

MÔ PHÒNG VẬN CHUYỂN PHOTON VÀ ELECTRON BẰNG PHƯƠNG PHÁP MONTE CARLO

Nguyễn Thanh Tân, Đặng Nguyên Phương, Trương Thi Hồng Loan

Trường Đại học Khoa học Tự nhiên, ĐHQG-HCM

(Bài nhận ngày 14 tháng 09 năm 2009, hoàn chỉnh sửa chữa ngày 01 tháng 05 năm 2010)

TÓM TẮT: Hiện nay trên thế giới có rất nhiều phần mềm mô phỏng vận chuyển bức xạ bằng phương pháp Monte Carlo. Các phần mềm này có rất nhiều ứng dụng chẳng hạn như: tính toán liều, khảo sát hiệu suất ghi đo bức xạ, thiết kế che chắn bức xạ, . . . Tuy nhiên, đối với nhiều người, các phần mềm này hoặc là khá đắt tiền, khó sử dụng cũng như khó sửa đổi cho phù hợp với mục đích sử dụng. Trong công trình này, chúng tôi bước đầu xây dựng một chương trình mô phỏng vận chuyển bức xạ bằng phương pháp Monte Carlo dựa trên ngôn ngữ lập trình C++ với mục đích tính toán nhanh gọn, dễ sử dụng cũng như có khả năng sửa đổi. Kết quả mô phỏng của chương trình này được so sánh với kết quả nhận được từ MCNP cho thấy một sự phù hợp tương đối tốt và có thể được chấp nhận.

Từ khóa: mô phỏng, vận chuyển bức xạ, Monte Carlo, C++.

1. GIỚI THIỆU

Phương pháp Monte Carlo là một phương pháp tính toán phổ biến trong việc giải quyết các bài toán vật lý và toán học. Phương pháp này là một kỹ thuật giải tích số dựa trên việc sử dụng một chuỗi các số ngẫu nhiên để thu được giá trị gieo lấy mẫu của các thông số trong bài toán.

Trong bài toán vận chuyển hạt, phương pháp Monte Carlo được sử dụng rất rộng rãi để mô phỏng các vận chuyển cũng như tương tác của các hạt (neutron, photon, electron, positron, alpha, . . .). Trong khoảng 50 năm trở lại đây kể từ khi phương pháp mô phỏng Monte Carlo sử dụng máy tính ra đời tại Phòng Thí nghiệm Los Alamos với sự đóng góp của Ulam, von Neuman, Fermi, Metropolis, Richtmyer [1]; hàng loạt chương trình mô phỏng vận chuyển bức xạ được ra đời: MCNP (Los Alamos 1977)

[2], EGS (SLAC 1978) [3], GEANT (CERN 1974) [4], PENELOPE (U. Barcelona 1996) [5], TRIPOLI (NEA 1976) [6], . . . Mỗi chương trình đều có những ưu khuyết điểm riêng nhưng tất cả đều dựa trên nền tảng của phương pháp Monte Carlo.

Trong thời gian qua, một số chương trình mô phỏng Monte Carlo đặc biệt là chương trình MCNP đã và đang được sử dụng để mô phỏng tính toán cho hệ phổ kế gamma HPGe tại Bộ môn Vật lý Hạt nhân. Công trình này được thực hiện nhằm mục đích tìm hiểu sâu hơn về các thuật toán được sử dụng trong các chương trình mô phỏng đồng thời góp phần nâng cao kiến thức, nghiên cứu phát triển các thuật toán Monte Carlo cho bài toán vận chuyển hạt. Đây cũng là bước đầu cho việc xây dựng một chương trình mô phỏng Monte Carlo hoàn

chính có thể so sánh với các chương trình khác hiện đang được sử dụng trên thế giới.

2. MÔ PHỎNG VẬN CHUYỂN PHOTON VÀ ELECTRON

2.1. Thư viện tiết diện

Thư viện tiết diện được sử dụng để mô phỏng vận chuyển hạt ở đây là thư viện tiết diện tương tác photon (EPDL) và tương tác electron (EEDL) của Trung tâm Dữ liệu Hạt nhân (Nuclear Data Services) thuộc IAEA. Thư viện này ra đời năm 1997 bởi các tác giả D.E. Cullen, J.H. Hubbell và L. Kyssel nhằm sử dụng cho mục đích tính toán vận chuyển photon và electron tại Phòng Thí nghiệm Quốc gia Lawrence Livermore (LLNL) [7].

Thư viện này bao gồm các tương tác photon và electron cho tất cả các nguyên tố từ $Z = 1$ (hidro) cho đến $Z = 100$ (fermium) bao gồm các tiết diện tương tác ion hóa, kích thích nguyên tử, va chạm đàn hồi và không đàn hồi,

$$\frac{d\sigma_{ph}}{d\Omega_e} = r_e^2 \alpha^4 \left(\frac{Z}{E}\right)^5 \frac{\beta^3 \sin^2 \theta_e}{\gamma (1 - \beta \cos \theta_e)^4} \left[1 + \frac{1}{2} \gamma(\gamma - 1)(\gamma - 2)(1 - \beta \cos \theta_e) \right] \quad (1)$$

Trong đó: $\gamma = 1 + E_e / (m_e c^2)$ và

$$\beta = \frac{\sqrt{E_e(E_e + 2m_e c^2)}}{E_e + m_e c^2} \quad \text{với } E_e \text{ và } m_e \text{ là động năng}$$

và khối lượng của electron quang điện.

Công thức của tiết diện vi phân tán xạ Rayleigh

$$\frac{d\sigma_{Ra}}{d\Omega_e} = r_e^2 \frac{1 + \cos^2 \theta}{2} [F(q, Z)]^2 \quad (2)$$

Thừa số dạng $F(q, Z)$ được tính theo công thức gần đúng của Baro và cộng sự [8].

tạo cặp hai và cặp ba, hiện tượng phát bức xạ hãm. Các số liệu này được sử dụng cho dải năng lượng từ 10 eV tới 100 GeV.

Các thư viện tiết diện được cho dưới dạng rời rạc theo năng lượng, do vậy để có thể sử dụng cho việc tính toán tiết diện tương tác cho photon và electron năng lượng liên tục cần phải xử lý sơ bộ các tiết diện này. Một module xử lý sơ bộ tiết diện được xây dựng. Kỹ thuật làm khớp spline bậc ba được sử dụng để tính toán tiết diện với năng lượng liên tục.

2.2. Mô phỏng vận chuyển photon

Tương tác của photon với vật chất chủ yếu thông qua 4 hiệu ứng: quang điện, tán xạ đàn hồi (Rayleigh), tán xạ không đàn hồi (Compton) và tạo cặp.

Để mô phỏng hiện tượng quang điện ta đi từ công thức tiết diện vi phân của hiện tượng quang điện theo góc khối Ω_e là góc mà electron quang điện phát ra

Công thức của tiết diện vi phân tán xạ Compton

$$\frac{d\sigma_{CO}^{KN}}{d\Omega} = r_e^2 \left(\frac{E_C}{E}\right)^2 \left[\frac{E_C}{E} + \frac{E}{E_C} - \sin^2 \theta \right] \quad (3)$$

với θ là góc bay ra của photon sau va chạm

$$E_C = \frac{E}{1 + E(1 - \cos \theta) / m_e c^2}$$

Đặt $\varepsilon = E_c/E$, ta có hàm mật độ xác suất:

$$p(\varepsilon) \sim \left[\varepsilon + \frac{1}{\varepsilon} - \sin^2 \theta \right]$$

Để đơn giản, chúng tôi sử dụng hàm:

$$p(\varepsilon) = \left[\varepsilon + a + \frac{b}{\varepsilon} + \frac{c}{\varepsilon^2} \right] \text{ với } a, b, c \text{ là các tham}$$

số theo năng lượng photon tới.

$$\frac{d\sigma_{pp}}{d\Omega} = r_e^2 \alpha Z [Z + \eta] \left\{ \left[\varepsilon^2 + (1 - \varepsilon)^2 \right] (\Phi_1 - 2f_c) + \frac{2}{3} \varepsilon (1 - \varepsilon) (\Phi_1 - 2f_c) \right\} \quad (4)$$

với $\varepsilon = (E_- + m_e c^2)/E$; E_- là động năng electron được tạo ra và E là năng lượng photon tới. Φ_1, Φ_2 là các hàm Green liên quan đến thừa số dạng của nguyên tử và f_c là hàm hiệu chỉnh trường Coulomb của Davies, Bethe, Maximom [9].

2.3. Mô phỏng vận chuyển electron

Gọi $\Sigma_{\text{brem}}, \Sigma_{\text{in}}, \Sigma_{\text{el}}$ là tiết diện tương tác cứng của hiện tượng bremsstrahlung, tán xạ không đàn hồi, tán xạ đàn hồi và Σ_{total} là tiết diện tương tác cứng tổng của electron

$$\Sigma_{\text{total}} = \Sigma_{\text{brem}} + \Sigma_{\text{in}} + \Sigma_{\text{el}} \quad (5)$$

Để mô phỏng tán xạ đàn hồi, chúng tôi sử dụng hai mô hình: mô hình sóng riêng phần (năng lượng thấp dưới 100 MeV) và mô hình Wentzel (năng lượng cao trên 100 MeV). Còn trong mô phỏng tán xạ không đàn hồi, chúng tôi sử dụng mô hình Moller [5].

Trong mô phỏng hiện tượng bremsstrahlung, electron chỉ mất năng lượng, còn hướng thì không thay đổi, tiết diện được tính theo công thức Bethe-Heitler được trình bày trong [10].

Công thức Bethe-Heitler của tiết diện vi phân của hiện tượng tạo cặp

Do electron va chạm rất nhiều trong quá trình vận chuyển vì vậy sẽ không thực tế khi mô phỏng mọi va chạm một cách chi tiết. Những tương tác nào có góc lệch lớn hơn góc ngưỡng và năng lượng electron bị mất mát lớn hơn năng lượng ngưỡng được gọi là tương tác cứng, những tương tác này được mô phỏng một cách chi tiết, còn các tương tác khác được gọi là tương tác mềm. Các tương tác mềm không được mô phỏng chi tiết mà được mô phỏng cộng gộp để tìm ra góc lệch trung bình và năng lượng mất mát trung bình do tương tác mềm tạo ra theo các bước

i. Electron đi quãng đường τ ngẫu nhiên giữa 0 và s (quãng đường trung bình).

ii. Mô phỏng góc lệch và năng lượng mất mát do va chạm mềm, góc lệch là χ .

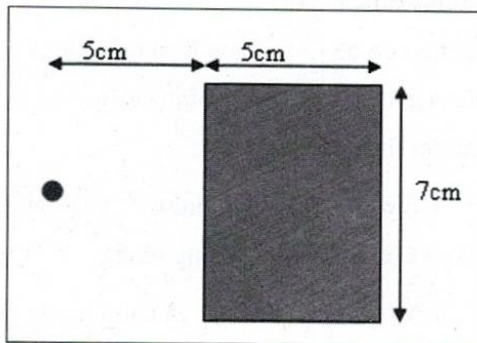
iii. Sau đó electron đi tiếp quãng đường $s - \tau$.

Một số chương trình mô phỏng hai hay nhiều va chạm mềm liên tiếp giữa hai tương tác cứng. Đặc biệt góc lệch ngưỡng và năng lượng ngưỡng trong tương tác mềm do người lập trình hoặc người sử dụng tùy ý lựa chọn, không có một tiêu chuẩn cụ thể về các ngưỡng này.

Trong chương trình mô phỏng, hiện tượng va chạm đàn hồi diễn ra rất phổ biến, giữa các va chạm này là va chạm mềm, còn sự phát bức xạ hãm và va chạm không đàn hồi cứng xảy ra ít hơn. Các va chạm mềm cũng góp phần rất lớn vào năng lượng mất mát của electron. Riêng va chạm không đàn hồi, để đơn giản chúng tôi chỉ mô phỏng va chạm theo mô hình Moller tức va chạm không đàn hồi với electron được coi là tự do.

Năng lượng mất mát và góc lệch của electron do các va chạm mềm này gây ra được mô phỏng bởi hàm gauss chặt cụt dựa vào giá trị trung bình và phương sai của năng lượng mất mát, giá trị trung bình và phương sai của góc lệch.

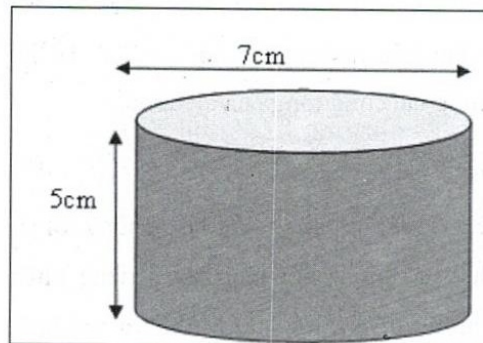
3. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN



3.1. Xây dựng chương trình mô phỏng

Chương trình mô phỏng vận chuyển photon/electron được xây dựng dựa trên các thuật toán đã trình bày trong mục 2. Chương trình được viết bằng ngôn ngữ lập trình C++, mang tên SIMPAT (viết tắt từ SIMulation of Particle Transport).

Do công trình này chủ yếu tập trung vào việc xây dựng thuật toán Monte Carlo để mô phỏng các tương tác cơ bản của electron và photon với vật chất cho nên cấu hình được sử dụng để mô phỏng rất đơn giản: mô hình detector là một khối vật chất hình trụ đồng nhất, đơn chất có chiều cao 5cm, bán kính đáy 3.5cm; nguồn là một nguồn điểm đơn năng phát đẳng hướng đặt cách mặt trước của detector 5cm. Chi tiết hình học được cho trong Hình 1.



Hình 1. Bố trí hình học của nguồn và detector trong quá trình mô phỏng

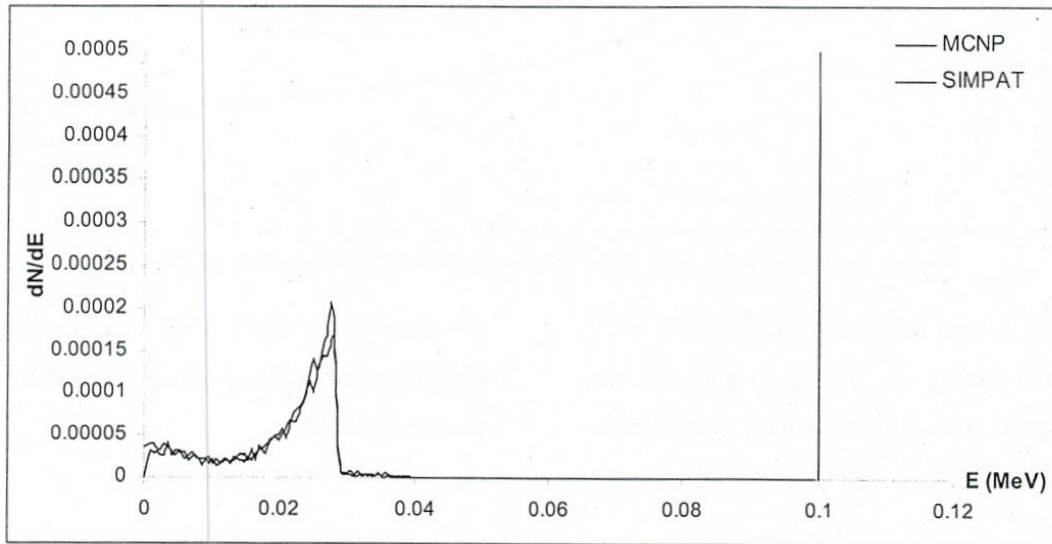
Chương trình mô phỏng có chức năng đánh giá hiệu suất và phổ năng lượng mất mát trong detector. Ngoài ra một module đồ họa cũng được xây dựng để vẽ vết của hạt tương tác với vật chất của detector trong không gian giả lập ba chiều.

3.2. Mô phỏng vận chuyển photon

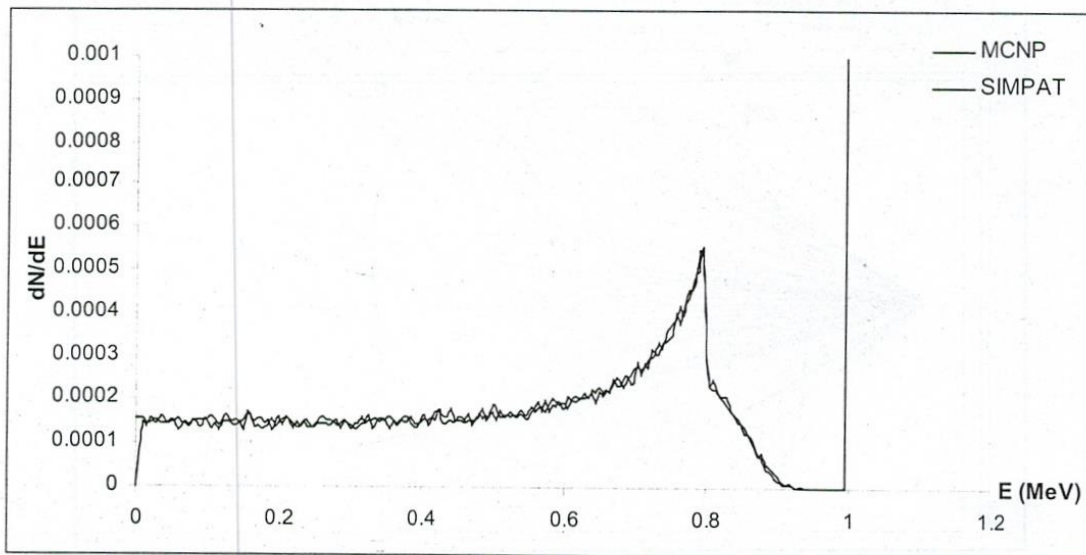
Để mô phỏng vận chuyển của photon, chúng tôi xây dựng mô hình nguồn điểm phát ra photon năng lượng 0.1 và 1 MeV đi tới detector làm bằng Germanium ($Z = 32$). Để số đếm đủ thống kê, chúng tôi mô phỏng 2×10^6

hạt phát ra từ nguồn. Hình 2 và Hình 3 trình bày kết quả đánh giá đáp ứng phổ của đầu dò đối với hai photon năng lượng trên bằng SIMPAT và so sánh với kết quả có được khi dùng MCNP. Từ kết quả so sánh đáp ứng phổ với MCNP, ta thấy phổ được mô phỏng bởi

SIMPAT hoàn toàn phù hợp với phổ của MCNP. Tuy nhiên đỉnh Compton hơi thấp hơn MCNP điều này có thể chấp nhận được bởi sự sai khác của các hàm phân bố xác suất sử dụng trong hai chương trình.



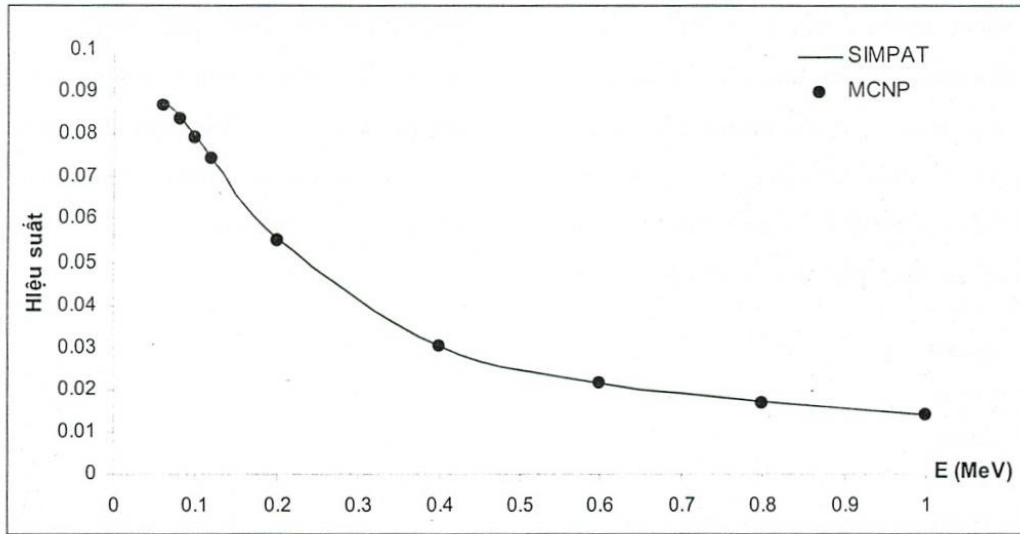
Hình 2. Đáp ứng phổ photon 0.1 MeV mô phỏng với detector Ge



Hình 3. Đáp ứng phổ photon 1 MeV mô phỏng với detector Ge

Hình 4 so sánh hiệu suất đỉnh có được từ chương trình SIMPAT ở các năng lượng khác nhau của photon với giá trị hiệu suất tương ứng

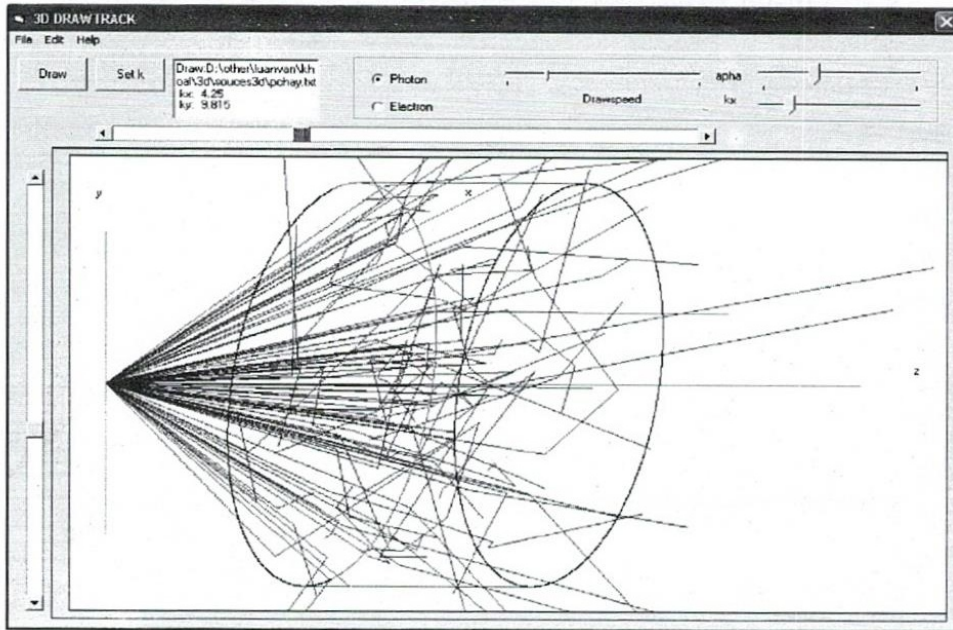
của chương trình MCNP. Kết quả cho thấy có sự phù hợp tốt giữa giá trị hiệu suất đỉnh tính bằng SIMPAT và MCNP.



Hình 4. Đường cong hiệu suất định của chương trình SIMPAT so sánh với MCNP

Hình 5 biểu diễn vết của photon 1 MeV trong môi trường Ge. Trong đó khối trụ tròn màu xanh là hình giới hạn không gian detector mô phỏng. Kết quả cho thấy quỹ đạo photon

với năng lượng cao 1 MeV hầu như đi thẳng xuyên qua môi trường detector, xác suất tán xạ photon rất thấp.



Hình 5. Vết của photon 1 MeV tương tác trong detector Ge

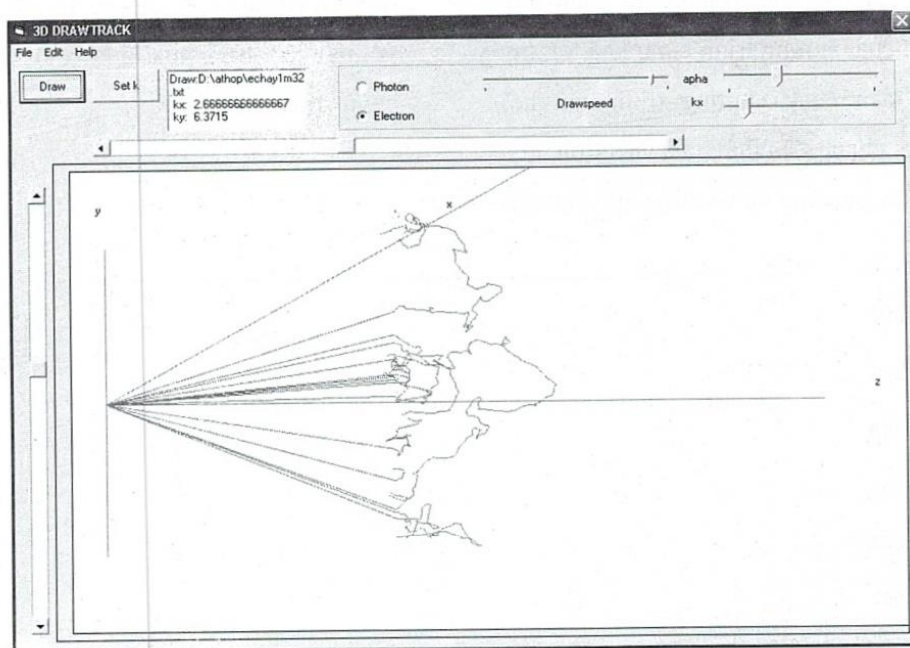
3.3. Mô phỏng vận chuyển electron

Trong phần này, mô hình electron với năng lượng 1 MeV đi qua detector Germanium được

khảo sát. Hình 6 trình bày vết của electron 1 MeV trong Ge. Từ kết quả mô phỏng cho thấy quãng chạy của electron trong vật chất rất

ngắn, ngắn hơn vài trăm lần so với quãng chạy của photon trong vật chất. Hình 6 được phóng đại vùng quan tâm (vùng bắt đầu xảy ra tương tác giữa electron với vật chất) lên khoảng 6000 lần khi vẽ. Kết quả mô phỏng cho thấy electron gần như mất hầu hết năng lượng trong detector.

Về cơ bản có thể thấy electron mất khá nhiều năng lượng do quá trình va chạm mềm. Trong hình này, ta thấy quỹ đạo electron là đường uốn liên tục do quãng chạy của electron trong vật chất rất nhỏ.



Hình 6. Vết quỹ đạo của electron 1 MeV trong Ge, khuếch đại ở vùng quan tâm

Trong đánh giá đáp ứng phổ đối với electron, để khảo sát được nhiều hiệu ứng tương tác của electron đóng góp lên dạng phổ, nhóm tác giả chọn môi trường detector làm bằng chất liệu Z cao. Hình 7 trình bày đáp ứng phổ của electron 1 MeV tương tác trong môi trường chì Pb ($Z = 82$) có được bằng SIMPAT và so sánh với đáp ứng phổ từ MCNP.

Kết quả cho thấy có sự phù hợp về dạng đáp ứng phổ mô phỏng giữa hai chương trình. Tuy nhiên đáp ứng phổ bằng SIMPAT còn bị thấp đáng kể, ngoài ra trong đáp ứng phổ của MCNP còn có sự xuất hiện của các đỉnh tương ứng với sự thoát của tia X đặc trưng ra

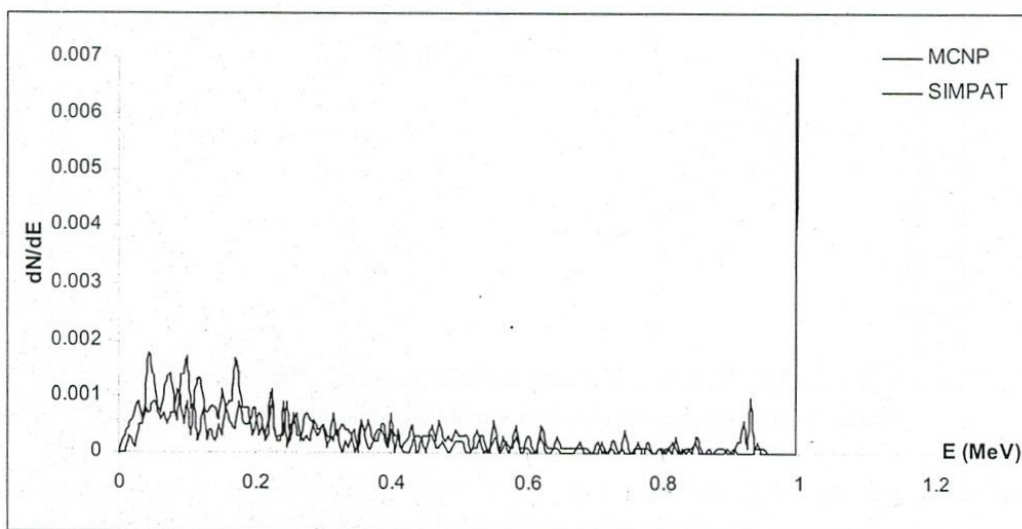
khỏi detector, đây là hiệu ứng còn chưa được mô phỏng trong công trình này.

4. KẾT LUẬN

Trong công trình này, chúng tôi đã bước đầu xây dựng được chương trình mô phỏng vận chuyển photon và electron bằng phương pháp Monte Carlo mang tên SIMPAT. Về cơ bản chúng tôi đã xây dựng được các thuật toán mô phỏng vận chuyển electron và photon ở những môi trường đơn nguyên tử với Z khác nhau. Sự phù hợp dạng đáp ứng phổ của detector đối với photon với năng lượng khác nhau giữa SIMPAT và MCNP cho thấy mô hình vận

chuyển photon được xây dựng khá tốt. Trong vận chuyển electron, công trình đã mô phỏng đầy đủ một số tương tác cơ bản của electron bao gồm va chạm đàn hồi, va chạm không đàn hồi, hiện tượng phát bức xạ hãm và va chạm mềm. Trong va chạm không đàn hồi chỉ mô phỏng va chạm với electron tự do. Đáp ứng phổ electron của chương trình cũng khá tốt, tuy nhiên thời gian chạy chương trình còn hơi chậm do va chạm đàn hồi của electron quá nhiều. Các tác giả cũng đã vẽ được quỹ đạo của

electron và photon ở dạng giả lập ba chiều giúp người dùng có thể hình dung cụ thể hơn sự chuyển động của các hạt trong môi trường vật chất. Tuy nhiên đây là phiên bản đầu tiên nên chương trình còn nhiều hạn chế. Ví dụ như chưa mô phỏng một cách chi tiết các hiện tượng va chạm của photon với electron của lớp vỏ nguyên tử, chưa đưa vào các hiệu ứng huỳnh quang tia X, ...



Hình 7. Đáp ứng phổ của electron năng lượng 1 MeV trong môi trường Pb

Trong tương lai, chương trình cần được tiếp tục phát triển theo những hướng sau: mô phỏng vận chuyển photon và electron trong môi trường đa nguyên tử và có cấu trúc bất kỳ thông qua việc kết hợp các khối hình học giải tích đơn giản; cải tiến kỹ thuật mô phỏng electron sang kỹ thuật mô phỏng nhiều hạt cùng

một lúc để cải thiện thời gian chạy chương trình; đưa thêm các tương tác mới như hủy positron, va chạm với electron lớp K, L,... hay kích thích nguyên tử. Ngoài ra cũng cần cải tiến chương trình mô phỏng để có thể mô phỏng vận chuyển của các hạt khác chẳng hạn như neutron, positron, alpha, các ion nặng,...

SIMULATION OF PHOTON AND ELECTRON TRANSPORT BY MONTE CARLO METHOD

Nguyen Thanh Tan, Dang Nguyen Phuong, Truong Thi Hong Loan

University of Science, VNU-HCM

ABSTRACT: *There are many radiation transport simulation codes using Monte Carlo method in the world nowadays. These codes have many applications such as: dose calculation, investigating radiation detection efficiency, designing radiation shielding, . . . However, these codes are too expensive or too difficult in using and changing to suitable for using purpose with many people. In this work, we built a radiation transport simulation program based on Monte Carlo method using C++ programming language with purpose of fast calculation and also easy to use. The simulation results of this program showed a good agreement in compared to MCNP results.*

Keywords: *simulation, radiation transport, Monte Carlo, C++.*

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1]. Gary D. Doolen, John Hendricks, *Monte Carlo at Work*, Los Alamos Science Special Issue (1987).
- [2]. J.F. Briesmeister, *MCNP4C2 – Monte Carlo N-Particle Transport Code System*, LA-13709-M (2001).
- [3]. I. Kawrakow et al, *The EGSnrc Code System: Monte Carlo Simulation of Electron and Photon Transport*, National Research Council of Canada (2009).
- [4]. S. Agostinelli et al, *GEANT4 – A simulation toolkit*, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A, vol.506 (2003).
- [5]. Francesc Salvat, José M. Fernández-Varea, Josep Sempau, *PENELOPE-2008: A Code System for Monte Carlo Simulation of Electron and Photon Transport*, NEA No. 6416 (2009).
- [6]. C.M. Diop et al, *TRIPOLI-4: A 3D Continuous-Energy Monte Carlo Transport Code*, PHYTRA1: First International Conference on Physics and Technology of Reactors and Applications (2007).
- [7]. D.E. Cullen, J.H. Hubbel, L. Kissel, *EPDL97: The Evaluated Photon Data Library '97 Version*, UCRL-LR-50400 vol.6 (1997).
- [8]. J. Baró, M. Roteta, J.M. Fernández-Varea, F. Salvat, *Analytical cross sections for Monte Carlo simulation of photon transport*, Radiat. Phys. Chem., vol.44, pp.531-552 (1995).
- [9]. H. Davies, H.A. Bethe, L.C. Maximon, *Theory of Bremsstrahlung and Pair Production, II. Integral Cross Section for Pair Production*, Phys. Rev., vol.93, pp.788-795 (1954).

- [10]. F. Salvat, J.M. Fernandez-Varea, *Semiempirical cross sections for the simulation of the energy loss of electrons and positrons in matter*, Nucl. Inst. Meth. B63, pp.255-269 (1992).