

文章编号: 1007-4627(2011)01-0097-06

光子能量沉积计算的一种新方法*

邱有恒^{1,2}, 应阳君¹, 王敏¹, 陈行良¹

(1 北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100094;

2 中国工程物理研究院研究生部, 北京 100088)

摘要: 光子沉积能广泛地应用于放射医疗和辐射防护领域。MCNP 程序中 *F8 功能统计的是进出网格的光子与电子能量差。*F8 只能采用真实网格, 计算效率较低。由于光子的能量沉积都是通过次级电子来完成的, 对光子能量沉积的计算可转换为次级电子能量沉积的计算。文中据此给出了一种新的光子能量沉积统计方法, 该方法只统计次级电子能量沉积, 且可以采用虚拟网格计数。新方法若采用真实网格, 计算精度与效率与 *F8 完全一样; 若采用虚拟网格, 新方法计算精度略低, 但几何建模简单, 计算效率较高。

关键词: 能量沉积; X 射线; 蒙特卡罗模拟; 放射医疗

中图分类号: TL99 **文献标识码:** A

1 引言

在放射医疗、辐射防护等领域, 光子的沉积能是一个非常重要的物理量。在临床上, 医生根据沉积能(剂量)在器官中的理论分布来制定精确的放疗计划^[1-4]。在辐射防护中, 根据光子在材料中的沉积能时空分布, 进行材料热力学效应、微喷射等研究, 进而制定相应的加固措施^[5-7]。

蒙特卡罗方法在求解复杂几何结构的粒子输运问题中具有极大的优势。随着计算机技术的飞跃发展, 蒙特卡罗方法在各领域中的应用越来越广泛, 一些大型通用的蒙特卡罗程序相继问世, 并在各领域发挥重要的作用。MCNP 程序^[8]作为其中的佼佼者, 其模拟精度已经通过诸多实验的验证。在辐射防护与放射医疗等领域广泛采用 MCNP 程序进行模拟研究。

MCNP 程序主要采用两种计数方法来计算沉积能, 分别是 F6 和 *F8。其它一些统计量, 比如面注量、体注量等也可以通过 FM 乘子卡来计算沉积能, 但是其本质都和 F6 一样, 即通过粒子注量与响应函数的卷积计算沉积能。

对光子沉积能的计算, F6 假定由光子产生的次级电子能量就地沉积, 因此不关心次级电子的输

运。在多数情况下, 次级电子能量就地沉积的假设是合理的, 因为次级电子能量通常较低, 电子的射程也很短, 在网格远大于次级电子射程的情况下, 这种处理不会对精度带来影响, 却可以大幅度提高计算速度。但是在一些特殊应用领域, 比如精确放疗, 材料抗 X 光热力学效应、微喷射等研究中, 其网格尺度可能达到微米量级^[5-7], 与次级电子射程相当, 次级电子就地沉积能量的假设就显得很粗糙, 使用 F6 会带来较大误差。

*F8 统计则细致考虑了次级电子的输运, 以进出网格粒子的能量差来计算能量沉积:

$$\Delta E = wgt_{in} * E_{in} - wgt_{out} * E_{out}, \quad (1)$$

其中, wgt_{in} 和 wgt_{out} 分别为入射和出射粒子的权重, E_{in} 和 E_{out} 分别为入射与出射粒子的能量。*F8 对光子与次级电子都要作统计, *F8 比 F6 精度高, 但由于涉及电子输运, 计算时间要长很多。

*F8 计数只统计粒子通过网格界面的信息, 不统计网格内的碰撞过程, 因此, 必须有真实定义的网格边界, *F8 才能计数。对于真实网格的粒子输运, 粒子穿过每个界面, 都需要处理在界面上粒子的信息。如果网格数很多, 真实网格计数不但计算效率低, 而且几何建模也比较繁琐。比如在放射医

* 收稿日期: 2010-04-08; 修改日期: 2010-04-24

作者简介: 邱有恒(1978—), 男(汉族), 四川邻水人, 博士研究生, 从事辐射防护研究; E-mail: qiu_youheng@iapcm.ac.cn

疗中, 一张分辨率为 512×512 的头部 CT 有 262144 个网格^[2], 一个人的头部 CT 有 20 张左右。赵攀等^[2]研究了网格合并对计算效率的影响, 林辉等^[3]研究了模体厚度和大小对计算效率的影响, 取得了一些有用的成果。

本文首先介绍了光子、电子与物质相互作用以及能量沉积的过程, 然后在 MCNP 平台上设计了一种新的光子能量沉积统计法 F9。与 *F8 相比, F9 仅统计次级电子能量沉积, 而不直接统计光子能量沉积。*F8 统计的是网格界面光子、电子信息, 而 F9 则统计的是网格内电子碰撞信息。F9 可采用虚拟网格计数法, 避免了繁琐的网格定义, 在保证精度的前提下, 计算效率得到有效提升。

2 物理过程

2.1 光子与物质相互作用

众所周知, 光子与物质相互作用主要有 3 种方式: 光电效应、康普顿散射和对产生。这 3 种作用方式均产生电子。其他反应机制如瑞利散射和光核反应等由于截面很小, 通常不予考虑^[9]。光电效应过程中, 入射光子被吸收, 并发射光电子, 光电子有确定的能量 $E = h\nu - B$, B 为出射电子在原子中的结合能。光电效应还可能伴生特征 X 射线或俄歇电子。无论是特征 X 射线还是俄歇电子, 其能量都很低, 特征 X 射线或荧光光子通过进一步光电效应完全消失。对于康普顿散射过程, 光子将部分能量交给电子后继续输运, 当光子能量较低时以光电效应方式结束。电子对效应是高能光子与物质相互作用的一种主要方式, 光子的能量的一部分 (1.022 MeV) 转换为电子的质量能, 剩余部分转换为电子动能。

由此可见, 光子的能量沉积都是通过次级电子来完成的, 对光子能量沉积的计算可转换为次级电子能量沉积的计算。

2.2 电子能量沉积过程

电子作为带电粒子, 其与物质相互作用方式显著地不同于中子和光子。由于电子受到长程库仑力的作用, 在慢化过程中, 发生碰撞的次数要多得多。比如, 在金属铝中要把能量从 0.5 MeV 慢化到 0.0625 MeV, 中子需要约 30 次碰撞, 光子少于 10 次, 而电子需要 10^5 次^[8]!

电子通过电离、辐射、散射等方式损失能量。电子的次级粒子包括韧致光子、俄歇电子、荧光光子、 δ 电子 (也称击落电子) 等。

由于一个电子的蒙特卡罗模拟历史比中子或光子的计算量大上千倍, 为了减少计算量, 对电子输运普遍采用浓缩历史的方法。其基本思想是: 把物理上真实的随机游动划分为若干能量步, 每一能量步包括多个能量量子步。在每一能量量子步中, 对电子做随机游动跟踪。每一个子步长内的能量损失为

$$\Delta E = \frac{dE}{ds} |_{I} \Delta s + T_e + T_\gamma, \quad (2)$$

其中, T_e 为由电子产生的次级电子的动能, 包括 δ 电子和俄歇电子, T_γ 为次级光子的能量, 包括韧致光子, 荧光光子, $\frac{dE}{ds} |_{I} \Delta s$ 为电子由于激发原子所产生的能量损失, 是电子在一个步长内真正沉积在介质中的能量^[10], 这也是本文方法要统计的量。

3 本文计算方法 F9

3.1 基本原理

从光子能量损失过程可知道, 一个源光子的能量损失最终都体现在次级电子上:

$$E_p = E_B + E_e + E_m + E_{\text{cut}}(p), \quad (3)$$

其中, E_B 为电子结合能, E_e 为电子动能, E_m 为正负电子对质量能, $E_{\text{cut}}(p)$ 为系统设置的光子截断能。正电子通过多次相互作用逐渐损失动能, 当其动能低于电子截止能时, 与静电子发生湮没辐射, 其截止动能沉积下来, 质量能 0.511 MeV 转变为光子动能, 光子继续跟踪, 最终也通过再次一级电子沉积能量。

一个电子从产生到消失, 其能量损失由以下几部分组成:

$$E_e = \sum \frac{dE}{ds} |_{I} \Delta s + \sum T_e + \sum T_\gamma + E_{\text{cut}}(e), \quad (4)$$

其中, $E_{\text{cut}}(e)$ 为电子截断能, 其余几项与式 (2) 相同。MCNP 程序中并没有直接提供电子结合能的统计量, 其值等于光电效应过程中入射光子动能与出射次级粒子 (光电子和荧光等) 动能之差, 结合能是非常小的量, 对结果影响很小。电子的每一次碰撞, MCNP 程序会利用阻止本领计算其能量损失 (不含

韧致光子能量), 从中扣除次级电子、次级荧光能量即可得到式(4)中第一项。韧致光子和次级荧光通过再次一级电子沉积能量。在 MCNP 程序中, 若韧致辐射光子低于光子截断能, 则不产生光子, 只记录电子通过韧致辐射的能量损失, 对此, 需要把该能量统计到电子沉积能中, 否则能量会轻微减少。

对每个源光子更新一次统计量, 对任意网格 j , 以式(5)–(7)统计沉积能均值、方差和误差。

$$\bar{E}(j) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N E(i), \quad (5)$$

$$s^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (E(i) - \bar{E})^2, \quad (6)$$

$$\epsilon = \frac{s}{\bar{E} \sqrt{N}}. \quad (7)$$

如果说 *F8“掩盖”了能量沉积物理过程(仅提供进出网格的能量差), F9 则真实反映了此过程, 对光电作用导致的各种沉积方式均可按需统计, 可为相关的物理分析、材料加固提供帮助。另外, F9 还能用虚拟网格计数, 而 *F8则只能用真实网格。

3.2 虚拟网格计数法

如果模型的网格数量众多, 会对数值模拟带来两方面的不利, 一是构建几何结构十分繁琐; 二是影响计算速度。虚拟网格法则不需要真实定义网格, 对同一个物质区可定义成一个大网格(不规则边界可适当划分小网格)。下面以长方体网格为例, 介绍虚拟网格计数法。

假如真实网格在 X, Y 和 Z 方向上厚度分别为 dx, dy 和 dz , 任意一网格坐标可用 (i, j, k) 表示。若粒子碰撞点坐标为 $P(x^*, y^*, z^*)$, 不妨设 x^*, y^*, z^* 均大于 0, 则 P 点对应的真实网格坐标为

$$\begin{cases} i = \text{int} \frac{x^*}{dx} + 1, \\ j = \text{int} \frac{y^*}{dy} + 1, \\ k = \text{int} \frac{z^*}{dz} + 1. \end{cases} \quad (8)$$

将粒子在 P 点的沉积能记录到对应的网格即可。采用虚拟网格可减少很多判断, 从而提高计算速度。

如果粒子能轻易地跨网格输运, 采用虚拟网格可能会带来一定误差。如图 1 所示, 粒子从 O 点出

发, 在虚拟网格中, 碰撞抽样距离可能为 $|OC|$, 在真实网格中, 由于 $|OC|$ 大于 O 点到网格边界距离 $|OA|$, 抽样碰撞距离改为 $|OA|$ 。假定单位距离能量沉积率为 q , 则两种方法计算沉积能分别为 $q \times |OA|$ 和 $q \times |OC|$ 。由于能量守恒, 在出发网格有差异, 必然在下一个网格也有差异。

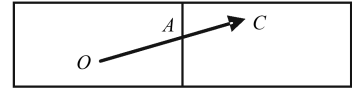


图 1 粒子跨网格处理区别

若要消除上述误差, 可将 $|OA|$ 和 $|AC|$ 段分别统计, 但是这样必然增加许多交点的计算, 其实质就和真实网格一样。由于电子每个能量子步抽取的碰撞距离相对于总射程非常短, 且 MCNP 程序建议最小网格要大于 10 倍能量子步长, 即便有一个能量子步跨网格, 对沉积能分布的影响也不大, 因此, 作上述修正意义不大。

3.3 F9 统计流程框图

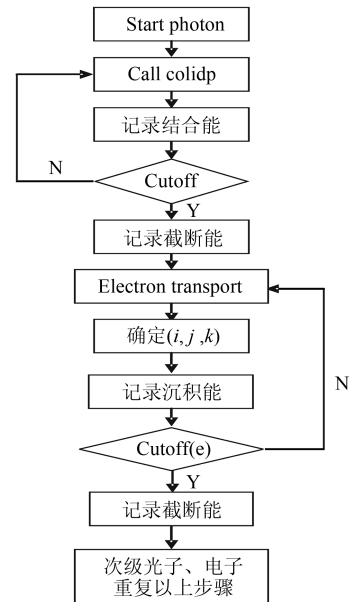


图 2 F9 流程图

F9 是在 MCNP 程序上开发的光子电子能量沉积统计模块, 其流程图见图 2 所示。先进行光子的输运(子程序 colidp), 储存由光子产生的电子并记录结合能, 如果光子被截断则记录截断能, 然后开始电子输运(子程序 electr); 对每一次碰撞点确定其虚拟网格坐标, 并记录相应的沉积能, 若电子被

截断则记录截断能，否则重复电子碰撞。

4 数值实例与分析

本文首先用一维无限模型对 F9 计数进行了能量守恒检验。如图 3 所示，模型材料为水或铝，用以模拟人体组织或抗辐射材料。整个模型分 102 个网格，入射方向上统计 100 个网格，厚度 0.01cm，透射和反射粒子分别在 A 和 B 号网格(均为无限厚)，则所有网格内沉积能之和为源光子动能。

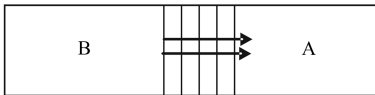


图 3 计算模型

对入射能量分别为 0.5, 2, 5 和 8 MeV 的光子，在所有网格内沉积的总能量完全守恒。极细微的偏差可能是多次散射浮点截断产生的(见表 1)。

表 1 各网格能量 MeV

E_0	H ₂ O	Al
0.5	0.500	0.500
2	2.000	1.999
5	4.999	4.999
8	7.99	7.999

下面以抗辐射领域常见的屏蔽介质铝板^[5-7]作为模拟对象，对 F9 计算的精度和效率进行检验。铝板厚度 1 cm，入射光子能量分别为 0.5 和 2 MeV，网格厚度为 0.001 cm，即 1000 个网格。首先对采用真实网格计数 F9 的精度进行检验，结果见图 4 和图 5。

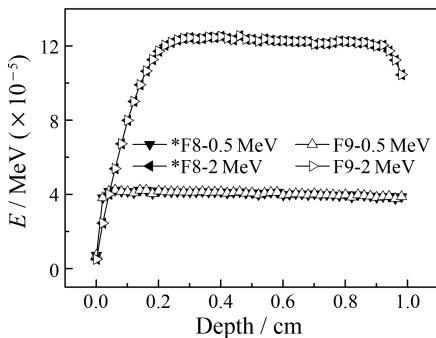


图 4 沉积能分布比较

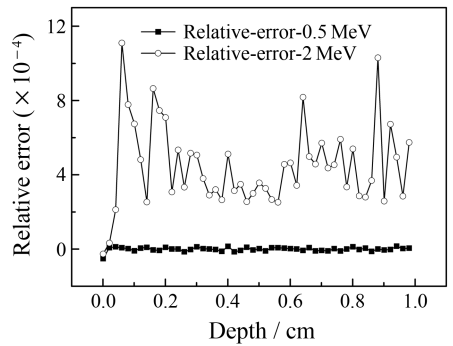


图 5 真实网格 F9 与 *F8 的相对误差

图 4 给出的是归一化的沉积能分布，上方两条曲线对应 2 MeV 光子曲线，下方是 0.5 MeV 光子曲线。由于网格太小，接近于次级电子平均射程，曲线看上去不太光滑，但所有网格的统计误差均在 2.5% 以下(为便于分辨曲线，只取其中 50 个数据点作图，以下同)。以 *F8 的结果作为标准，图 5 给出了 F9 的相对误差，其中 0.5 MeV 的误差非常接近于 0，而 2 MeV 的误差稍大，这可能与高能粒子散射次数多有关，因为 F9 统计的是电子碰撞的每一步过程，而 *F8 则统计的是进出网格的能量差，两者的计算量不一样，但是最大误差也不超过 0.25%，说明 F9 的结果是很精确的。

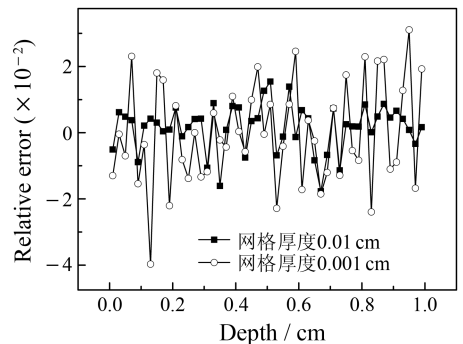


图 6 相对误差

对采用虚拟网格时 F9 的精度与效率进行了检验。入射光子 0.5 MeV，网格厚度(d)分别取 0.001 和 0.01 cm。图 6 给出了相对误差，0.01 cm 网格的相对误差最大值不超过 2%，0.001 cm 网格的相对误差绝大多数网格小于 2%，最大误差不超过 4%，说明采用虚拟网格时 F9 的结果是可信的。

图 7 给出了各自的计算效率 FOM。FOM 定义为统计误差与计算时间乘积的倒数，FOM 越大越好。1 × 10⁻² cm 网格的计算效率明显高于 1 × 10⁻³

cm 网格。采用虚拟网格计数的 F9 在 1×10^{-3} cm 网格中体现了很高的效率, 比 *F8 提高了接近 2 倍。在 1×10^{-2} 模型中 F9 的优势不是特别大, 其原因是总网格数较少(100 个), 显然网格数越多, 虚拟网格计数的优势越大。

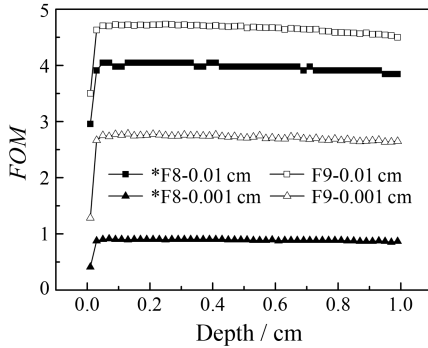


图 7 计算效率比较

5 结论

本文从光电相互作用的物理过程出发, 分析了光子能量沉积的全过程, 提出了一种新的光子能量沉积统计方法 F9。新方法完全以次级电子为统计量, 不涉及光子。F9 真实反映了光子能量沉积的物理过程, 可根据研究需要提供相关统计量。采用真实网格计算的 F9 与 *F8 几乎完全一样; 采用虚拟网格计算的 F9 精度略低, 但可避免繁琐的几何建模, 且计算效率明显提高, 网格越多优势越明显。

参考文献 (References):

[1] Lin Hui, Wu Yican, Chen Yixue. Nuclear Physics Review, 2006, **23**(2): 237(in Chinese).
(林辉, 吴宜灿, 陈义学. 原子核物理评论, 2006, **23**(2): 237.)

[2] Zhao Pan, Chen Yixue, Lin Hui, *et al.* Nuclear Physics Review, 2006, **23**(2): 258(in Chinese).
(赵攀, 陈义学, 林辉, 等. 原子核物理评论, 2006, **23**(2): 258.)

[3] Lin Hui, Chen Dongying, Wu Dongsheng. Nuclear Physics Review, 2008, **25**(2): 154(in Chinese).
(林辉, 陈冬颖, 吴东升, 等. 原子核物理评论, 2008, **25**(2): 154.)

[4] Lin Hui, Xu Liangfeng, Xu Yuanying, *et al.* Nuclear Physics Review, 2007, **24**(4): 299(in Chinese).
(林辉, 许良凤, 徐元英, 等. 原子核物理评论, 2007, **24**(4): 299.)

[5] Wang Tongquan, Wei Xiaodong, Li Hongjie, *et al.* Atomic Energy Science and Technology, 2007, **41**(4): 399(in Chinese).
(王同权, 魏晓东, 李宏杰, 等. 原子能科学技术, 2007, **41**(4): 399.)

[6] Zhao Guomin, Zhang Ruoqi, Tang Wenhui. Explosion and Shock Waves, 1996, **16**(3): 259(in Chinese).
(赵国民, 张若棋, 汤文辉. 爆炸与冲击, 1996, **16**(3): 259.)

[7] She Jinhui, Tang Wenhui. Atomic Energy Science and Technology, 2009, **43**(9): 839(in Chinese).
(余金虎, 汤文辉. 原子能科学技术, 2009, **43**(9): 839.)

[8] Briesmeister J F (Editor). MCNP-A General Monte Carlo Code for N-Particle Transport Code, User's Manual LA-12625-M. Los Alamos: Los Alamos National Laboratory, 2000.

[9] Lu Xiting. Nuclear Physics. Beijing: Atomic Energy Press, 2000, 63-68(in Chinese).
(卢希庭, 主编. 原子核物理. 北京: 原子能出版, 2000, 63-68.)

[10] Du Shuhua. The Computer Simulation of Transport Problem. Changsha: Hunan Science and Technology Press, 1988, 648-662(in Chinese).
(杜书华, 编著. 运输问题的计算机模拟. 长沙: 湖南科学技术出版社, 1988, 648-662.)

A New Calculation Method for Energy Deposition of Photon*

QIU You-heng^{1,2, 1)}, YING Yang-jun¹, WANG Min¹, CHEN Xing-liang¹

(1 Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100094, China;

2 Graduate School of China Academy of Engineering Physics, Beijing 100088, China)

Abstract: Energy deposition distribution is very important to study radiotherapy or radioprotection. The *F8 method of MCNP program counts the energy loss of photon and electron together. Only real grid is

* Received date: 08 Apr. 2010; Revised date: 24 Apr. 2010

1) E-mail: qiu_youheng@iapcm.ac.cn

allowed to *F8, so its computation efficiency is low. This paper gives a new calculation method for energy deposition of photon. Because the energy deposition of photon is accomplished by secondary electron, only electron is counted in the new method. The real collision of the electron is counted by the new method, whereas *F8 only counts the information of particle across the interface. Moreover, virtual grid is allowed in the new method. With real grid, the new method has the same precision and efficiency as *F8. If virtual grid is adopted by the new method, although the precision is slightly down, the efficiency is greatly increased.

Key words: energy deposition; X-ray; Monte-Carlo simulation; radiotherapy