

СООБЩЕНИЯ  
ОБЪЕДИНЕННОГО  
ИНСТИТУТА  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ  
ДУБНА

Ч 491

19-88-144

Л.П.Черненко, С.Козубек

АЛГОРИТМ РАСЧЕТА  
МИКРОДОЗИМЕТРИЧЕСКОЙ  $f(Z,D)$ -ФУНКЦИИ

1988

Построим процедуру расчета дозово-зависимой функции распределения случайной величины  $Z$ ,  $f(Z, D)$  на основании функций распределения случайных величин  $Z_i$  и  $n$  в отдельности.

Показано [1], что

$$f(Z, D) = \sum_{n=0}^{\infty} P(n) \cdot f_n(Z), \quad /2/$$

где  $P(n)$  - распределение Пуассона, а  $f_n(Z)$  - распределение вероятности выделения энергии  $Z$  в  $n$  событиях попадания заряженных частиц в чувствительный объем. Функция  $f_n(Z)$  определяется по функции распределения одиночного события попадания  $f_1(Z)$  в виде свертки:

$$f_n(Z) = \int f_{n-1}(Z-Z') \cdot f_1(Z') dZ'. \quad /3/$$

Для упрощения задачи рассмотрим облучение чувствительного объема однородным потоком заряженных частиц с заданным значением  $L$ , которое не меняется при пересечении объема частицей. Легко показать, что  $f_1(Z)$  в таком случае отражает геометрические флуктуации, связанные с разной длиной пробега частицы в чувствительном объеме, и для сферического чувствительного объема имеет вид

$$f_1(Z) = \frac{2 \cdot Z}{a^2}, \quad /4/$$

где параметр  $a$  характеризует максимально возможное энерговыделение при пересечении частицей по оси, проходящей через ее центр. Для бесконечно тонких треков, без учета вклада в энерговыделение  $Z$   $\delta$ -электронов,

$$a = 2 \cdot r \cdot L.$$

Если учесть, что доля энергии  $k$  из  $L$  уходит на образование  $\delta$ -электронов, то параметр  $a$  будет равен

$$a = 2 \cdot r \cdot L \cdot (1 - k),$$

и соответствующая ему зависимость  $f_1(Z)$  будет отражать распределение поглощенной энергии, выделяемой сердцевинной трека частицы, в одиночном событии попадания. Величина  $k$  определяется размером сердцевины трека и принята нами равной  $k = 0,45$ , что соответствует диаметру сердцевины трека  $r_{\min} = 1$  нм.

Для расчетов функции  $f_n(Z)$  воспользуемся преобразованием Лапласа. Найдем образ Лапласа  $F_1(p)$  функции  $f_1(Z)$ . По определению

$$F_1(p) = \int_0^{\infty} f_1(Z) e^{-pZ} dZ = \int_0^a \frac{2 \cdot Z}{a^2} e^{-pZ} dZ = \frac{2}{a^2} \left[ -\frac{a}{p} e^{-pa} + \frac{1}{p^2} (1 - e^{-ap}) \right], \quad /5/$$

где  $p = (x + i \cdot y)$  - комплексный параметр. По теореме для свертки в теории преобразования Лапласа [2] имеем для  $n$ -кратной свертки  $f_n(Z)$  образ Лапласа  $F_n(p) = [F_1(p)]^n$ , т.е. вычисление образа  $n$ -кратной свертки сводится к возведению в степень образа  $F_1(p)$ . Далее остается провести обратное преобразование Лапласа, чтобы найти искомую  $n$ -кратную свертку, а именно

$$f_n(Z) = \frac{1}{2\pi i} \int F_n(p) e^{pZ} dp. \quad /6/$$

Вычисление  $n$ -кратной свертки  $f_n(Z)$ , таким образом, можно свести к приближенному вычислению интеграла /6/. Нами было найдено,

$$\text{что интеграл /6/ равен } f_n(Z) = \frac{1}{\pi} \int_0^w \operatorname{Re} [ F_n(x + i \cdot y) \cdot e^{(x + i \cdot y) Z} ] dy,$$

где параметры  $w$  и  $x$  были выбраны так, чтобы процедура расчета интеграла, использующая метод Симпсона при числе шагов интегрирования, равном  $20 \div 30$ , давала приемлемую точность и скорость счета. Было выбрано

$$w = \frac{20}{n-1}, \quad x = \frac{1}{n}.$$

Можно показать, что  $f_n(Z)$  обладает свойством

$$f_n(Z) = \frac{\sqrt{2}}{a} f_n\left(\frac{\sqrt{2}}{a} \cdot Z\right), \quad /7/$$

которое использовалось для того, чтобы функции  $f_n(Z)$  затабулировать при значении параметра  $a = \sqrt{2}$ . В памяти ЭВМ была зарезервирована матрица для значений  $f_n(Z_i)$  при  $a = \sqrt{2}$  где  $i = 1, 2, \dots, 30$ ,  $n = 2, 3, \dots, 240$ . Значения  $Z_i$  выбраны с равномерным шагом для каждого  $n$  в интервале от  $Z_{\min}$  до  $Z_{\max}$ , где  $Z_{\min} = (0,57 - \frac{0,74}{n}) \cdot n \cdot \sqrt{2}$ ,

$$Z_{\max} = (0,75 + \frac{0,5}{\sqrt{n}}) \cdot n \cdot \sqrt{2}.$$

Данные интервалы  $Z$  определяют существенные значения  $f_n(Z)$  такие, что

$$\int_{Z_{\min}}^{Z_{\max}} f_n(Z) dZ = 1$$

с точностью не хуже 1%.

В приложении 1 приводится программа, по которой рассчитывалась матрица табулированных функций  $f_n(Z)$  при  $a = \sqrt{2}$ . Для нее отведен массив  $W(240, 30)$ , в котором первый индекс пробегает значения  $n$  от 2 до 241, а второй соответственно  $i$  от 1 до 30. В результате работы программы в файл TAPE 1 будет занесен данный массив для хранения и последующего применения в расчетах. Расчеты выполнялись на ЭВМ CDC-6500. Чтобы вычислить все значения массива  $W$  по данной программе, потребовалось меньше 20 мин процессорного времени. Дальнейшие расчеты с использованием массива  $W$  существенно экономят процессорное время по сравнению с вариантом программы, в которой  $f_n(Z)$  рассчитывались бы без табулирования.

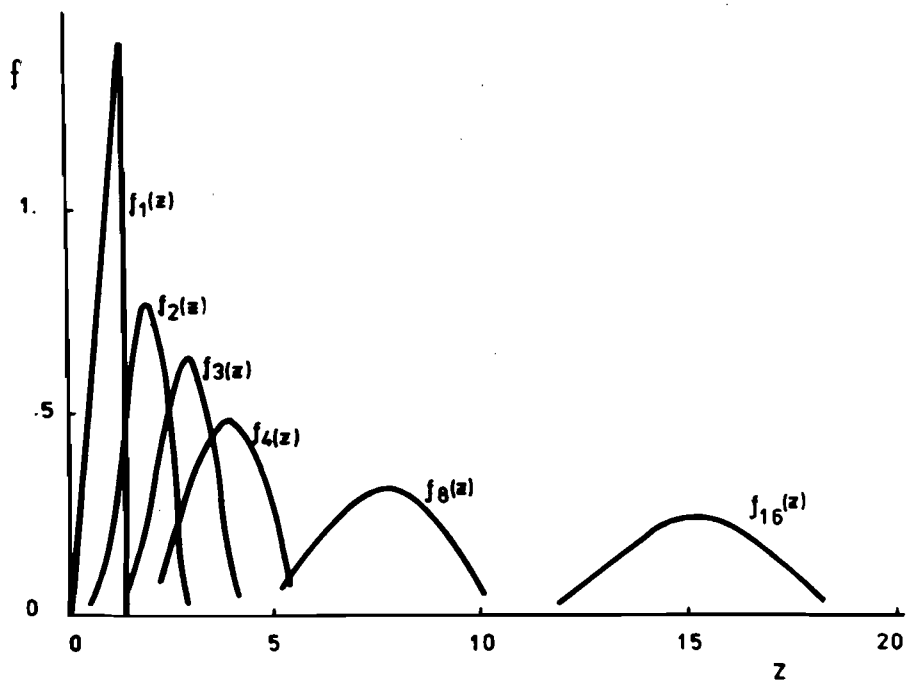


Рис.1. Поведение табулированных функций  $f_n(Z)$  для  $n = 1, 2, 3, 4, 8$  и  $16$ . По оси абсцисс -  $Z$ , отн.ед.; по оси ординат - плотность вероятности, отн.ед.

На рис.1 приведены  $f_n(Z)$ , построенные по табулированным значениям для  $n = 1, 2, 3, 4, 8, 16$ . В точках, промежуточных между табличными значениями, функция рассчитывалась линейной интерполяцией между соседними точками. Нормированность функций  $f_n(Z)$  на единицу использовалась для проверки процедуры их расчета. Кроме того, свертку  $f_2(Z)$  легко вычислить аналитически и это дает формулу для проверки расчета интеграла /6/ в нашем алгоритме. Для вычисления  $f_n(Z)$  при произвольном значении параметра  $a$  применялось соотношение /7/.

Распределение Пуассона  $P(n)$  имеет вид

$$P(n) = e^{-\bar{n}} \cdot \frac{\bar{n}^n}{n!}, \quad /8/$$

где  $\bar{n} = \frac{\pi \gamma^2 D}{0,16L}$  - безразмерное среднее количество попаданий в сферу радиуса  $\gamma$  при данных  $D$  и  $L$ .

Таким образом, в /2/ имеем полностью определенные величины. При этом суммирование ведется до максимальных значений  $n = 240$ :

$$f(\gamma, D) = \sum_{n=0}^{240} P(n) \cdot f_n(Z). \quad /9/$$

Ограничение  $n \leq 240$  приводит к тому, что  $\bar{n}$  не должно быть большим, а именно, так, чтобы  $\bar{n} + 3 \cdot \sqrt{\bar{n}} \leq 240$ . Это соответствие дает ограничение на параметры  $D, \gamma, L$ , которые определяют  $\bar{n}$ . К примеру, если  $D = 800$  Гр,  $\gamma = 0,5$  мкм, то  $L \geq 20$  кэВ/мкм. Данные ограничения соответствуют тому, что  $P(n)$  пробегает ряд существенных значений при суммировании по  $n$  от 0 до 240. Точность расчетов на данном этапе контролировалась по вычислению интегралов

$$\begin{cases} \int f(Z, D) dZ = 1, \\ \int Z f(Z, D) dZ = D \end{cases} \quad /10/$$

и составляла величину не хуже 5%.

#### УЧЕТ $\delta$ -ЭЛЕКТРОНОВ

Согласно концепции радиального распределения поглощенной энергии /4/ /РРПЭ/ в треке заряженной частицы

$$\begin{cases} D(x) = \text{const} & \text{при } 0 < x < r_{\min}, \\ D(x) \sim \frac{1}{x^2} & \text{при } r_{\min} < x < r_{\max} \end{cases} \quad /11/$$

где  $r_{\min}$  - радиус сердцевины трека, равный примерно 1 нм;  
 $r_{\max} = 40 \cdot E^{1,75}$  нм - максимальный радиус трека, определяемый пробегом  $\delta$ -электрона с максимальной энергией;  $E$  - энергия частицы, МэВ/нукл.;  $D(x)$  - локальная доза;  $x$  - расстояние от геометрической оси трека.

Такая структура трека позволяет все события энергосвободения в чувствительном объеме разделить на "прямые" и "непрямые". К прямым событиям относятся такие, при которых сердцевина трека заряженной частицы пересекает чувствительный объем, а к непрямым событиям - те, которые обусловлены попаданием в него только  $\delta$ -электронов.

Исходя из особенностей РРПЭ /11/, в треке заряженной частицы можно оценить долю энергии, поглощаемой в событиях непрямого попадания

$$FG = \frac{\int_M D(x) ds}{\int_{r_{\min}}^{r_{\max}} D(x) \cdot 2\pi \cdot x dx}$$

где элементарная площадь  $ds$  рассматривается в области  $M$ , перекрывающей чувствительный объем и "шубу"  $\delta$ -электронов трека. Таким образом,  $FG$  - это доля энергосвободения в событиях непрямого попадания, усредненная по различным возможным конфигурациям расположения "шубы"  $\delta$ -электронов и чувствительного объема. Несложные вычисления приводят к формуле

$$FG = 0,5 \frac{\ln(r_{\max} + r) - \ln r}{\ln r_{\max} - \ln r_{\min}} \quad /12/$$

Энергосвободение в событиях непрямого попадания, как мы предполагаем, распределяется по облучаемой области без флуктуаций и обладает свойствами энергосвободения при равномерном облучении электромагнитными видами излучения. При этом часть дозы  $D$ , соответствующая поглощению энергии без флуктуаций

$$Z_\gamma = D \cdot k \cdot FG \cdot \frac{4\pi r^3}{3 \cdot 0,16} \quad /13/$$

определяет параметр  $\delta$ -функции Дирака в первом члене суммы / $n = 0$ , или отсутствие попаданий/ в выражении для  $f(Z, D)$ , а именно

$$f_0(Z) = \delta(Z - Z_\gamma).$$

Для вычисления  $f(Z, D)$  с учетом  $\delta$ -электронов мы должны из полной энергии  $Z$ , которая является случайной величиной, вычесть компонент, обусловленный непрямыми попаданиями.

Можно записать

$$Z = Z_\Delta + Z_\delta,$$

где  $Z_\Delta = Z \cdot (1 - k)$  - энергия, выделяемая сердцевинкой треков;  $Z_\delta$  - энергия, выделяемая  $\delta$ -электронами, из которой часть  $FG \cdot Z_\delta$  определяет компоненту равномерного облучения без флуктуаций. Часть энергии  $Z_\delta \cdot (1 - FG)$  принципиально ведет себя так же, как и энергия, выделяемая в сердцевинке трека, и ее следует рассматривать, суммируя одновременно с  $Z_\Delta$ .

Таким образом, в прямом попадании выделяется энергия

$$Z' = Z_\Delta + Z_\delta(1 - FG) = (Z - Z_\gamma) \cdot CZ,$$

где

$$CZ = \frac{1 - k}{1 - k \cdot FG}.$$

В выражении для  $f(Z, D)$  у членов суммы, определяющих число попаданий  $n = 1, 2$  и т.д., необходимо аргумент  $Z$  заменить на  $Z'$ , при этом мы приходим к окончательному выражению для  $f(Z, D)$ :

$$f(Z, D) = e^{-\bar{n}} \delta(Z - Z_\gamma) + \sum_{n=1}^{240} P(n) f_n(Z'), \quad /14/$$

которое учитывает особенности энергосвободения в треке в соответствии с концепцией РРПЭ:

На рис. 2 и 3 приведены расчеты функции  $f(Z, D)$  при разных параметрах  $D, L, r$ , иллюстрирующие основные черты распределения.

Если рассматривать вероятность биологического эффекта  $G(Z)$  при определенном энергосвободении  $Z$  в виде некоторого функционального закона, то экспериментально наблюдаемый эффект необходимо рассчитывать, усредняя по всем возможным  $Z$ , распределенным по  $f(Z, D)$  т.е.

$$S(D) = \int G(Z) f(Z, D) dZ, \quad /15/$$

где  $S(D)$  - наблюдаемый эффект.

В приложении 2 приводится программа для расчета  $S(D)$  при  $G(Z) = Z$  с использованием формулы /14/. Очевидно при этом, что  $S(D)$  определяет среднее  $Z$  или дозу  $D$ , т.е.  $S(D) = D$ .

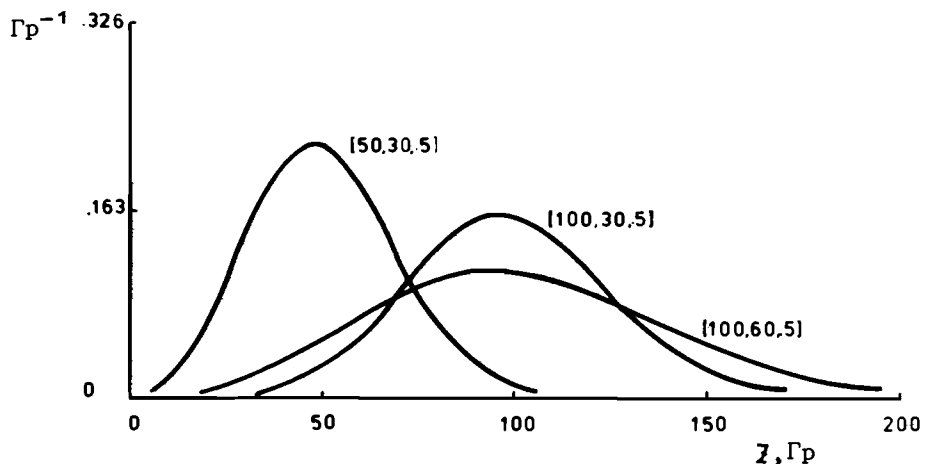


Рис.2. Дозово-зависимое распределение  $f(Z, D)$ . Параметры  $D, L, \Gamma$  приведены в квадратных скобках и выражены соответственно в  $\text{Gr}$ ,  $\text{кэВ/мкм}$ ,  $\text{мкм}$ . По оси абсцисс: специфическая энергия,  $\text{Gr}$ ; по оси ординат: плотность вероятности,  $\text{Gr}^{-1}$ .

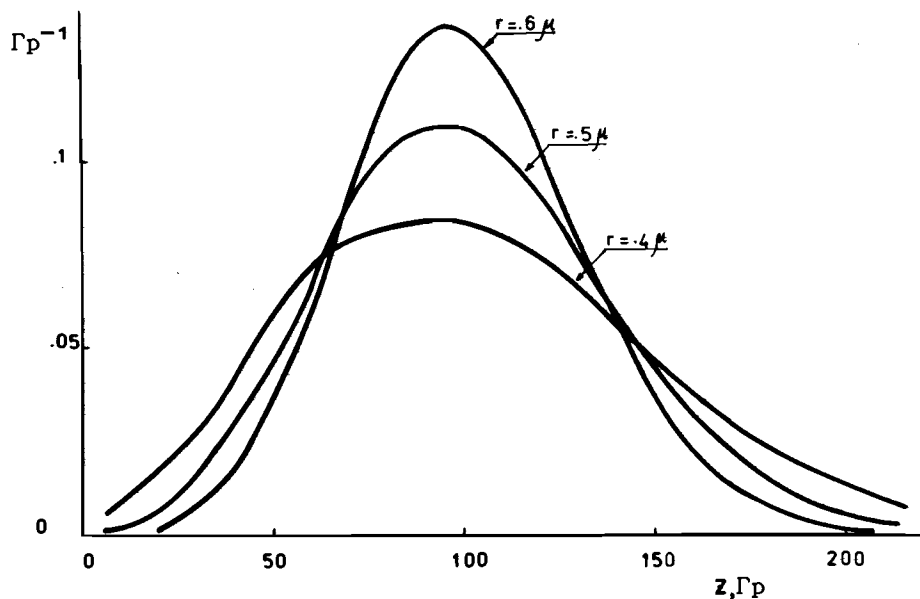


Рис.3. Динамика изменения  $f(Z, D)$  при изменении радиуса чувствительного объема. По оси абсцисс: - специфическая энергия,  $\text{Gr}$ ; по оси ординат - плотность вероятности,  $\text{Gr}^{-1}$ .

Таким образом, развитый алгоритм расчета  $f(Z, D)$  является сравнительно простым и пригоден для расчета кривых доза - эффект при различных  $L$ . Он учитывает характер распределения энерговыделения в треке заряженных частиц от сердцевины трека и  $\delta$ -электронов, окружающих ее.

### Приложение 1

```

PROGRAM TESI (INPUT, OUTPUT, TAPE 1)
COMMON/BL2/M(240,30)
COMMON/BL1/LIM,M,X,A,Z,RADIUS,DELTA,K,EPL,EVRN,S0,A2,GK
CALL WRFZM
STOP
END
FUNCTION FZM (DUM)
COMMON/BL1/LIM,M,X,A,Z,FAJ,DEL,EPL,EVRN,S0,A2,GK
NSTEP=30
XMIN=0.
XMAX=(20./M-1)**(1./M-1)
S2=SIMP(S(XMIN,XMAX,NSTEP))
FZM=S2*EXP(Z*X)/3.1415926
111 FOR/IAT(2X,* NSTEP=*,I8,* FZM= *,E14.2,* Z= *,E14.8)
RETURN
END
FUNCTION SIMPS(XMIN,XMAX,NSTEP)
H=(XMAX-XMIN)/NSTEP
N=NSTEP-1
X1=XMIN
X2=X1+H
A=FUNFZM(X1)+4.*FUNFZM(X2)
DO 1 I=1,N,2
X1=X2+H
X2=X1+H
1 A=A+2.*FUNFZM(X1)+6.*FUNFZM(X2)
X1=X2+H
A=A+FUNFZM(X1)
SIMPS=A*H/3.
RETURN
END
FUNCTION FUNFZM (Y)
COMMON/BL1/LIM,M,X,A,Z,RADIUS,DELTA,K,EPL,EVRN,S0,A2,GK
COMPLEX P,E,E1
P=CMPLX(X,Y)
E1=(1.-0.)
E=-P*A2
E=DEXP(E)
E=-A2*E/P+(1.-E)/(P*P)
DO 1 I=1,M
1 E1=E1*E
RP=REAL(E1)
RI=AIMAG(E1)
FUNFZM=RP*COS(V*Z)-RI*SIN(V*Z)
RETURN
END
SUBROUTINE WRFZP
COMMON/BL2/M(240,30)
COMMON/BL1/LIM,M,X,A,Z,DU(4),S0,A2,GK
DO 1 I=2,241
M=I
X=1./M
XMAX=(.75+.5/SQRT(1.*M))*M*A2
XMIN=(.57-.74/M)*M*A2
H=(XMAX-XMIN)/29.
DO 2 L=1,30
Z=XMIN+H*(L-1)
S=FZM(DUM)
2 M(I-1,L)=S
1 CONTINUE
WRITE(1)M
RETURN
END

```

```

PROGRAM TEST(INPUT,OUTPUT,TAPE1)
COMMON/BL3/OG,CZ
COMMON/BL2/M(240,30)
COMMON/BL1/LIM,M,X,A,Z,RADIUS,DELTA C,EPL,EVRN,S0,A2,GK
REWIND 1
READ(1)M
RADIUS=.6
EN=20.
EPL=60.
RMAX=40.*EEN**1.75)
FG=.5*ALOG((RMAX+RADIUS*1J60.)/(RADIUS*13.0.))
RMIN=1.
FG=FG/ALOG(RMAX/RMIN)
GK=.7/3.*(RADIUS*RADIUS)/.1602*3.1415926
A2=SQRT(2.)
Z=10.
D=50.
LIM=240
DELTAK=.45
CZ=(1.-DELTAK)/(1.-FG*DELTAK)
A=2.*RADIUS*(1.-CELTAK)*EPL
DG=0*DELTAK*FG
EVRN=D*RADIUS*FACIUS*3.1415926/EPL/.1602
S0=EXP(-EVRN)
CALL SQ(Y,D)
Y=Y+S0*DG
PRINT 1,Y,D
1  FORMAT(1X,*S(D)=*,E14.8,* D=*,E14.8)
STOP
END
FUNCTION FZD(Z,D)
COMMON/BL1/LIM,M,X,A,ZZ,RADIUS,DELTA C,EPL,EVRN,S0,A2,GK
ZZ=Z
N=1
S1=EVRN*F1Z(Z)
S2=EVRN
DO 1 L=2,LIM
M=L
S2=S2*EVRN/L
X=1./M
XMAX=(.75+.5/SQRT(1.*M))*M*A2
XMIN=(.57-.74/P)*M*A2
S3=0.
IF(ZZ.LE.XMIN)GO TO 2
IF(ZZ.GT.XMAX)GO TO 2
S3=FZMN(XMAX,XMIN)
2  CONTINUE
1  S1=S1+S2*S3
FZD=S1*S0*A2/A
RETURN
END
FUNCTION F1Z(Z)
COMMON/BL1/LIM,M,X,A,ZZ,RADIUS,DELTA C,EPL,EVRN,S0,A2,GK
F1Z=Z
IF(ZZ.GT.A2)F1Z=0.
IF(ZZ.LT.0.)F1Z=0.
RETURN
END
FUNCTION FZMN(XMAX,XMIN)
COMMON/BL2/M(240,30)
COMMON/BL1/LIM,M,X,A,Z,DU(4),S0,A2,GK
M=(XMAX-XMIN)/29.
I=1
DO 1 L=1,30
Z1=XMIN+M*(L-1)
IF(Z.LE.Z1)GO TO 2
1  I=I+1
2  CONTINUE
FZMN=(M*(M-1,I)-M*(M-1,I-1))/M*(Z-Z1+M)+M*(M-1,I-1)
RETURN

```

```

END
SUBROUTINE SQ(Y,D)
COMMON/BL1/LIM,M,X,A,Z,RAD,DEL,EPL,EVRN,S0,A2,GK
COMMON/BL3/OG,CZ
XMAX=.5.*D+2.*EPL*XMAX=(XMAX-DG)*CZ*A2*GK*A
NSTEP=60
M=NSTEP-2
H=XMAX/NSTEP
Z=HSA1=.4.*FZC(Z,C)*G(D)
DO 1 I=1,N,2
Z=Z+HSA1=A1+2.*FZD(Z,D)*G(D)
Z=Z+H
1  A1=A1+4.*FZC(Z,D)*G(D)
Z=Z+HSA1=A1+FZC(Z,D)*G(D)
Y=A1*H*A/A2/3.
RETURN
END
FUNCTION G(D)
COMMON/BL1/LIM,M,X,A,Z,RAD,DEL,EPL,EVRN,S0,A2,GK
COMMON/BL3/OG,CZ
Y=Z*A/A2/EK/CZ*DE
G=Y
RETURN
END

```

ЛИТЕРАТУРА

1. Иванов В.И., Лыцов В.Н. Основы микродозиметрии. М.: Атомиздат, 1979.
2. Бронштейн И.Н., Семендяев К.А. - В кн.: Справочник по математике. М.: Наука, 1986, с.437.
3. Иванов В.И., Лыцов В.Н., Губин А.Г. - В кн.: Справочное руководство по микродозиметрии. М.: Энергоатомиздат, 1986, с.57.
4. Кудряшов Е.И. и др. - В кн.: Вопросы микродозиметрии. Труды первого Всесоюзного совещания по микродозиметрии. М.: Атомиздат, 1973, с.49.

Рукопись поступила в издательский отдел  
29 февраля 1988 года.