

利用蒙特卡罗程序 EGSnrc 实现 电子束辐照剂量分布的计算和 电子束辐射加工工艺的优化

冉蜀阳 傅玉川 罗正明

(四川大学原子核科学技术研究所辐射物理与技术教育部重点实验室 成都 610064)

摘要 利用蒙特卡罗程序 EGS4 的最新版本 EGSnrc, 在 Linux 操作系统平台上计算了在 1.5—3.0 MeV 能量范围内电子在聚乙烯材料和水中的剂量深度分布; 比较了在两种不同厚度的聚乙烯板的底部加上不同材料(铝、铜、铅)衬底情况下剂量深度分布的变化; 计算了电子束在入射到聚乙烯材料之前经过的空气层的厚度对剂量损失的影响及不同电子束射野大小对剂量分布的影响。计算的结果以绝对剂量的形式给出, 误差在 2% 以内。该方法优化电子束辐射加工工艺的一种实用、高效的理论估算方法。

关键词 电子束, 辐射加工, 剂量分布, 蒙特卡罗技术, EGSnrc

中图分类号 O57, TL84

应用电子束辐照开发新产品是辐射加工技术产业中最具发展前景的工艺之一。由于电子的射程短、传能线密度大、散射作用强、吸收剂量随着受辐照材料深度变化的梯度也大, 所以在开展电子束加工前, 需要对吸收剂量作出准确的理论估算和应用基础研究验证工作, 才能避免盲目性^[1]。辐射加工的最大特点是直接利用电离辐射能量, 因而表征电离辐射与物质相互作用的物理量—吸收剂量就成为辐射加工最重要的工艺参数。对辐照产品来说, 最重要的参数是材料中的吸收剂量及其均匀度^[2]。计算电子束在材料中的吸收剂量及其它相关的参数, 实际上就是解决电子在介质中的输运问题。在现有的粒子基本碰撞过程知识的基础上, 粒子在物质中的输运问题可以用蒙特卡罗方法来解决。粒子输运过程的蒙特卡罗模拟是一种物理事实的逼真模拟: 粒子按照可描述的源分布而产生, 穿过一定的距离, 在输运的过程中根据各种相互作用截面而发生碰撞和散射, 损失一定的能量, 改变运动方向或产生新的粒子。这个过程将一直进行下去, 直到所有粒子被吸收(能量损失到一个特定值以下)或穿出研究区域为止。随着蒙特卡罗方法研究的深入和计算机的发展, 一些大型的蒙特卡罗方法应用软件先后产生并得到了迅速的发展。其中 EGS4 程序就是一个由美国 Stanford Linear Accelerator Center 提供的软件程序包^[3], 这个程序包用蒙特卡罗方法模拟能量从 10 个 keV 到几个 TeV ($1\text{T} = 10^6\text{MeV}$) 的电子——光子在介质中的簇射过程。自从 1979 年第一次公开发表后, 以后的 20 多年里它不断地被改进和扩充, 并且把它的各种计算结果与各种实验结果进行了比较^[4], 使之成为一个非常可靠的软件包。本工作中使用的是 2000 年由加拿大 National Research Council 发布的 EGS4 软件包的新版本 EGSnrc^[5], 运行于 LINUX 操作系统平台。

国家自然科学基金(10075033)资助

第一作者: 冉蜀阳, 男, 1962 年 10 月出生, 1994 年研究生毕业于电子科技大学电磁测量技术及仪器专业, 获硕士学位, 现为四川大学副教授, 核技术应用在职博士生

收稿日期: 初稿 2001-08-15, 修回 2001-09-24

1 计算方法

1.1 EGSnrc

EGSnrc 是 EGS4 的一个新版本,与以往的版本相比有一些实质性的改进^[6],其中包括:引入了一种新的任意角度多次弹性散射理论;改进了的电子输运步长算法;对于离散的相互作用进行距离抽样而需要的假定的截面数据的正确应用方法;更精确的能量损失估算方法及一种精确的边界计算算法。由于这些改进,使得运用 EGSnrc 可以精确地模拟电离室响应和电子的反散射问题,这两个问题过去曾是密集历史型蒙特卡罗程序所遇到的最难精确解决的问题,因为在这两类问题中,蒙特卡罗程序计算的结果与模拟时选择的步长有关。

1.2 计算条件

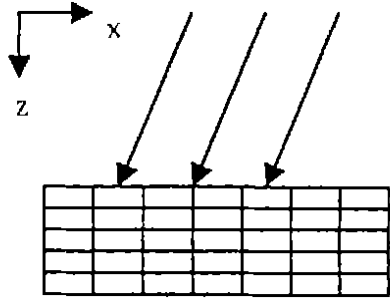


Fig.1 Irradiation scheme with EGSnrc for depth-dose calculation

计算空间为笛卡尔坐标系,分别在 X、Y 和 Z 坐标方向将受辐照材料划分成许多小格,划分的间隔在 3 个方向均可不同,最后可形成一个由许多小立体元组成的矩形几何体,如图 1 所示。矩形的平行电子束可以任意角度入射到材料表面,电子束大小可以按要求任意调节。经过足够多的蒙特卡罗抽样计算后,将得到在单位电子注量入射条件下每一个小立体元内沉积的绝对剂量值。根据这些剂量值就可得到被照射材料中任意方向的剂量分布。本文中假设受照射材料的大小为 15cm×15cm×2cm,在 X、Y 方向每小格边长为 1cm,而 Z 方向每小

格为 0.1cm,共 4500 个小立体元,电子束垂直于 X-Y 平面入射。

1.3 不同材料截面数据的获得

EGS4 程序所需的材料数据是由单独的实用程序 PEGS4 在蒙特卡罗程序计算之前预先产生的。规定介质所需的参数是:介质的密度,不同种类的原子个数,每一种原子的原子数、原子量以及化合物中不同原子的数目比,或者混合物的重量比等。辐照材料一般都有一定的配方,不可能是简单的单质或化合物,但只要知道具体配方中各种组成成分的种类和比重,就可以利用 PEGS4 生成相应的材料数据,保证计算结果的正确性和可靠性。本文中所选用的介质为聚乙烯和水,主要作为范例来说明利用 EGSnrc 蒙特卡罗程序实现电子束辐照剂量分布的计算和电子束辐射加工工艺优化的可行性和可靠性。

2 计算结果

图 2 给出了在各种不同能量的电子束辐照下聚乙烯材料的深度剂量分布,图 2 中的剂量值由 X-Y 平面最中心的沿 Z 轴变化的小立体元中沉积的能量给出;图 3 为入射电子能量均为 3.0 MeV 的聚乙烯和水两种材料的深度剂量分布的比较;图 4 和图 5 都是加了不同金属衬底板的聚乙烯材料中的深度剂量分布曲线,入射电子能量均为 3.0 MeV,但图 4 中衬底板上的聚乙烯厚度为 1.2 cm,而图 5 中的聚乙烯厚度仅为 0.8 cm。图 6 反映了电子束射野大小对不同深度的剂量分布的影响;图 7 则表明电子束在达到辐照材料之前经过的空气层的厚度对入射电子能量的损耗影响。

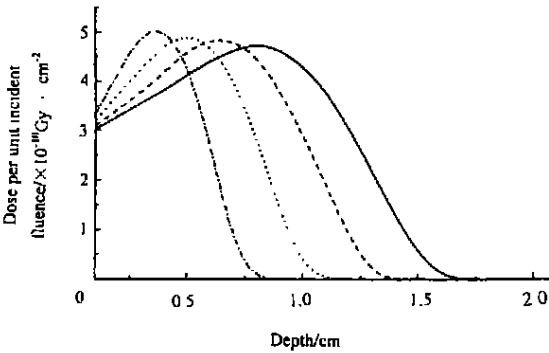


Fig. 2 Depth—dose profile in irradiated polyethylene for different incident electron energies
— 3.0MeV, — — — 2.5MeV, ... 2.0MeV, — · — · 1.5MeV

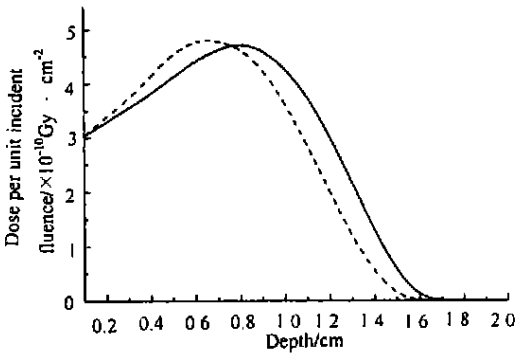


Fig. 3 Depth—dose profile in irradiated polyethylene and water for 3.0MeV incident electrons
— Polyethylene, — — — Water

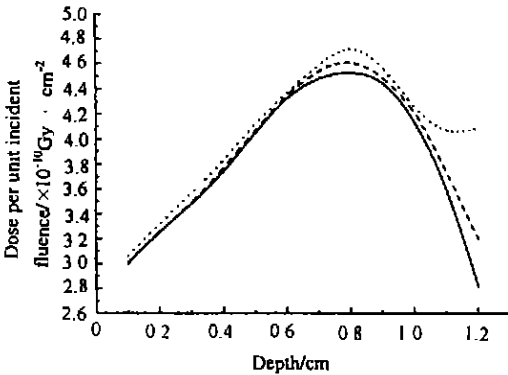


Fig. 4 Effects of base plate with different materials for depth—dose profile of 1.2cm thickness of polyethylene with 3.0MeV incident electrons
— AIR, — — — AL, ... PB

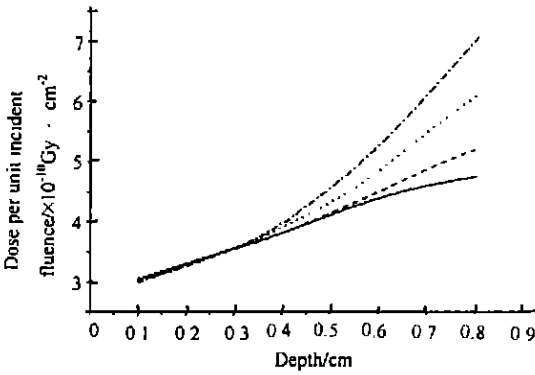


Fig. 5 Effects of base plate with different materials for depth—dose profile of 0.8cm thickness of polyethylene with 3.0MeV incident electrons
— NORMAL, — — — AL, ... CU, — · — · PB

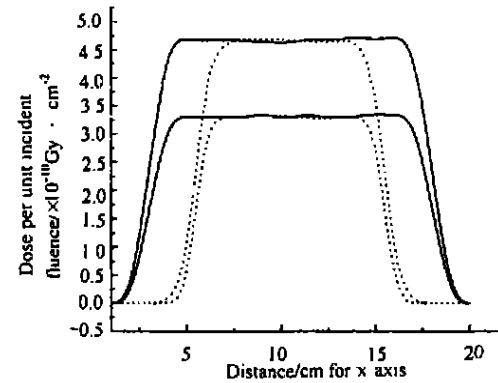


Fig. 6 Lateral dose distribution in the irradiation field with different incident electron beam fields. The two depths are 0.2cm and 0.8cm. The incident electron energy is 3.0MeV
— 15×15cm², ... 10×10cm²

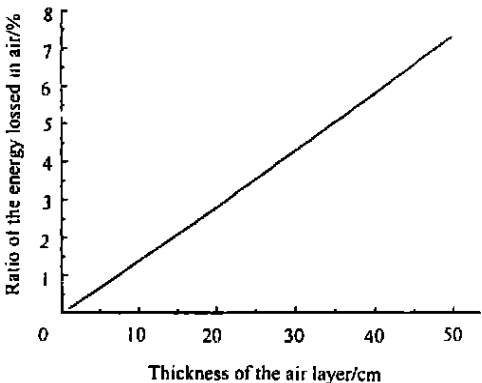


Fig. 7 Ratios of the energy lost in air layers with different thickness to initial incident energy

3 讨论

3.1 计算结果分析

产品辐射加工工艺条件的选择步骤是:首先根据电子束在材料中的贯穿能力,选择所需的电子束能量;其次根据材料所需的吸收剂量大小及对吸收剂量均匀性的要求,选择产品运动方式和传送速度;再进行产品的处理总量和经济成本核算;还应考虑环境限制、辐照工艺与整个工艺流程的关联以及其它特殊要求等综合因素^[1]。一定的电子束能量对于特定的材料来说,就对应于一个最佳的材料厚度,作为辐射工艺设计的基础,一般推荐采用产品前表面的入射剂量等于产品后表面上的出射剂量时所对应的产品厚度为最佳加工厚度。从图 2 和图 3 中可以看到,在产品加工之前,完全可以计算出各能量所对应的最佳厚度;如果入射的电子束不是单能的,而是有一定的能谱分布,也可以用蒙特卡罗方法计算出吸收剂量分布;事实上,我们可以得到任一小立体元中的绝对剂量值。

图 4 和图 5 表明,在电子束辐射加工场中,产品周围的物体会对产品的吸收剂量及其均匀度产生显著影响。高 Z 介质衬底对产品的深度剂量分布的影响比低 Z 介质衬底的影响大得多。但衬底材料所在的位置也很重要,如果衬底加在辐照材料的最佳厚度之前,即衬底上的辐照材料厚度小于最佳厚度,那么衬底的影响是十分显著的。

由图 6 可以看出,对聚乙烯材料而言,即使是电子束射野的大小不同,吸收剂量也没有明显的边界效应。

3.2 计算误差估计

蒙特卡罗方法的误差为概率误差,在具有有限方差的假设下,它的收敛速度为 $O(N^{-1/2})$,其中 O 是时间复杂度函数, N 是试验次数。本文中每种条件下的计算所追踪的粒子径迹数为 2×10^6 个,每一小立体元中的吸收剂量的误差均在 2% 以下,在 Linux 操作系统平台上,对于奔腾 III 处理器来说大约需要 3h。利用 EGSnrc 进行粒子输运问题的计算,其准确性是能够得到保证的,因为 EGS4 程序本身就基于清晰易懂的物理过程,具有灵活性;是一个经过各种基准实验验证了的程序;它的开放的结构,基于很多用户的贡献,其本身就是开放软件。目前它已被广泛应用于医学物理,自从 1979 年第一次公布以来,已有近千篇有关 EGS4 的论文发表。

3.3 蒙特卡罗计算的灵活性

利用 EGSnrc 计算电子束辐照剂量分布及实现电子束辐射加工工艺的优化不仅是完全可行的,而且还具有很大的灵活性。首先,蒙特卡罗方法的优点之一就是受几何条件限制小,能方便地处理复杂的几何问题,并且不因几何维数的增多而增加更多的计算时间。所以,辐照产品的形状改变并不会造成计算的困难,只需要按照一定的方式将产品的形状描述出来就可以进行精确的剂量计算;其次,图 1 中的所有小立体元的组成材料并不一定要求是同一种材料,只需在程序中说明每一个小立体元的组成材料,就可以进行非均匀介质中剂量分布的计算;另外,入射电子一般都需要经过一定的空气层才能到达产品表面,在已知空气层厚度的情况下,可以从空气层的表面开始模拟,得到更精确的计算结果。对于电子束加工而言,辐照工艺优化的途径主要是增加产品中有效的能量吸收和减少各种无效的能量损失,而通过事先进行精确的理论估算,可以得到大量有用的数据,在确保产品质量的前提下,尽最大可能降低加工成本。

参 考 文 献

1 张达明,张利民. 辐射研究与辐射工艺学报, 2000, 18(4): 272-277

- ZHANG D M, ZHANG L M. J Radiat Res Radiat Process, 2000, **18**(4):272—277
- 2 McLaughlin W L, Miller A, Fidan S *et al*. Radiat Phys Chem, 1977, **10**:119—127
- 3 Nelson W R, Hirayama H, Rogers D W O. The EGS⁴ code system, SLAC—Report—265, Stanford Linear Accelerator Center, 1985
- 4 Nelson W R, Bielajew A F, Rogers D W O. EGS⁴ in '94 (A Decade of Enhancements), SLAC—PUB—6625, 1994
- 5 Kawrakow I, Rogers D W O. The EGSnrc Code System: Monte Carlo Simulation of Electron and Photon Transport, NRCC Report PIRS—701, 2000
- 6 Kawrakow I. Accurate condensed history Monte Carlo simulation of electron transport. I. EGSnrc, the new EGS⁴ version, Med. Phys. 2000, **27**(3):485—498

APPLICATIONS OF EGSnrc MONTE CARLO SYSTEM IN CALCULATIONS OF DOSE DISTRIBUTION IN MATERIALS IRRADIATED BY ELECTRON BEAM AND OPTIMIZATION OF ELECTRON RADIATION PROCESSING

RAN Shuyang FU Yuchuan LUO Zhengming

(Key Laboratory for Radiation Physics and Technology of Education Ministry of China
Institute of Nuclear Science and Technology, Sichuan University, Chengdu 610064)

ABSTRACT The dose distribution in polyethylene and H₂O were calculated by a new EGS⁴ version—EGSnrc Monte Carlo code system with 1.5MeV—3MeV initial electron energy. The effects of different metal base—plate such as Al, Cu and Pb for dose depth profile in materials were compared. And the effects of different electron beam size on absorbed dose were calculated, too. The dose was given by absolute dose (Gy·cm²). The calculation uncertainty was controlled within 2%. This kind of work proposes a useful theoretical tool for optimizing technology of electron radiation processing.

KEYWORDS Electron beam, Radiation processing, Dose distribution, Monte Carlo technology, EGSnrc system

CLC O57, TL84