

Министерство науки и высшего образования РФ
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Смоленский государственный университет»

Кафедра прикладной математики и информатики

КУРСОВАЯ РАБОТА

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОХОЖДЕНИЯ ЧАСТИЦ ЧЕРЕЗ ВЕЩЕСТВО В GEANT4

Выполнил:

студент 4 курса физико-
математического факультета
направления подготовки 44.03.05
Педагогическое образование

(профиль «Физика, информатика»)

АНТОНОВ Семён Сергеевич

Научный руководитель:

кандидат педагогических наук,
доцент КОЗЛОВ Сергей
Валерьевич

Смоленск

2021

Содержание

Введение.....	3
Глава 1. Общие положения теории моделирования.....	5
§ 1. Моделирование и подобие в научно-технических исследованиях.....	5
§ 2. Классификация моделей.....	6
§ 3. Математическое моделирование. Понятие математического моделирования.....	9
§ 4. Этапы математического моделирования.....	13
Глава 2. Geant4.....	19
§ 1. Моделирование в физике ядра и частиц.....	19
§ 2. Метод Монте - Карло.....	20
§ 3. История создания Geant3,4.....	23
§ 4. Описание пакета Geant4.....	25
§ 5. Управление программой моделирования.....	32
Глава 3. Моделирование прохождения ионов углерода с кинетической энергией 1,2 ГэВ/нуклон через полиэтиленовую мишень.....	35
Заключение.....	44
Список литературы.....	45

Введение

В настоящее время, эксперимент в физике частиц, представляет собой многократное измерение совокупности процессов - взаимодействия частиц и прохождения их через детектор. Многообразие физических моделей позволяет комбинировать различные процессы и эффекты с учетом геометрии детектора, его элементного состава и набора процессов (рождения частиц и образования состояний) в зависимости от энергии частиц. Метод Монте-Карло даёт удобный способ расчёта результатов измерений [1]. Недостатком же подхода является потребность в больших вычислительных мощностях, однако на современном оборудовании, таком как отказоустойчивые кластеры, кластеры с балансировкой нагрузки, вычислительные кластеры, системы распределенных вычислений, данная задача вполне решаема.

Современные исследования в фундаментальной науке требуют для получения новых знаний, гораздо более сложны и, соответственно, дорогих установок - коллайдеры, синхротроны, спутники и др. И такие установки, несомненно, потребляют огромное количество материальных средств. Каждый запуск расходует много рабочего времени и ресурсов, поэтому важно уменьшить их количество до возможного минимума, рассчитав все параметры заранее. Особое значение имеет постоянно растущий спрос на крупномасштабное, точное и всестороннее моделирование физических процессов в детекторах, используемых в этих установках. А сами средства моделирования требуют дополнительных компетенций у исследователей в области информационных технологий. Спрос обусловлен ростом размера, сложности и чувствительность детекторов и поддерживается появлением недорогих, высокопроизводительных компьютерных систем, на которых становится возможным проводить большие и сложнее симуляции [2].

Для задач моделирования в различных областях человеческого знания разработаны и разрабатываются инструменты для компьютерного моделирования, позволяющие правильно подобрать параметры под задачу.

Для подбора оборудования и материалов, производится тысячи и даже миллионы тестовых прогонов, позволяющих подобрать оптимальное сочетание материалов для создания экспериментальной установки, и для этого требуется мощная вычислительная техника, например, достаточно распространённые сейчас кластеры и grid-системы с установленным на ней программным обеспечением для моделирования экспериментов. Geant4 является одним из таких инструментов. Комплекс разработан специалистами исследовательской организации ЦЕРН [7].

Целью данной работы является обзор возможностей Geant4 для моделирования транспорта заряженных частиц через вещество.

Объектом исследования является программа Geant4, а предметом – её возможности моделирования в физике частиц.

Работа подразумевает решение следующих задач:

1. Обзор понятия - математическое моделирование.
2. Математическое моделирование в физике элементарных частиц.
3. Обзор возможностей пакета Geant4 и демонстрация его возможностей на практическом примере.

Структура курсовой работы проведена по следующему плану: анализ понятий «моделирование» и «модель», приведение классификаций моделей и понятие математического моделирования, этапы математического моделирования, метод Монте-Карло, история создания Geant3,4, описание пакета Geant4 и практическая часть, в которой рассмотрен пример моделирование прохождения частиц через вещество.

Глава 1.

§1. Моделирование и подобие в научно-технических исследованиях

Модель - это естественный или искусственный объект, находящийся в соответствии и изучаемым объектом или, точнее, с какой-либо из его сторон. В общетеоретическом смысле моделирование означает осуществление каким-либо способом отображения или воспроизведения действительности для изучения имеющихся в ней объективных закономерностей. Обобщенно моделирование определяется как метод опосредованного познания, при котором изучаемый объект (оригинал) находится в некотором соответствии с другим объектом (моделью), причем объект-модель способен в том или ином отношении замещать оригинал на некоторых стадиях познавательного процесса. Стадии познания, на которых может происходить эта замена, равно как и формы соответствия модели и оригинала, могут быть различны. Исходя из понятия отображения, принятого в теории познания, можно определить два характерных вида моделирования:

- моделирование как познавательный процесс, содержащий переработку информации, поступающей из внешнего мира, о происходящих в нем явлениях. В результате этой информации в сознании появляются образы, имеющие определенной сходство с соответствующими объектами. Сумма этих образов позволяет выявлять свойства изучаемых объектов и их взаимодействие. Математическая запись, составленная на основании суммы образов и содержащая описание динамики физических или других (например, экономических) закономерностей, и есть модель;

- моделирование как создание некоторой системы - системы-модели, имеющей определенное сходство с системой оригиналом. Две эти материально реализованные системы связаны соотношениями подобия. Отображение одной системы в другой - следствие выявления сложных

зависимостей между двумя системами, отраженных в соотношении подобия, а не результат непосредственного изучения поступающей информации.

При первом виде моделирование имеет мысленный характер, при втором - материальный, поскольку его реализация требует создания специальных установок, воспроизводящих исследуемую систему. Многообразие исследуемых объектов и процессов, целей и задач моделирования породило множество типов моделей. Выбор аппарата для построения модели зависит, как от природы и свойств моделируемого объекта или процесса, так и от характера решаемой задачи.

§ 2. Классификация моделей

1) Классификация моделей по области использования:

Учебные модели - используются при обучении. Опытные – это уменьшенные или увеличенные копии проектируемого объекта, используют для исследования и прогнозирования его будущих характеристик, научно - технические - создаются для исследования процессов и явлений. Игровые - репетиция поведения объекта в различных условиях. Имитационные - имитируют поведение объекта в различных ситуациях.

2) Классификация моделей по фактору времени:

Статические - модели, описывающие состояние системы в определенный момент времени (единовременный срез информации по данному объекту). Примеры таких моделей: классификация животных, строение молекул, список посаженных деревьев и т.д.

Динамические - модели, описывающие процессы изменения и развития системы (изменения объекта во времени). Примеры: описание движения тел, развития организмов, процесс химических реакций.

3) Классификация моделей по отрасли знаний - это классификация по отрасли деятельности человека: математические, биологические, химические, социальные, экономические, исторические и т.д.

4) Классификация по степени определенности:

Модель называется детерминированной, если каждому набору входных параметров всегда соответствует единственный набор выходных параметров. В противном случае модель называется недетерминированной (стохастической, вероятностной).

5) Классификация моделей по форме представления:

5.1) Материальные - это предметные (физические) модели. Они всегда имеют реальное воплощение. Материальные модели можно разделить на модели копии (например, глобус, карта, некоторые виды наглядных пособий и т.п.) и физические модели. Физическое моделирование - это воспроизведение с помощью модели основных геометрических, физических и функциональных характеристик изучаемого объекта. Определение параметров модели при физическом моделировании и перенос данных моделирования на реальный объект осуществляется на основании теории подобия. Теория подобия позволяет связать параметры натурального объекта и модели с помощью критериев подобия, а на их основе подобрать удобные для моделирования параметры модели. Физическая модель - это установка или устройство, позволяющее проводить исследования путем замены изучаемого физического процесса подобным ему процессом с сохранением его физической природы. Физическое моделирование может протекать в реальном или нереальном масштабе времени, а также может рассматриваться без учета времени.

5.2) Абстрактные (нематериальные) модели - не имеют реального воплощения. Их основу составляет информация, это теоретический метод познания окружающей среды. В абстрактных моделях описание объектов и процессов осуществляется на каком-либо языке. В качестве языков моделирования можно использовать естественный язык, язык чертежей, схем, математический язык и т.п. [24].

По признаку реализации абстрактные модели бывают:

мысленные, вербальные; информационные. Мысленные модели формируются в воображении человека в результате раздумий, умозаключений, иногда в виде некоторого образа. Это модель сопутствует

сознательной деятельности человека. Вербальные - мысленные модели, выраженные в разговорной форме. Информационные модели - целенаправленно отобранная информация об объекте, которая отражает наиболее существенные для исследователя свойства этого объекта.

Типы информационных моделей:

1) По форме представления:

Табличные - объекты и их свойства представлены в виде списка, а их значения размещаются в ячейках прямоугольной формы. Перечень однотипных объектов размещен в первом столбце (или строке), а значения их свойств размещаются в следующих столбцах (или строках).

Иерархические - объекты распределены по уровням. Каждый элемент высокого уровня состоит из элементов нижнего уровня, а элемент нижнего уровня может входить в состав только одного элемента более высокого уровня.

Сетевые - применяют для отражения систем, в которых связи между элементами имеют сложную структуру.

2) По степени формализации:

Образные модели выражают свойства оригинала с помощью наглядных чувственных образов, имеющих прообразы среди элементов оригинала или объектов материального мира. Например, в кинетической теории газов частицы газа образно моделируются в виде упругих шаров, воздействующих друг на друга только во время столкновений.

Знаковые модели выражают свойства оригинала с помощью условных знаков или символов. К ним относят математические выражения и уравнения, физические и химические формулы и т. п.

Образно-знаковые модели обладают признаками образных и знаковых. Образно-знаковые модели можно разделить на геометрические (рисунок, пиктограмма, чертеж, карта, план, объемное изображение), структурные (таблица, граф, схема, диаграмма), словесные (описание естественными языками), алгоритмические (пошаговое перечисление, блок-схема).

§ 3. Математическое моделирование. Понятие математического моделирования

Математическое моделирование - описание реальных объектов с помощью математических объектов (чисел, геометрических образов, уравнений, преобразований математической логики). Математические модели отличаются тем, что средством описания моделей и изучения их поведения является формальный аппарат математики. Математическое моделирование - метод изучения объекта исследования, основанный на создании его математической модели и использовании её для получения новых знаний, совершенствования объекта исследования или управления объектом. Математическое моделирование можно подразделить на аналитическое и компьютерное (машинное) моделирование. При аналитическом моделировании формирование модели производится в основном с помощью точного математического описания объекта исследования. Компьютерная модель - модель, реализованная на одном из языков программирования в виде программы для компьютера.

Компьютерное моделирование для рождения новой информации использует любую информацию, которую можно актуализировать с помощью компьютера. Прогресс моделирования связан с разработкой систем компьютерного моделирования, а прогресс в информационной технологии - с актуализацией опыта моделирования на компьютере, с созданием банков моделей, методов и программных систем, позволяющих собирать новые модели из моделей банка [19].

Разновидность компьютерного моделирования - машинный эксперимент, т. е. эксперимент, осуществляемый экспериментатором над исследуемой системой или процессом с помощью орудия эксперимента - компьютера, компьютерной среды, компьютерных технологий. Машинный эксперимент стал новым инструментом, методом научного познания, новой технологией также из-за возрастающей необходимости перехода от исследования линейных математических моделей систем (для которых

достаточно хорошо известны или разработаны методы исследования и теория) к исследованию сложных и нелинейных математических моделей систем (анализ которых гораздо сложнее).

Чтобы дать жизнь новым конструкторским разработкам, внедрить новые технические решения в производство или проверить новые идеи, нужен эксперимент. В недалеком прошлом такой эксперимент можно было провести либо в лабораторных условиях на специально создаваемых для него установках, либо на натуре, т. е. на настоящем образце изделия, подвергая его всяческим испытаниям. Математическое моделирование - это средство изучения реального объекта, процесса или системы путем их замены математической моделью, более удобной для экспериментального исследования с помощью компьютера.

Математическая модель является приближенным представлением реальных объектов, процессов или систем, выраженным в математических терминах и сохраняющим существенные черты оригинала. Математические модели в количественной форме, с помощью логико-математических конструкций, описывают основные свойства объекта, процесса или системы, его параметры, внутренние и внешние связи.

Построение математической модели заключается в определении связей между теми или иными процессами и явлениями, создании математического аппарата, позволяющего выразить количественно и качественно связь между теми или иными процессами и явлениями, между интересующими специалиста физическими величинами, и факторами, влияющими на конечный результат.

В общем случае математическая модель реального объекта, процесса или системы представляется в виде системы функционалов

$$\Phi_i(X, Y, Z, t) = 0,$$

где X - вектор входных переменных, $X = [x_1, x_2, x_3, \dots, x_{N1}]$,

Y - вектор выходных переменных, $Y = [y_1, y_2, y_3, \dots, y_{N2}]$,

Z - вектор внешних воздействий, $Z = [z_1, z_2, z_3, \dots, z_{N3}]$,

t - координата времени. [30]

Наиболее очевидную роль математическое моделирование сыграло в физике. После того, как Ньютон создал основы теоретической механики, последняя превратилась в строгую систему математических моделей. Через теоретическую механику математика пришла в технику.

Математическое машинное моделирование позволяет оперативно и без больших затрат оценить влияние на рабочий процесс любого фактора, в том числе и такого, который трудно поддается натурному моделированию. Такое моделирование позволяет быстро получить сравнительные оценки для машин, различающихся по структуре, что редко достижимо в натурном эксперименте. Все это делает целесообразным применение математического моделирования при выборе рациональных параметров и схемы новой машины, формировании эталонных рабочих характеристик и поиске причин, вызывающих отклонение реальных рабочих характеристик от эталонных, выявление предельных возможностей машин и поиске путей модернизации [7].

В настоящее время:

- математическое моделирование выступает как осознанный специфический метод исследования, а во многих дисциплинах (например, экономике, экологии) как один из основных методов;

- осознание математического моделирования как метода привело к постановке вопроса об адекватности моделей целям исследования. Вошло в практику создание системы моделей разной степени точности и сложности;

- использование вычислительной техники революционизировало методы создания и исследования математических моделей. Машинный эксперимент постепенно утвердился как метод исследования математических моделей.

Трудности, ограничивающие использование метода математического моделирования, обычно связаны: 1) с составлением вычислительной программы, 2) ее последующей корректировкой для расширения круга решаемых задач или 3) переходом на новую программу при всяком более или менее существенном изменении структурной схемы исследуемого объекта.

Эти трудности усугубляются тем, что часто одному и тому же проектировщику или исследователю приходится сталкиваться с различными типами машин, входящие в машины узлы и устройства могут быть различной физической природы - механические, гидравлические, пневматические, электрические. Для составления корректных уравнений динамики рабочих процессов требуются глубокие знания в области теории, которыми владеют только специалисты соответствующего профиля. Следует также иметь в виду все возрастающую сложность программ [17].

В этом случае целесообразен переход на проблемно-ориентированные программы, каждая из которых предназначена для определенного класса машин или устройств и создается объединенными усилиями специалистов в области рабочих процессов машин и программистов. Программы должны быть универсальными, чтобы охватить весь класс исследуемых машин, и вместе с тем достаточно простыми в применении, доступными для использования широкому кругу специалистов.

При использовании проблемно-ориентированных программ конструирование схемы исследуемой модели можно осуществить двумя способами:

1) созданием обобщенной математической модели. Частная модель получается из обобщенной математической модели удалением «лишних» для данной модели элементов и связей, преимущество - частная модель выделяется простым заданием соответствующего набора параметров;

2) набором модели из моделей элементов. В этом случае в программе есть набор базовых (для данного класса устройств) элементов и средств для «сборки» из них частной модели устройства.

В большинстве случаев зависимости, входящие в обобщенную математическую модель удобнее представлять в безразмерном виде. В этом случае упрощается обработка и анализ результатов вычислений, сравнение различных вариантов друг с другом, а также выбор окончательного варианта, поскольку у исследователя остается определенная свобода выбора на этапе перехода от безразмерных соотношений к размерным [11].

Математические модели можно классифицировать по следующим признакам:

1) линейные (описываются линейными уравнениями, возможно аналитическое решение) и нелинейные (уравнения обычно решаются итерационными методами);

2) статические (время не входит в модель) и динамические (в модель в явном или неявном виде входит время);

3) детерминированные (параметры модели в каждой точке пространства имеют в каждый момент времени определенное значение) и стохастические (имеют вероятностный характер параметров);

4) расчетные и оптимизационные. Основное назначение расчетных моделей: зная начальное состояние, дать прогноз о поведении системы во времени и в пространстве. Как правило, модели прогнозирования описываются алгебраическими, трансцендентными, дифференциальными, интегральными, интегро-дифференциальными уравнениями и неравенствами. Примерами могут служить модели распределения тепла, электрического поля, гидродинамики. Оптимизационная модель служит для нахождения характеристик системы, при которых какой-либо из ее параметров достигает максимального или минимального значения [1, 7, 9].

§ 4. Этапы математического моделирования

Моделирование - творческий процесс. Заключение его в формальные рамки очень трудно. В наиболее общем виде его можно представить поэтапно, но при решении конкретной задачи эта схема может подвергаться некоторым изменениям: какой-то блок будет убран или усовершенствован, какой-то - добавлен. Содержание этапов определяется поставленной задачей и целями моделирования.

Этап 1 Постановка задачи.

Под задачей понимается некая проблема, которую надо решить. На этапе постановки задачи необходимо:

- описать задачу,
- определить цели моделирования,
- проанализировать объект или процесс.

Описание задачи. Определение объекта моделирования и понятие того, что должен представлять собой результат. Для этого в разных отраслях человеческого знания используется своя терминология (UML, например).

Цели моделирования.

Моделирование осуществляют для определения последствий воздействия на объект и принятия правильного решения. Например, для спасения Петербурга от постоянных наводнений, приносящих огромный ущерб, решено было возвести дамбу. При ее проектировании было построено множество моделей, в том числе и натуральных, именно для того, чтобы предсказать последствия вмешательства в природу.

Целью моделирования может являться эффективность управления объектом (или процессом).

Анализ объекта. При этом четко выделяют моделируемый объект, его основные свойства, его элементы и связи между ними. Простой пример подчиненных связей объектов - разбор предложения. Сначала выделяются главные члены (подлежащее, сказуемое), затем второстепенные члены, относящиеся к главным, затем слова, относящиеся к второстепенным, и т. д.

Этап 2 Разработка модели.

На этом этапе переходят от реальной системы к некоторой логической схеме, т.е. происходит абстрагирование. Составляется описание модели – словесное, графическое, математическое. Отбирают данные, необходимые для построения модели.

На этом этапе выясняются свойства, состояния, действия и другие характеристики элементарных объектов в любой форме: устно, в виде схем, таблиц. Формируется представление об элементарных объектах, составляющих исходный объект, т. е. создается информационная модель.

Этап 3 Описание модели на языке понятном компьютеру.

Компьютерная модель - это модель, реализованная средствами программной среды. Существует множество программных комплексов, которые позволяют проводить исследование информационных моделей. Каждая программная среда имеет свой инструментарий, и позволяет работать с определенными видами информационных объектов. Например, для построения геометрических моделей, схем используются графические среды, для словесных или табличных описаний - среда текстового редактора.

Этап 4 Оценка адекватности модели (проверка модели, валидизация).

Стоит заметить, что на практике результаты первых расчетов, как правило, весьма далеки от реальных. Модели имеют свободные параметры, которые подгоняются под экспериментальные данные, теоретические ограничения, параметры установки, контрольные выборки. Поэтому происходит постоянное усовершенствование алгоритма, уточнение математической модели до совпадения с тестовыми или контрольными данными. Этот этап, называемый идентификацией математической модели, всегда присутствует в вычислительном эксперименте.

Этап 5 Планирование эксперимента, который должен дать необходимую информацию о функционировании объекта.

На этом этапе определяют, какие параметры модели и в каких пределах изменять при проведении машинного эксперимента.

Этап 6 Компьютерный (машинный) эксперимент.

Компьютерный эксперимент включает некоторую последовательность работы с моделью, совокупность целенаправленных действий пользователя над компьютерной моделью.

Этап 7 Анализ результатов моделирования.

Конечная цель моделирования - принятие решения, которое может быть выработано только на основе всестороннего анализа полученных результатов.

Основой для выработки решения служат результаты тестирования и экспериментов. Если результаты не соответствуют целям поставленной

задачи, значит, допущены ошибки на предыдущих этапах. Это может быть либо слишком упрощенное построение информационной модели, либо неудачный выбор метода или среды моделирования, либо нарушение технологических приемов при построении модели. Если такие ошибки выявлены, то требуется корректировка модели, т. е. возврат к одному из предыдущих этапов. Процесс повторяется до тех пор, пока результаты эксперимента не будут отвечать целям моделирования.

Рассмотрим некоторые общие подходы к построению простейших математических моделей.

1. Применение фундаментальных законов природы.

Наиболее распространенный метод построения моделей состоит в применении фундаментальных законов природы к конкретной ситуации. Эти законы общепризнаны, многократно подтверждены опытом, служат основой множества научно-технических достижений (законы сохранения материи, энергии, импульса). Поэтому их обоснованность не вызывает сомнений. На первый план выдвигаются вопросы, связанные с тем, какой закон (или законы) следует применять в данном случае и как это делать.

2 Применение вариационных принципов.

Еще один подход к построению моделей, по своей широте и универсальности сопоставимый с возможностями, даваемыми фундаментальными законами, состоит в применении так называемых вариационных принципов. Они представляют собой весьма общие утверждения о рассматриваемом объекте (системе, явлении) и гласят, что из всех возможных вариантов его поведения (движения, эволюции) выбираются лишь те, которые удовлетворяют определенному условию. Обычно согласно этому условию некоторая связанная с объектом величина достигает экстремального значения при его переходе из одного состояния в другое.

3 Применение аналогий при построении моделей.

Во многих случаях при попытке построить модель какого-либо объекта, невозможно прямо указать фундаментальные законы или вариационные принципы, которым он подчиняется. Одним из плодотворных

подходов к такого рода объектам является использование аналогий с уже изученными явлениями. Что, казалось бы, общего между радиоактивным распадом и динамикой популяций, в частности изменением численности населения нашей планеты? Однако на простейшем уровне такая аналогия вполне допустима, о чем свидетельствует одна из простейших моделей популяций, называемая моделью Мальтуса. В ее основу положено простое утверждение - скорость изменения населения со временем t пропорциональна его текущей численности $N(t)$, умноженной на сумму коэффициентов рождаемости $\alpha(t) \geq 0$ и смертности $\beta \leq 0$. В результате приходим к уравнению весьма похожему на уравнение радиоактивного распада $\frac{dN}{dt} = [\alpha(t) - \beta(t)]N(t)$ и совпадающего с ним при $\alpha < \beta$ (если α и β постоянные). Это неудивительно, так как при их выводе использовались одинаковые соображения. Интегрирование уравнения даёт $N(t) = N_0 \exp(\int_{t_0}^t [\alpha(t) - \beta(t)] dt)$, где $N(0) = N(t = t_0)$ — начальная численность. При $\alpha = \beta$ численность остается постоянной, т. е. в этом случае решением уравнения является равновесная величина $N(t) = N(0)$. Изменение численности популяции со временем в модели Мальтуса смертностью неустойчиво в том смысле, что даже небольшое нарушение равенства $\alpha = \beta$ приводит с течением времени ко все большему отклонению функции $N(t)$ от равновесного значения $N(0)$. При $\alpha < \beta$ численность населения убывает и стремится к нулю при $t \rightarrow \infty$, а при $\alpha > \beta$ растет по некоторому экспоненциальному закону, обращаясь в бесконечность при $t \rightarrow \infty$. Последнее обстоятельство и послужило основанием для опасений Мальтуса о грядущем перенаселении Земли со всеми вытекающими отсюда последствиями. Как в данном примере, так и в ряде рассмотренных выше случаев можно указать немало очевидных ограничений применимости построенной модели. Конечно же, самый сложный процесс изменения численности населения, зависящий к тому же от сознательного вмешательства самих людей, не может описываться какими-либо простыми закономерностями. Даже в идеальном случае изолированной биологической популяции предложенная модель не отвечает реальности в

полной мере хотя бы из-за ограниченности ресурсов, необходимых для ее существования.

Сделанное замечание тем не менее нисколько не умаляет роли аналогий в построении математических моделей очень сложных явлений. Применение аналогий основано на одном из важнейших свойств моделей — их универсальности, т. е. их приложимости к объектам принципиально различной природы. Так, предположения типа «скорость изменения величины пропорциональна значению самой величины (или некоторой функции от нее)» широко используются в далеких друг от друга областях знаний.

4 Иерархический подход к получению моделей.

В редких случаях бывает удобным и оправданным построение математических моделей даже относительно простых объектов сразу во всей полноте, с учетом всех факторов, существенных для его поведения. Поэтому естественен подход, реализующий принцип «от простого - к сложному», когда следующий шаг делается после достаточно подробного изучения не очень сложной модели. При этом возникает цепочка (иерархия) все более полных моделей, каждая из которых обобщает предыдущие, включая их в качестве частного случая.

Построение математической модели в прикладных задачах – один из наиболее сложных и ответственных этапов работы. Опыт показывает, что во многих случаях правильно выбрать модель – значит решить проблему более, чем наполовину. Трудность данного этапа состоит в том, что он требует соединения математических и специальных знаний. Поэтому очень важно, чтобы при решении прикладных задач математики обладали специальными знаниями об объекте, а их партнеры, специалисты, – определенной математической культурой, опытом исследования в своей области, знанием компьютера и программирования [2, 3, 8].

Глава 2.

§ 1. Моделирование в физике ядра и частиц

В настоящее время, эксперимент в физике частиц, практически всегда, представляет собой многократное измерение совокупности случайных процессов - взаимодействия частиц и прохождения их через детектор. Аналитическое решение задачи о прохождении частиц через вещество описывается интегро-дифференциальными уравнениями, при этом, учет дополнительных процессов приводит к появлению дополнительных интегралов рассеяния, что существенно усложняет решение подобных уравнений. Альтернативой является метод Монте-Карло, который даёт удобный способ расчёта результатов таких измерений. Недостатком же подхода является потребность в больших вычислительных мощностях, однако, на современном оборудовании данная задача вполне решаема.

Исследования в настоящее время направлены на ещё более глубокое освоение устройства мира, и, если ещё несколько десятилетий назад для проведения экспериментов были нужны скромные установки вроде микроскопа или барокамер, то в настоящее время наука ушла вперёд настолько, что для получения новых знаний, нужны гораздо более сложные и, соответственно, дорогие установки - коллайдеры, синхротроны, спутники и др. И такие установки, несомненно, потребляют огромное количество материальных средств. Каждый запуск расходует много рабочего времени и ресурсов, поэтому важно уменьшить их количество до возможного минимума, рассчитав все параметры заранее. Особое значение имеет постоянно растущий спрос на крупномасштабное, точное и всестороннее моделирование прохождения частиц через детекторы, используемые в этих установках. Спрос обусловлен ростом размера, сложности и чувствительность детекторов и поддерживается появлением недорогих, высокопроизводительных компьютерных систем, на которых становится возможным проводить большие и сложнее симуляции.

Как раз для таких задач были разработаны инструменты для компьютерного моделирования, чтобы правильно подобрать параметры запуска. Для высокой точности калибровки оборудования, производится тысячи и даже миллионы тестовых прогонов до реального запуска установки, и для этого требуется мощная вычислительная техника, например, достаточно распространённые сейчас кластеры и grid-системы с установленным на ней программным обеспечением для моделирования экспериментов. И Geant4 является одним из таких инструментов. Комплекс разработан специалистами исследовательской организации ЦЕРН.

§ 2 Метод Монте-Карло

Для изучения процесса транспорта частиц в веществе наиболее подходящим способом является метод Монте-Карло. Метод специализирован для изучения заданной статистики при проведении большого количества выборок, в связи с этим, способ существенно нагружает оборудование вычислительной техники. При проведении исследований методом Монте-Карло машина генерирует псевдослучайные числа, имитируя данные из изучаемой генеральной совокупности. После проведения большого числа повторений, выходные данные достаточно точно имитируют реальное распределение выборочной статистики. В тех случаях, когда обычная теория выборочных распределений оказывается недействительной, метод Монте-Карло позволяет получать достаточно точные данные этих распределений [1].

Метод чаще всего используют для оценки диапазона изменения результатов и относительной частоты значений в этом диапазоне для количественных величин. Моделирование методом Монте-Карло может быть использовано для двух различных целей:

- трансформирование неопределенности для обычных аналитических моделей;
- расчета вероятностей, если аналитические методы не могут быть использованы [9].

Данный метод применяют в ситуациях, когда результаты не могут быть получены аналитическими методами или существует высокая неопределенность входных или выходных данных.

Для проведения моделирования методом Монте-Карло нужны такие входные данные, как хорошо проработанная модель системы, информация о типе входных данных, источниках неопределенности и требуемых выходных данных. Входные данные и соответствующую им неопределенность рассматривают в виде случайных переменных с соответствующими распределениями. Часто для этих целей используют равномерные, треугольные, нормальные и логарифмически нормальные распределения.

Процесс включает следующие этапы:

- 1 Определение алгоритма или модели, которые позволят наиболее точно описать поведение исследуемой системы.

- 2 Многократное применение модели с использованием генератора случайных чисел для получения выходных данных модели (моделирование системы). При необходимости моделируют воздействие неопределенности. Модель записывают в форме уравнения, выражающего соотношение между входными и выходными параметрами. Значения, отобранные в качестве входных данных, получают исходя из соответствующих распределений вероятностей, характеризующих неопределенности данных.

С помощью компьютера многократно используют модель (часто до 10000 раз) с различными входными данными и получают выходные данные. Они могут быть обработаны с помощью статистических методов для получения оценок среднего, стандартного отклонения, доверительных интервалов.

Выходными данными могут быть значения характеристик, как показано в вышеприведенном примере, или распределение вероятности или частоты отказа, или выходом может быть идентификация основных функций модели, которые оказывают основное влияние на выходные данные.

В итоге, метод Монте-Карло в задачах переноса частиц в веществе сводится к пошаговому моделированию (трассировке) движения частицы

через заданные объемы: вычисление ее координат в семимерном пространстве $(x, y, z, t, p_x, p_y, p_z)$. Свободный пробег, результат столкновения (потеря энергии или рассеяние), а также характеристики частицы после столкновения (энергия и направление движения рассеянной частицы) разыгрываются из соответствующих вероятностных распределений, описываемых дифференциальными сечениями соответствующих элементарных процессов [1]. При этом значения дифференциальных сечений взаимодействий могут быть как экспериментальными, так и теоретически рассчитанными. Результаты выборки из конечного числа траекторий обрабатываются статистическими методами для определения требуемых макроскопических параметров взаимодействия (например, дозового распределения).

Метод Монте-Карло обычно используют для оценки распределения входных или выходных результатов, или характеристик распределения, в том числе для оценки:

- вероятности установленных состояний;
- значений выходных величин, для которых установлены границы, соответствующие некоторому уровню доверия, которые не должны быть нарушены [11].

Анализ взаимосвязи входных и выходных величин может выявить относительное значение факторов работы системы и идентифицировать способы снижения неопределенности выходных величин.

Преимущества:

1. Метод может быть адаптирован к любому распределению входных данных, включая эмпирические распределения, построенные на основе наблюдений за соответствующими системами.
2. Модели относительно просты для работы, и могут быть при необходимости расширены.
3. Метод позволяет учесть любые воздействия и взаимосвязи, включая такие тонкие как условные зависимости.

4. Для идентификации сильных и слабых влияний может быть применен анализ чувствительности.

5. Модели являются понятными, а взаимосвязь между входами и выходами - прозрачной.

6. Метод допускает применение эффективных моделей исследования многокомпонентных систем, таких как сеть Петри [9].

7. Метод позволяет достичь требуемой точности результатов.

8. Программное обеспечение метода доступно и относительно недорого.

Недостатки:

1. Точность решений зависит от количества итераций, которые могут быть выполнены (этот недостаток становится менее значимым с увеличением быстродействия компьютера).

2. Метод предполагает, что неопределенность данных можно описать известным распределением.

3. Большие и сложные модели могут представлять трудности для специалистов по моделированию и затруднять вовлечение заинтересованных сторон.

4. Метод не может адекватно моделировать события с очень высокой или очень низкой вероятностью появления, что ограничивает его применение при анализе риска [9].

Эффективность применения метода Монте-Карло определяется в настоящее время, развитием в самом методе способов уменьшения дисперсии расчётов, а также прогрессом в области создания быстродействующих многопроцессорных вычислительных систем. Следует также отметить, что метод статистического моделирования по определению является решением прямой задачи, а перебор различных геометрий пучков еще более усложняет практическое применение данного метода [8].

§ 3. История создания Geant3,4

Происхождение комплекса Geant4 можно проследить до двух исследований, проведенных независимо в CERN (Conseil Europeen pour la Recherche Nucleaire (Европейская организация по ядерным исследованиям, крупнейшая в мире лаборатория физики высоких энергий)) и КЕК (Организация по изучению высокоэнергетических ускорителей) в 1993 году. Обе группы разрабатывали средства и методы использования современных вычислительных мощностей в задачах физики ядра, частиц и ускорителей, как можно применить современные вычислительные методы для улучшения существующей программы GEANT3, которая являлась эталоном, источником идей и ценным опытом. Эти два исследования были объединены в Комитет по исследованиям и разработке детекторов CERN (Detector Research and Development Committee DRDC)) было вынесено предложение о создании программы моделирования на основе объектно-ориентированной технологии. Результатом стал проект D44, международное сотрудничество, в которое вошли более ста ученых и инженеров из более чем десяти университетов Европы, России, Японии, Канады и Соединенных Штатов.

Работа над разработкой инструментария была завершена в декабре 1998 года, появлением первой версии Geant4. Позднее, в январе 1999 года было создано сообщество Geant4, для продолжения разработки и усовершенствования комплекса, а также для обеспечения обслуживания и поддержки пользователей.

Меморандум о взаимопонимании, подписанный всеми участвующими сторонами, регулирует сотрудничество. Он подлежит негласному обновлению каждые 2 года и устанавливает структуру сотрудничества, состоящую из Совета по сотрудничеству, Технического руководящего совета и нескольких рабочих групп. Меморандум о взаимопонимании также распределяет ресурсы для совместной работы - деньги, трудовые ресурсы, опыт и ключевые роли и виды деятельности. Участвующие группы включают экспериментальные команды и коллаборации, лаборатории и национальные институты.

Совет по сотрудничеству уполномочен управлять этими ресурсами и контролировать обязанности между филиалами. Этот орган также отвечает за обновление меморандума. С другой стороны, он так же является форумом, на котором обсуждаются и решаются технические вопросы, такие как детали разработки программного обеспечения и вопросы реализации физических моделей, приоритеты в этих вопросах отдаются запросам пользователей. Основными задачами совета являются надзор за производственной службой и поддержка пользователей, а также определения направления дальнейшего развития программы.

Каждый домен программного обеспечения Geant4, который соответствует реализованному компоненту (библиотеке), управляется рабочей группой экспертов. Кроме того, существует рабочая группа для каждого из видов деятельности по тестированию и обеспечению качества, управлению программным обеспечением и управлению документацией. Координатор, выбранный советом по сотрудничеству, возглавляет каждую группу. Также есть общий координатор релиза. Это четкое общее разделение обязанностей делает возможным проектирование и разработку распределенного программного обеспечения в рамках общей работы по всему миру [7]. Каждая группа может работать параллельно, что позволяет оптимально использовать рабочую силу и опыт.

Коллаборация Geant4 обеспечивает документацию и поддержку пользователей программного комплекса. Документация включает в себя руководство по установке, руководство пользователя и справочные материалы, а также ряд учебных комплектов. Они предназначены для удовлетворения потребностей как новичков, так и опытных пользователей.

Поддержка пользователей заключается в оказании помощи в решении проблем, связанных с кодом, консультации по использованию инструментария и ответах на запросы по исправлению ошибок.

Geant4 также обеспечивает пользователей учебным комплектом. Он состоит из нескольких блоков, каждый из которых охватывает определенную

часть программы. Каждый блок содержит теоретическую часть и примеры, такие как выдержки из кода или графики с результатами моделирования.

§ 4. Описание пакета Geant4

Внутренние средства, реализованные в GEANT4, позволяют в полном объёме описать физический эксперимент: геометрию системы, химический состав материалов, образующих его, типы частиц, участвующих в эксперименте, и физические процессы, управляющие взаимодействием частиц.

GEANT4 (сокращенное название G4, произносится как «джант», является акронимом от английских слов «Geometry and Tracking») - представляет собой свободно распространяемый программный комплекс, состоящий из компонентов, которые используются для моделирования физических процессов в таких областях науки, как ядерная физика, космология, физика элементарных частиц и др. [2].

Объектно-ориентированная технология программирования, используемая в комплексе, позволяет достигнуть высокого уровня прозрачности при описании различных модулей программы моделирования. Например, способ с помощью которого вычисляются сечения взаимодействия реализован полностью отдельно от способа, которым эти сечения используются, что даёт возможность легко изменять или расширять нужные для эксперимента взаимодействия [3].

GEANT 4 является набором библиотек и классов, при помощи которых можно описать следующие аспекты компьютерного моделирования:

- 1 Тип и свойства используемых частиц. Например, класс G4ParticleDefinition позволяет задать такие свойства частицы как масса, спин, моды распада и т.д., а с помощью класса G4DynamicParticle возможно реализовать такие динамические характеристики частиц, как энергия, момент количества движения, поляризация и т.д. [4].

2 Генерация первичных частиц. За создание первичных частиц отвечает класс `G4PrimaryGeneratorAction`, в котором существует возможность задавать тип, свойства, а также форму пучка.

3 Физические процессы, обуславливающие взаимодействие частиц. Заданный аспект отвечает класс `G4PhysicsList`. В нем создаются все частицы, а также процессы, которые могут с ними происходить. Так как создание такого пакета является очень сложной процедурой, где нужно учитывать массу деталей, то обычно используют готовые пакеты, специализированные для определенных целей [4].

4 Получение информации о каждом событии, треках и ее хранение. Класс `G4Event` содержит информацию о каждом событии в процессе моделирования. Класс `G4Step` позволяет получить информацию о каждом шаге моделирования.

5 Задание геометрии системы. Основной класс, отвечающий за геометрию системы - это `G4DetectorConstruction`. Данный класс позволяет создавать компьютерную модель реального объекта, со всеми присущими ему свойствами, такими как размер, материал, относительное расположение частей и т.д.

6 Материалы, из которых состоит геометрия системы. Здесь пользователю предоставлен широкий простор для реализации нужных ему материалов, так как в GEANT4 предусмотрена возможность создавать материалы, начиная с создания элементов (класс `G4Element`). Далее из созданных элементов создается сам материал. Материал можно создавать несколькими способами, например, из элементов создать молекулы или смесь нескольких элементов с определенным весовым коэффициентом [4].

7 Задание чувствительных областей геометрии, при попадании частиц в которые будет происходить анализ, и обеспечиваться доступ характеристикам, создаваемых в моделировании объектов. Эти операции можно определить посредством класса `G4SensitiveDetector`.

8 Визуализация. В GEANT4 существует возможность визуализировать геометрию и треки частиц в процессе моделирования с помощью следующих

графических систем OpenGL, OpenInventor, HepRep, DAWN, VRML, RayTracer, ASCII Tree. Выше приведены лишь основные аспекты компьютерного моделирования и соответствующие им классы.

Все классы программы реализуют описание используемых объектов и их функциональность. Это позволяет разработчику, использующему комплекс Geant4, вносить изменения в те классы, которые не подходят своей начальной функциональностью решаемой задаче. На практике это значит, что практически всегда нужно использовать объектные модели GEANT4, наполнять функциональностью, адаптируя под свою задачу. Применять требуемые материалы, описание задействованных частиц и их взаимодействий, сбор данных моделирования, но не требуется изменять классы, реализующие самый сложный (в плане программирования) процесс - непосредственный процесс прохождения частиц и их взаимодействие с веществом [5].

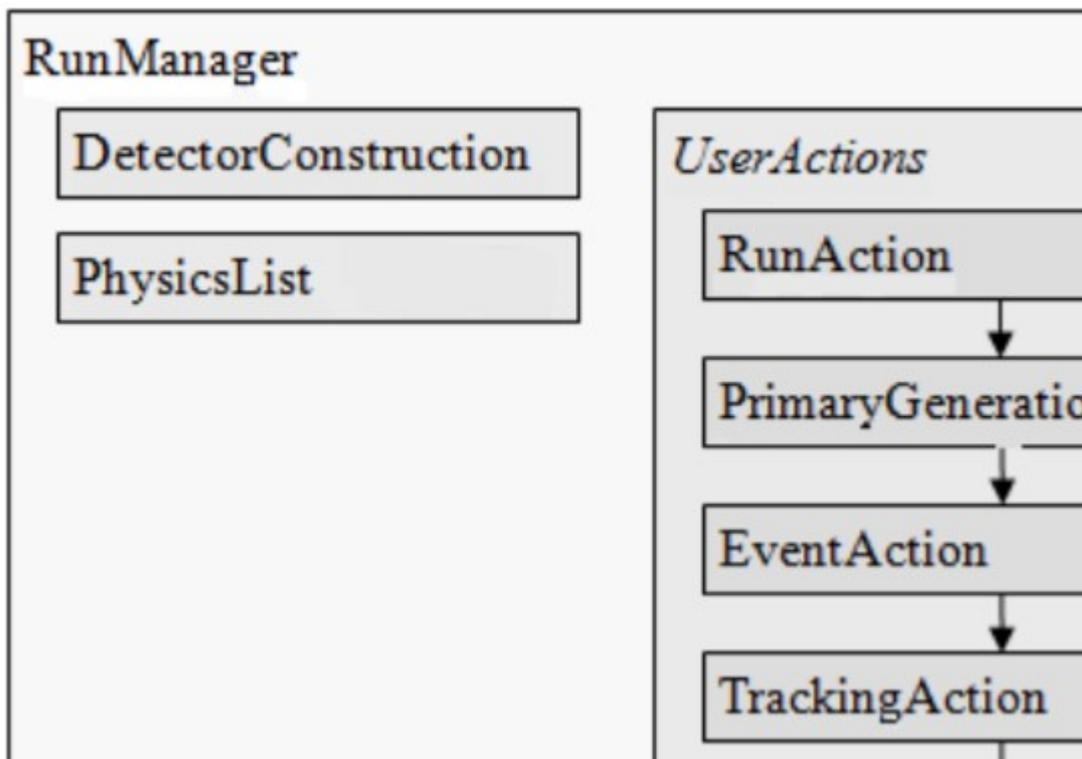


Рис. 1. Основные используемые классы Geant4

Класс RunManager отвечает за основную организацию процесса моделирования. Класс DetectorConstruction применяется для описания геометрии системы и используемых материалов мишени и детектора. С помощью класса PhysicsList задают используемые частицы и взаимодействия

между ними. Несколько классов под названием UserActions используется для получения информации о процессе моделирования на всех этапах:

RunAction - начальный этап, на котором создаются геометрия системы, определяются используемые частицы и рассчитывается таблица сечений;

PrimaryGenerationAction - этап создания первичной частицы, именно здесь задается тип, энергия частицы и начальное направление;

EventAction - этап запуска/остановки первичной частицы, в основном используется для инициализации/сохранения гистограмм и первичного анализа полученных данных;

TrackingAction - этап начала/конца создания трека частицы, позволяет получить информацию о треке частицы, например длину;

SteppingAction - самый низший уровень в иерархии, позволяет обрабатывать информацию о каждом шаге движения частицы [4].

В GEANT 4 учитываются следующие физические процессы:

1. Электромагнитные взаимодействия:

- Процессы с участием гамма-квантов: фотоэффект (G4PhotoElectricEffect), комптоновское рассеяние (G4ComptonScattering), образование электрон-позитронных пар (G4GammaConversion), образование мюонных пар (G4GammaConversionToMuons), комптоновское рассеяние линейно поляризованных гамма-квантов (G4PolarizedCompton), рэлеевское рассеяние;
- Процессы, общие для всех заряженных частиц: многократное рассеяние (G4MultipleScattering), переходное излучение (G4TransitionRadiation), сцинтилляционный эффект (G4Scintillation), эффект Черенкова (G4Cerenkov), фотоабсорбционная ионизационная модель (G4PAIModel);
- Процессы с участием электронов и позитронов: ионизация (G4eIonization), тормозное излучение (G4eBremsstrahlung), аннигиляция позитронов в гамма-кванты (G4eplusAnnihilation),

аннигиляция в мюоны (G4eplusAnnihiToMuPair), синхротронное излучение (G4SynchrotronRadiation);

- Процессы с участием мюонов: ионизация (G4MuIonization), тормозное излучение (G4MuBremsstrahlung), мюонные фотоядерные взаимодействия, образование электрон-позитронных пар (G4MuPairProduction);
- Процессы с участием заряженных адронов: ионизация (G4hIonisation)

2. Процессы с участием адронов, сильное взаимодействие (лептон-адронные взаимодействия, сечения фотоядерных и электроядерных реакций, когерентное упругое рассеяние, а также множество узкоспециализированных моделей специфических физических процессов [5].

Компиляция программ осуществляется посредством утилиты-программы `stake` в соответствии с правилами синтаксиса языка `c++`, а сборка осуществляется линковщиком из объектных файлов, предварительно скомпилированных, написанных средствами комплекса `Geant4`, проходит по следующему сценарию: на первом этапе описывается геометрия системы, рассчитываются сечения взаимодействия всех используемых частиц, со всеми используемыми материалами, затем следует запуск определённого пользователем числа частиц - создание трека. При этом пролёт частицы разбивается на события (шаги – `Steps`). По рассчитанной таблице сечений на каждом шаге движения проходит выбор и реализация одного из заданных процессов взаимодействия. Частица продолжает движение до полной потери энергии, если программистом не задана остановка частицы после какого-либо взаимодействия. При образовании в процессе моделирования вторичной частицы, далее идёт создание её трека по такому же сценарию, а затем программа возвращается к первичной частице. Моделирование не будет завершено, пока не обработаны все частицы. На каждом из основных этапов программист может вызвать свою дополнительную функцию, при этом ей будет известна вся информация о состоянии и движении частицы: её

конечная и потерянная энергия, координаты и многое другое. Эта информация и используется в дальнейшем для построения зависимостей.

Весь процесс моделирования состоит из events (события). Каждое событие заключается в испускании первичных частиц и их дальнейшего движения через геометрию системы вплоть до полной остановки этих частиц (и всех образовавшихся вторичных тоже). Процесс движения каждой конкретной частицы от ее появления до остановки называется track. Совокупность событий при неизменной геометрии установки называют run (запуск). Например, если в моделируемой системе есть радиоактивный источник, то каждое испускание проникающей частицы будет событием, а их совокупность (т.е. испускание, скажем, 1 000 000 частиц) – запуском [7].

```
#include "G4RunManager.hh"
#include "DetectorConstruction.hh"
#include "PhysicsList.hh"
#include "PrimaryGeneratorAction.hh"
#include "EventAction.hh"
#include "RunAction.hh"
#include "SteppingAction.hh"
int main()
{
// (1)
G4RunManager* runManager = new G4RunManager;
// (2)
runManager->SetUserInitialization (new SectorConstruction) ;
runManager->SetUserInitialization(new PhysicsList);
runManager->SetUserAction(new PrimaryGeneratorAction) ;
// (3)
runManager->SetUserAction(new RunAction);
runManager->SetUserAction (new EventAction) ;
runManager->SetUserAction(new SteppingAction) ;
// (4)
```

```
runManager->Initialize();  
// (5)  
runManager->BeamOn (10) ;  
// (6)  
delete runManager;  
return 0;  
}
```

Приведенный листинг является главной частью программы, но не единственной. Вообще говоря, он составляет весьма малую долю от всего программного кода.

§ 5. Управление программой моделирования

Взаимодействие пользователя с частью Geant4, отвечающей визуализацию может проходить в нескольких режимах:

- Пакетный режим
- Пакетный режим, управляемый сценарием
- Интерактивный режим с командной строкой
- Интерактивный режим с графическим интерфейсом

Режимы отличаются функциональностью и способом управления визуализацией. Так в пакетном режиме, управляемым сценарием, можно записать нужные параметры энергии, количества и вида частиц, а также параметры детектора и окружающей его среды в так называемый тас-файл, с которым будет запускаться программа. Изменяя параметры в тас-файле можно менять программу в зависимости от того, что нужно получить в эксперименте. В режиме командной строкой можно изменять параметры установки во моделирования, для этого Geant4 имеет встроенный набор команд, с помощью которых так же можно изменять уровень диагностики, геометрические параметры модели, список учитываемых процессов и т. д.

Набор команд может быть расширен пользователем. Стандартный набор команд делится на следующие категории:

- /control - управление интерфейсом
- /units - система единиц
- /geometry - навигация и проверка перекрытий объемов
- /tracking - управление объектами TrackingManager и SteppingManager
- /event - управление объектом EventManager
- /cuts - управление порогами рождения частиц
- /run - управление сеансом
- /random - управление генератором случайных чисел
- /material - просмотр списка и свойств материалов
- /particle - изменение списков и свойств частиц
- /process - изменение списка активных процессов
- /vis - визуализация
- /gun - управление генератором первичной вершины
- /hits - управление детектирующими объемами
- /score - работа со счетчиками

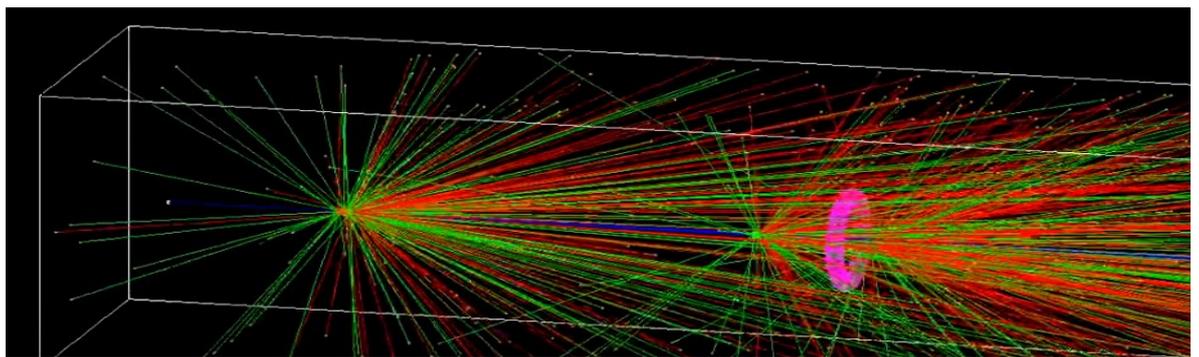


Рис. 2. Прохождение частиц через мишени и Тор-детектор.

В Geant4 можно визуализировать объемы детектора или отдельных подсистем, траекторию частиц, срабатывания в чувствительных объемах. Кроме того, можно добавить оси координат, маркеры, текст и масштабные

линейки.

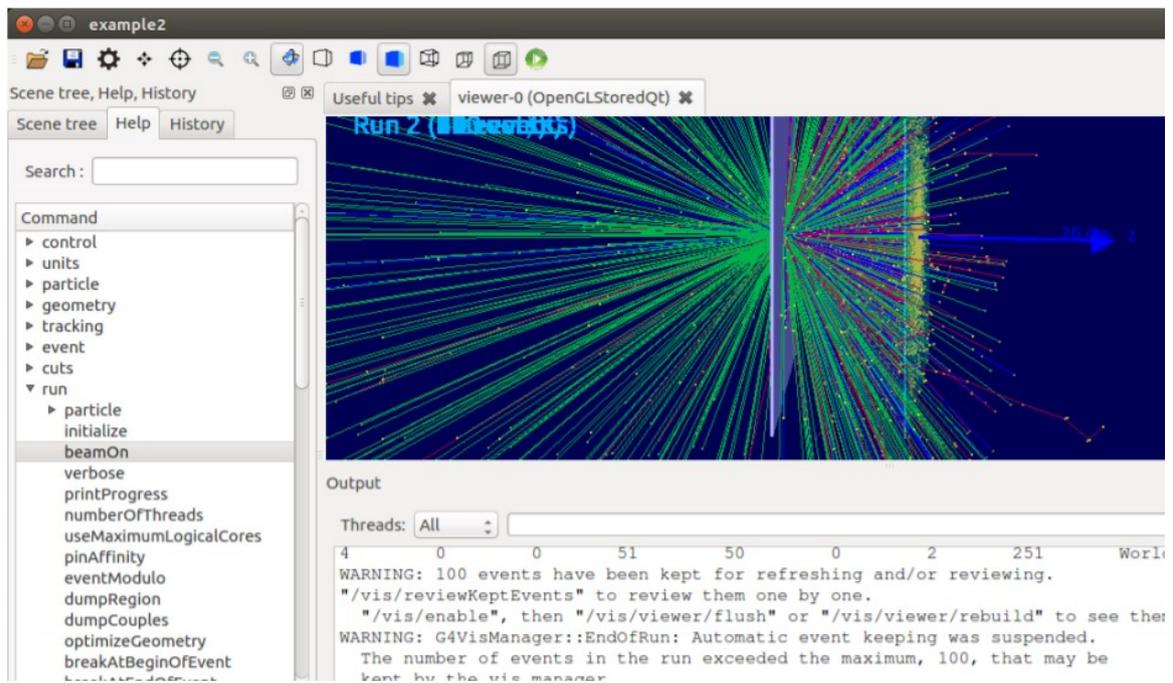


Рис. 3. Графическая визуализация экспериментальной установки и треков частиц.

Глава 3. Моделирование прохождения ионов углерода с кинетической энергией 1,2 ГэВ/нуклон через полиэтиленовую мишень

Для исследования нужны установки, которые обходятся очень дорого. Моделирование может помочь получить правильную конфигурацию установки, её размеры. Из-за быстрых темпов роста компьютерной мощности, возникает доступность моделирования, что порождает спрос на специальные программы. Для этой цели был разработан пакет Geant4.

Данный проект реализован на платформе scientific linux 7. В связи с тем, что нам не требовалось проводить вычисления, требующие серьезные компьютерные мощности, операционная система была установлена в качестве гостевой с помощью программы VirtualBox. Позволяет гибко использовать возможности нескольких ОС, нет нужды в сложных конфигурациях в разбиении дискового пространства, для перехода от одной ОС к другой, не требуется перезагрузка, возможность создания общих папок, доступ к периферийным устройствам и внешним носителям, интуитивно понятный интерфейс, приличная скорость работы на современных ПК, т.к. для "быстрой работы" достаточно несколько ГБ оперативки. Не занимают ресурсы ПК когда виртуальная машина не запущена. Удобно передавать конфигурации при освоении тех или иных программных продуктов.

В ходе выполнения работы проводились консультации с научными сотрудниками ОИЯИ, однако из-за сложившейся эпидемиологической ситуации они проходили в дистанционном формате.

Пакет Geant4 предназначен для решения спектра задач фундаментальной науки - ядро и частицы, а также для прикладных задач в области космонавтики, медицины.

Пример моделирования: получение спектра частиц при прохождении углерода ^{12}C через мишень ПЭ (полиэтилен), с фиксацией в детекторе

представляющий собой фотозмульсию(Em), при энергии ядер углерода 1,2 ГэВ/нуклон.

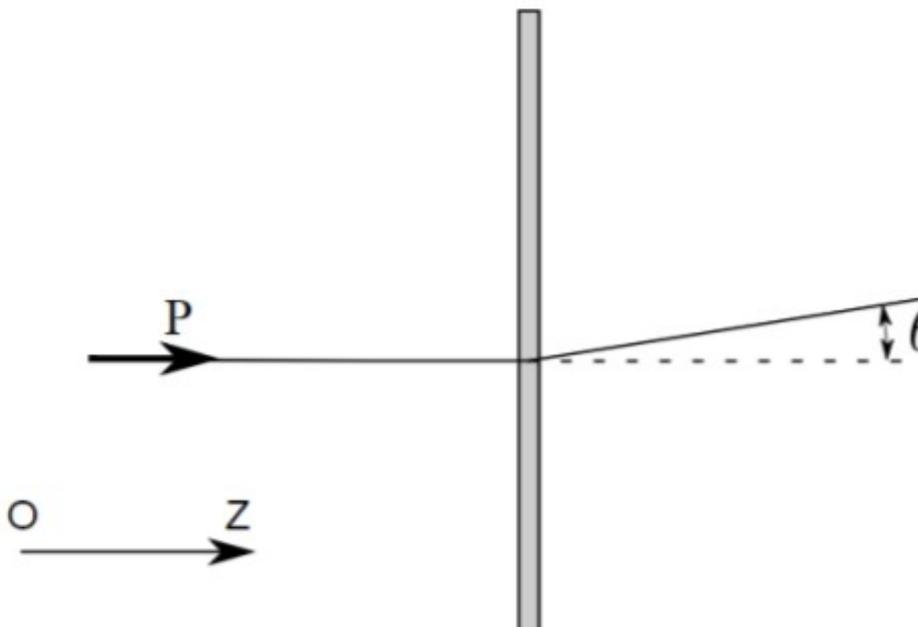


Рис. 4. Схема моделируемой установки, P - источник частиц, 1 - мишень, 2 - чувствительная область, детектор.

Описание экспериментальной установки происходит в файле DetectorConstruction.cc.

Сначала определяется конструктор класса World, он принимает значения ширины, высоты, глубины и материала, данный класс создаёт материнский объём, в котором будут располагаться элементы установки.

```

{
World: :World(double size_x, double size_y, double size_z, G4Material *mater_):
<-----> Double size05 = size/2;
<-----> solid = new G4Box("world", sizex/2, sizey/2, sizez/2);
<-----> logic = new G4LogicalVolume( solid, mater, "World", 0, 0, 0);
<-----> physic = new G4PVPlacement(0, G4ThreeVector(), logic, "World",
<-----> <-----> <-----> <-----> 0, false, 0);
}

```

В данной работе задействована физика QGSP_INCLXX - это физический лист (набор физических процессов) для описания транспорта заряженных частиц через различные вещества на основе Лиежской модели

внутриядерных каскадов (INCL++) для реакций индуцированных протонами, нейтронами, пионами и легкими ядрами. Модель имеет свои ограничения по энергии и атомному номеру ядра, для которых может быть успешно применена и могут быть получены удобоваримые данные.

Подключение задействованной нами физики частиц будет представлять собой такой код:

```
int main()
{
<----->CLHEP::HepRandom::setTheSeed(time(0)+getpid());
G4RunManager * runManager = new G4RunManager;
<----->DetectorConstruction* detector_c = new DetectorConstruction;
<----->runManager->SetUserInitialization(detector_c);
G4PhysListFactory *phlistf = new G4PhysListFactory();
G4VUserPhysicsList *p = phlistf->GetReferencePhysList ("QGSP_INCLXX");
runManager->SetUserInitialization(p); <-----><----->
<----->G4VisManager* visManager = new G4VisExecutive;
<----->visManager->Initialize();
<-----> runManager->SetUserAction(new PrimaryGeneratorAction(detector_c) );
<----->runManager->SetUserAction(new RunAction) ;
runManager->SetUserAction(new EventAction) ;
<----->
<----->runManager->Initialize();
}
```

Задаём размеры пучков углерода и энергии, с которыми они будут пролетать через мишень.

```
PrimaryGeneratorAction::PrimaryGeneratorAction(DetectorConstruction*myDC)
<-----><----->myDetector (myDC)
{
<----->G4int n_particle = 1;
<----->ParticleGun = new G4ParticleGun(n_particle);
}
```

```

Void PrimaryGeneratorAction::GeneratePrimaries(G4Event* anEvent)
{
<----->particleGun->SetParticleMomentumDirection(G4ThreeVector(0.,0.,1.));
<----->G4double rand_x, rand_y;
<----->rand_x=G4UniformRand()*2.5-0.125;
<----->rand_y=G4UniformRand()*2.5-0.125;<----- >
<----->
    particleGun->SetParticlePosition(G4ThreeVector(rand_x*cm, rand_y*cm,
-15.000005))
G4double meank=14400*MeV, sigmak=10.0*MeV; //C12_1. 2GeV
G4double kineticEnergy = G4RandGauss::shoot(meank, sigmak) ;
<----->particleGun->SetParticleEnergy(kineticEnergy*MeV);
<----->particleGun->GeneratePrimaryVertex(anEvent) ;}

```

После этого создается производящая мишень (на ней идет распад первичного ядра углерода) и детектор. Каждый элемент геометрии GEANT4 задается тремя объектами. G4VSolid описывает его геометрические свойства: куб, сфера и т. п. Следующим этапом описываются физические свойства мишени, при необходимости подключаются магнитные поля. В данном разделе так же находится описание материала G4_Polyethylene (библиотека материалов).

Для того чтобы скрыть материнский объем задаём свойство невидимый (Invisible).

```

{World = new World(500*cm, 500*cm, Mat("G4_AIR));
    G4Box *solidTgt – new G4Box("solidTgt", 5*cm, 5*cm, 5.0*mm);
    G4LogicalVolume *logicTgt = new G4LogicalVolume(solidTgt,
Mat("G4_POLYETHYLENE"), "logicTgt");
    G4PVPlacement *physilTgt = new G4PVPlacement(0,
G4TheeVector(0,0,0*cm), logicTgt, "physilTgt", world->getLogic(), false, 0);
    G4Box)solidDet = new G4Box("solidDet", 10*cm, 10*cm, 20*cm);
    G4LogicalVolume *logicDet = new G4LogicalVolume(solidDet,
Mat("G4_PHOTO_EMULSION"), "logicDet", 0);

```

```

    G4PVPlacement *physiDet = new G4PVPlacement(0,
    G4TheeVector(0,0,50*cm), logiclDet, "physiDet", world->getLogic(), false, 0);
    SensitiveDetector *detector = new SensitiveDetector( "hi there" );
    G4SDManager* SDman = G4SDManager::GetSDMpointer();
    SDman->AddNewDetector (detector) ;
    logicDet->SetSensitiveDetector (detector) ;
    world->getLogic()->SetVisAttributes (G4VisAttributes:: Invisible) ;
    return world->getPhysic() ; }

```

Подключаем файлы с имеющимся кодом. В этот список включены файлы, входящие изначально в состав пакета Geant4.

```

#include "PrimaryGeneratorAction.hh"
#include "DetectorConstruction.hh"
#include <G4Event .hh>
#include <G4ParticleGun.hh>
#include <G4ParticleTable.hh>
#include <G4TonTable.hh>
#include <G4GenericIon. hh>
#include <G4ALpha.hh>
#include <G4ParticleDefinition.hh>
#include <globals .hh>
#include "Randomize. hh"
#include "time.hh"
#include "G4SystemOfUnits.hh"
#include "G4PhysicalConstants.hh"

```

Теперь зададим угол обзора и цвета частиц, на которые будет распадаться наш пучок углерода.

```

/vis/viewer/set/viewpointThetaPhi 110 140 deg
/vis/modeling/trajectories/create/drawByParticleID
/vis/modeling/trajectories/drawByParticleID-0/set e- red
/vis/modeling/trajectories/drawByParticleID-0/set e+ red
/vis/modeling/trajectories/drawByParticleID-0/set nu_e grey

```

```
/vis/modeling/trajectories/drawByParticleID-0/set anti_nu_e grey
/vis/modeling/trajectories/drawByParticleID-0/set geantino white
/vis/modeling/trajectories/drawByParticleID-0/set gamma grey
/vis/modeling/trajectories/drawByParticleID-0/set alpha blue
/vis/modeling/trajectories/drawByParticleID-0/set neytron grey
/vis/modeling/trajectories/drawByParticleID-0/set ion blue
```

Задаём вещество которое будем пропускать через детектор и команду «Начать моделирование 1000 событий»

```
/tracking/storeTrajectory 1
/gun/particle ion
/gun/ion 6 12
/run/initialize
/vis/scene/endofEventAction accumulate
/run/beamOn 1000
```

Результатом визуализации этого моделирования будет являться данное изображение:

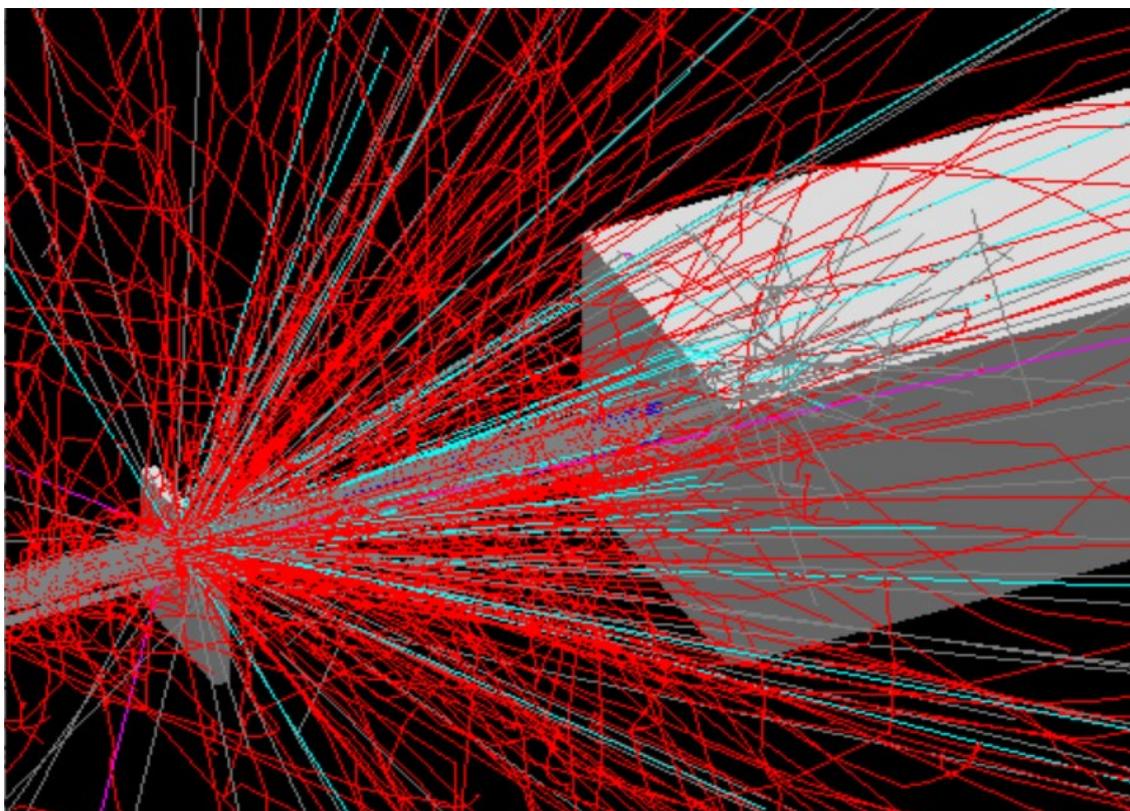


Рис. 5. Графическое изображение модельного эксперимента.

Для записи результатов используем файл probeg.dat.

Код к нему задаётся в файл SensitiveDetector. В нем реализуется доступ к объектам моделирования. В данном случае - это код частицы, название, родительский идентификатор, идентификатор трека, импульс, создаваемый частицей, кинетическая энергия, полная энергия, масса, положение частицы после прохождения по трём координатам X,Y,Z и длина трека (видимый след, оставленный частицей).

```
G4bool SensitiveDetector::ProcessHits(G4Step *step, G4TouchableHistory *hist)
{std::ofstream file;
file.open("probeg.dat",ios::app);
G4int pID = step->GetTrack()->GetParentID();
G4int tID = step->GetTrack()->GetTrackID() ;
G4ThreeVector mTrack = step->GetTrack() ->GetMomentum() ;
G4ThreeVector vPos = step->GetTrack() ->GetVertexPosition() ;
double length = step->GetTrack() ->GetTrackLength() ;

double kenergy = step->GetTrack()->GetVertexKineticEnergy() ; .
double tenergy = step->GetTrack()->GetTotalEnergy() ;
double mass = step->GetTrack() ->GetDynamicParticle() ->GetMass();
G4int code = step->GetTrack()->GetDynamicParticle()->GetParticleDefinition()
->GetPDGEncoding();
G4String name = step->GetTrack()->GetDynamicParticle()-
>GetParticleDefinition() ->GetParticleName();
if( pID < 4).
{file<<code<< \t <<name<< \t <<tID<< \t <<pID<< \t
<mTrack.getx()/MeV<<
\t <<mTrack.getY()/MeV<< \t <<mTrack.getZ()/MeV<< \t <<
mass/MeV << \t <<kenergy/MeV<< \t << tenergy/MeV<< \t <<.
<<vPos.getY()/mm<<” ”<<vPos.getY()/mm<<” ”<<vPos.getZ()/mm<< \t <<
length/micrometer<< \t << std::endl;}
Step->GetTrack()->SetTrackStatus(fStopAndKill);
File.close();
```

Return true;

Фрагмент листинга - текст с набором частиц со значениями переменных, описанных выше, на которые распадаются ионы углерода.

```
probeg.dat      [----]  2 L:[17472+ 0 17472/51057] *(1122125/323289
10
1000060120<---->C12<---->1<----->0<----->15.3781>-31.8418<----->25533.
11<----->e<----->190<---->1<----->0.261547<----->0.557463<----->-0.190
11<----->e<----->183<---->1<----->-0.109113<----->-0.192443<----->0.1729
257  end
11
1000060120<---->C12<---->1<----->0<----->-2.47481<----->-2.81658<-----
11<----->e<----->185<---->1<----->0.890727<----->-0.178131<----->0.2571
404  end
12
1000020040<---->alpha<->73<----->1<----->-20.627>-38.2486<----->8845.5
1000020040<---->alpha<->72<----->1<----->-79.6145<----->255.087>7989.9
2212<-->proton<>71<----->1<----->34.3485>23.8575>2375.58>938.272>1643.1
2112<-->neutron>70<----->1<----->-13.0969<----->-12.6842<----->2235.3
2112<-->neutron>69<----->1<----->-452.664<----->363.722>1318.29>939.56
1000010020<---->deuteron<----->68<----->1<----->194.636>-571.916<-----
158  end
13
probeg.dat      [----]  2 L:[17583+ 0 17583/51057] *(1129059/323289
32
1000010030<---->triton<>100<---->1<----->347.45<>-321.596<----->6070.1
2112<-->neutron>99<----->1<----->-357.201<----->44.6395>1717.31>939.56
2112<-->neutron>98<----->1<----->0<----->0<----->0<----->939.565>1314.8
2212<-->proton<>97<----->1<----->0.408637<----->-30.2483<----->1702.8
2212<-->proton<>96<----->1<----->-139.639<----->32.8687>1317.47>938.27
2112<-->neutron>95<----->1<----->0<----->0<----->0<----->939.565>1395.1
1000010020<---->deuteron<----->94<----->1<----->-138.441<----->-312.3
211<-->pi+<-->93<----->1<----->2.74382>-36.4433<----->144.69<>139.57
2212<-->proton<>92<----->1<----->319.189>-613.677<----->3108.44>938.27
2112<-->neutron>91<----->1<----->309.344>71.3772>1071.53>939.565>520.48
271  end
33
1000060120<---->C12<---->1<----->0<----->34.0333>-9.01039<----->25530.
11<----->e<----->157<---->1<----->0.403826<----->0.523405<----->-0.107
228  end
34
1000060120<---->C12<---->1<----->0<----->0.968436<----->-16.9016<-----
11<----->e<----->180<---->1<----->1.00979>0.690203<----->-1.45909<-----
```

Рис. 6. Фрагмент листинга результатов моделирования.

Анализируя полученные данные можно, например, получить процент событий, идущих по каналу $^{12}\text{C} \rightarrow 3\alpha + X$ или $^{12}\text{C} \rightarrow N\alpha + Nd + X$ и т.п. В данном случае 3 альфа частицы рождаются в 1.3% событий, а дейтроны в 2.8% событий.

Результаты такого моделирования полезны при расчете оптимальной загрузки детектора перед облучением (расчет интегрального потока через детектор), расчете времени экспозиции, а также применимы при анализе экспериментальных данных, т.к. позволяют получить угловые и энергетические характеристики частиц-фрагментов. Массив экспериментальных данных обеспечивает эволюцию объектной модели Geant4 (обратная связь), а та в свою очередь позволяет получать более детальное описание процессов, востребованное в прикладных направлениях – радиационной биологии, материаловедении, космонавтике.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе рассмотрено:

1. Обзор понятия математическое моделирование. Рассмотрена классификация математических моделей.

2. На примере программного продукта Geant4, являющегося одним из стандартных современных решений для физики ядра и частиц, продемонстрирован уровень развития средств моделирования в одном из направлений физики.

3. Дано описание ряда сущностей (классов) объектной модели Geant4, отражающих идеологию построения модели эксперимента, связанного с трекингом частиц.

4. На практическом примере моделирования прохождения ядер углерода через мишень из полиэтилена и детектора в виде объема ядерных фотоэмульсий продемонстрированы возможности Geant4.

Так же следует отметить, что проект GEANT4 развивается. Используя созданные библиотеки, можно решать многие типовые задачи, 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.

Данная работа имеет потенциал развития до итогового исследовательского проекта, по средствам дополнительных работ в части: детализации объекта мишень-детектор, подключение физических моделей, рассчитанных на описание развала ядра углерода на фрагменты в ядро-ядерных взаимодействиях и сравнения результатов моделирования с результатами сотрудничества Беккерель на Нуклотроне ОИЯИ.

Список литературы

1. Борн М. Атомная физика. М.: Мир, 1965 с. 78-82
2. Братченко М. И., Дюльдя С. В. Применение программного комплекса Geant4 к задачам радиационно-технологического моделирования // Вопросы атомной науки и техники. - 2001 г. - No 4 Серия: Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение-184 с.
3. Брукшир Дж. Гленн Введение в компьютерные науки. Общий обзор, 6-е издание.: Пер. с англ. М.: Издательский дом «Вильямс»., 2001.-688с.
4. Вержбицкий В.М. Основы численных методов: учебник для вузов. – М.: Высшая школа, 2002. -840с.
5. Дрёмин И.М. Физика на Большом адронном коллайдере // Успехи физических наук, 2009 Т. 179, №6. С. 571-579.
6. Ишханов Б.С., Кэбин Э.И. Физика ядра и частиц, XX век. <http://nuclphys.sinp.msu.ru/introduction/>
7. Козин Р.Г. Математическое моделирование: примеры решения задач: Учебно-методическое пособие. М.: НИЯУ МИФИ, 2010. 176с
8. Левин А. Частица-призрак: нейтрино // Популярная механика, 2010, №3.
9. Леонтьев В.В., Белотелов И.И., Задачи раздела «Информационные методы в физике высоких энергий» // Университетская книга Москва, 2011 г.
10. Михайлов Г.А., Войтишек А.В. Численное статистическое моделирование. / Г. А. Михайлов, А. В. Войтишек - М.: Академия, 2006 368 с.
11. Моисеева Л.Т. Методы математического моделирования процессов в машиностроении. Курс лекций. Казань: Казанский государственный технический университет, 2012.-48с.

12. Мурзина Е.А. Взаимодействие излучения высокой энергии с веществом: учебное пособие / Е.А. Мурзина.– М.: МГУ им. М.В. Ломоносова, 2007.– 97 с.
13. Мурзина, Е.А. Взаимодействие излучения высокой энергии с веществом: учебное пособие /Мурзина.– М.: МГУ им. М.В. Ломоносова, 2007.– 97 с.
14. Перкинс Д. Введение в физику высоких энергий. М.: Энергоатомиздат, 1990 с. 5-7.
15. Подлипов В.В., Шабека А.С., Куприянов А.В. Моделирование взаимодействия электронного пучка с веществом методом Монте-Карло // Информационные технологии и нанотехнологии. – Самара, 2016 – 157 с.
16. Самарский А.А. Гулин А.В. Численные методы - М.: Наука, 1989
17. Самарский А.А., Михайлов А.П. Математическое моделирование. – М.: Физматлит, 2001. 320с.
18. Соболев, И.М. Численные методы Монте-Карло / И.М. Соболев. – М.: Наука, 1973.– 312 с.
19. Советов Б.Я, Яковлев С.А. Моделирование систем. – М.: Высшая школа, 1998.
20. Фролов И.Т. Гносеологические проблемы моделирования - М.: Наука, 1961.
21. Черняев А.П.. Взаимодействие ионизирующего излучения с веществом. М.:ФИЗМАТЛИТ, 2004 – 152 с.

22. Элементарный учебник физики / Под ред. академика Г.С. Ландсберга. Том 1 Изд. 1-е, М.: Наука, 1985 г. с. 452-453.
23. <http://elibrary.asu.ru/xmlui/bitstream/handle/asu/8280/vkr.pdf?sequence=1&Allowed=y>
24. <http://library.miit.ru/methodics/111217/Зайцева%20Мат.моделир.pdf>
25. <http://math.phys.msu.ru/data/27/ОММ1.pdf>

26. https://mat.1sept.ru/view_article.php?ID=200301401
27. http://mipt.jinr.ru/xdocs/geant4_5.pdf
28. <http://nuclphys.sinp.msu.ru/partmat/pm01.htm>
29. http://pedsovet.info/info/pages/referats/info_00002.htm
30. <http://www.ict.nsc.ru/sites/default/files/files/textbooks/MatMod-2.pdf>
31. http://www.kaf07.mephi.ru/eduroom/Geant4/lecture_01.pdf