

光子输运模拟

何仕杰 2021010266

1 问题描述

模拟 γ 源 Cs-137 ($E_0 = 0.662\text{MeV}$) 在 NaI (Tl) 闪烁体中的输运情况。计算模型如下图 1 所示, 闪烁体尺寸 $\varnothing 4 \times 4\text{cm}$, 即半径 $R = 2\text{cm}$, 高 $H = 4\text{cm}$ 。Cs-137 点源在闪烁体中轴线上, 与闪烁体顶面距离 $D = 20\text{cm}$, 粒子垂直向下入射进入晶体。

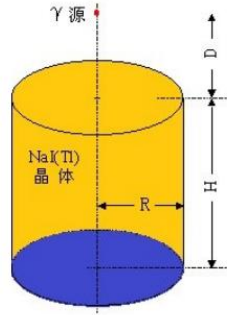


图 1 闪烁体模型

要求计算得到光子在 NaI (Tl) 闪烁体内的能量沉积谱。用直接模拟法模拟光子在闪烁体中的输运, 记录单个光子在闪烁体中损失的能量, 如果发生了光电效应, 则认为损失了全部能量, 如果是康普顿散射, 沉积能量为碰撞前后的能量之差, 最后获得光子的总沉积能量。

模拟要求计算出探测效率和峰总比, 估计相对误差, 统计 γ 谱每道计数, 画出 γ 能谱图, 根据能谱图估计测量系统在 0.662MeV 处的能量分辨率。

2 理论分析

粒子输运过程是一个随机过程, 输运规律是通过大量统计实验总结出来的, 光子输运也是如此, 因此本题采用蒙特卡罗方法模拟大量光子在截止中的运动状况。本题中, 为简化问题, 忽略次级光子和电子的产生, 只是简单的模拟光子与核发生光电效应和康普顿散射两种过程, 统计全过程中的能量沉积, 在模拟过程中假定粒子在两次碰撞之间按照直线运动, 粒子之间的相互作用可以忽略。

以圆柱形晶体底面圆心为原点, 竖直向上为 z 轴正方向, 建立 xyz 直角坐标系。粒子在介质中的运动状态可以用一组参数来描述, 即状态参数, 包括粒子的空间位置 \mathbf{r} 、能量 E 和运动方向 $\mathbf{\Omega}$ 、粒子的时间 t 和附带的权重 W , 以 $\mathbf{S} = (\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}, t, W)$ 表示。粒子第 m 次碰撞后的状态参数为 $\mathbf{S}_m = (\mathbf{r}_m, E_m, \mathbf{\Omega}_m, t_m, W_m)$, 它表示一个由源发出的粒子, 在介质中经过 m 次碰撞的状态。

\mathbf{r}_m : 粒子在第 m 次碰撞点的位置;

E_m : 粒子在第 m 次碰撞后的能量;

$\mathbf{\Omega}_m$: 粒子在第 m 次碰撞后的运动方向;

t_m : 粒子到第 m 次碰撞时经历的时间;

W_m : 粒子第 m 次碰撞后的权重。

一个由源发射的粒子在介质中运动, 经过若干次碰撞后, 直到其运动历史结束 (逃出系

统或被吸收等)。假定粒子在两次碰撞之间直线运动，并且其能量与方向均不改变，则粒子在介质中的运动过程可用以下碰撞点的状态序列描述：

$$\mathbf{S}_0, \mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2, \dots, \mathbf{S}_{M-1}, \mathbf{S}_M$$

详细表示为：

$$\mathbf{S}_0, \mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2, \dots, \mathbf{S}_{M-1}, \mathbf{S}_M = \begin{pmatrix} \mathbf{r}_0 & \mathbf{r}_1 & \cdots & \mathbf{r}_{M-1} & \mathbf{r}_M \\ E_0 & E_1 & \cdots & E_{M-1} & E_M \\ \boldsymbol{\Omega}_0 & \boldsymbol{\Omega}_1 & \cdots & \boldsymbol{\Omega}_{M-1} & \boldsymbol{\Omega}_M \\ t_0 & t_1 & \cdots & t_{M-1} & t_M \\ W_0 & W_1 & \cdots & W_{M-1} & W_M \end{pmatrix}$$

这里 \mathbf{S}_0 为粒子由源出发的状态，即初态， \mathbf{S}_M 为粒子终止状态， M 为粒子运动的链长，这个序列即为粒子随机运动的历史。

整个模拟过程：

(1) 确定初始状态 \mathbf{S}_0 ：

确定粒子初始状态，实际上即为从粒子源的空间位置、能量、方向分布中抽样。源分布为：

$$f(\mathbf{r}_0, E_0, \boldsymbol{\Omega}_0) = f_1(\mathbf{r}_0)f_2(E_0)f_3(\boldsymbol{\Omega}_0)$$

分别从各自的分布中抽样确定初始状态。对于本题的单向点源：

$$\mathbf{r}_0 = (0, 0, H), \boldsymbol{\Omega}_0 = (0, 0, -1)$$

(2) 确定下一个碰撞点：

已知状态 \mathbf{S}_{m-1} ，要确定状态 \mathbf{S}_m ，首先要确定下一个碰撞点的位置 \mathbf{r}_m 。在相邻两次碰撞之间，中子的输运长度 L 服从如下分布：

$$f(L) = \Sigma_t(\mathbf{r}_{m-1} + L \cdot \boldsymbol{\Omega}_{m-1}, E_{m-1}) \exp \left\{ - \int_0^L \Sigma_t(\mathbf{r}_{m-1} + l \cdot \boldsymbol{\Omega}_{m-1}, E_{m-1}) dl \right\}$$

其中， Σ_t 为介质的中子宏观总截面，积分 $\rho = \int_0^L \Sigma_t(\mathbf{r}_{m-1} + l \cdot \boldsymbol{\Omega}_{m-1}, E_{m-1}) dl$ 称为粒子输运的自由程数，系统的大小通常就是用系统的自由程数表示的。

粒子输运的自由程数 ρ 服从指数分布：

$$f(\rho) = e^{-\rho}, \rho \geq 0$$

先从指数分布中抽样确定自由程数 ρ ， $\rho = -\ln \xi$ ，然后从积分方程：

$$\int_0^L \Sigma_t(\mathbf{r}_{m-1} + l \cdot \boldsymbol{\Omega}_{m-1}, E_{m-1}) dl = -\ln \xi$$

中解出 L 。对于单一介质：

$$L = \frac{\rho}{\Sigma_t(E_{m-1})} = \frac{-\ln \xi}{\Sigma_t(E_{m-1})}$$

L 确定后，下一个碰撞点位置：

$$\mathbf{r}_m = \mathbf{r}_{m-1} + L \cdot \boldsymbol{\Omega}_{m-1}$$

即：

$$x_m = x_{m-1} + L \cdot u_{m-1}$$

$$y_m = y_{m-1} + L \cdot v_{m-1}$$

$$z_m = z_{m-1} + L \cdot w_{m-1}$$

(3) 确定碰撞类型：

本题不考虑光子碰撞的核的类型，直接判断光子与核发生作用的类型，低能光子与核的反应类型有光电效应和康普顿效应，其微观截面分别为： $\sigma_{pe}^B(E_{m-1})$ 和 $\sigma_c^B(E_{m-1})$ ，则总截面为： $\sigma_t^B(E_{m-1}) = \sigma_{pe}^B(E_{m-1}) + \sigma_c^B(E_{m-1})$ 。

则各种反应发生的几率为：

$$P_{pe} = \frac{\sigma_{pe}^B(E_{m-1})}{\sigma_t^B(E_{m-1})}$$

$$P_c = \frac{\sigma_c^B(E_{m-1})}{\sigma_t^B(E_{m-1})}$$

利用离散型随机变量的抽样方法，确定反应类型，即抽取随机数 ξ ，若 $\xi \leq P_{pe}$ ，则为光电效应，此时光子的历史终止。否则为康普顿效应，此时需要进一步确定康普顿散射后光子的能量和方向。

(4) 确定碰撞后的能量和方向：

光子发生康普顿散射后，其能量分布密度函数为：

$$f\left(\frac{x}{\alpha}\right) = \frac{1}{K(\alpha)} \left[\left(\frac{\alpha+1-x}{\alpha \cdot x} \right)^2 + \frac{1}{x} - \frac{1}{x^2} + \frac{1}{x^3} \right] \quad 1 \leq x \leq 1+2\alpha$$

其中， $K(\alpha)$ 为归一因子。

$$K(\alpha) = \left[1 - \frac{2(\alpha+1)}{\alpha^2} \right] \ln(1+2\alpha) + \frac{1}{2} + \frac{4}{\alpha} - \frac{1}{2(1+2\alpha)^2}$$

$x = \frac{\alpha}{\alpha'}$ ， α 和 α' 分别为光子散射前后的能量，以 $m_0 c^2$ 为单位， m_0 为电子静止质量， c 为光

速，即 $\alpha = \frac{E}{m_0 c^2}$ ， $\alpha' = \frac{E'}{m_0 c^2}$ 。

光子康普顿散射能量分布的抽样方法为：

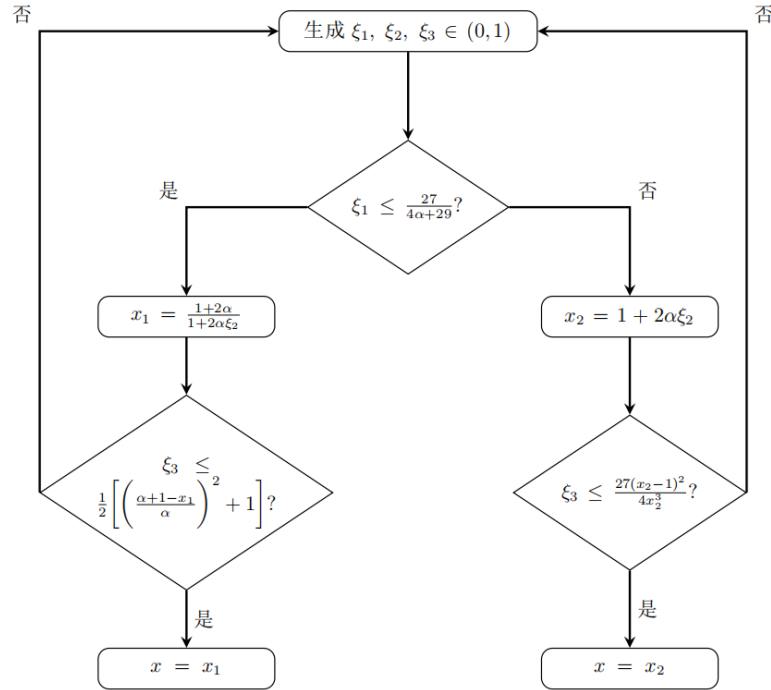


图 2 光子康普顿散射抽样方法

x 的抽样确定后，散射后的能量为：

$$E_{m+1} = \alpha' \cdot m_0 c^2 = \frac{\alpha}{x} \cdot m_0 c^2 = \frac{E_m}{x}$$

光子康普顿散射角与散射前后的能量有关，其散射角余弦 $\mu_L = \cos \theta_L$ 的分布密度函数为：

$$f(\mu_L) = \delta \left(1 - \frac{1}{\alpha'} + \frac{1}{\alpha} - \mu_L \right)$$

抽样方法为:

$$\mu_L = 1 - \frac{1}{\alpha'} + \frac{1}{\alpha}$$

散射角 θ_L 确定后, 还需要确定方位角并最终确定散射后光子的运动方向。

令

$$a = \cos \theta_L$$

$$b = \sin \theta_L = \sqrt{1 - a^2}$$

$$c = \cos \varphi$$

$$c = \sin \varphi$$

方位角 φ 在 $[0, 2\pi]$ 上均匀分布。

则可以由第 $m-1$ 次碰撞后的数据 Ω_{m-1} 确定第 m 次碰撞后的数据 Ω_m :

$$u_m = \frac{-bcw_{m-1}u_{m-1} + bdv_{m-1}}{\sqrt{u_{m-1}^2 + v_{m-1}^2}} + au_{m-1}$$

$$v_m = \frac{-bcw_{m-1}v_{m-1} - bdu_{m-1}}{\sqrt{u_{m-1}^2 + v_{m-1}^2}} + av_{m-1}$$

$$w_m = bc\sqrt{u_{m-1}^2 + v_{m-1}^2} + aw_{m-1}$$

当 $u_{m-1}^2 + v_{m-1}^2 \rightarrow 0$ 时, 不能使用以上的公式, 而是用下面的简单公式:

$$u_m = bc$$

$$v_m = bd$$

$$w_m = aw_{m-1}$$

至此可由 S_{m-1} 完全确定 S_m , 因此当光子从源出发, 即 S_0 确定后, 重复步骤(2)~(4), 直到光子游动历史终止, 从而得到一个光子的随机游动历史, 即:

$$S_0, S_1, S_2, \dots, S_{M-1}, S_M = \begin{pmatrix} \mathbf{r}_0 & \mathbf{r}_1 & \cdots & \mathbf{r}_{M-1} & \mathbf{r}_M \\ E_0 & E_1 & \cdots & E_{M-1} & E_M \\ \Omega_0 & \Omega_1 & \cdots & \Omega_{M-1} & \Omega_M \\ t_0 & t_1 & \cdots & t_{M-1} & t_M \\ W_0 & W_1 & \cdots & W_{M-1} & W_M \end{pmatrix}$$

在得到一个光子的能量沉积之后, 重复以上过程, 模拟大量光子的随机游动, 得到几十万或几百万以上个光子的能量沉积数据, 进而可以绘制能谱图。

(5) 记录结果

在获得光子的随机游动历史后, 我们对所要计算的物理量进行估计。对 NaI (Tl) 晶体, 我们要计算探测效率和光子能量沉积谱, 考察每个光子的随机游动历史, 记录该光子在探测器中发生的每次碰撞所损失的能量 (即沉积能量 E_D), 对于第 m 次碰撞的光子:

$$E_D(m) = \begin{cases} E_{m-1} - E_m & \text{康普顿效应} \\ E_{m-1} & \text{光电效应} \end{cases}$$

总沉积能量 $E_D = \sum E_D(m)$, 如果为 0, 说明该光子没有被记录到, 其对探测效率的贡献为 1, 同时可根据该沉积能量记录相应的光子能量沉积谱。

设第 n 个光子对探测效率的贡献为 η_n , 则

$$\eta_n = \begin{cases} 1, & \text{当 } E_D > 0 \\ 0, & \text{当 } E_D = 0 \end{cases}$$

如果我们共跟踪了 N 个光子, 则记录到的光子数为:

$$N_c = \sum_{n=1}^N \eta_n$$

则探测效率的近似值为：

$$\hat{\eta}_N = \frac{N_c}{N} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \eta_n$$

它是探测效率的一个无偏估计。

在置信水平 $1 - \alpha = 0.95$ 时的误差为：

$$|\hat{\eta}_N - \eta| < \frac{\chi_\alpha \sigma_\eta}{\sqrt{N}} \approx \frac{2\sigma_\eta}{\sqrt{N}}$$

其中 σ_η 为 η_n 的均方差，由于 η_n 是一个服从二项分布的随机变量，所以

$$\sigma_\eta^2 = \eta(1 - \eta)$$

或

$$\hat{\eta}_N = \frac{N_c}{N} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \eta_n$$

为了得到光子能量沉积谱，事先将能量分割成若干间隔：

$$E_{min} = E_0 < E_1 < \dots < E_I = E_{max}$$

其中 E_{min} 、 E_{max} 分别为能量的下限上限，对于有记录的光子，根据 E_D 所处的能量间隔进行记录，若沉积能量 E_D 属于第 i 个能量间隔 ΔE_i ，则在第 i 个能量计数器中加“1”。

如果能量按照 ΔE 等间隔划分，则：

$$i = \frac{E_D - E_{min}}{\Delta E}$$

跟踪 N 个光子之后，则光子能量沉积谱为：

$$\hat{P}_i = \frac{N_i}{N \cdot \Delta E_i} \quad i = 1, 2, \dots, I$$

其中 N_i 为第 i 个能量间隔的光子记录数。

皈依后得到能谱分布的概率密度函数：

$$\hat{P}_i^* = \frac{\hat{P}_i}{\hat{\eta}_N} = \frac{N_i}{N_c \cdot \Delta E_i} \quad i = 1, 2, \dots, I$$

在实际测量系统中，并不能精确测量到光子的沉积能量值，实际测量到的值是有一定的统计涨落的，而且该涨落是服从高斯分布的。因此，模拟实际测量情况，最终记录的沉积能量就是一个正态分布的随机变量：

$$E'_D = E_D + \sigma \cdot x$$

其中 x 为服从标准正态分布的随机变量， σ 为对应沉积能量处的能量统计涨落的标准差。

它与该能量处的能量分辨率 r 有以下关系：

$$\sigma = \frac{r \cdot E_D}{2\sqrt{2 \ln 2}} \approx 0.4247 \cdot r \cdot E_D$$

3 程序设计

使用 MATLAB 编写程序，程序结构如下图 3 所示。

本题中的粒子历史终止条件为：

- (1) 粒子从系统逃脱；
- (2) 粒子经碰撞被吸收；
- (3) 粒子能量低于给定能量；
- (4) 粒子位置越过某一界面。

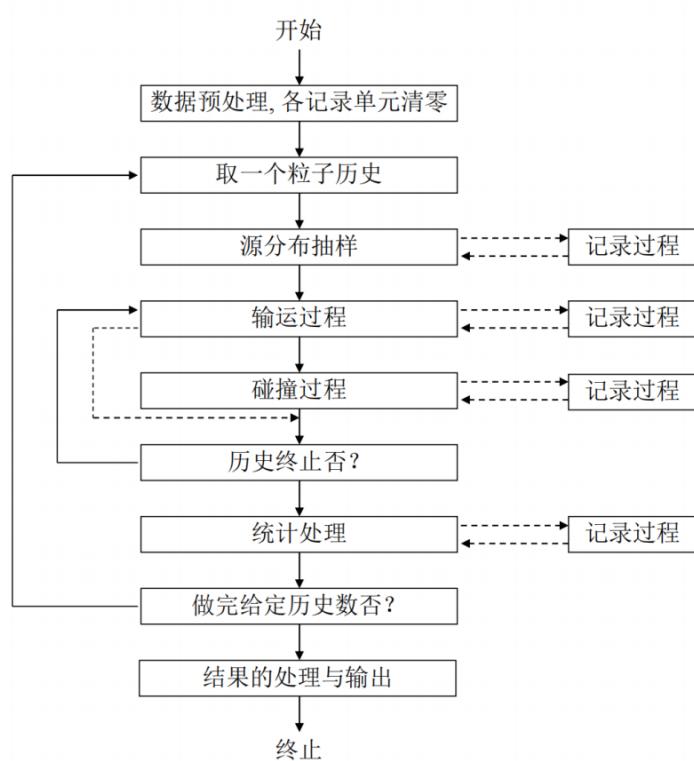


图 3 蒙特卡罗程序结构

本题中的指数分布随机抽样、光子康普顿散射能量抽样方法均按照课件给出的流程写。单一介质 NaI (TI) 的不同能量光子对应的光电效应和康普顿散射截面数据依照作业附表，在模拟过程中得到光子的具体能量后再线性插值。

4 模拟结果

4.1 γ 能谱图

模拟大量光子的输运过程，得到沉积能量数据 E_D ，显然，在本题中，只有当光子第一次进入闪烁体，并且经过自由程抽样，输运距离大于 H，也就是超过了圆柱的下表面，那么沉积能量才能为 0，其他情况，只要光子与核发生作用就会沉积能量，因此，沉积能量数据中为 0 的都是未探测到的光子，不需要考虑进 γ 能谱图中。

以下图 4 是模拟 100 万个光子得到的能谱图：

能量范围：0~0.85MeV，按照每道 0.002MeV 的间隔划分。

图中已用红色竖直虚线标示出全能峰 E_0 ，用紫色竖直虚线标示出全能峰半高宽位置。

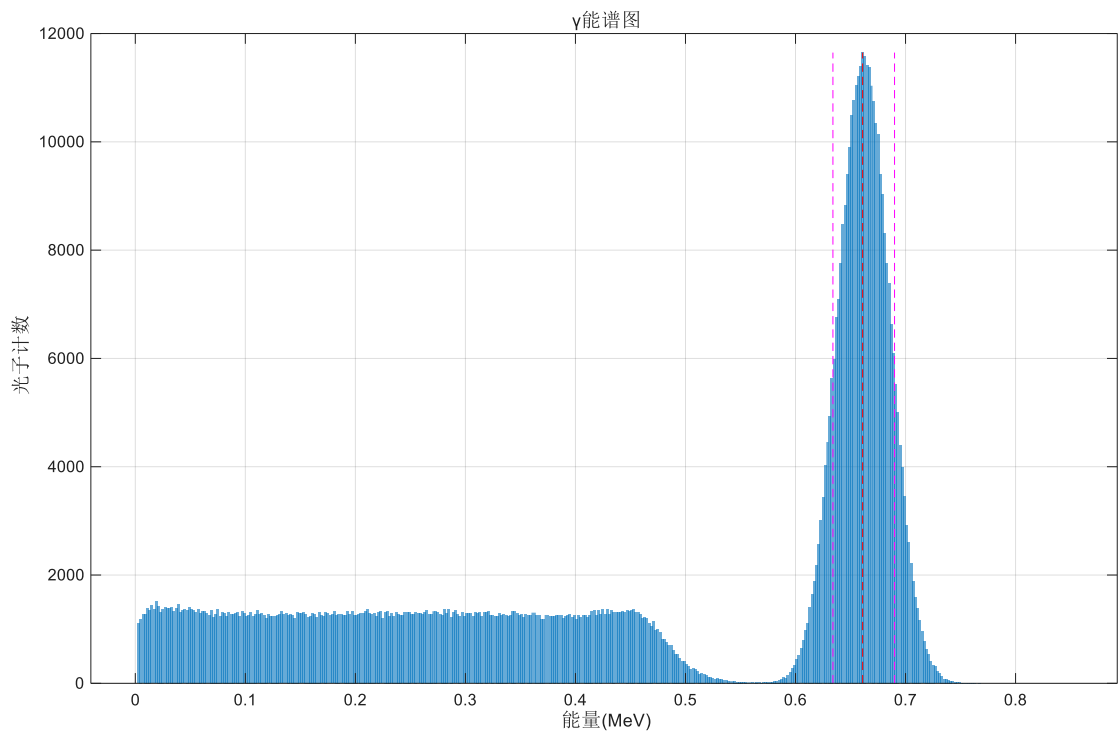


图 4 模拟 100 万个光子的 γ 能谱图

4.2 能量分辨率

根据 γ 能谱图的全能峰的半高宽，估算能量分辨率。

$$\text{能量分辨率} = \frac{\text{全能峰半宽度}}{\text{全能峰的峰位}} \times 100\%$$

进行 10 次模拟，数据如下：

模拟次数	能量分辨率
1	8.45%
2	8.45%
3	8.47%
4	8.47%
5	8.47%
6	8.45%
7	8.50%
8	8.47%
9	8.47%
10	8.42%

根据多次模拟得到的数据，能量分辨率在 8.462% 左右，方差大约是 3.96×10^{-4} 。

4.1 探测效率和峰总比

$$\text{探测效率} = \frac{N_m}{N}$$

$$\text{峰总比} = \frac{N_p}{N_m}$$

N 是进入闪烁体的总计数； N_m 是探测到的总计数（能量沉积 $E_D > 0$ 的光子计数）； N_p 是全能峰的总计数（按照 $E_0 \pm 3\sigma$ 范围统计计数）。

本题采用的是直接模拟法，蒙特卡罗方法的误差 ε 定义为：

$$\varepsilon = \frac{\lambda \alpha \sigma}{\sqrt{N}}$$

$$\hat{\sigma} = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N X_i^2 - \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N X_i \right)^2}$$

用 $\hat{\sigma}$ 代替 σ ，误差水平取 $1 - \alpha = 0.95$ ， $\lambda \approx 2.0$ ， $N = 10^6$ 。
进行 10 次 100 万个光子的模拟，得到探测效率和峰总比如下：

模拟次数	探测效率	峰总比
1	66.29%	51.68%
2	66.30	51.67%
3	66.26%	51.75%
4	66.27%	51.82%
5	66.29%	51.63%
6	66.34%	51.69%
7	66.33%	51.70%
8	66.33%	51.73%
9	66.37%	51.73%
10	66.30%	51.66%

计算得到 95%置信水平下的相对误差为：

$$\varepsilon_{\text{探测效率}} = 0.29\%$$

$$\varepsilon_{\text{峰总比}} = 0.018\%$$

理论上的探测效率可从物理模型上得到。如前所述，光子不和介质发生反应，沉积能量为 0 的情况只有一种，就是光子第一次进入介质时自由程抽样，计算得到的输运距离超过了圆柱的下表面，其他情况，只要光子与核发生作用，就会沉积能量。光子初始状态能量 0.662Mev，对应截面 $\Sigma_t = 0.2721\text{cm}^{-1}$ ，输运距离：

$$L = \frac{\rho}{\Sigma_t(E_0)} = \frac{-\ln \xi}{\Sigma_t(E_0)} > H$$

则：

$$\xi < 0.3368$$

$$P_{\text{探测到}} = 1 - \xi = 66.32\%$$

$$P_{\text{未探测到}} = \xi = 33.68\%$$

理论探测效率和实际模拟得到的探测效率十分接近。