



ارائه کد جدید مونت کارلو MCRes برای محاسبه ترابرد پرتوهای گاما در ماده

محسن، شریف زاده*؛ حسین، خلفی^۱؛ حسین، آفریده^۲؛ رضا، قلی پور^۲

۱- سازمان انرژی اتمی، پژوهشگاه علوم و فنون هسته ای، پژوهشکده کاربرد پرتوها

۲- دانشگاه صنعتی امیرکبیر، دانشکده مهندسی انرژی و فیزیک

چکیده:

در این تحقیق یک الگوریتم ساده مونت کارلو برای شبیه سازی ترابرد پرتوهای گاما در محدوده انرژی 1MeV - ۰ در ماده ارائه شد. این الگوریتم امکان ردگیری پرتوهای گاما و نیز فوتونهای مرئی را برای محاسبه بسیاری از کمیت های مطلوب نظیر انرژی گداخته شده در ماده، سهم فوتونهای مرئی تولیدی در سوسوزن و کسری از آنها که امکان رسیدن به فوتوکاتد را دارند و همچنین رزولوشن انرژی مربوط به فرآیند تکثیر در PMT فراهم می کند. در پایان، سهم فوتونهای مرئی تولیدی بازای انرژی های مختلف برای سوسوزن NaI(Tl) محاسبه و با مقادیر منتشر شده در مقالات ISI مقایسه شده است.

کلمات کلیدی: کد محاسباتی مونت کارلو، کد مونت کارلوی MCRes، ترابرد پرتوهای گاما، سوسوزن NaI(Tl)

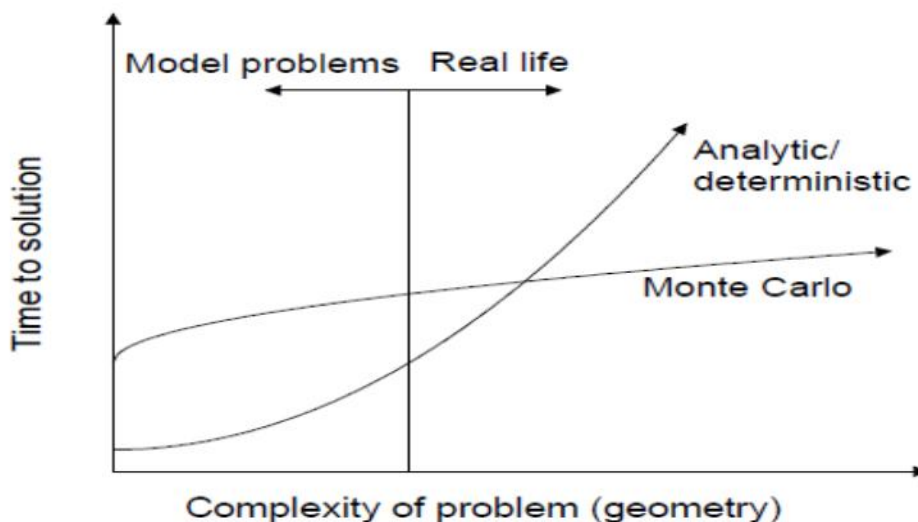
مقدمه:

اگر مونت کارلو وجود نداشت، انگیزه ای بسیار قوی برای خلق آن وجود می داشت! تولیدات در حوزه علوم پایه و کاربردی به مثلث اندازه گیری، تئوری و مونت کارلو وابسته است. به مونت کارلو اغلب به عنوان یک رقیب برای سایر روش های محاسباتی ماکروسکوپیکی نگاه می شود که ما آنها را روش های قطعی و یا تحلیلی می نامیم. یک محقق حرفه ای باید ابتدا این سوال را از خود بپرسد که "من چه کاری را می خواهم انجام دهم؟" و سپس این که "کدام راه حل، کارآمدترین برای انجام آن کار است؟". برخی اوقات جواب صحیح "یقینی" و گاهی "مونت کارلو" خواهد بود. موفق ترین دانشمندان خود را به بیش از یک مسیر برای حمله به یک مسئله مجهز می کنند [۱].

در روش های مونت کارلو به فرآیند پردازش ترابرد یک ذره به صورت آماری نگاه می شود و تعداد بسیار زیادی از تاریخچه های مستقل مربوط به ذرات، توسط کامپیوتر شبیه سازی شده و پس از میانگین گیری، مقادیر مربوط به یک کمیت مورد نظر برآورد می شود. اما در روش های یقینی به فرآیند پردازش ترابرد ذره به صورتی که توسط معادله ترابرد بولتزمن بیان می شود نگریسته می شود که در آن، این معادله به سیستمی متشکل از چند (اغلب بزرگ) معادلات جبری تقسیم می شود و آنگاه این سیستم معادلات حل شده و مقدار میانگین مربوط به کمیت مورد نظر محاسبه می شود. چنانچه هندسه و سطح مقطع های مربوط به یک سیستم فیزیکی دقیقاً معلوم باشد، مقادیر محاسباتی مونت کارلو صرفاً دارای خطای آماری خواهند بود که به صورت $N^{-1/2}$ به صفر میل می کنند. که N تعداد تاریخچه های ذرات شبیه سازی شده است. اما مقادیر محاسباتی



در روش های یقینی فقط دارای خطای ناشی از برش متغیر هاست که به نحوه گسسته سازی و ابعاد شبکه هایی که برای متغیرهای وابسته به فضا، زاویه و انرژی انتخاب شده اند بستگی دارد [۲]. در واقع وقتی یک مسئله دارای ابعاد بزرگتر شده و پیچیده تر می گردد، آنوقت است که مزیت استفاده از روش مونت کارلو آشکار می شود. این موضوع در شکل شماره (۱) نشان داده شده است.



شکل شماره ۱- مدت زمان اجرای برنامه به روش مونت کارلو نسبت به روش تحلیلی [۱].

برهمکنش بین یک پرتو گاما با یک تک اتم از قوانین کاملاً مشخصی تبعیت می کند. یک پرتو ممکن است در نتیجه برهمکنش فوتوالکتریک با اتم های ماده کاملاً جذب شود، یا در اثر برخورد کامپتون با الکترون های مداری پراکنده شده و تنها درصدی از انرژی خود را به جای بگذارد و یا در برخورد با اتم ها تبدیل به یک زوج الکترون-پوزیترون شده و نابود گردد. در هر حال آنچه مهم است آنست که اثر نهایی ای که این پرتوها در عبور از ماده برجای می گذارند عمدتاً نتیجه تعداد زیادی برخورد است که تا قبل از خروج از ماده و یا جذب کامل در ماده، انجام داده اند.

روش کار:

در ابتدا سطح مقطع برهمکنش را برحسب انرژی گاما، چگالی و عدد اتمی هدف از فرمولاسیون های تجربی و معتبر بدست آورده شد [۳].

$$\tau_{pe} = \frac{0.602 \rho z^4 (-0.00003 z^2 + 0.0046 z + 1.02)}{(0.0055 z + 2.072)} \sum_{n=i}^4 \frac{(a_n + b_n z) E^{-p_n}}{1 + c_n z} \quad (1)$$

$$\tau_c = \frac{0.148 \rho}{(0.0055 z + 2.072)} \int_0^\pi \left(\frac{1 + \cos(\theta)^2 + \frac{E^2 (1 - \cos(\theta))^2}{0.522 - 0.261 \cos(\theta)}}{(1 + 1.956947162 E (1 - \cos(\theta)))^2} \right) \cdot \sin(\theta) d\theta$$

(۲)

کمیت های ثابت a_n ، b_n ، c_n و p_n موجود در معادله (۱) در جدول شماره (۱) آورده شده اند [۳].

جدول شماره ۱- مقادیر ثابت های موجود در معادله (۱)

n	a_n	b_n	c_n	p_n
۱	$۱,۶۲۶۸e-۹$	$-۲,۶۸۳e-۱۲$	$۴,۱۷۳e-۲$	۱
۲	$۱,۵۲۷۴e-۹$	$-۵,۱۱۰e-۱۳$	$۱,۰۲۷e-۲$	۲
۳	$۱,۱۳۳۰e-۹$	$-۲,۱۷۷e-۱۲$	$۲,۰۱۳e-۲$	۳,۵
۴	$-۹,۱۲e-۱۱$.	.	۴

در ادامه پارامترهایی که باید به صورت تصادفی مقداردهی شوند شامل محل ورود ذره به ماده (\vec{X})، مسافت پیموده شده تا نخستین برخورد (s) ، مشخص نمودن اینکه ذره پس از طی این مسافت در ماده است یا اینکه از آن خارج شده است ، نوع برهمکنش ذره با ماده (جذب یا پراکندگی) و تکرار این فرایند تا زمانی است که ذره کاملاً جذب شود و یا از ماده خارج گردد. در مرحله اول به یک مکانیسم تولید عدد تصادفی نیاز بود که از دستور rand در فضای نرم افزار MATLAB استفاده شد و در مرحله بعدی به بازنویسی توابع توزیع تجمعی (cdf) برای متغیرهای بالا و مساوی قرار دادن آنها در هر مرحله از کار با مقدار عدد تصادفی تولیدی در آن مرحله پرداخته شد. تنها فرض حاکم بر الگوریتم ، در هندسه ماده هدف است که به صورت یک استوانه متعامد در نظر گرفته شد. توابع توزیع تجمعی مربوط به متغیرهای دخیل در مسئله عبارت اند از :

$$X = \begin{bmatrix} \rho \sqrt{r} \cos(2\pi r) \\ \rho \sqrt{r} \sin(2\pi r) \\ 0 \end{bmatrix} \quad (۴)$$

$$s = \left| \frac{\ln(r)}{\mu} \right| \quad (۵)$$

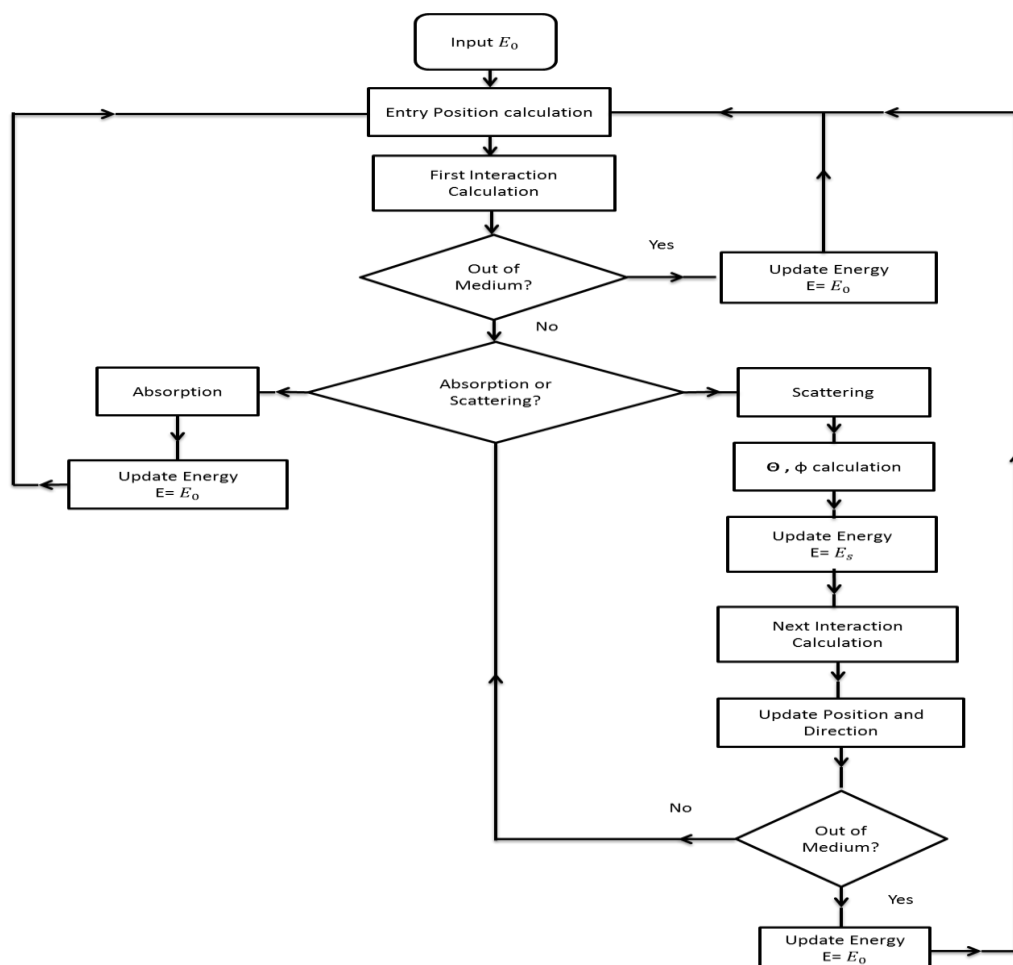
$$\varphi = 2\pi r \quad (۶)$$



(۷)

$$\frac{\left(\int_0^\theta \frac{\left(1 + \cos(\theta)^2 + \frac{E^2 \cdot (1 - \cos(\theta))^2}{0.261 \cdot (2 - \cos(\theta))} \right)}{\left(1 + \frac{E}{0.511} \cdot (1 - \cos(\theta)) \right)^2} \cdot \sin(\theta) d\theta \right)}{\left(\int_0^\pi \frac{\left(1 + \cos(\theta)^2 + \frac{E^2 \cdot (1 - \cos(\theta))^2}{0.261 \cdot (2 - \cos(\theta))} \right)}{\left(1 + \frac{E}{0.511} \cdot (1 - \cos(\theta)) \right)^2} \cdot \sin(\theta) d\theta \right)} = r$$

در معادله (۷) از روش حل عددی Fixed-Point Iteration برای بدست آوردن θ استفاده شد. در ادامه الگوریتم مونت کارلو بر اساس معادلات بالا نوشته شد و در فضای MATLAB به صورت یک script به اجرا گذاشته شد. در شکل شماره ۲) فلوجارت مربوط آورده شده است.

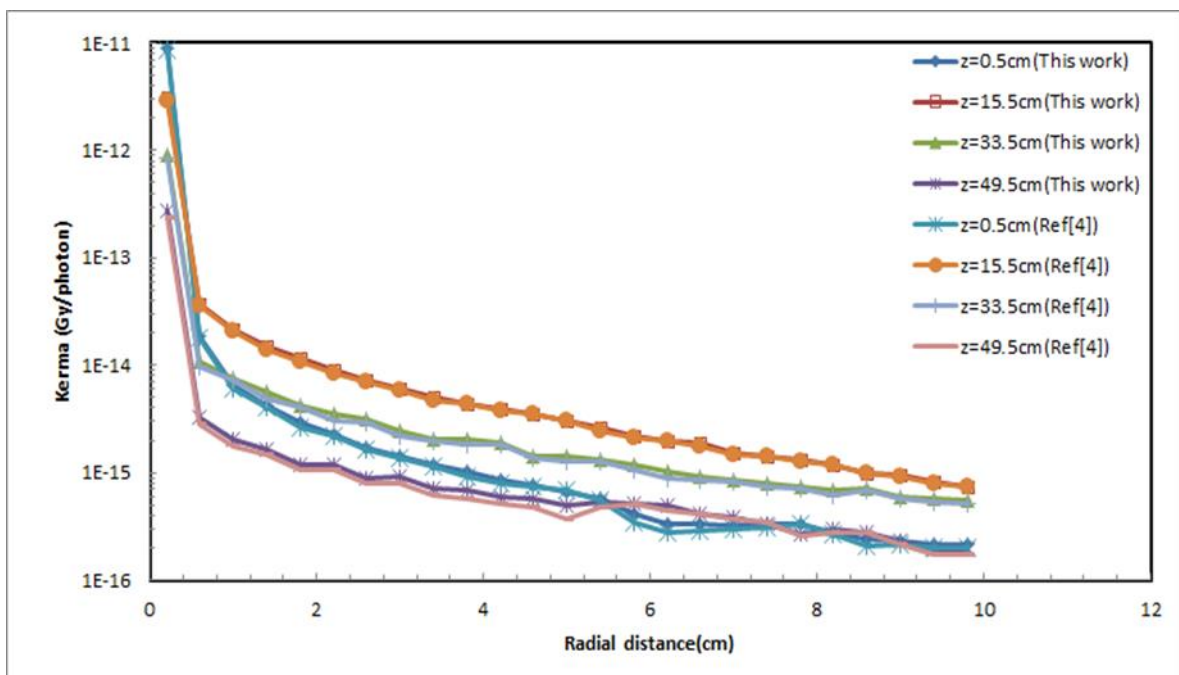


شکل شماره ۲- فلوجارت مربوط به الگوریتم مونت کارلو کد MCRes



نتایج :

در این مرحله برای اعتبار بخشیدن به کد MCRes، کرما برای باریکه ای از پرتوهای گامای ۱MeV که در امتداد محور استوانه ای از جنس آب به شعاع ۱۰cm و ارتفاع ۵۰cm و به $۰.۵cm^2$ از قاعده آن فرود می آیند حساب شد. از آنجا که کرما انرژی انتقال یافته در واحد حجم ماده است، استوانه بالا به ۱۲۵۰ سلول متقارن حول محور استوانه با ابعاد $\Delta r = ۰.۴cm$ و $\Delta z = ۱cm$ تقسیم و انرژی به جای گذاشته شده در واحد جرم و بازی یک ذره گاما، بصورت تابعی از r و برای $z = ۰.۵, ۱۵.۵, ۳۳.۵, ۴۹.۵cm$ و با تاریخچه $۱۰^8 * ۵$ ذره محاسبه و با داده های مربوط به مرجع [۴] مقایسه شد.



شکل شماره ۳- تغییرات کرما در آب برحسب فاصله شعاعی برای عمق های مختلف

بحث و نتیجه گیری :

همانطور که از شکل شماره (۱) پیداست نتایج مربوط به اجرای کد MCRes به خوبی با نتایج مربوط به مرجع همخوانی دارد که نشان دهنده صحت شبیه سازی و عملکرد کد می باشد. استفاده از این کد در محاسبات دزیمتری و طیف سنجی به عنوان یک کد مونت کارلوی ساده و سریع توصیه می شود.



مراجع :

۱-A. F. Bielajew, Fundamentals of the Monte Carlo method for neutral and charged particle transport, The University of Michigan, ۱-۸, ۱۹۹۸-۲۰۰۱.

۲-E. W. Larsen, Hybrid Monte Carlo-Deterministic Methods for Neutral Particle Transport Problems, The University of Michigan, ۱-۸.

۳-J. H. Hubbel, Photon Cross Section, Attenuation Coefficients, and Energy Absorption Coefficients Frm ۱۰ keV to ۱۰۰ GeV, ۲۴-۳۳, ۱۹۶۹.

۴-F. Arqueros and G. D. Montesinos, A simple algorithm for the transport of gamma rays in a medium, Am. J. Phys. ۷۱(۱), ۳۸-۴۵, January ۲۰۰۳.