УДК 519.6:574:539.1.04

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОСТУПЛЕНИЯ РАДИОНУКЛИДА В ОРГАНИЗМ ЧЕЛОВЕКА

В.А. Кривощапов, Я.В. Кривощапова

Рассматривается реализация алгоритма определения динамики поступления радионуклида в организм человека по результатам измерения активности зубной эмали. Описываются пути оптимизации предложенного алгоритма, позволяющие сократить объем требуемых вычислений без заметной потери точности получаемых решений.

Ключевые слова: динамика поступления радионуклида, эмаль зуба, внутреннее облучение, регуляризация, некорректная задача.

В 50-е годы XX века ПО «Маяк» осуществлялись регулярные неконтролируемые сбросы радиоактивных отходов в реку Теча. В результате чего пойма реки, вода и донные отложения были сильно загрязнены смесью радионуклидов, а жители прибрежных населенных пунктов подверглись внешнему и внутреннему радиоактивному облучению. Внешнее облучение происходило за счет прямого контакта с рекой, имевшей повышенный гамма-фон, внутреннее облучение являлось результатом употребления речной воды и продуктов питания местного производства. В описываемой радиационной ситуации основной вклад в дозу внутреннего облучения вносил долгоживущий стронций-90 (⁹⁰Sr) с периодом полураспада около 30 лет [1]. Данный радионуклид, являясь метаболическим аналогом кальция, аккумулируется в костной ткани и тканях зуба, при этом его выведение из этих тканей происходит очень медленно (сопоставимо со скоростью радиоактивного распада). Основываясь на этих фактах, была разработана биофизическая модель [2], связывающая измеряемую с помощью счетчика бета-частиц активность зубной эмали передних зубов Y(T) со скоростью поступления ${}^{90}Sr$ в предшествующие измерению годы x(t):

$$Y(T) = \beta \int_{t_1}^{t_2} \alpha(\tau, t) x(t) k(\tau) R(\tau, t_2 - t) dt .$$
 (1)

Исходными данными для этой модели, представленной в виде интегрального уравнения, послужили многочисленные результаты измерения активности эмали передних зубов людей, постоянно проживавших на загрязненных территориях и употреблявших в пищу речную воду. Модель также использует экспертные оценки, основанные на изучении рационов питания людей разных возрастов $\alpha(\tau, t)$, а также известные аналитические зависимости, учитывающие как физические свойства ${}^{90}Sr$, так и особенности его метаболизма в организме человека $k(\tau)$ и $R(\tau, t_2 - t)$.

Сложность построения алгоритмов определения динамики поступления радионуклида x(t) с использованием предложенной модели обусловлена тем, что функция перехода ⁹⁰Sr из желудочно-кишечного тракта в эмаль передних постоянных зубов – $k(\tau)$, входящая в данное уравнение, также подлежит определению; а экспертная оценка $\alpha(\tau,t)$, представляющая собой отношение поступления 90 Sr детям возраста τ к поступлению взрослым, имеет большую погрешность. Задачу восстановления динамики поступления стронция по результатам измерений активности в эмали решал в 1970-е годы И.М. Расин [3], но, как оказалось, полученное им решение не согласуется с результатами прижизненных измерений содержания стронция в организме человека [2]. В 1985 году к этой задаче вернулся В.П. Кожеуров [4], но предложенное им решение не учитывало неустойчивость данной задачи (1) относительно погрешности задания правой части, являющейся осредненными по годам рождения экспериментальными данными с большой дисперсией. Позже группой сотрудников ФГБУН УНПЦ РМ была проведена ревизия полученных данных измерений активности эмали, а используемые биологические закономерности были уточнены [5]. Поэтому задача восстановления скорости поступления ⁹⁰Sr была вновь сформулирована и потребовала разработки нового алгоритма её решения без радикального изменения методологических подходов к расчетам [6].

Как оказалось, используя некоторые допущения, решение интегрального уравнения (1) с тремя неизвестными β , x(t) и $k(\tau)$ можно свести к решению системы двух интегральных уравнений с двумя неизвестными $k(\tau)$ и z(t) следующего вида [6]:

$$\begin{cases} \phi(U) = \int_{0}^{U} \alpha(t - U + 10, t)k(t - U + 10)z(t)dt, 0 \le U \le 10; \\ \phi(V) = \int_{0}^{V} \alpha(t, t - V + 10)k(t)z(t - V + 10)dt, 0 \le V \le 10; \\ k(0) = 1; \end{cases}$$
(2)

где $z(t) = e^{\lambda t} \cdot x(t)$, а константа $\lambda = 0.025 \frac{1}{\log \theta}$ – постоянная распада.

Данная система может быть линеаризована итерационным методом Ньютона–Канторовича в окрестности некоторого начального приближения $k_0(\tau)$ и $z_0(t)$. Полученная таким образом линеаризованная система является неустойчивой по отношению к погрешностям задания правой части, а задача её решения является некорректно поставленной по А.Н. Тихонову, и для её решения целесообразно применять процедуру регуляризации со стабилизатором первого порядка [6]. Численная реализация данной методики приводит к получению системы из 2n+1 линейных уравнений относительно неизвестных x и y, зависящих от параметра регуляризации a, где n – параметр используемой сетки разбиения на промежутке от 0 до 10 [6].

Для численного решения данной системы уравнений была написана вычислительная программа на языке Virtual Pascal, реализующая итерационный алгоритм минимизации сглаживающего функционала методом Хука–Дживса. Шаг сетки дискретизации варьировался на этапе тестирования программы и в итоге был выбран равным полгода, т.к. расчеты на более грубой сетке показали заметное снижение точности получаемых решений, а более мелкое разбиение вместо ожидаемого повышения точности приводило лишь к значительному увеличению объема необходимых вычислений и, как следствие, росту кумулятивной ошибки и времени расчета.

Исходными данными для расчета являются файлы, содержащие матрицы и вектора значений параметров, входящих в расчетные соотношения (2), которые получаются путем их дискретизации на выбранной сетке, а именно:

а) вектора ϕ_i и ψ_i – правые части системы (2) рассчитанные по результатам измерений активности зубной эмали Y(T) следующим образом:

$$\phi_{i} = \phi(U_{i}) = e^{\lambda t_{2}} \cdot y(U_{i} - 10),$$

$$\phi_{i} = \phi(U_{i}) = e^{\lambda t_{2}} \cdot y(10 - U_{i}),$$

$$U_{i} = 0; 0, 5; 1, 0; ...10;$$

б) матрица значений биологического параметра $\alpha_{i,j} = \alpha(\tau_i, t_j)$, полученных с помощью сглаживания двухмерным кубическим сплайном точечных экспертных оценок, основанных на рационах питания людей разного возраста;

в) предварительно рассчитанные *n* матриц коэффициентов *A* и *B* системы линейных уравнений [6] для каждого узла сетки;

г) вектора начальных приближений искомых функций $x_i^{<0>}$ и $k_i^{<0>}$.

Данные параметры рассчитываются заранее и вне основной программы с помощью математического пакета MathCad. Такое разделение позволило снизить сложность кодирования алгоритмов расчета на языке общего назначения Virtual Pascal и значительно повысить скорость работы итерационной программы. Полностью выполнить расчеты в пакете MathCad не представляется возможным, т.к. данный пакет имеет существенные ограничения на реализацию в нем сложных итерационных алгоритмов. Следует отметить, что в настоящий момент получили широкое распространение такие универсальные пакеты, как Matlab или Scilab, которые позволяют описывать произвольные вычислительные алгоритмы без применения сложного кодирования. Реализовать предложенный алгоритм расчета с помощью таких пакетов можно с гораздо меньшими трудозатратами.

Тем не менее для обеспечения заданной точности вычислений, в зависимости от выбранного начального приближения, основная программа производит около 20 циклов вычислений, что показывает устойчивую сходимость выбранного метода. Результатом её расчета является вектор-столбец значений скорости поступления стронция-90 x_i и вектор-столбец функции перехода ⁹⁰Sr из желудочно-кишечного тракта в эмаль k_i . Для получения непрерывных функций x(t) и k(t) используется сглаживание кубическими сплайнами. На рис. 1 представлено рассчитанная данным образом функция динамики поступления ⁹⁰Sr для жителей НП Муслюмово.

Подставляя полученные функции x(t) u k(t) в исходное интегральное уравнение (1), можно получить расчетные значения зубного датчика (рис. 2). Как можно видеть на рис. 2, полученное решение достаточно хорошо описывает изучаемый процесс, а невязка лежит в допустимых пределах.



Рис. 1. Динамика поступления стронция-90



Рис. 2. Показания зубного датчика

Разработанная методика и программное обеспечение использовалось для расчета динамики поступления 90Sr жителям реперных населенных пунктов Муслюмово и Метлино [7]. Полученные данные успешно применяются для уточнения доз внутреннего облучения [8]. Рассчитанная динамика поступления стронция-90 также использовалась для определения доз внутриутробного облучения детей жителей прибрежных территорий с помощью биокинетической модели [9] и определения рисков заболеваний.

Автор выражает свою признательность коллективу лаборатории биофизики ФГБУ УНПЦ РМ за полезные и плодотворные обсуждения.

Библиографический список

1. Современное представление о радиоактивном загрязнении реки Теча в 1949–1956 гг. / М.О. Дёгтева, Н.Б. Шагина, М.И. Воробьева и др. // Радиационная биология. Радиоэкология. – 2016. – Т. 56. № 5. – С. 523–534.

2. The Techa River Dosimetry System: Methods for the reconstruction of internal dose / M.O. Degteva, V.P. Kozheurov, E.I. Tolstykh et al. // Health Phys. $-2000. - V.79. - N_{\odot} 1. - P. 24-35.$

3. Расин, И.М. Кинетика накопления стронция-90 и формирование тканевых доз в растущем организме: дис. ... канд. биол. наук / И.М. Расин. – М.: ИБФ, 1970.

4. Kozheurov, V.P. Dietary Intake Evaluation and Dosimetric Model-ing for the Techa River Residents Based on in vivo Measurements of Strontium-90 in Teeth and Skeleton / V.P. Kozheurov, M.O. Degteva // Sci. Tot. Environ. 142: 63-72; 1994.

5. Анализ результатов мониторинга содержания долгоживущих радионуклидов в организме жителей уральского региона / М.О. Дёгтева, Е.И. Толстых, К.Г. Суслова и др. // Радиационная гигиена. – 2018. – Т. 11. № 3. – С. 30–39.

6. Zalyapin, V.I. Numerical solution of an applied biophysics inverse problem / V.I. Zalyapin, V.A. Krivoschapov, M.O. Degteva // Inverse Problems in Science and Engineering. -2004. - T. 12. No 4. - C. 379-392.

7. Reconstruction of long-lived radionuclide intakes for Techa riverside residents: strontium-90 / E.I. Tolstykh, M.O. Degteva, L.M. Peremyslova et al. // Health Phys. 2011. Jul; 101(1): 28–47. doi: 10.1097/HP.0b013e318206d0ff.

8. Enhancements in the Techa River Dosimetry System: TRDS-2016D Code for reconstruction Of Deterministic Estimates of Dose From Environmental Exposures / M.O. Degteva, B.A. Napier, E.I. Tolstykh // Health Phys. 2019. Apr 5. doi: 0.1097/HP.00000000001067.

9. In utero exposure to radiation and haematological malignancies: pooled analysis of Southern Urals cohorts / J. Schüz, I. Deltour, L.Y. Krestinina // Br J Cancer. 2017. Jan 3; 116(1):126–133. doi: 10.1038/bjc.2016.373. Epub 2016 Nov 17.

<u>К содержанию</u>