

计算电子射程的直接蒙特卡罗方法

邱有恒^{1,2}, 应阳君¹, 李茂生¹, 王敏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: 电子射程的计算通常采用吸收曲线线性外推法, 但线性外推法在计算与应用上有一定缺陷。采用相对强度衰减至一定比例的定义法也可用来确定射程。本文首先对定义法的数值模拟方案提出改进, 然后研究提出计算电子射程的直接蒙特卡罗模拟方法。直接蒙特卡罗模拟方法不需计算注量, 直接以射程为统计量, 该方法使用方便, 不受电子能量、衰减介质厚度的限制, 具有很高的计算精度和计算效率, 还可给出射程的区间估计。

关键词: 射程; 直接蒙特卡罗方法; 电子; 辐射防护

中图分类号: O571.33 **文献标志码:** A **文章编号:** 1000-6931(2011)05-0513-05

Direct Monte-Carlo Method for Calculation of Electron Range

QIU You-heng^{1,2}, YING Yang-jun¹, LI Mao-sheng¹, WANG Min¹

(1. *Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100094, China;*
2. *Graduate School of China Academy of Engineering Physics, Beijing 100088, China*)

Abstract: The linear extrapolate method that widely used to calculate the range of electron has some shortcomings in the calculation and application. In the reference document, the range was defined as the thickness of shielding media, where relative intensity is 0.01. First, the modification to the numerical method of the reference document was given, and then a new calculation method for electron range was given. The range of electron was counted directly by direct Monte-Carlo method, whereas electron fluence was not concerned. The new method can easily calculate the range of electrons with various energies, without the restriction of thickness of shielding media. The calculation precision and efficiency of new method are very good. It also can provide the confidence interval of range.

Key words: range; direct Monte-Carlo method; electron; radio protection

荷能带电粒子从进入物质到被完全吸收, 在其入射方向上穿过的最大距离为该粒子在物质中的射程^[1]。电子射程在辐射防护、加速器

靶设计等领域有广泛的应用^[2-5]。由于电子易被散射, 并非同质子等重带电粒子一样具有确定的平均射程和直线路径。单能电子的射程变

化很大,其歧离可达 10%~15%^[2],这给电子射程的理论计算和实验测定带来较大不确定性。

目前,对电子射程的实验测量与理论计算主要采用吸收曲线线性外推法^[2-4]。外推法在使用与计算上有一定缺陷:在外推射程处仍可能残留较强的电子束,在辐射防护中使用外推射程可能带来不安全;由于电子射程的不确定性,电子衰减曲线的线性关系通常并不好,选择外推起止段有较大不确定性。文献[4]提出利用相对强度衰减 99% 来确定射程的方法,该方法在计算上减少了不确定性,在辐射防护中也有实用价值,但其数值模拟需适当改进。

本文针对文献[4]中的数值模拟方案提出改进措施,提出一种新的计算电子射程的直接蒙特卡罗模拟方法,并进行数值分析。

1 电子射程的计算方法

1.1 定义法

文献[3]给出测量电子衰减曲线的实验装置。根据实验装置原理,文献[4]设计了图 1 所示的数值模拟模型。靶区为直径 10 mm 的圆形平面靶,整个靶区划分为 100 个厚度为 0.1 mm 的圆形片层。图 1 中,用黑色填充的片层为重金属薄层(50 个),用斜线填充的片层为真空薄层(50 个)。

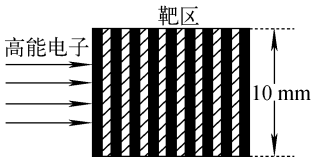


图 1 数值计算模型

Fig. 1 Model of numerical calculation

文献[4]先将模型中所有材料设为真空,用 MCNP^[6]程序计算每个真空薄层的初始电子注量 $\Phi_0 = 1.273 \text{ cm}^{-2}$,然后计算图 1 中每个真空薄层电子注量 Φ_{ci} 。将 $\Phi_{ci}/\Phi_0 = 0.01$ 作为确定射程的边界条件,即多于 99% 的入射电子被吸收,射程为 i 个 0.1 mm 厚钨片的总厚度 d ,即 $d = i \times 0.1 \text{ mm}$ 。对不同能量电子需调节衰减片的厚度。文献[4]将这种计算方法称为定义法。

文献[4]中给出了几个能量电子射程算例,并用文献[6]中提供的数据来验证其模拟精度。文献[4]中用线性外推法给出的结果较定义法小很多,是由于外推法对非线性衰减部分的忽略。定义法与文献[6]结果较接近,但仍小 10% 左右,这是由于文献[6]中数据来源于文献[7],而文献[7]的数据是利用阻止本领来定义的(式(1)),由于电子并非走直线路径,由式(1)定义的“射程”(其实是电子的总行程)往往大于实际射程。

$$r_0(T_0) = - \int_0^{T_0} \frac{dT}{L(T)} \quad (1)$$

式中: T_0 为能量, MeV; $L(T)$ 为能量损失率, MeV/cm; r_0 为射程, cm。

MCNP 程序在输出含电子的运输结果中会给出每种材料 133 个能点阻止能以及对应的“射程”,无需另外计算。经检验,文献[6]中数据与 MCNP 程序输出完全一致。

1.2 对定义法的改进

用电子流替代注量计算相对强度更精确。文献[4]中源电子注量可通过图 2a 认识。假如 1 个源电子(MCNP 结果是归一到 1 个源粒子)垂直入射到真空薄层中,则源强(单位面积通过粒子数)等于面积的倒数,即 1.273 cm^{-2} ;利用 MCNP 计算初始体注量,由于介质为真空,电子的径迹长度必等于薄层厚度 0.1 mm,故薄层初始体注量为:

$$\Phi = \frac{T_1}{V} = \frac{\Delta l}{s \Delta l} = \frac{1}{s} = 1.273 \text{ cm}^{-2} \quad (2)$$

式中: Φ 为注量, cm^{-2} ; T_1 为径迹长度, cm; V 为体积, cm^3 ; Δl 为平板厚度, cm; s 为面积, cm^2 。上述源注量在数值上虽与源强相等,单位也相同,但其物理含义并不相同。反应堆理论中体注量为粒子在单位体积中平均径迹长度,并非单位面积粒子数^[8]。平行源粒子束垂直入射,源注量刚好与单位面积通过粒子数相等;但经过输运后,飞行方向各异,体注量不再等于单位面积通过粒子数。

通过图 2b 来认识采用注量可能带来的误差。假如源粒子在某处发生一次散射后以 45° 出射,则粒子在第 2 个、第 3 个薄层中径迹长度变为 $\Delta l/\cos 45^\circ$ 。而薄层体积不变,体注量为 1.8 cm^{-2} (可用 MCNP 程序验证)。此时,出射

粒子数目仍为源粒子个数,但将此体注量与源注量相比,相对强度为 1.414。由于电子与介质的散射概率很大,经散射后在每个薄层中的径迹长度必大于等于薄层厚度,这就是文献[4]中相对强度在局部区域大于 1 的原因之一(另一个原因是背散射)。可见,用注量之比来计算相对强度偏大,衰减变慢,射程偏大。当然,由于电子个数的大幅度减少,用注量之比在真实射程后也迅速趋于 0。

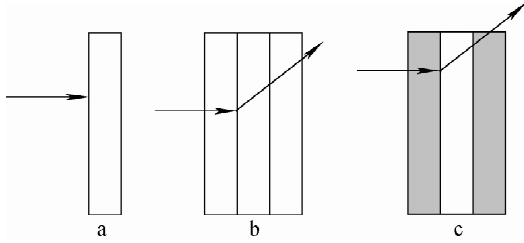


图 2 源强(a)、电子散射(b)及泄漏(c)示意图
Fig. 2 Sketch for source intensity (a), electron scattering (b) and leaking out (c)

统计穿出每个平面的电子流则可避免上述误差。文献[2]明确指出,衬底材料可使向探测器相反方向发射的电子散射回探测器而使探测器计数率明显升高,当衬底材料是高 Z 元素时,计数率增加会超过 50%。因此,只考虑入射方向上在一定厚度处是否有电子能穿出,而不考虑穿出去后再返回的量更合理。

对高能电子,图 2 中的模型(半径 5 mm)可能存在电子从侧边泄漏出去的情况(图 2c),使电子束强度衰减加快,射程变短。尤其是模型中的真空薄层会增加泄漏几率。因此,衰减介质半径相对于入射电子束应为无限大,或对侧面使用反射边界。

1.3 直接蒙特卡罗统计方法

外推法和定义法都是利用粒子相对强度间接计算电子射程。本文提出直接计算电子射程的蒙特卡罗方法。

射程是指穿过一定厚度的屏蔽介质后电子强度近似为 0。利用文献[4]中强度衰减到百分之一、千分之一等指标来确定射程便于掌握与使用。在计算上,可避免外推法的不确定性;在应用中,可根据不同的应用背景,将比例定为百分之一、千分之一甚至万分之一,便于辐射防

护。借鉴此,提出一种新的射程计算方法。以相对强度衰减至百分之一为例(称为百分之一射程),介绍电子射程蒙特卡罗直接统计方法。

图 3 为电子射程与行程计算示意图。假定平行电子束从 O 点出发,在 C 点消失(图 3a),则行程为 $l_1 + l_2 + l_3$ (由阻止本领决定),而射程为 $l_4 \cos \theta$ (假定 OC 连线与入射方向夹角为 θ)。由于电子背散射,如图 3 所示,有可能射程发生在碰撞点 B 而不是消失点 C(图 3b)。因此,本方法的中心思想是找出每个电子游动历程中在入射方向上距离源点最远的碰撞点(或吸收点),这和射程的概念完全一致。

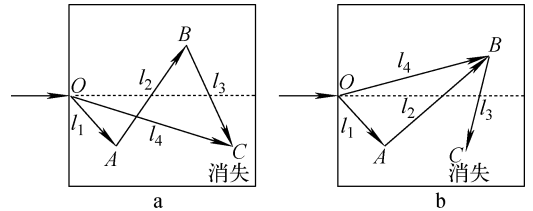


图 3 电子射程与行程计算示意图
Fig. 3 Sketch for range and track of electron

以百分之一射程为例,统计过程分以下几步:

- 1) 将样本总数分为 N 组,每组 100 个样本;
- 2) 对组内每个样本进行随机游动跟踪,记录每个样本的射程 $r(i), i = 1, \dots, 100$;
- 3) 统计每组样本中最大射程 $R(j) = \text{Max}(r(i)), i = 1, \dots, 100, j = 1, \dots, N$;
- 4) N 组样本跟踪完毕,统计 $R(j)$ 的分布情况,用式(3)、(4)、(5)^[9] 分别估计射程的均值、方差与统计误差(其中, $k = 1, 2, 3$ 分别代表 $\sigma, 2\sigma, 3\sigma$ 原则),有:

$$\bar{R} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N R(j) \quad (3)$$

$$s^2 = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N (R(j) - \bar{R})^2 \quad (4)$$

$$\epsilon = \frac{ks}{R\sqrt{N}} \quad k = 1, 2, 3 \quad (5)$$

- 5) 任意给定置信度 $1 - \alpha$,按式(6)给出射程均值的区间估计(其中, $U_{\alpha/2}$ 为标准正态分布分位数(蒙特卡罗模拟为大样本, t 分布与正态分布相同)),有:

$$\left(\bar{R} - \frac{s}{\sqrt{N}}U_{\alpha/2}, \bar{R} + \frac{s}{\sqrt{N}}U_{\alpha/2}\right) \quad (6)$$

蒙特卡罗程序 MCNP 可很好地模拟电子的随机游动行为,拥有较先进的电子作用截面,但无专门的电子射程统计功能。在 MCNP 程序的子程序 electr 中增加上述统计功能,即可轻松计算电子射程,无需计算注量等,也无需数据后处理。当然,统计过程中需去除二次电子,仅统计源电子。

新方法不但能给出射程的点估计,还能给出区间估计,这是其他方法不能实现的。由于单能电子无确定的射程,将射程表示为在一定

置信度下的区间估计更符合电子射程的本质。

2 实例与分析

计算文献[4]中各单能电子在密度为 19.32 g/cm^3 金属钨中的射程。为便于比较,表 1 列出了经典的电子射程经验公式结果。经验公式^[2]为:

$$R = 530E - 106 \quad (1 \text{ MeV} < E < 20 \text{ MeV}) \quad (7)$$

其中:射程 R 的单位为 mg/cm^2 ; 能量 E 的单位为 MeV。

表 1 各种方法计算结果对比

Table 1 Comparison of results by several methods

能量/MeV	不同方法计算的射程/mm					
	经验公式	文献[4]注量比	本文注量比	本文电子流比	新方法 1%	新方法 0.1%
6	1.59	1.90	1.7	1.6	1.58	1.81
9	2.41	2.70	2.6	2.4	2.39	2.73
15	4.06	4.30	4.1	3.8	3.87	4.43

用注量比得出的结果与文献[4]的结果相比略低,这可能与样本数、二次电子处理有关,文献[4]中提到了关掉次级光子产生的二次电子部分,未提及关掉源电子与靶碰撞出的二次电子(MCNP 中称为 knock-on 电子)。

采用电子流的结果比注量的结果低,这与前文分析相吻合,且与经验公式较为接近。新方法百分之一射程与经验公式符合较好,千分之一射程大于百分之一射程,这符合物理规律,因为距离越远,衰减越多。表 2 列出统计误差与区间估计,样本数 100 万,统计误差不到 0.1%,收敛情况良好。

表 2 百分之一射程的统计误差与区间估计($1-\alpha=0.9973$)

Table 2 Statistics error and confidence interval of 1% range

能量/MeV	统计误差/%	区间估计
6	0.09	(1.576, 1.585)
9	0.09	(2.387, 2.400)
15	0.09	(3.857, 3.878)

对新方法与文献[4]中定义法进行综合比较,可发现新方法具有以下特点。

首先,新方法使用很方便。定义法需根据入射电子能量的变化来设置衰减介质薄层的厚度。如 0.5 MeV 的电子在钨中的射程约为 $8 \times 10^{-3} \text{ cm}$,若厚度为 0.1 mm,显然太大。而新方法则完全没有这方面的限制,对任意能量电子,只需将介质设为足够大,无需分层,无需加真空薄层。样本跟踪完毕直接给出射程结果与计算误差,无需数据后处理,使用十分方便。

其次,新方法的精度很高,如百分之一射程的计算,统计每 100 个样本中最大射程,这个最大值可认为是唯一的(因为碰撞位置坐标可取很高的精度,不受老方法中栅元厚度限制),因此,比例 1% 是确定的。而定义法的精度与栅元厚度有关,即使栅元足够薄,要找出相对强度刚好衰减到 1% 也很难。通常情况是射程在相对强度大于 1% (假定第 i 个真空薄层) 与相对强度刚好小于 1% (第 $i+1$ 个真空薄层) 的衰减层中间,即使通过插值,其精度也不如新方法。

最后,新方法的计算效率明显高于老方法。以百分之一射程为例,假如样本数 100 万,必能

得到 1 万个统计样本,其中既包含低于平均射程的样本,也包含高于平均射程的样本。假如射程所在真空薄层为 i ,定义法只能统计到穿过第 i 薄层的电子,对第 i 薄层前面的电子未加以利用;定义法的收敛速度与电子穿透率、栅元厚度均有关系。

3 结论

以电子强度的衰减程度来定义射程在辐射防护中有应用价值。本文给出的射程计算方法不需计算注量,直接以射程为统计量,使用非常方便,不受电子能量、衰减介质厚度的限制,拥有很高的计算精度和效率。以区间估计给出电子射程更符合电子射程的不确定性特点。

参考文献:

[1] 汲长松. 核辐射探测及其实验技术手册[M]. 北京:原子能出版社,1990.

[2] 卢希庭. 原子核物理[M]. 北京:原子能出版社,1981.

[3] 王倩,吾勤之,何承发. 衰减法测量静电加速器电子束能量[J]. 原子能科学技术,1999,33(5): 419-424.

WANG Qian, WU Qinzhi, HE Chengfa. Determination of energy electron beam generated by electrostatic accelerator by measurement of attenuation[J]. Atomic Energy Science and Technolo-

gy, 1999, 33(5): 419-424(in Chinese).

- [4] 邵文成,孙普男,代文江. 高能电子在加速器靶物质中射程的数值模拟[J]. 原子能科学技术, 2008,42(11):992-996.
- SHAO Wencheng, SUN Punan, DAI Wenjiang. Numerical simulation on range of high-energy electron moving in accelerator targets [J]. Atomic Energy Science and Technology, 2008, 42(11): 992-996(in Chinese).
- [5] 李泉凤,吴莹英,黄蔚玲. 电子加速器 X 射线发射率的 MCNP 分析[J]. 清华大学学报:自然科学版,2004,44(3):5-11.
- LI Quanfeng, WU Yingying, HUANG Weiling. MCNP analysis of X-rays emissions in an electron accelerator [J]. J Tsinghua Univ: Sci & Tech, 2004, 44(3): 5-11(in Chinese).
- [6] BRIESMEISTER J F. MCNP—A general Monte-Carlo code for N -particle transport code. LA-12625-M[R]. [S. l.]: [s. n.], 2000.
- [7] BERGER M J, SELTZER S M. Bremsstrahlung and photoneutrons from thick tungsten and tantalum targets [D]. Washington D. C.: National Bureau of Standards, 1970.
- [8] 谢仲生,张少泓. 核反应堆物理理论与计算方法[M]. 西安:西安交通大学出版社,2000.
- [9] 杜书华,等. 运输问题的计算机模拟[M]. 长沙:湖南科学技术出版社,1988.