

文章编号: 1007-4627(2011)02-0204-05

提高光子能量沉积计算效率的几种技巧*

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: MCNP 程序提供了计算光子沉积能的两种方法, 分别是 F6 和 *F8。当次级电子射程与网格尺度比较接近时, *F8 的精度比 F6 高, 但计算效率比 F6 低很多。分析比较了几种提高计算效率的技巧, 分别是: 网格大于 10 倍电子射程用 F6; F6 与 *F8 的联合使用; 改变电子能量子步数; 关掉 δ 电子; 次级电子自适应截断等。数值模拟表明, F6 与 *F8 的联合使用以及次级电子自适应截断这两种技巧对精度与效率兼顾得很好。

关键词: 能量沉积; X 射线; MCNP; 放射医疗

中图分类号: TL99

文献标识码: A

1 引言

在放射医学和辐射防护等领域, 沉积能是一个非常非常重要的物理量。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, 根据沉积能在材料中的时空分布, 进行材料热力学效应和微喷射等研究, 进而制定相应的加固措施^[5-7]。

MCNP 程序^[8]作为通用蒙特卡罗程序中的佼佼者, 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学等领域发挥了重要作用。

MCNP 程序主要采用两种方法计算沉积能, 分别是 F6 和 *F8, F6 不能计算电子沉积能, 并假定由光子产生的次级电子能量就地沉积, 故不做次级电子运输。*F8 则细致考虑了次级电子的运输。

*F8 比 F6 精度高, 但是由于电子运输十分耗时, *F8 的计算效率较低。另外, *F8 需要有真实定义的网格界面, 对一些大型计算, 比如脑部放射医疗, 一张分辨率为 512×512 的头部 CT 有 262144 个网格^[4], 一个人的头部 CT 有 20 张左右, 众多的网格定义很繁琐。林辉等^[1-3]针对临床具体模型, 通过数值实例, 讨论了提高计算效率的一些技巧。其主要内容包括: 改变宏观模体大小、厚度, 提高光子、次级电子截断能, 改变次级电子产生数等, 取

得了一些有益的经验。文献[5]提供了一种虚拟网格计数方法, 对改善几何建模有很好的帮助。

本文首先介绍了 F6 和 *F8 两种方法的原理, 分析了各自的优缺点。然后介绍了提高光子沉积能计算的几个技巧: 网格大于 10 倍电子射程采用 F6; F6 与 *F8 的联合使用; 次级电子自适应截断; 关闭 δ 电子; 改变电子能量子步数等, 并用数值实例比较了各自的优缺点。

2 计算方法介绍

在 MCNP 程序中, F6 的计算公式为

$$F6 = \frac{\rho_a}{\rho_g} \int_v \int_E H(E) \sigma_t \Phi(\mathbf{r}, E, t) dE dt \frac{dV}{V}, \quad (1)$$

其中, ρ_a 和 ρ_g 分别为核子密度与质量密度, σ_t 为微观总截面, Φ 为注量(或通量), V 为体积, $H(E)$ 为响应函数:

$$H(E) = E - \sum_{i=1}^3 p_i(E) \bar{E}_{out}(E), \quad (2)$$

$p_i(E)$ 是入射能量为 E 的光子发生第 i 种反应的概率, $i=1$, 为康普顿散射, $\bar{E}_{out}(E)$ 是入射光子能量和入射角度的函数; $i=2$, 为对产生, $\bar{E}_{out}(E) = 2m_0c^2 = 1.022016 \text{ MeV}$; $i=3$, 为光电效应, $\bar{E}_{out}(E) = 0$ 。

* 收稿日期: 2010-04-27; 修改日期: 2010-05-11

* 基金项目: 武器装备预研基金资助项目(9140A11060310ZW09)

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

F6 实质上是体注量(通量)、宏观截面、响应函数 3 者的卷积,其核心还是体注量的计算。F6 假定由光子产生的次级电子能量就地沉积。在网格远大于次级电子射程的情况下,这种假设不会对精度带来影响,却可以大幅度提高计算效率。但是如果网格尺度与次级电子射程相当,甚至小于射程时,就地沉积假设会带来较大误差。

*F8 考虑了次级电子的输运,以进出网格界面光子和电子的能量差来计算沉积能:

$$\Delta E = wgt_{in} E_{in} - wgt_{out} E_{out}, \quad (3)$$

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、次级电子、由次级电子产生的再次一级粒子等都要作统计。

*F8 具有很高的精度,也是一种非常简便的统计方法,但是由于电子输运十分耗时,*F8 计算效率比 F6 低得多。

3 提高光子沉积能计算效率的技巧

在工程应用上,不同的应用背景对计算精度与计算效率的需求不同,因此,光子沉积能的计算不一定需要采用考虑了所有次级粒子输运的 *F8 计数。下面给出的几种技巧各有特点,可根据具体情况选择使用。

3.1 网格尺度大于 10 倍以上电子射程可用 F6

对于网格众多的模型,F6 的计算效率通常比 *F8 高 1 个量级以上,因此 F6 在实际应用中比 *F8 使用频率高很多。虽然 F6 不考虑次级电子输运,但如果网格尺寸大于 10 倍以上电子射程,则有理由认为绝大多数次级电子能量就地沉积,使用 F6 不会带来太大误差。在实际应用中,10 倍电子射程这个条件也很容易满足,比如 200 keV 的电子在密度 1 g/cm^3 介质中射程约 0.042 cm ,若网格最小尺度为 0.5 cm ,则可使用 F6 来计算。次级电子平均能量可通过简单试算获得。同时,MCNP 程序默认输出各种能量电子在模型相关介质中的射程,通过插值即可获得次级电子平均能量对应的射程。

3.2 F6 与 *F8 的联合使用

事实上,只要网格大于 1 倍电子射程以上,F6 与 *F8 的差别就主要体现在入射面和出射面附近的

网格。如图 1 所示,在光子入射面与出射面附近的网格,比如第 1 个网格产生的电子,有可能逃逸出系统,带走相应的能量,造成边界处网格 F6 的结果大于 *F8。在离开表面的中部区域,即便电子跨网格输运,也仅仅在局部改变沉积能分布,对结果影响不大。因此,对于网格大于 1 倍电子射程的模型,可在自由表面附近 5 倍射程的网格用 *F8,其余网格用 F6。将 F6 计数区域的电子重要性设置为 0 即可实现上述联合统计功能。如果入射能谱为连续谱,低能光子会优先沉积在入射表面区域,可根据实际情况适当增加表面附近使用 *F8 的网格数。

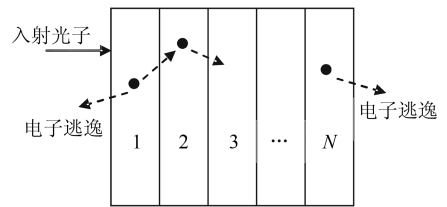


图 1 电子沉积能错位分布示意图

3.3 *F8 关掉 δ 电子

电子碰撞极易产生新的电子,包括俄歇电子和 δ 电子等。在一个碰撞步长内,电子的能量损失可由下式确定:

$$\Delta E = \frac{dE}{ds} \Big|_l \Delta s + T'_e + T_\gamma, \quad (4)$$

其中, T'_e 为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,包括韧致光子和荧光光子, $\frac{dE}{ds} \Big|_l \Delta s$ 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。由低能电子产生的 δ 电子能量很低,因为按照 Moller 理论, δ 电子能量不会高于入射电子能量的一半。因此不跟踪 δ 电子,直接用阻止本领确定其能量损失引起的误差不大,如果考虑统计起伏,可以按 Landan 分布抽样确定 $\Delta E^{[9]}$ 。关闭 δ 电子的输运通常可提高计算效率。

3.4 *F8 改变能量子步数

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方法^[9]。其基本思想是,把真实物理上的随机游动划分为若干能量步,每一能量步包括多个能量子步。在 MCNP 程序中,能量步的

划分依据是

$$E_{n-1} - E_n = - \int_{s_{n-1}}^{s_n} \frac{dE}{ds} ds, \quad (5)$$

其中 dE/ds 是单位长度总阻止本领，一般取 $E_n/E_{n-1}=0.917$ ，即每一能量步损失 8.3% 的能量。ETRAN 程序和 MCNP 程序进一步将能量步分解为若干能量量子步，电子角散射以及次级粒子的产生都在能量量子步上进行^[8]。例如，能量步长度为 s_0 ，电子在介质中的能量量子步数为 m ，则能量量子步长为 s_0/m 。 m 仅取决于材料的平均原子序数 Z ，MCNP 程序根据经验确定了各种原子序数对应的 m 值。

MCNP 程序建议网格尺度最小要大于 10 倍能量量子步长，如果网格太小，可通过 ESTEP 卡增大 m 值。由于 ESTEP 卡只能增大 m 值，不能降低 m 值，只能在源程序中修改。方法如下：假定程序默认的能量量子步数为 m_0 ，某能量的电子对应的子步长为 s ，现将子步数改为 m ，则对应的子步长为 $(s*m_0)/m$ 。

显然， m 值越大，精度越高，计算时间越长，反之亦然。

3.5 *F8 自适应截断次级电子

从电子运输的特点可知，提高电子截断能可以大幅度提高计算效率，但是提高截断能可能会降低计算精度。关于如何确定电子截断能，目前没有统一的标准。笔者提出了一种自适应截断方法：假定电子在网格中的剩余总行程为 R_{max} ，电子到网格边界的最短距离为 D_{min} ，若 $R_{max} \leq D_{min}$ 则认为电子肯定不能逃出此网格，终止该电子运输。自适应方法可以尽可能地兼顾计算精度与效率，是一种非常实用的截断技巧，适用于各种模型，全自动截断，无需人为判断^[10]。

4 数值实例

计算模型采用抗辐射领域常见的一维圆柱模型，介质为 Al，半径 50 m，厚度 1 cm，入射光子是以圆柱轴为中心，半径 0.1 cm 的平行光子束，能量 0.5 MeV，统计圆柱轴向不同深度处光子能量沉积。本模型中，次级电子射程约 0.01 cm。首先网格采用 0.1 和 0.01 cm，即大约 10 倍和 1 倍电子射程，比较 F6 与 *F8 的精度(见图 2 和图 3)。

从图 2 和图 3 可见，F6 的结果比较平滑，因为

F6 主要反映的是能注量(能量与注量的乘积)的分布，*F8 的结果有一定起伏，这是因为电子跨网格导致错位分布。F6 与 *F8 的主要差别体现在入射面附近的网格和出射面的网格。以 *F8 的结果为精确解，图 2 中第一个网格相对误差最大，但也在 10% 以内，其余点相对误差均在 2% 以内。可见，当网格大于 10 倍电子射程时，采用 F6 替代 *F8 可以接受。图 3 中有 3 个网格相对误差超过 10%，说明网格与电子射程相当的模型，在入射面和出射面附近，F6 的精度太低。在上述两个模型中，F6 的计算效率比 *F8 高约 300—500 倍，因此，若能处理好入射面与出射面附近网格的相对误差，使用 F6 的优势很明显。图 4 至图 7 均采用 0.01 cm 网格，比较小网格下几种技巧对精度和效率的影响。

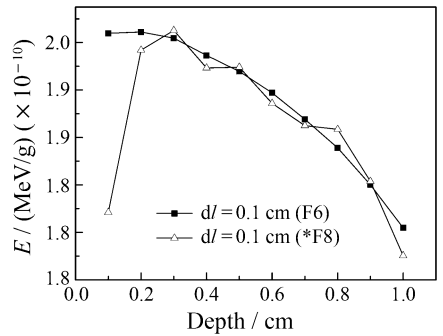


图 2 dl=0.1 cm 沉积能分布比较

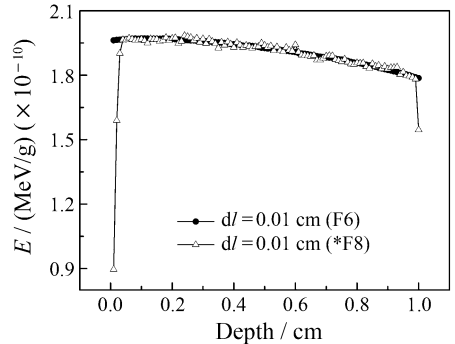


图 3 dl=0.01 cm 沉积能分布比较

图 4 给出了联合计算模式下相对误差，仅在前 4 个网格和最后一个网格采用 *F8，其余网格采用 F6。各网格相对误差均在 2% 以内，计算同样的样本数，联合计算时间仅为纯 *F8 的 2.6%。可见，采用联合网格模式对计算精度和效率兼顾得很好。

图 5 给出了关掉 δ 电子引起的相对误差，基本在 2% 以内，平均每个网格的计算效率提高 2.28 倍。虽然通过关掉 δ 电子对计算效率的提升不如联

合网格模式，但是这种方式使用方便。

技巧最方便，适合各种模型，无需人为判断。

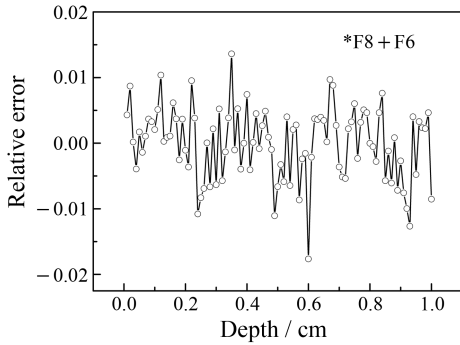


图 4 F6 与 *F8 联合计算的相对误差

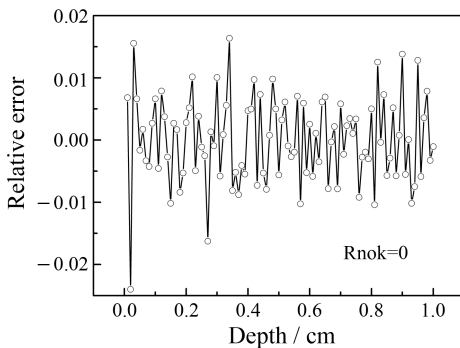


图 5 关掉 δ 电子的相对误差

对介质 Al, MCNP 程序默认的电子能量量子步数 $m=5$, 现分别考虑 m 值增大 ($m=8$) 和 m 值降低 ($m=3$) 对精度与效率的影响。从理论上讲, m 值越大精度越高, 计算效率越低。以 $m=5$ 的结果作为基准, 图 6(a) 给出了 $m=3$ 和 8 的相对误差, $m=8$ 与 5 之间有一定偏差, 当然 $m=8$ 的结果更精确。 $m=3$ 在前几个网格和最后一个网格有较大误差。图 6(b) 给出的是各自计算效率 FOM (计算时间与统计误差乘积的倒数), FOM 越大越好。 $m=3$ 的 FOM 提升了约 60%, $m=8$ 降低了约 13%。笔者曾尝试采用联合 m 值的模式, 即将入射面和出射面附近的 5 个网格取正常值 $m=5$, 中间部分取 $m=3$, 则出现过渡区相对误差较大的现象。总之, 通过增大 m 值可以提升精度, 降低 m 值可以有限提升效率, 但效率提升幅度不大, 且精度降低很明显, 不推荐使用降低 m 值来提高效率。

图 7 给出了采用自适应截断电子技巧对误差和效率的影响, 相对误差不超过 0.6%, 计算效率提高约 3.5 倍。这是几种技巧中精度保持最好的方法, 计算效率的提升也较为明显。在使用上, 这种

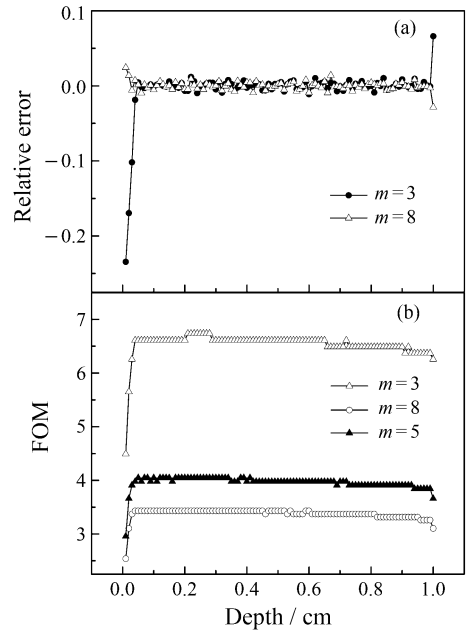


图 6 改变 substep 数的相对误差与计算效率

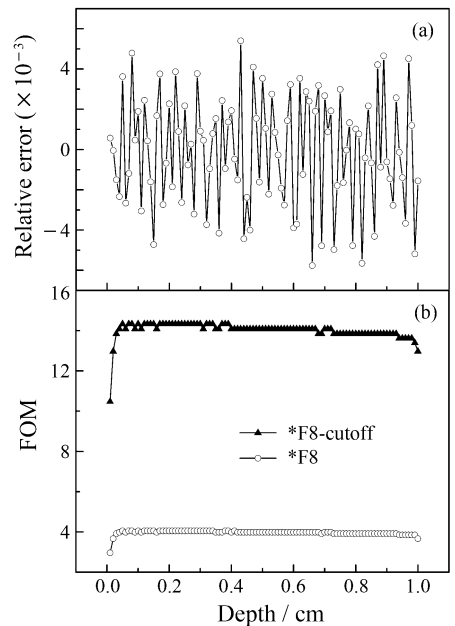


图 7 采用自适应截断后的相对误差与计算效率

虽然本算例采用了简单的单介质模型, 但本文提到的几种技巧对多介质模型同样适用。关掉 δ 电子与自适应截断次级电子技巧, 对模型无特殊要求。改变能量量子步数这种技巧对提升精度有帮助, 对提升计算效率无明显帮助。每种介质对应默认的能量量子步数, 在多介质模型中仍可通过提升能量量子步数提高精度。剩下的两种技巧均与材料中电子射

程有关,可通过简单试算确定每种介质(或者同种介质不同密度)的电子射程,进而确定用哪种技巧。

5 结论

本文分别介绍了几种提升光子能量沉积计算效率的几种技巧。降低量子步数对效率提升不大,但精度下降明显,不推荐使用。关闭 δ 电子对效率提升比较明显。要使计算效率最大化,应该结合电子射程,尽量使用 F6 与 *F8 的联合模式。自适应电子截断方法在有效提升计算效率的情况下,保证了很高的精度。在工程应用上,应根据不同的应用背景,选择合适的技巧。

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] Lin Hui, Chen Dongying, Wu Dongsheng, *et al.* 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.)
- [3] 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.)
- [4] 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.)
- [5] Qiu Youheng, Ying Yangjun, Wang Min, *et al.* Nuclear Physics Review, 2011, **28**(1): 97(in Chinese).
(邱有恒, 应阳君, 王敏, 等. 原子核物理评论, 2011, **28**(1): 97.)
- [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 JF(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] Du Shuhua. The Computer Simulation of Transport Problem. Changsha: Hunan Science and Technology Press, 1988, 648-662(in Chinese).
杜书华(编著). 输运问题的计算机模拟. 长沙: 湖南科学技术出版社, 1988, 648-662.
- [10] Qiu Youheng, Ying Yangjun, Wang Min, *et al.* Chinese Journal of Computational Physics, 2011, **28**(3): 411(in Chinese).
(邱有恒, 应阳君, 王敏, 等. 计算核物, 2011, **28**(3): 411.)

Several Techniques on Increasing Computation Efficiency of Photon Energy Deposition^{*}

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: F6 and *F8 are two methods to calculate energy deposition of photon by MCNP program. If the dimension of grid is almost the same long as the range of secondary electron, the precision of *F8 is higher than that of F6, but the efficiency of F6 is greatly higher than that of *F8. This paper presents five techniques to increase the efficiency, namely: F6 is use to the model with grid dimension bigger than 10 ranges of secondary electron; combination of F6 and *F8; change the substeps of electron; turn off knock on electron; self-adaption cutoff secondary electron. The two techniques, combination of F6 and *F8, self-adaption cutoff secondary electron, can provide a good precision and efficiency.

Key words: energy deposition; X-rays; MCNP; radiotherapy

* Received date: 27 Apr. 2010; Revised date: 11 May 2010

* Foundation item: Armament Pre-research Foundation(9140A11060310ZW09)

1) E-mail: qiu-youheng@iapcm.ac.cn E-mail: wenxq@dlut.edu.cn