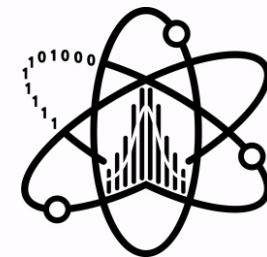


Комплексная валидация ионизационных моделей в Geant4-DNA

Матвей Вологжин

Студент 5-го курса ФФ ТГУ (Faculty of Physics)

18/12/2025



**Laboratory
of High Energy Physics
Data Analysis**

Tomsk
State
University

Предварительные сведения (Актуальность | Цели | Задачи)

Актуальность

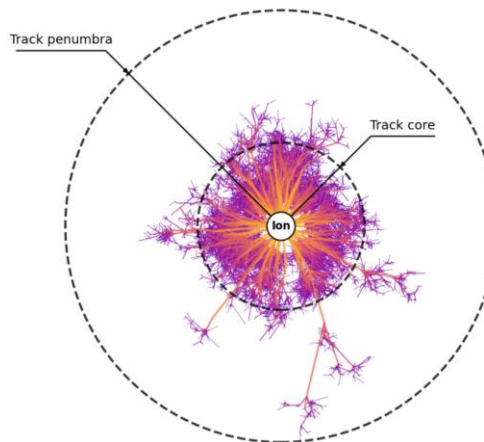
В ближайшие десятилетия планируется множество космических полетов, в том числе с участием человека и без него. Несмотря на различия в целях, каждая миссия сталкивается с проблемой космического излучения. Это излучение может вызывать различные сбои, от **единичных сбоев в микроконтроллерах до разрывов в цепочке ДНК**. Как мы знаем, разработка таких миссий является дорогостоящей и трудоемкой, поэтому важно оценивать риски как для жизни людей, так и для технологий в космических проектах.

Цели

- I. Попытаться смоделировать альфа-распад и химию одновременно
- II. Создать новую модель ионизационных потерь
- III. Валидация DNA физический листов в Geant4

Задачи

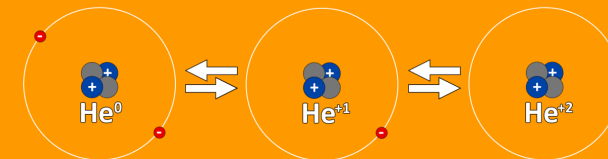
- I. Создать серию приложений Geant4
- II. Разработать новую модель ионизационных потерь на основе новой концепции – *Динамический заряд*
- III. Протестировать и сравнить физические листы DNA и EM Standard
- IV. Реализовать ROOT-скрипты для визуализации полученных данных



План

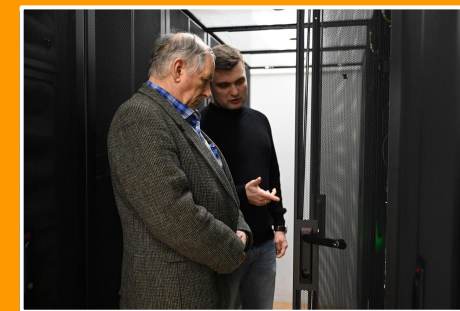
START

Предварительные сведения
Актуальность, цели и...
...планы



MAIN PART

Радиохимическое моделирование
Rudd-модель
Detour factor
Пробег
Время расчёта
Radial Dose Distribution
Ionisation cluster size distribution



END

Заключение
Достижения
Планы & Перспективы

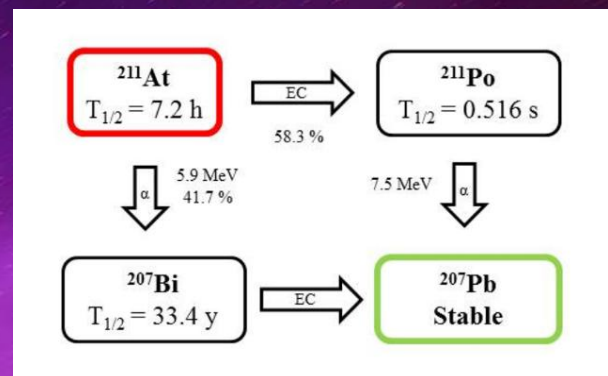


Радиохимия

- Нам удалось смоделировать радиоактивный распад и химические реакции, основываясь на примере *"molecular dna"*

Alpha particles are launched: 1
Initial energy of incoming particle (MeV): 0.0003125
Particles (without e-) fleet out from sphere: 1
Particles fleet out from sphere: 4
Number of the uncountable particles: 0
Average number of steps: 7891959
Average length of track (mm): 0.0583609
Summary energy deposition (MeV): 3.22628

Elapsed time: 9774.97 s



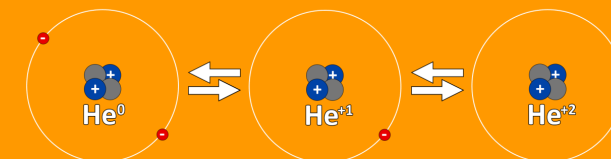
Цепочка распада ^{211}At

- Мы пытались смоделировать распады следующих ядер:
Pb-209, U-238, At-211,
- Ac-211, Ra-223, Bi-212, Th-226

План

START

Предварительные сведения
Актуальность, цели и...
...планы



MAIN PART

Радиохимическое моделирование

Rudd-модель
Detour factor
Пробер
Время расчёта
Radial Dose Distribution
Ionisation cluster size distribution



END

Заключение
Достижения
Планы & Перспективы



Rudd модель 11.4

- Модель Rudd (Nucl. Track Rad. Meas. 16 (1988) 219) обеспечивает выборку электронной эмиссии при столкновении протона или электрона с молекулой воды
- Три вида модели:
 1. G4DNRuddIonisationModel – DNA Option #4
(The effective charge)
 2. G4DNRuddIonisationExtendedModel – DNA Option #2
(The effective charge)
 3. G4DNRuddIonisationDynamicModel – DNA Option #8
(The dynamic charge = charge exchange with the media)



План

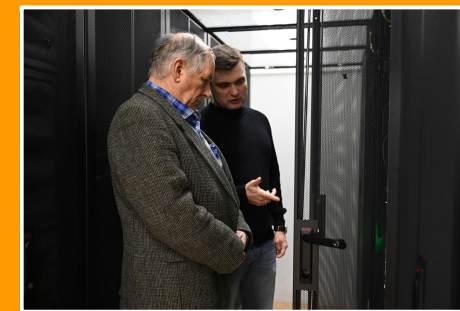
START

Предварительные сведения
Актуальность, цели и...
...планы



MAIN PART

Радиохимическое моделирование
Rudd-модель
Detour factor
Пробег
Время расчёта
Radial Dose Distribution
Ionisation cluster size distribution



END

Заключение
Достижения
Планы & Перспективы

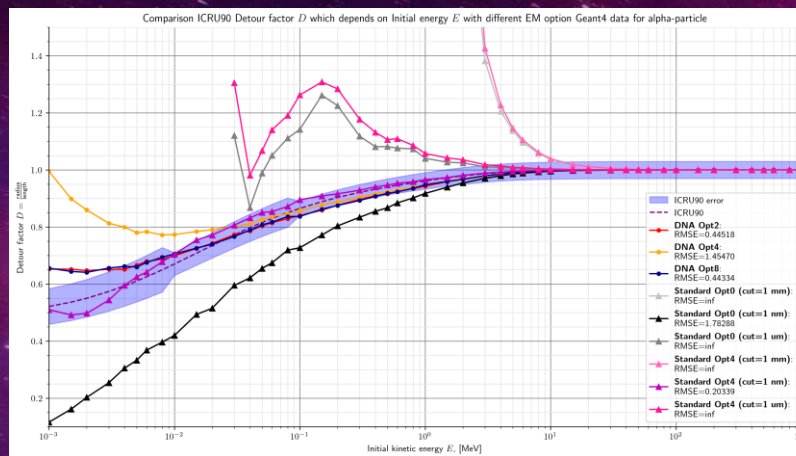
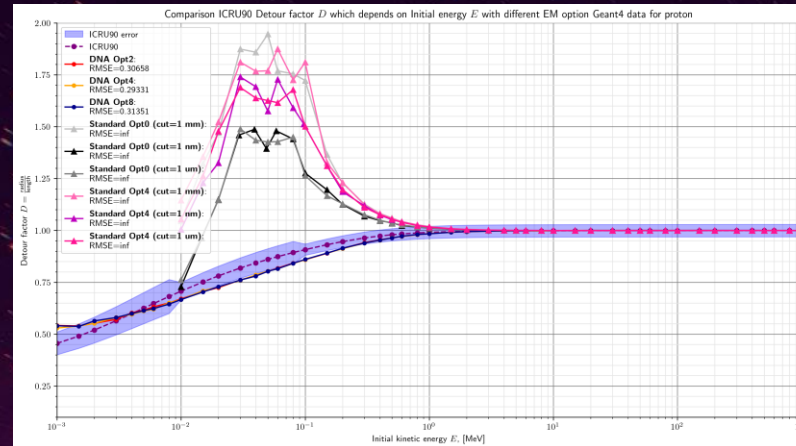


Geant4 VS ICRU90: Detour factor

Detour factor is the ratio of the penetration depth to the actual path length

$$\text{Detour factor} = \frac{\text{radius}}{\text{length}}$$

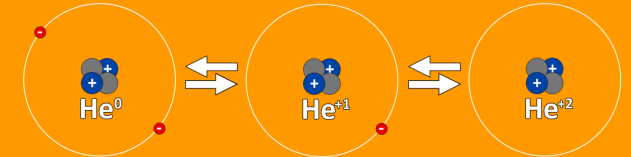
It characterizes the scattering of the particles



План

START

Предварительные сведения
Актуальность, цели и...
...планы



MAIN PART

Радиохимическое моделирование
Rudd-модель
Detour factor
Пробер
Время расчёта
Radial Dose Distribution
Ionisation cluster size distribution

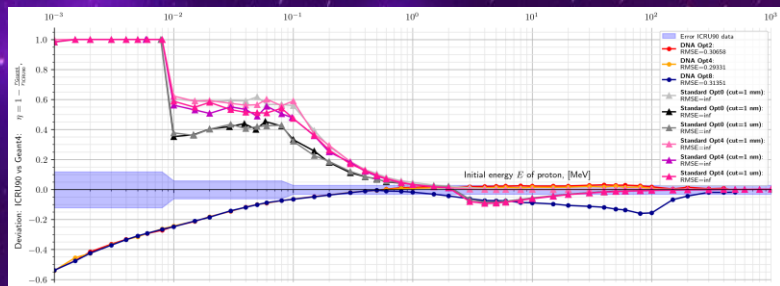


END

Заключение
Достижения
Планы & Перспективы

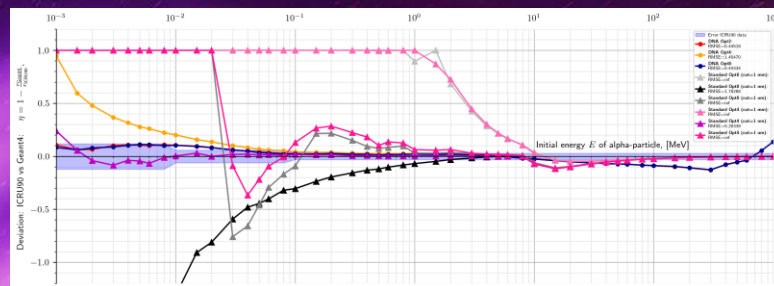


Geant4 VS ICRU90: Range

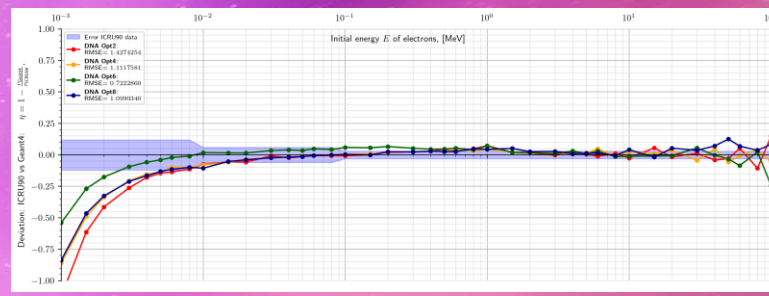
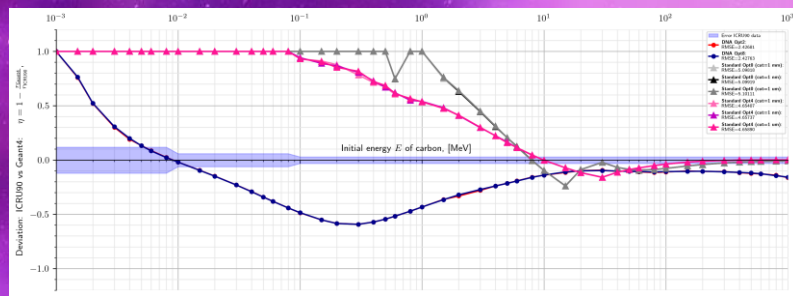


Range is the path length of some particle in some material

Динамический заряд
 $\text{He}^0 \leftrightarrow \text{He}^{+1} \leftrightarrow \text{He}^{+2}$



$$\text{Deviation} = 1 - \frac{\text{Range}_{\text{Geant4}}}{\text{Range}_{\text{ICRU90}}}$$



План

START

Предварительные сведения
 Актуальность, цели и...
 ...планы



MAIN PART

Радиохимическое моделирование
 Rudd-модель
 Detour factor
 Пробер
 Время расчёта
 Radial Dose Distribution
 Ionisation cluster size distribution

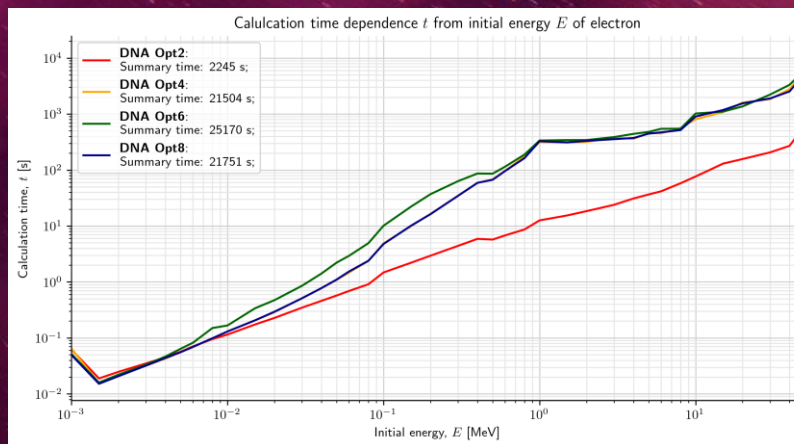
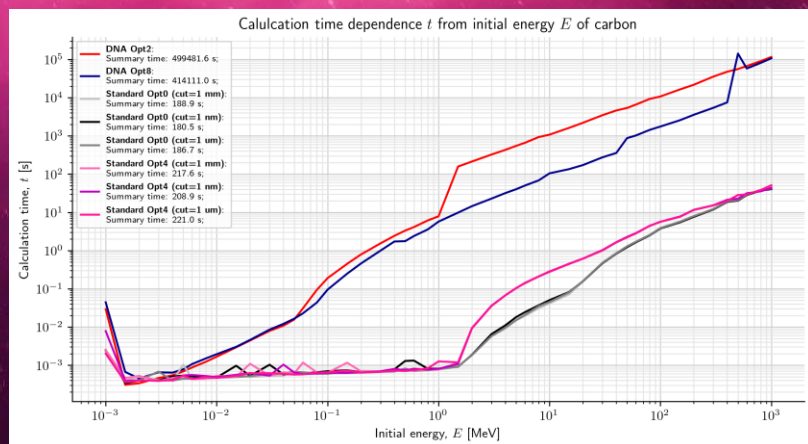
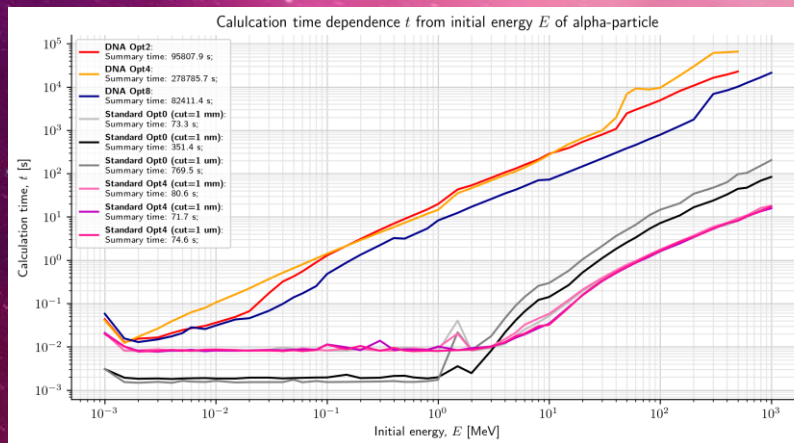
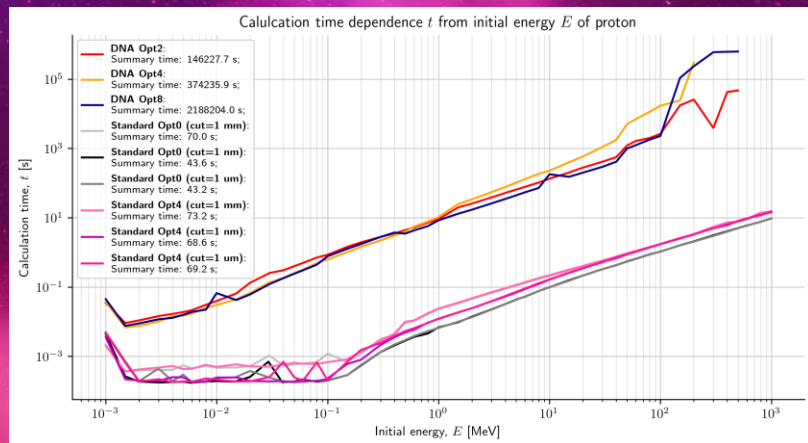


END

Заключение
 Достижения
 Планы & Перспективы



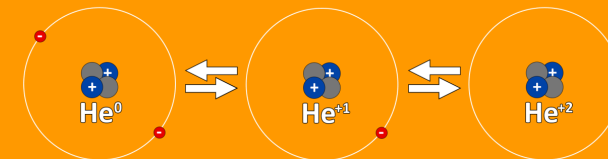
Geant4 VS ICRU90: Computation time



План

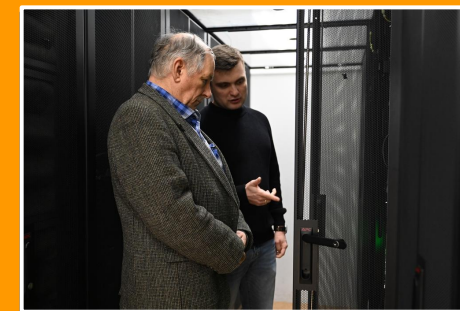
START

Предварительные сведения
Актуальность, цели и...
...планы



MAIN PART

Радиохимическое моделирование
Rudd-модель
Detour factor
Пробер
Время расчёта
Radial Dose Distribution
Ionisation cluster size distribution

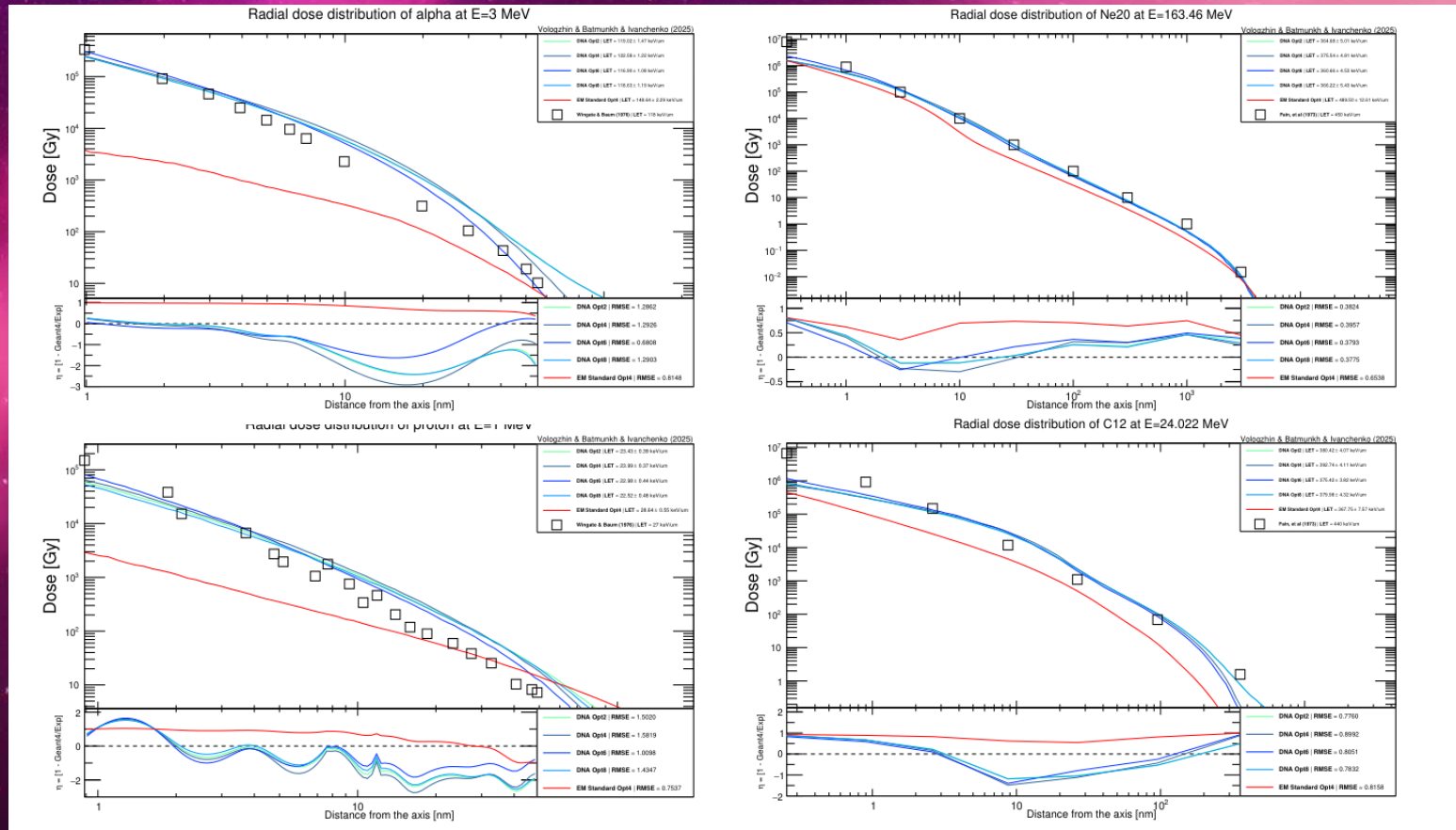


END

Заключение
Достижения
Планы & Перспективы



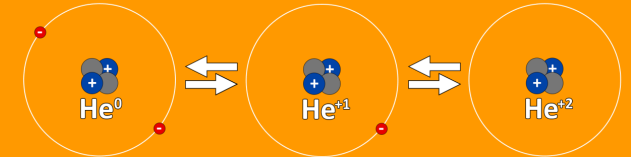
Geant4: Radial Dose Distribution



План

START

Предварительные сведения
Актуальность, цели и...
...планы



MAIN PART

Радиохимическое моделирование
Rudd-модель
Detour factor
Пробер
Время расчёта
Radial Dose Distribution
Ionisation cluster size distribution



END

Заключение
Достижения
Планы & Перспективы

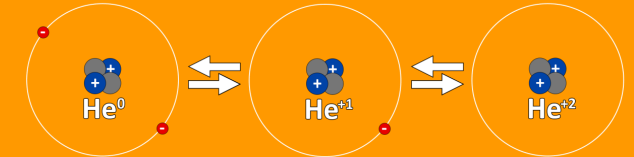


План

Geant4: Ionisation cluster size distribution

START

Предварительные сведения
Актуальность, цели и...
...планы



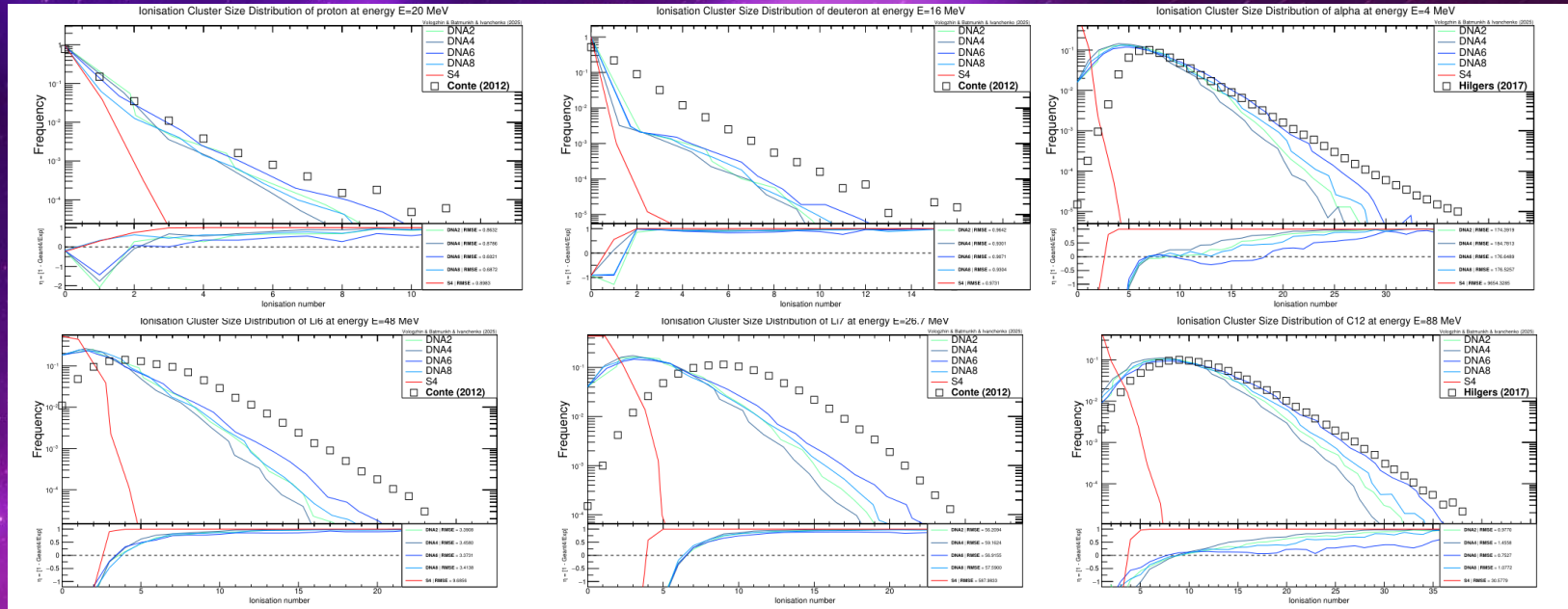
MAIN PART

Радиохимическое моделирование
Rudd-модель
Detour factor
Пробер
Время расчёта
Radial Dose Distribution
Ionisation cluster size distribution



END

Заключение
Достижения
Планы & Перспективы



Заключение

❑ Моделирование радиохимии

1. Слишком медленное для изотопов с маленьким периодом полураспада
2. Требуется оптимизация | Поиска другого подхода

❑ Физические модели

1. Разработана новая модель обмена зарядами:
"G4EmRuddIonisationDynamicModel"

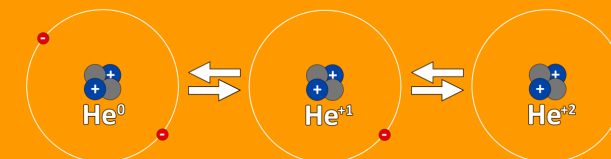
❑ Валидация ЭМ Физических листов Geant4

1. Готовы: RDD, ICSD
2. В процессе: Range, Detour factor, Computation time
3. Не адаптированы: Stopping power & SSB/DSB

План

START

Предварительные сведения
Актуальность, цели и...
...планы



MAIN PART

Радиохимическое моделирование
Rudd-модель
Detour factor
Пробег
Время расчёта
Radial Dose Distribution
Ionisation cluster size distribution



END

Заключение
Достижения
Планы & Перспективы



🤔 Перспективы | Планы 🤔

❑ Разработка моделей для физических процессов

1. 🟡 Динамический обмен зарядами для тяжёлых ионов
2. 🟢 Динамический обмен зарядами для ядер изотопов (например, дейтрон)
3. 🟠 Упругое рассеяние | Возбуждение | Мульти-ионизация

❑ Разработка моделей для химических реакций

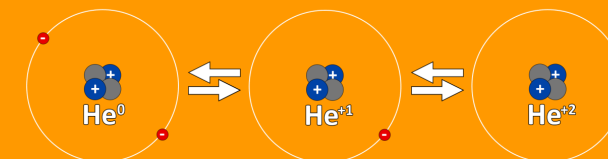
1. 🟠 Condensed History approach & Химия

Мы открыты к предложениям и расширению круга научных задач!

План

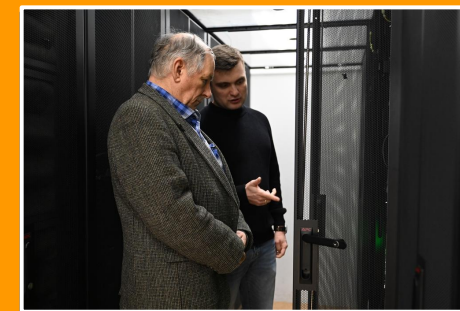
START

Предварительные сведения
Актуальность, цели и...
...планы



MAIN PART

Радиохимическое моделирование
Rudd-модель
Detour factor
Пробег
Время расчёта
Radial Dose Distribution
Ionisation cluster size distribution



END

Заключение
Достижения
Планы & Перспективы



Перспективы | Планы

Geant4-DNA: Статус проектов и задачи (Октябрь 2025)

Решено / Достигнуто В работе / Планы Проблема / Заморожено Научная группа

M. Galocha-Oliva (Univ. Sevilla)

Пример Microtrack
Микродозиметрия с пост. ЛПЭ,
условие зл. равновесия (CPE),
сегментация треков

Планы Microtrack
Расчет энергии на столкновение,
адаптация для in-vitro (клеток)

C. Velten (Columbia U.)

Новые счетчики молекул
(Molecule Counters)
Гибкий менеджер, без сигнатур,
учет геометрии

Развитие счетчиков
Добавление поглотителей (Scavengers)
как резервуаров,
интеграция мезоскопии

Общие задачи

Python Wrapping
(Обертка Geant4)
Требуется лидер направления
для развития инструмента

S. Incerti / H. Tran (CNRS, France)

Новые расширенные примеры
• radial (радиальные дозы ионов)
• phaseSpace (фазовое пространство)
• cellaPhantom (3D клетки из конфокал.)

Обновления физики (EM)
• Option 4: электроны < 10 MeV
• Новая модель для золота (Au)
• Коррекции DRF (релятивизм)

Химия UNOR (FLASH)
• Поддержка нуль-импульсов
• Мезоскопическая модель (SBS-RDME)
• Валидация на фиске дозиметрии

Валидация моделей ионизации Geant4-DNA
• Готово: Ionisation cluster size distribution, Radial dose distribution
• Расчет: Range, Detour factor, Stopping power
• В процессе: SSB/OSB

Радиохимия + Распады
Объединение моделей распада
и хим. реакций

Динамический заряд (DNA Option 8) для тяжелых ионов:
Bi, C, Si, Fe, Ni и др.

M. Vologzhin (TSU) / V. Ivanchenko

S. Guatelli / J. Archer (UOW, Australia)

CosmicDNA (Option 7)
Физика для космоса:
Протоны > 100 TeV, ионы

Segmented HT-synt
Ускорение химии для ионов
(параллелизация, сегментация)

Проблемы текущих моделей
Ограничения Condensed History
для структуры трека,
медленная химия ионов

INFN (Italy) - LNS/Catania

Пример Radiobiology
Запись и воспроизведение
фазового пространства
(Capture & Replay)

GANDALF (ML Tool)
Нейросеть для прогноза
повреждений ДНК (опубликовано)

Пример Hadrontherapy
Заморожен: устаревший код
(Technical Debt), требует рефакторинга

Планы INFN
Глобальная 5d фазовое пространство,
Рефакторинг Hadrontherapy

План

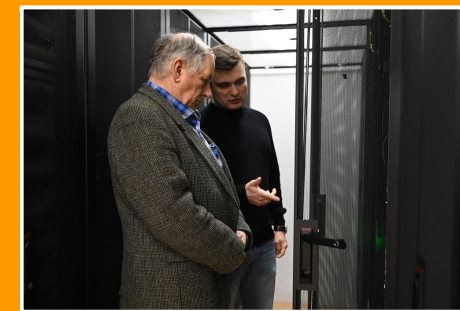
START

Предварительные сведения
Актуальность, цели и...
...планы



MAIN PART

Радиохимическое моделирование
Rudd-модель
Detour factor
Пробер
Время расчёта
Radial Dose Distribution
Ionisation cluster size distribution



END

Заключение
Достижения
Планы & Перспективы



🏆 Достижения 🏆

❑ Конференции

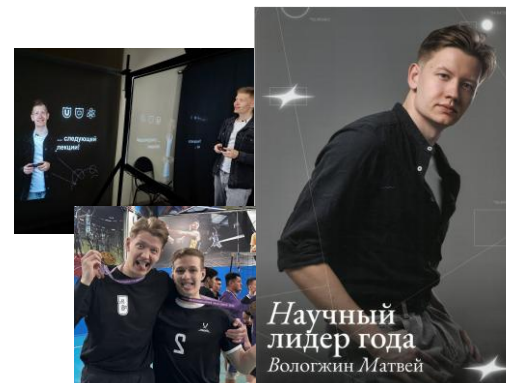
1. БФФХ-2024 (модели ДНК)
2. AYSS-2024 (модели ДНК)
3. РязГМУ-2025 (модели ДНК)
4. XXII Lomonosov Conference on Elementary Particle Physics (Geant4 validation)
5. Geant4-DNA Collaboration Meeting (Geant4 validation)
6. Geant4 Collaboration Meeting (Geant4 validation)

❑ Стажировки

1. ТПУ (Микротомография) | Ноябрь-Декабрь 2024 г.
2. «START» ОИЯИ | Август-Сентябрь 2025 г.
3. «INTEREST» ОИЯИ | Октябрь-Ноябрь 2025 г.

❑ Статьи

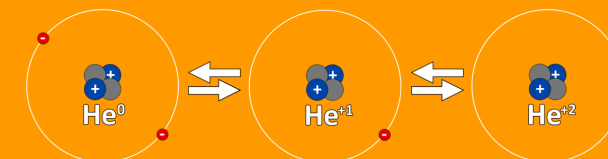
1. Вологжин М.А., Краснобаева Л.А., Шаповалов А.В. Исследование динамики конформационного возмущения в молекуле ДНК в модели Мута // **Изв. вузов. Физика**. 2025. Т. 68. № 4. С. 5–13. DOI: 10.17223/00213411/68/4/1
2. Ivanchenko V.N., Vologzhin M.A. Recent developments on ion transport simulation in Geant4 // **Moscow University Physics Bulletin** (on-going)
3. M. Batmunkh, S. Incerti, V.N. Ivanchenko, H. N. Tran, M. Vologzhin on structure simulation in Geant4-DNA // **Physica Medica** (In progress)



План

START

Предварительные сведения
Актуальность, цели и...
...планы



MAIN PART

Радиохимическое моделирование
Rudd-модель
Detour factor
Пробер
Время расчёта
Radial Dose Distribution
Ionisation cluster size distribution



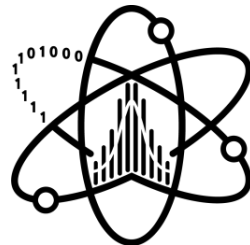
END

Заключение
Достижения
Планы & Перспективы



Спасибо за внимание!

✉ *matvey.vologzhin@mail.ru*



**Laboratory
of High Energy Physics
Data Analysis**

Tomsk
State
University

Готов ответить на Ваши вопросы

✉ matvey.vologzhin@mail.ru

