

РАЗРАБОТКА ПРОГРАММНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ БИБЛИОТЕК GEANT4 ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ИОНИЗИРУЮЩЕГО ИЗЛУЧЕНИЯ С ВЕЩЕСТВОМ

К. М. Музюкин, Е. Н. Крылевский, С. А. Лазарев

ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», г. Саров Нижегородской обл.

В настоящее время актуальна задача моделирования взаимодействия излучения с веществом (тяжелых заряженных частиц, протонов, нейтронов, электронов, гамма-квантов). Одним из направлений, где требуется подобное моделирование, является сопровождение радиационных испытаний электронной компонентной базы (ЭКБ). В данной работе рассматривается технология создания программы для моделирования взаимодействия ионизирующего излучения всех типов частиц с веществом.

В программе предусмотрена возможность описания геометрии облучаемого объекта, геометрии источника, энергии первичных частиц (от 10 кэВ до 100 ГэВ) и типа частиц (гамма-кванты, электроны, протоны, тяжелые заряженные ионы).

Следует отметить, что существуют программы VISUAL TRIADA (ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», ИЯРФ) [1] и ЭЛИЗА (ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», ИТМФ) [2]. Данные программы позволяют моделировать взаимодействие гамма-квантов и электронов с веществом для энергий первичных частиц до 100 МэВ, но отсутствует возможность моделирования тяжелых заряженных частиц (ТЗЧ), что необходимо при изучении влияния космического излучения на ЭКБ.

Обзор литературы показал, что в мировой практике одним из передовых инструментов для создания программ моделирования взаимодействия излучения с веществом является проект GEANT4.

GEANT4 (англ. GEometry ANd Tracking – геометрия и трекинг) – это набор библиотек для моделирования процессов прохождения элементарных частиц через вещество на основе метода Монте-Карло. GEANT4 распространяется под открытой лицензией GEANT4 Software License. Разработка GEANT4 началась в 1994 году с переписывания GEANT3.2.1 на C++. С начала 2000-х годов проект превратился в международную коллаборацию, а GEANT4 стал де-факто стандартным пакетом, который применяется в физике высоких энергий. Помимо физики высоких энергий, он нашел чрезвычайно широкое применение и в иных областях. В частности, программный пакет GEANT4 используется для моделирования физических процессов в астрофизике и физике космических полетов для расчета влияния излучения радиационных поясов на космические телескопы, доз облучения астронавтов, находящихся внутри космических кораблей, а также доз облучения и радиаци-

онного старения электронных схем самих кораблей. А совсем недавно список областей приложения пакета пополнила еще и медицина [3].

Основными преимуществами GEANT4 являются инструменты для гибкого описания геометрии, наличие нескольких драйверов для визуализации и множество физических моделей взаимодействия частиц с веществом [4]:

- электромагнитные процессы;
- адронные процессы;
- фотон-адронные и лептон-адронные процессы;
- процессы с участием оптических фотонов;
- моделирование распадов;
- параметризация ливней;
- методики использования статистических весов.

Параллельно GEANT4 развиваются еще несколько проектов: CLHEP и ROOT.

CLHEP (Computing Library for High Energy Physics) – это математические библиотеки, которые содержат 3-векторы и 4-векторы, действия с матрицами, геометрические объекты и преобразования, генераторы случайных чисел, систему единиц и основные физические константы.

ROOT – пакет объектно-ориентированных программ и библиотек, разработанных в Европейском центре ядерных исследований для использования в качестве платформы обработки экспериментальных данных физики высоких энергий, который содержит специфичные для этой области продукты. CLHEP и ROOT активно используются в проекте GEANT4.

Следует отметить, что проект GEANT4 стремительно развивается. Используя данные библиотеки, можно решать многие типовые задачи, с которыми приходится сталкиваться в ИЯРФ (например, в CERN с помощью библиотек GEANT4 моделируются многие узлы большого адронного коллайдера). Поэтому разработка программ моделирования на основе библиотек GEANT4 является перспективным способом моделирования.

Нами было принято решение использовать библиотеки GEANT4 для решения типовых задач моделирования при проведении испытаний ЭКБ (в основном моделирования ТЗЧ при прохождении через микросхемы).

GEANT4 создан на основе объектно-ориентированной технологии (ООТ). Суть технологии заключается в разделении программы на логические части,

что позволяет существенно упростить разработку и поддержку больших программ, таких как GEANT4. В качестве базового элемента в ООТ используется понятие класса. Наборы классов образуют категории. Для GEANT4 диаграмма категорий классов представлена на рис. 1.

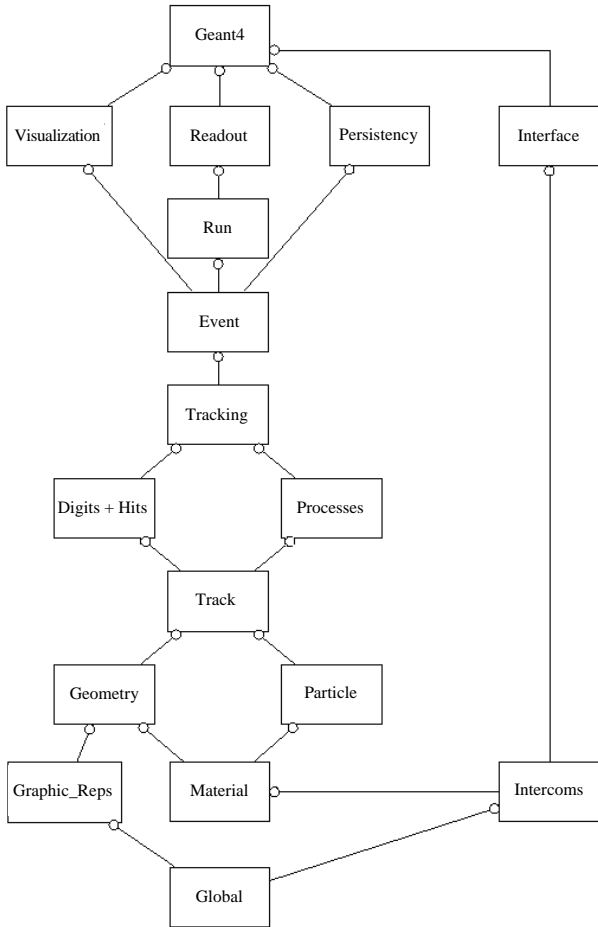


Рис. 1. Диаграмма категорий классов

Для написания программ было создано рабочее место, оснащенное следующим программным обеспечением: операционная система Ubuntu 10.04 (лицензия GPL-совместимая), интегрированная среда разработки Eclipse (свободная лицензия ESL), компилятор GCC (свободная лицензия GPLv3), GEANT4 (свободная лицензия GSL).

Работа состояла из следующих этапов:

- изучение объектной модели и библиотек GEANT4 и их возможностей;
- написание тестовых программ;
- сравнение результатов расчетов с литературными данными, а также программами расчета, которые применяются во ВНИИЭФ.

На первом этапе при использовании библиотек GEANT4 наиболее сложным является изучение объектной модели.

Каждый прямоугольник на рис. 1 представляет набор классов, описывающих соответствующую категорию, прямыми обозначены связи категорий.

Основные понятия GEANT4:

Run (сеанс) – период набора статистики, в котором не меняются условия проведения эксперимента (параметры пучка, конфигурация и параметры детектора, материал мишени и т. п.).

Event (событие) – единичное независимое изменение физического явления детектором.

Track (трек) – описывает полное продвижение частицы в веществе.

Step (шаг) – описывает минимальное продвижение частицы через вещество с учетом различных физических процессов, является составляющей единицей трека.

Digits + Hit (срабатывание) – описывает единичное взаимодействие частицы с веществом в детектирующем объеме.

Visualization (визуализация) – различные драйверы для визуализации результатов счета.

Interfaces (интерфейсы) – предоставляют возможность интерактивного взаимодействия с программой.

Geometry (геометрия) – представляет классы для описания геометрии задачи.

Materials (материалы) – представляет классы для задания химического состава геометрии.

Processes (процессы) – содержит набор физических моделей.

Написание простой программы на основе библиотек GEANT4, как правило, сводится к созданию экземпляров классов, с заданными свойствами, и состоит из следующих этапов:

- описание геометрии задачи;
- задание физических моделей расчета;
- задание источника первичного излучения;
- описание параметров, которые необходимо рассчитать.

Первое, что необходимо сделать при описании геометрии, – это задать материалы для каждой области геометрии. Существует несколько способов задания материалов: по химической формуле, через массовые доли компонент, значение из библиотеки GEANT4 и через смесь материалов.

Задав материалы, можно переходить к описанию геометрии. В GEANT4 геометрия задачи состоит из множества объемов, описание каждого состоит из трех этапов: описание формы, логического объема и физического объема.

На этапе описания объема задается информация только о его форме и размерах. База форм GEANT4 достаточно разнообразна и содержит формы различных типов – параллелепипед, цилиндр, конус, трапециод, сфера, шар, тор, гиперболическая поверхность, перекрученный параллелепипед, специальные формы, формы, определяемые поверхностью, и булевы формы. Для тестовой задачи использовался параллелепипед.

После задания формы на ее основе создается логический объем, который, кроме геометрических параметров, содержит описание материала, заполняющего объем, электромагнитные поля, свойства визуализации объема и описание детектирующей способности.

Физический объем строится на основе логического и описывает положение объема в пространстве. Есть различные способы размещения объемов – от одиночного позиционирования до параметризации. На размещение объемов накладываются несколько ограничений – все объемы должны быть вложены один в другой. Геометрия задачи может содержать только один глобальный объем, в котором размещаются остальные объемы.

После описания геометрии задачи задается набор физических моделей. В GEANT4 имеется большое количество встроенных физических моделей, которые можно использовать в своей программе. При отсутствии подходящей модели существует возможность написать свою. Список процессов и соответствующих классов, которые использовались для тестовых программ, представлен ниже.

1. Гамма-кванты: фотоэффект (для описания используется класс `G4PhotoElectricEffect`), комптон-эффект (`G4ComptonScattering`), рождение пар (`G4GammaConversion`), рэлеевское рассеяние (`G4RayleighScattering`).

2. Электроны: многократное рассеяние `G4eMultipleScattering`; ионизация и рождение дельта-электронов `G4eIonisation`; тормозное излучение `G4eBremsstrahlung`.

3. Позитроны: многократное рассеяние `G4eMultipleScattering`; ионизация и рождение дельта-электронов `G4eIonisation`; тормозное излучение `G4eBremsstrahlung`; аннигиляция позитрона `G4eplusAnnihilation`.

4. Мюоны: многократное рассеяние `G4MuMultipleScattering`; ионизация и рождение дельта-электронов `G4MuIonisation`; тормозное излучение `G4MuBremsstrahlung`; рождение пар `G4MuPairProduction`.

5. Протоны и пионы: многократное рассеяние `G4hMultipleScattering`; ионизация `G4hIonisation`; тормозное излучение `G4hBremsstrahlung`; рождение пар `G4hPairProduction`.

6. Ионы: многократное рассеяние `G4hMultipleScattering`; ионизация `G4ionIonisation`.

Следующий этап – задание источника излучения. В GEANT4 существует два типа источника первичных частиц: точечный и распределенный. Параметры источников можно задать как при написании программы, так и в интерактивном режиме, что очень удобно при проведении однотипных расчетов. В качестве первичных частиц могут быть электроны, протоны, нейтроны, гамма-кванты и ионы с различными типами распределений энергий.

Для тестовых задач использовались оба типа источников. В первом случае это был точечный источник с монохроматическим спектром частиц, во втором – распределенный источник формы круга, также с монохроматическим спектром. Тип частиц для различных задач варьировался: электроны, гамма-кванты и ионы железа.

Одним из основных преимуществ GEANT4 является то, что программист имеет полный контроль

над процессом моделирования. Это выражается в доступе к параметрам частицы на любом уровне от Step до Run. Таким образом, возможно реализовать расчет большого количества функционалов. Для ускорения разработки программ разработчики GEANT4 создали классы нескольких функционалов – энерговыделение, доза, флюенс, заряд и т. д. Для тестовых задач использовался класс функционала «энерговыделение», который был переработан в соответствии с потребностями задачи.

Вывод данных, как и расчеты, можно выполнять на любом из уровней от Step до Run. В результате можно создать формат вывода, удобный для анализа. В тестовых задачах расчетная информация может выводиться как на стандартный вывод, так и в файл.

В GEANT4 присутствуют средства визуализации (в терминологии GEANT4 они называются драйверами визуализации), которые можно выбрать в зависимости от задачи. В большинстве задач используется драйвер на основе библиотек FreeGlut (свободная лицензия X Consortium), Qt (лицензия GPLv3) и OpenInventor (свободная лицензия LGPL), так как он имеет пользовательский интерфейс и возможность мгновенной визуализации без использования сторонних программ. Если мгновенная визуализация не нужна, то применяется драйвер HepRep, который создает файл для дальнейшей визуализации, например в программе HepRApp. Остальные драйверы используются реже. Также в составе исходных кодов GEANT4 присутствует шаблон для создания собственного драйвера визуализации, что является не маловажным при решении специфических задач.

В GEANT4 возможно использовать два режима работы – интерактивный и потоковый. Интерактивный режим (рис. 2) удобен для отладки при написании программы, когда необходимо визуально увидеть задачу. Потоковый режим используется для большого количества расчетов, в нем отсутствует визуализация, что позволяет существенно увеличить скорость вычислений.

Пример работы программы в визуальном режиме приведен на рис. 2.

После компиляции и запуска программы в интерактивном режиме появляется окно визуализации, которое разделено на две части: слева располагаются вкладка со списком команд, вкладка вывода информации о процессе работы программы и вкладка истории выполненных команд, справа – окно визуализации.

Для тестирования и освоения функциональных возможностей GEANT4 разработаны несколько тестовых программ: программа с простой геометрией, программа для расчета спектральной чувствительности детектора методики ИКС-А и программа для расчета энерговыделений в слоях различных микросхем – ChipsTest (пример будет рассмотрен в одном из докладов данного сборника).

На рис. 3–5 представлены окна визуализации тестовой задачи ChipsTest. Прямые – это треки частиц.

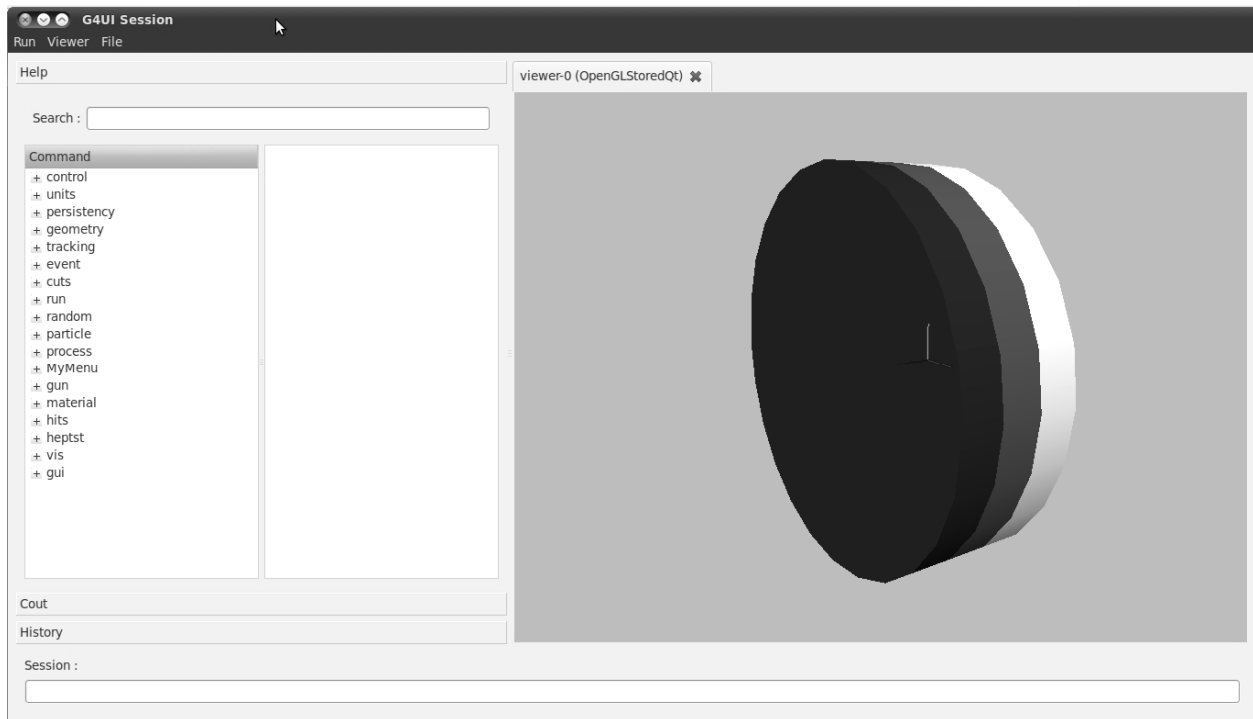


Рис. 2. Интерфейс программы

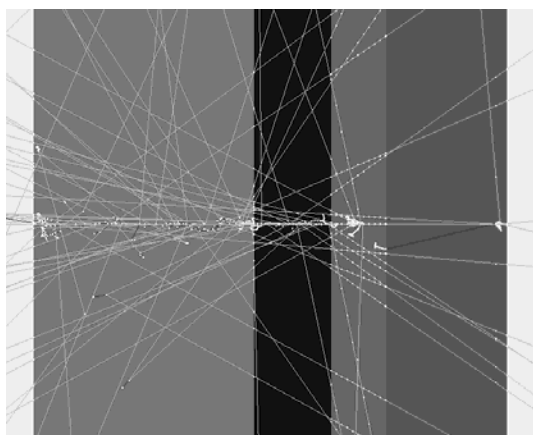


Рис. 3. Визуализация. Тип частиц источника: гамма-кванты с энергией 0,5 МэВ

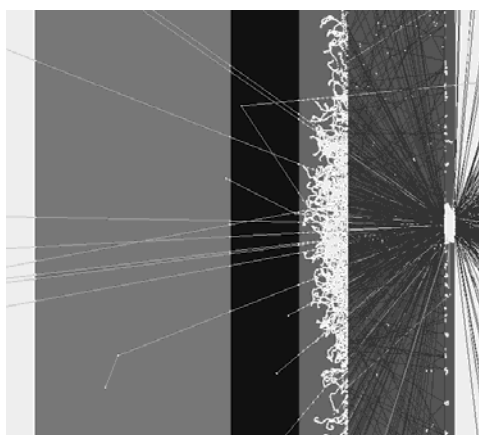


Рис. 4. Визуализация. Тип частиц источника: электроны с энергией 0,5 МэВ

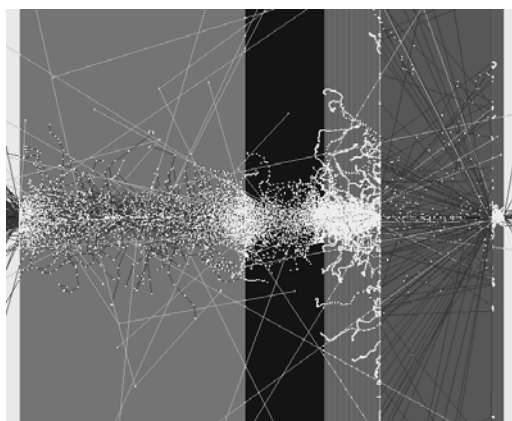


Рис. 5. Визуализация. Тип частиц источника: ионы железа с энергией 20 ГэВ

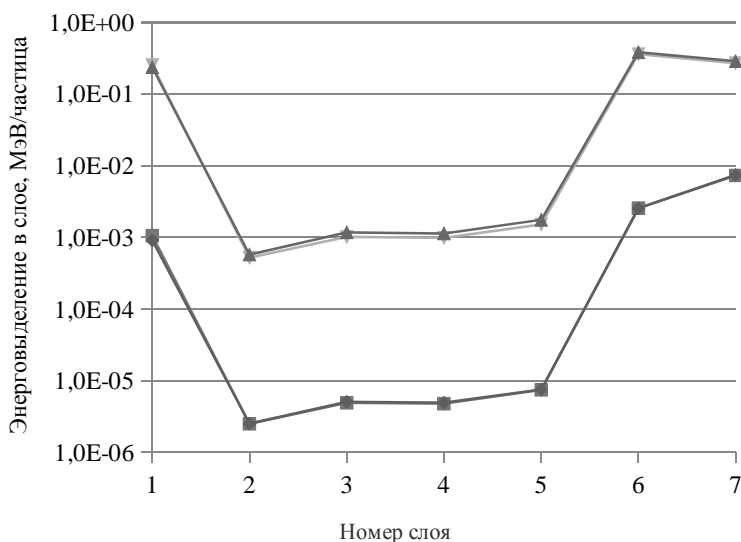


Рис. 6. Сравнение результатов расчетов: ■ – ТРИАДА (гамма); ◆ – ChipsTest (гамма); ▽ – ТРИАДА (электроны); ▲ – ChipsTest (электроны)

После разработки тестовой программы (ChipsTest), с использованием библиотек GEANT4, целесообразно оценить ее эффективность. Основными критериями при оценке эффективности моделирования переноса ионизирующего излучения с помощью программного обеспечения на базе библиотек GEANT4 являются:

1. Сравнение результатов расчета с результатами по программе VISUAL TRIADA.

2. Сравнение с литературными данными.

Для сравнения результатов по программам «ChipsTest» (GEANT4) и VISUAL TRIADA были проведены тестовые расчеты, в которых облучаемый объект – многослойная сборка (рис. 5), тип источника – монохроматический пучок, частицы источника – гамма-кванты и электроны.

Результаты расчетов в пределах статистической погрешности сошлись и приведены на рис. 6.

В докладе ICRU № 73 [5] представлено детальное сравнение линейных поглощений энергии (ЛПЭ), полученных экспериментальными и расчетными методами разными авторами (в т. ч. с помощью библиотек GEANT4). Для проверки правильности использования библиотек GEANT4 были проведены тестовые расчеты, результаты которых в пределах статистической погрешности совпали с результатами из доклада.

Детальное рассмотрение и результаты облучения тестовой сборки различными типами частиц представлены в докладе данной конференции «Применение программного обеспечения на основе библиотек GEANT4 для решения типовых задач при проведении испытаний интегральных микросхем на стойкость к ионизирующему излучению космического пространства».

Заключение

1. Работа показала, что библиотеки GEANT4 являются мощнейшим инструментом для разработки программ моделирования прохождения излучения через вещество.

2. Разработаны тестовые программы на основе библиотек GEANT4.

3. Проведено сравнение результатов моделирования с использованием библиотек GEANT4 с программой VISUAL TRIADA, результаты расчетов в пределах статистической погрешности не отличаются. При этом программы на основе GEANT4 позволяют проводить моделирование излучения протонов и тяжелых ионов.

В перспективе планируется реализовать импорт геометрии из CAD-систем в формат геометрии GEANT4 и освоить технологию создания многопоточных программ с использованием GEANT4.

Литература

1. Шмаров А. Е. Программа «VISUAL TRIADA» – инструмент численного моделирования совместного переноса гамма-квантов, электронов и позитронов в веществе методом Монте-Карло // VI Межотраслевая конф. по радиационной стойкости, 14–20 октября 2002 г., Саров.

2. Донской Е. Н. Методика и программа ЭЛИЗА решения методом Монте-Карло задач совместного переноса гамма излучения, электронов и позитронов // ВАНТ. 1993, № 1. С. 3–6.

3. АНИ «ФИАН-информ».
http://www.strf.ru/material.aspx?d_no=28884&CatalogId=222&print=1

4. Geant4 User's Guide for Application Developers // Geant4 Collaboration.

5. Bimbot R., Geissel H., Paul H. et al. Stopping of ions heavier than helium // Journal of ICRU. 2005. Vol. 5, N 1, 73.