківців до досвідчених користувачів Geant4. Підтримка користувачів охоплює допомогу у вирішенні проблем, пов'язаних з кодом, консультації з використання інструментарію та реагування на запити про удосконалення коду. Користувач має також розраховувати на допомогу у дослідженні аномальних результатів [4]. На сайті проєкту Geant4 [5] можна ознайомитись з веб-системою звітності та списком питань, що частіше задаються (FAQ). Колаборація Geant4 також керує веб-форумом користувачів, з підфорумами згідно з галузями наукових інтересів. У вільному доступі в Інтернеті існують актуальні робочі версії відкритого коду і документація, а також учбові приклади та комплекти учбових матеріалів. Великою перевагою Geant4, окрім його функціональності, гнучкості й надійності, є доступність його коду, можливість модифікації й адаптації практично до будь-яких задач комп'ютерного моделювання, в яких взаємодія випромінювання з речовиною відіграє роль.

Робота з бібліотекою класів Geant4 зводиться до розробки програм мовою C++, які певним чином зв'язують компоненти бібліотек для моделювання деякої реальної системи. При цьому в програмі, що використовує Geant4, визначається трьохвимірний модель системи, характеристики матеріалів, з яких вона складається, описуються електромагнітні поля. Також програмістом описуються різні набори фізичних процесів, наприклад, гальмівне випромінювання, іонізація, тощо. В процесі роботи розроблена програма розраховує траєкторії проходження різних елементарних частинок в заданій системі і т. ін. Програма, що використовує бібліотеку класів Geant4, повинна містити визначення декількох основних класів, які відповідають особливостям конкретної задачі. Всі ці класи повинні бути зареєстрованими в спеціальному об'єкті – екземплярі класу **G4RunManager** [6], який керує процесом моделювання. До обов'язкових класів належать:

- **G4UserDetectorConstruction** [6], який містить визначення геометрії детекторів та матеріалів, з яких складаються чутливі області установок;
- **G4VPhysicsList** [6], що підключає моделювання фізичних процесів, які детально розглянуті в документації [7];
- **G4UserPrimaryGeneratorAction** [6], що описує джерело первинних частинок при моделюванні.

В об'єкті-екземплярі класу **G4RunManager**, який керує процесом моделювання проходження частинок, також зареєстровані й необов'язкові класи, без яких моделювання можливо, – **G4UserAction**, **G4UserEventAction**, **G4UserSteppingAction**. Ці класи дозволяють керувати поведінкою програми на різних етапах виконання, задавати необхідний рівень деталізації під час виведення результатів.

Віртуальний лабораторний практикум, що розроблюється, являє собою комплекс комп'ютерних програм, які використовують бібліотеку класів Geant4 і можуть бути виконані в середовищі операційної системи Linux. При моделюванні проходження електронів через шари речовини розглядалися іонізаційні і радіаційні втрати енергії, що обчислювались з використанням класів **G4eIonisation** (моделювання по формулам *Бете – Блоха* з поправкою на ефект густини Штернхеймера), що враховують формули (1) – (8), **G4eBremsstrahlung** (використовується *модель Бете-Гайтлера* [6]), а також використовувались класи, що описують процеси багатократного розсіювання електронів (*модель кутового розподілу Гоудсмита – Саундерсона, просторового розподілу Льюїса* [6]): **G4CoulombScattering** та **G4GoudsmitSaundersonMscModel**. Ці класи базуються на методі Монте-Карло при розрахунках загальної довжини путі частинки та середнього кута розсіювання. Для вторинних частинок враховувались всі необхідні фізичні процеси, та в об'єкті-екземплярі класу **G4VPhysicsList** зареєстровані всі необхідні відповідні класи, що описують фізичні процеси для вторинних частинок. Порогові енергії генерування вторинних частинок E_{cut} були обрані за допомогою методу **SetCut**, при цьому для кожного матеріалу, що описаний у складі лабораторної роботи, для якого можливо провести моделювання, та для кожного типу частинок обчислюється своя енергія E_{cut} . Для первинних електронів важливим було продемонструвати статистичний характер процесів багатократного розсіювання та розробити відповідні програми з наочною візуалізацією цих процесів.

Приклади лабораторних робіт. На рис. 1 і 2 наведено фрагменти лабораторних робіт з вивчення багатократного кулонівського розсіювання електронів (рис. 1) та процесів гальмівного випромінювання (рис. 2). Для створення цих віртуальних лабораторних робіт було розроблено комп'ютерні програми мовою C++ в середовищі операційної системи Linux SLC 4.8. В програмах використовується бібліотека класів Geant4 версії 9.4, OpenGL-візуалізація.

На рис. 1 представлені скрін-шоти лабораторної роботи для моделювання процесів багатократного розсіювання електронів. Наведено результат візуалізації проходження 50 електронів з початковою енергією 4.5 MeV через шар кремнію 300 мікрон. Перед шаром кремнію на невеликій відстані розташована дуже тонка алюмінієва фольга, яка на рисунку не представлена.

У верхній частині рис. 1 наведено візуалізацію віртуального експерименту, коли не враховуються процеси багатократного кулонівського розсіювання, у нижній частині рисунку – експеримент має ті ж самі умови, але процеси багатократного кулонівського розсіювання враховуються. Первинні електрони спрямовані за нормаллю до поверхні кремнієвої площини. Траєкторії електронів представлені жовтим кольором.

Розсіювання електронів, що пройшли крізь шар речовини, в основному, викликано сумарним ефектом багатьох відхилень на невеликі кути. Випадки одноразового розсіювання на великі кути призводять до виходу частинки з пучка та доволі рідкі порівняно з процесами багатократного розсіювання.

На рис. 2 наведено фрагмент лабораторної роботи з вивчення процесів гальмівного випромінювання електронів. Представлені шари конвертеру гальмівного випромінювання зі свинцю, OpenGL-візуалізація у контурному режимі. На верхній частині рисунку 2 – візуалізація проходження одного (для наочності) електрона з енергією 100 MeV, в нижній частині рисунку 2 – візуалізація проходження одного електрона з початковою енергією 1 GeV. Траєкторії гальмівних гамма-квантів зображені на скрін-шоті зеленим кольором. Траєкторії електронів представлені на цих скрін-шотах червоним кольором. Можна помітити, як змінюються характеристики пучка гальмівного випромінювання зі зміною енергії електронів.

Для того, щоб в процесі виконання роботи була можливість спостерігати за змінами характеристик гальмівного випромінювання, в розробленій програмі передбачено багатий вибір матеріалів для конвертера.

На рис. 3 представлено розподіл кута відхилення електронів з енергією 4.5 MeV, що пройшли крізь алюмінієву фольгу та кремнієвий детектор. Цифрову обробку даних здійснено в середовищі Microcal Origin 7.5.

Можна зазначити, що найбільш ймовірне значення кута розсіювання електронів з початковою енергією 4.5 MeV становить близько 8° . Для кількості моделювання $N_{events} = 500000$ кількість подій у максимумі $N = 41296$, тому середньоквадратична похибка дорівнює $\delta = 1/\sqrt{N} \approx 0.0049$, що цілком достатньо для прикладних та учбових задач. Зі збільшенням енергії електронів, що налітають на мішень, процеси розсіювання в кремнієвому детекторі здійснюють менший вплив на траєкторію руху електронів [8], тому кут між початковим напрямком та напрямком вильоту з детектору буде зменшуватись.

На рис. 4 представлені результати моделювання залежності кута відхилення від початкового напрямку руху електронів для діапазону енергій 0.3 MeV – 5 MeV.

В процесі виконання представлених лабораторних робіт студенти мають можливість задавати будь-які енергії частинок, вказувати товщини шарів, обирати різні типи первинних частинок і матеріали, керувати рівнями деталізації результатів, що записуються у текстовий файл для подальшої обробки. Комп'ютерні програми, що розроблені і є основою віртуального лабораторного практикуму, мають набір параметрів та команд користувача, які вказуються в діалоговому режимі під час виконання програм для вибору необхідних параметрів кожної лабораторної роботи.

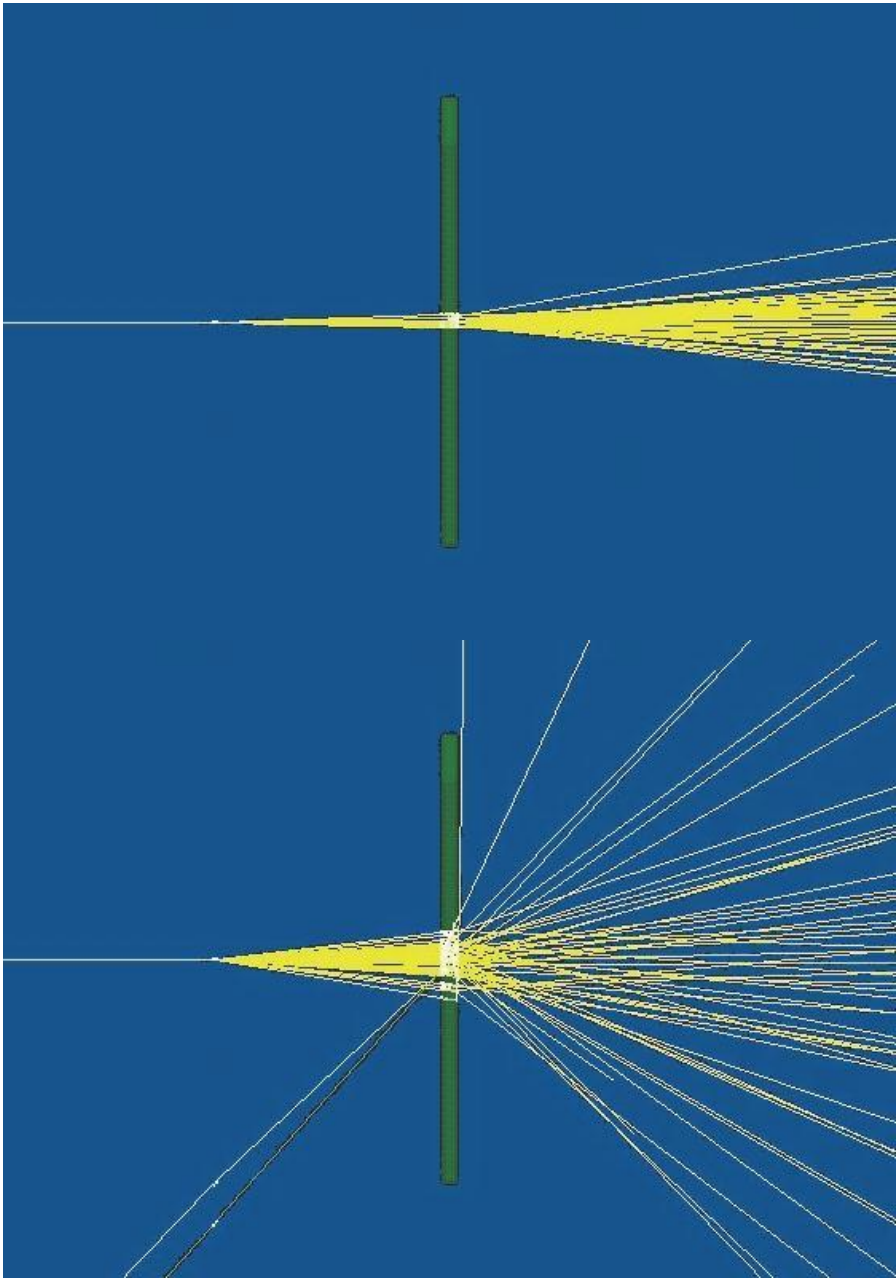


Рисунок 1 – Фрагмент лабораторної роботи з вивчення процесів багатократного розсіювання електронів

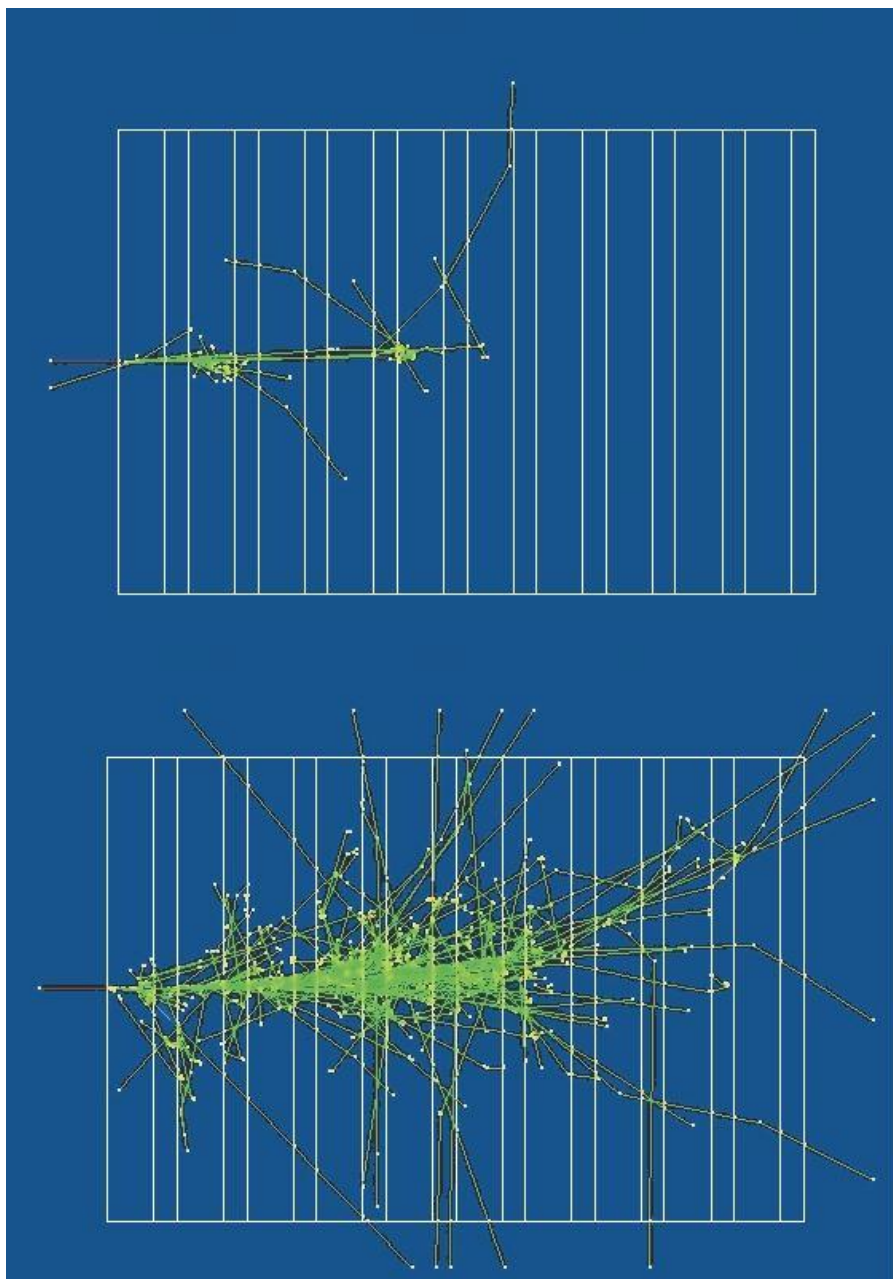


Рисунок 2 – Фрагмент лабораторної роботи з вивчення процесів гальмівного випромінювання електронів

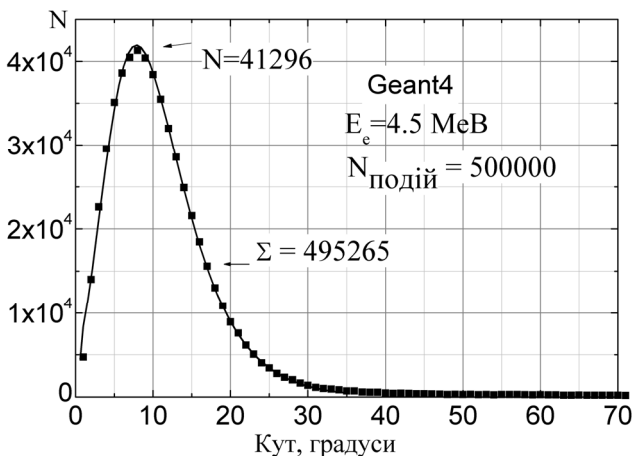


Рисунок 3 – Розподіл кута відхилення первинних електронів, що пройшли через алюмінієву фольгу та детектор

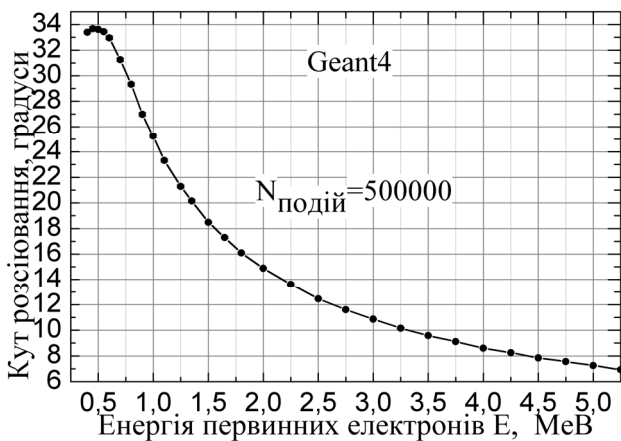


Рисунок 4 – Залежність кута розсіювання електронів, що пройшли через фольгу та детектор, від первинної енергії

Висновки. В результаті розроблення комп'ютерних програм, що є складовою частиною віртуального лабораторного практикуму, з'явилась можливість наочного вивчення процесів багатократного кулонівського розсіювання та процесів гальмівного випромінювання електронів. Ці лабораторні роботи можуть бути проведені без застосування коштовного унікального обладнання лабораторій та великої кількості персоналу, без істотних витрат електроенер-

гії тощо. Розроблення віртуального лабораторного практикуму дозволяє більш інтенсивно використовувати інформаційні технології в освіті. В перспективі – створення нових комп'ютерних програм та доповнення переліку лабораторних робіт відповідно до переліку процесів, що вивчаються студентами старших курсів фізико-технічного та фізико-енергетичного факультетів.

Список літератури: 1. Сорока Л.С., Стервоєдов Н.Г., Мальныха Т.В. Разработка переносного прибора для локации источника излучения. // Вісник Академії митної служби України. Серія “Технічні науки”. – 2011. – № 2 (46). – С. 102 – 109. 2. Мальныха Т.В., Марущенко В.В., Сакун А.В., Стервоєдов Н.Г. Компьютерное моделирование установки для локализации источника гамма-излучения. // Вестник ХНУ. Серия МИА. – 2010. – № 925, вып. 14. – С. 132-139. 3. M.V. Bezuglov, V.S. Malyshevsky, T.V. Malykhina, A.V. Torgovkin, G.V. Fomin and B.I. Shramenko «Photonuclear Channel of ^7Be Production in the Earth's Atmosphere». // Physics of Atomic Nuclei, 2012, Vol. 75, No. 4, P. 393 – 397. 4. J. Allison et.al. Geant4 – a simulation toolkit. // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. – 2003. – A 506. – P. 250 – 303. 5. Веб-ресурс проекту Geant4: <http://geant4.cern.ch> 6. Geant4 User's Guide for Application Developers. [Електронний ресурс]: 2010. – 327 с. – режим доступу: <http://geant4.web.cern.ch/geant4/UserDocumentation/ UsersGuides / PhysicsReferenceManual / fo / BookForAppliDev.pdf>. 7. Physics Reference Manual [Електронний ресурс]: 2010. – 554 с. – режим доступу: <http://geant4.web.cern.ch/ geant4 / UserDocumentation / UsersGuides/PhysicsReferenceManual / fo / PhysicsReferenceManual.pdf>. 8. ICRU(1984). International Commission on Radiation Units and Measurements. *Radiation Dosimetry: Electron beams with energies between 1 and 50 MeV*. ICRU Report 35 (International Commission on Radiation Units and Measurements, Bethesda, Maryland).

Надійшла до редколегії 15.05.2012

УДК 621.317

Р.П. МИГУЩЕНКО, канд. техн. наук, доц., НТУ «ХПІ»;

О.Ю. КРОПАЧЕК, канд. техн. наук, доц., НТУ «ХПІ»;

Т.В. ПЕЧЕРИЦЯ, магістр, НТУ «ХПІ»;

К.В. МАТЯШ, студент, НТУ «ХПІ»

АНАЛІЗ ПИТАНЬ КОМПЕНСАЦІЇ АДИТИВНИХ ЗБУРЕНЬ ПРИ ДІАГНОСТИЦІ ДИЗЕЛЬНИХ АГРЕГАТИВ

Розглянуті питання побудови системи контролю і діагностики стану форсунок дизельних агрегатів. Для розробки системи контролю обраний об'єкт дослідження, розглянуті принципи його функціонування, проведено огляд літератури та проаналізовано можливі моделі процесів у розгляданому об'єкті, обрані основні напрямки роботи при проведенні досліджень, зроблено висновки про перспективи подальших розробок.

Рассмотрены вопросы построения системы контроля и диагностики состояния форсунок дизельных агрегатов. Для разработки системы контроля выбран объект исследования, рассмотрены принципы его функционирования, проведен обзор литературы и проанализированы возможные модели процессов в рассматриваемом объекте, выбраны основные направления работы при проведении исследований, сделаны выводы о перспективах дальнейших разработок.