

一种改进的计算探测器校正因子的相关抽样方法*

武祯¹⁾ 李君利 程建平

(清华大学工程物理系 北京 100084)

摘要 对于小尺寸探测器处于大块介质的情形,在探测器的校正因子的Monte Carlo模拟中,存在两个难题:一是由于探测器尺寸很小粒子难以到达探测器并发生碰撞;二是两个随机变量比值难以达到要求精度.本文使用经过改进的粒子碰撞自动重要抽样方法,再结合相关抽样方法,解决了这两个难题,并在MCNP-4C程序平台上加以实现.除了粒子碰撞自动重要抽样以外,还选用了其他3种方法:直接模拟、区域分裂、强迫碰撞+Dxtran球分别与相关抽样方法结合,对一个简化的探测器校正因子计算模型进行了计算.实际计算结果表明,相关抽样方法无论与哪种方法结合,都起到了提高相关量计算效率的作用;而它与粒子碰撞自动重要抽样结合,比其他方法具有明显的优越性.

关键词 校正因子 Monte Carlo 相关抽样 粒子碰撞自动重要抽样

1 引言

在辐射剂量学领域,探测器标定时校正因子的计算是一个很重要的过程. Monte Carlo模拟在此类计算中有着很广泛的应用. 例如,在水模中测量点实际剂量与探测器的测量剂量的转换因子计算;或者电离室探测器中,有无中心电极对测量剂量的影响计算等. 在这类问题中,通常是需要计算两个随机变量的比值. 因此,如果使用常规模拟,需要分别进行两次模拟,然后再求两次结果的比值. 但是,当两个随机变量的期望值差别很小的时候,两次模拟的统计误差必须达到非常高的精度,其比值才能达到要求的误差,这中间存在着很大的困难.

在20世纪80年代早期,相关抽样方法^[1]被提出. 而后,有人^[2]使用相关抽样方法,利用两个随机变量之间的相关性,提高计算效率,从而部分地解决了这个问题. 但是,在使用相关抽样的过程中,还存在着一个问题:就是在这类校正因子的计算中,探测器体积相对整个模拟的体积来说都非常小,因此在大量的随机游动历史中,能够到达探测器附近的粒子占输运粒子总数的比例很小;而且由于探测器尺寸非常小,所以在探测器中发生碰撞产生能量沉积的粒子更加少.

后来,在感兴趣区域进行粒子分裂的方法被用来与相关抽样结合^[3]来提高计算效率,本文则使用了粒子碰撞自动抽样方法^[4, 5],并对其进行了改进,然后与相关抽样方法结合,从而达到了更高的计算效率.

2 方法介绍

2.1 相关抽样方法

相关抽样方法的基本思想是利用两个随机变量的相关性. 本文所描述的问题中,两个随机变量都为感兴趣区域的沉积能量,两者的相关性表现在:感兴趣区域除了材料不同之外,其他条件都相同. 相关抽样方法的具体实现主要包括以下3种.

第1种方法^[6]如图1(a)和(b)所示,计算材料分别为 B_1 和 B_2 的感兴趣区域 B 中的能量沉积的两个模拟过程完全独立,但是对于两者的同一次随机游动历史,则强制使用相同的初始随机数,这样就使两个模拟过程中粒子在区域 A 中的历史完全相同,只有到达感兴趣区域 B 中时,才会由于材料 B_1 和 B_2 的不同而产生的历史不同,从而产生了相关性. 本方法的缺点有两个:一是即使粒子并没有在感兴趣区域造成能量沉积,粒子的整个历史都要模拟两次,这样会造成大

2005-11-21 收稿, 2005-12-21 收修改稿

* 国家自然科学基金(10575065)资助

1) E-mail: wu_zhen01@mails.tsinghua.edu.cn

量的粒子历史的浪费. 二是由于独立模拟, 两个随机变量的相关性无法给出, 从而无法估计使用此方法所提高效率.

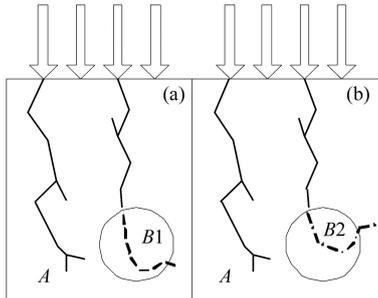


图1 相关抽样方法1示意图

(a) 模拟条件1; (b) 模拟条件2. (圆圈内为区域B).

第2种方法^[7]则使用一个模拟过程同时得到粒子在两种材料的能量沉积. 其方法是在粒子进入感兴趣区域之后, 每与第一种材料发生一次作用, 包括能量和方向的改变, 都使用第二种材料的截面进行粒子权重纠偏. 本方法的优点是所计算得到的两个随机变量的相关性最强; 但是在进行粒子权重纠偏时, 则会涉及到一些相当复杂的问题需要解决.

第3种方法^[2]对前两种方法进行了折衷, 当粒子在区域A时都使用一个随机游动历史; 只有当粒子进入感兴趣区域B时, 才记下此时的随机数以及粒子状态, 然后改变感兴趣区域的材料, 进行两次模拟, 如图2. 本方法既解决了方法1中的粒子历史浪费问题, 又不用涉及到方法2中的粒子权重纠偏问题. 所以本文主要使用此种相关抽样方法.

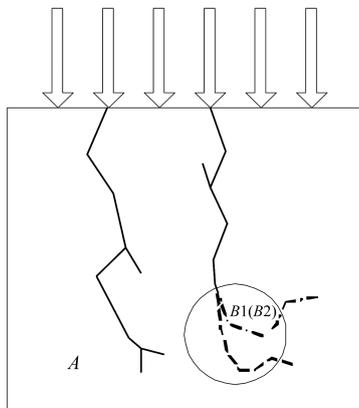


图2 相关抽样方法3示意图

对于普通的校正因子计算问题, 只使用相关抽样方法即可得到较好的结果. 但是如果探测器相对于整个系统甚小时, 由于粒子很难到达探测器以及在探测器中发生碰撞, 所以单使用相关抽样方法无法并不能

满足计算要求. 前人在使用相关抽样方法的同时, 使用了在感兴趣区域进行粒子分裂的方法来提高模拟效率^[3]. 本文则引进了粒子碰撞自动重要抽样方法, 并对其进行了改进, 用来代替粒子分裂方法.

2.2 粒子碰撞自动重要抽样方法

该方法主要用于解决感兴趣区域尺寸过小, 粒子难以到达并在其中发生碰撞的问题, 其原理^[4, 5]如下:

对于一个粒子的随机游动历史 $h = \{(\mathbf{r}_m, \boldsymbol{\omega}_m, W_m), m = 1, M\}$, 其中 \mathbf{r}_m , $\boldsymbol{\omega}_m$, W_m 分别为粒子经过第 m 次碰撞后的位置向量, 方向向量及权重, 在粒子进入感兴趣区域 v 时将其强行截断, 此时的随机游动历史为 $h^* = \{(\mathbf{r}_m, \boldsymbol{\omega}_m, W_m), m = 1, M^*\}$. 对于 h^* 的每个粒子 $(\mathbf{r}_m, \boldsymbol{\omega}_m, W_m)$, 使用强迫碰撞方法在感兴趣区域 v 中产生一个虚拟粒子 $(\mathbf{r}_{m,Fv}, \boldsymbol{\omega}_{m,Fv}, W_{m,Fv})$;

$\mathbf{r}_{m,Fv}$ 为在感兴趣区域均匀抽样

$$\boldsymbol{\omega}_{m,Fv} = \frac{\mathbf{r}_{m,Fv} - \mathbf{r}_m}{|\mathbf{r}_{m,Fv} - \mathbf{r}_m|}, \quad (1)$$

$$W_{m,Fv} = W_m P_F(\mathbf{r}_m, \mathbf{r}_{m,Fv}), \quad (2)$$

$$P_F(\mathbf{r}_m, \mathbf{r}_{m,Fv}) = \frac{3V_F P(\mathbf{r}_m, \boldsymbol{\omega}_{m,Fv})}{t_{2k}^3(\mathbf{r}_m, \boldsymbol{\omega}_{m,Fv}) - t_{1k}^3(\mathbf{r}_m, \boldsymbol{\omega}_{m,Fv})} \times \left(\exp\left(-\int_0^{t_{1k}(\mathbf{r}_m, \boldsymbol{\omega}_{m,Fv})} \sum_{\text{tot}}(\mathbf{r}_m + t\boldsymbol{\omega}_{m,Fv}) dt\right) - \exp\left(-\int_0^{t_{2k}(\mathbf{r}_m, \boldsymbol{\omega}_{m,Fv})} \sum_{\text{tot}}(\mathbf{r}_m + t\boldsymbol{\omega}_{m,Fv}) dt\right) \right), \quad (3)$$

式中 $t_{2k}(\mathbf{r}_m, \boldsymbol{\omega}_{m,Fv})$ 和 $t_{1k}(\mathbf{r}_m, \boldsymbol{\omega}_{m,Fv})$ 分别表示从 \mathbf{r}_m 出发, 沿 $\boldsymbol{\omega}_{m,Fv}$ 进入和离开感兴趣区域 v 的距离;

V_F 为感兴趣区域的体积; $P(\mathbf{r}_m, \boldsymbol{\omega}_{m,Fv})$ 表示在 \mathbf{r}_m 粒子沿 $\boldsymbol{\omega}_{m,Fv}$ 发射的概率; $\sum_{\text{tot}}(\mathbf{r}_m + t\boldsymbol{\omega}_{m,Fv})$ 为粒子在沿 $\boldsymbol{\omega}_{m,Fv}$ 方向, 距 \mathbf{r}_m 距离为 t 处的宏观总截面.

然后选择随机数 u , 如果

$$\frac{\sum_{m=1}^{p-1} W_{m,Fv}}{M^*} < u < \frac{\sum_{m=1}^p W_{m,Fv}}{M^*}, \quad p \leq M^*,$$

则在 $(\mathbf{r}_{m,Fv}, \boldsymbol{\omega}_{m,Fv}, W_{m,Fv})$, $m = 1, M^*$ 中选择第 p 个虚拟粒子作为在 v 中驻留的粒子, 其权重变为 $\sum_{m=1}^{M^*} W_{m,Fv}$, 粒子 $(\mathbf{r}_{p,Fv}, \boldsymbol{\omega}_{p,Fv}, \sum_{m=1}^{M^*} W_{m,Fv})$ 将在 $\mathbf{r}_{p,Fv}$ 处发生碰撞, 然后继续输运直到其自然死亡为止.

此方法的最大的优点为不论实际的粒子历史有没有进入感兴趣区域, 有没有在感兴趣区域发生碰撞, 都会在感兴趣区域产生一个虚拟粒子并发生碰撞, 在感兴趣区沉积能量.

2.3 方法改进

在粒子碰撞自动重要抽样方法中, 当被选中的虚拟粒子在感兴趣区域中开始输运以后, 会一直输运到其自然死亡. 但是, 由于感兴趣区域相对于整个系统甚小, 所以虚拟粒子之后的大量输运历史会发生在其离开感兴趣区域之后. 在这段历史中, 即使粒子重新返回感兴趣区域, 由于同样的原因, 其在感兴趣区域中发生再次碰撞从而沉积能量的几率也甚小. 因此粒子离开感兴趣区域之后的这段历史对该区域的能量沉积贡献很小, 但是其占用的粒子输运时间则可能相当长. 在借鉴了MCNP-4C^[8]的Dxtran球方法对类似情况的处理之后, 本文对粒子碰撞自动抽样方法进行了改进. 在粒子离开感兴趣区域之后, 使用俄罗斯轮盘赌的方式来决定粒子是否被杀掉.

设粒子离开感兴趣区域时的权重为 W , 如果源粒子权重为 W_0 . 取权重限值 $W_1 = 0.5W_0$ 和 $W_2 = 0.25W_0$. 如果 $W > W_2 \frac{\text{IMP}_{\text{source}}}{\text{IMP}_{\text{now}}}$, 则粒子继续正常输运, $\text{IMP}_{\text{source}}$ 和 IMP_{now} 分别为源粒子所在区域重要性和当前粒子所在区域重要性(一般可直接设为1); 反之, 则选择随机数 u , 如果 $W > W_1 \frac{\text{IMP}_{\text{source}}}{\text{IMP}_{\text{now}}} u$, 则 $W = W_1 \frac{\text{IMP}_{\text{source}}}{\text{IMP}_{\text{now}}}$, 粒子继续输运. 反之, 则杀掉该粒子. 由于实际上此时的虚粒子权重都很小, 因此大部分虚粒子在离开感兴趣区域后就被杀掉, 从而大大缩短了时间. 而本方法也保证了输运历史的无偏性.

改进后的粒子碰撞自动重要抽样方法可以大大提高探测器能量沉积的计算效率. 然后在结合相关抽样方法, 当虚粒子到达感兴趣区域后, 改变感兴趣区域的材料, 对每一个虚粒子使用相同的初始随机数在不同的材料内进行两次输运, 利用这两次输运的相关性, 从而使两种不同材料的探测器能量沉积比的计算效率也进一步提高.

总之, 将粒子碰撞自动重要抽样方法和相关抽样方法结合起来, 即可实现一个用于计算探测器校正因子的高效的特殊Monte Carlo方法.

2.4 相关量均值、方差及计算效率

本文中提到的相关量为两个随机变量 x, y 的比值 R, R 的均值估计^[2]为

$$\bar{R} = \bar{y}/\bar{x}, \quad (4)$$

式中 \bar{x}, \bar{y} 为 x, y 的均值估计; R 的方差估计为

$$s_R^2 = (\bar{R})^2 \left[\left(\frac{s_x}{\bar{x}} \right)^2 + \left(\frac{s_y}{\bar{y}} \right)^2 - \frac{2s_{xy}^2}{(\bar{x}\bar{y})} \right], \quad (5)$$

式中 $s_x^2 = \sum_{i=1}^N \frac{(x_i - \bar{x})^2}{N(N-1)}$, 为随机变量 x 的方差估计; N 为模拟的总粒子数

$$s_{xy}^2 = \frac{1}{N(N-1)} \left(\sum_{i=1}^N x_i y_i - \frac{\sum_{i=1}^N x_i \sum_{i=1}^N y_i}{N} \right),$$

为随机变量 x, y 的协方差估计.

两个随机变量的相关性由相关系数 ρ 给出, 其估计值为

$$\rho_{xy} = \frac{s_{xy}}{s_x s_y}, \quad (6)$$

ρ 取值范围为 $[-1, 1]$.

与普通Monte Carlo方法类似, 相关抽样的计算效率也可以由FOM值给出

$$\text{FOM} = \frac{1}{T \cdot s_R^2}. \quad (7)$$

相关抽样FOM值和普通FOM值计算不同, 这里的 T 为得到比值 R 所需要的总时间. 如果在计算相关量的过程中没有使用相关抽样方法, 则 T 为计算两个随机变量的时间和.

3 方法实现

本文的工作是在大型Monte Carlo程序MCNP-4C平台下进行的. MCNP本身虽然是包含了相关抽样方法, 但是其使用的是相关抽样方法1, 对于两个相关的问题, 在对应的初始粒子发射的时候都使用相同的随机数, 从而间接利用其相关性. 但是该方法造成了大量粒子历史的重复, 同时无法给出两个问题的相关性. 所以, 本文对MCNP-4C的源程序进行了修改, 在其中添加了相关抽样方法3, 可分别给出两个相关的随机变量的均值估计 \bar{x}, \bar{y} , 以及 s_x, s_y 和 $\text{FOM}_{\bar{x}}, \text{FOM}_{\bar{y}}$, 同时给出它们的比值 R 的均值估计 \bar{R} , 以及其比值在不相关情况下的 $s_{R_1}, \text{FOM}_{R_1}$ 和相关情况下的 $s_{R_2}, \text{FOM}_{R_2}$. 本技巧与MCNP-4C的其他技巧, 如赌分裂、强迫碰撞、Dxtran球等不冲突, 可同时使用.

同时, 又在MCNP-4C中实现了经过改进的粒子碰撞自动重要抽样方法, 该技巧与上述相关抽样方法也不冲突, 可以同时使用.

4 方法比较

为验证改进后的粒子碰撞自动重要抽样与相关抽样结合的方法在探测器校正因子计算中的优越性, 本文采用了如下模型, 将其与多种 Monte Carlo 技巧进行了比较. 该模型为一个水模剂量测量中的简化的探测器校正因子计算模型, 探测器密度为 1g/cm^3 的丙胺酸 ($\text{C}_3\text{H}_7\text{NO}_2$) 探针, 其位置在水深 10cm , 探针长 5mm , 半径为 2.5mm . 粒子源为 ^{60}Co 源, 从水面入射. 求单位粒子在丙胺酸中和将丙胺酸换成水后在水中的能量沉积 $E_{\text{C}_3\text{H}_7\text{NO}_2}$, $E_{\text{H}_2\text{O}}$ 以及两者的比值 R .

首先为了验证改进后的粒子碰撞自动重要抽样方法的正确性, 将使用改进前后的粒子碰撞自动重要抽样方法分别计算丙胺酸探测器中的能量沉积 $E_{\text{C}_3\text{H}_7\text{NO}_2}$, 并对结果进行了比较. 见表1.

改进前的粒子碰撞自动重要抽样方法的正确性在

表2 探测器校正因子模拟计算结果

方法	粒子数	$10^{-6} \times E_{\text{C}_3\text{H}_7\text{NO}_2}$ /MeV	$10^{-6} \times E_{\text{H}_2\text{O}}$ /MeV	R_{corr}	R_{incorr}	FOM_{corr}	$\text{FOM}_{\text{incorr}}$	ρ
直接模拟	1×10^8	2.039 ± 0.107	2.101 ± 0.108	0.970 ± 0.008	0.970 ± 0.071	87.12	0.6485	0.985
区域分裂	1×10^7	2.028 ± 0.070	2.082 ± 0.071	0.974 ± 0.004	0.974 ± 0.047	570.5	17.205	0.994
Dxtran球+强迫碰撞	1×10^6	2.032 ± 0.023	2.099 ± 0.024	0.968 ± 0.001	0.968 ± 0.016	637200	748.5	0.997
自动重要抽样(改进)	1×10^6	1.990 ± 0.010	2.054 ± 0.011	0.969 ± 0.001	0.969 ± 0.007	419600	1929	0.990

分析表2数据, 可得出以下结论:

1) 4种方法能量沉积计算结果基本符合. 其中直接模拟的结果误差较大, 在使用了区域分裂之后, 误差有了一定的减小, 但依然不理想. Dxtran球+强迫碰撞与粒子自动重要抽样的原理类似, 也是将粒子引到指定区域然后强迫粒子发生碰撞, 但由于其需要定义Dxtran球将感兴趣区域完全包住, 而且粒子是被引到Dxtran球表面, 所以与粒子自动重要抽样的将粒子直接引到感兴趣区域内部的方法相比, 效率还是不够高. 它计算能量沉积的效率还是要比粒子碰撞自动重要抽样方法差. 所以, 在对能量沉积的计算上, 改进后的粒子碰撞自动重要抽样方法比其他方法明显优越.

2) 在与相关方法结合之后, 4种方法得到的沉积能量比值的误差都有了明显的下降, 其FOM值也显著提高. 对于不同的方法, 与相关抽样方法结合后的相关因子有所不同, 因此FOM值的提高幅度也有所

文献[3]中已经得到肯定, 从表1可以看出, 在对其进行改进之后, 结果以及误差都与改进前符合得很好, 从而确保了改进后方法的正确性. 而且, 由于计算时间的大大缩短, 使改进后方法的FOM值提高了2倍多.

表1 粒子碰撞自动重要方法改进前后计算结果比较

粒子碰撞自动重要 抽样方法粒子数	改进前	改进后
1×10^6	1×10^6	1×10^6
$10^{-6} \times E_{\text{C}_3\text{H}_7\text{NO}_2}$ MeV	1.990 ± 0.010	1.990 ± 0.010
FOM	3497	8894

为了使比较更加客观, 选用了直接模拟、区域分裂、强迫碰撞+Dxtran球3种方法与相关抽样结合, 来与本文的方法进行了比较. 表2给出了各个技巧的计算得到的 $E_{\text{C}_3\text{H}_7\text{NO}_2}$ 和 $E_{\text{H}_2\text{O}}$, 使用和不使用相关抽样计算得到的比值 R_{corr} 和 R_{incorr} , 以及各自的误差及FOM值的变化, 还给出了各种技巧使用相关抽样后的相关因子 ρ .

不同. 其中, 以Dxtran球+强迫碰撞方法的相关因子最大, 因此它最后得到的FOM值最大, 但粒子自动重要抽样方法的FOM值也相当大. 为了进一步验证粒子自动重要抽样方法与相关抽样方法结合的优越性, 将探测器校正因子计算模型做如下改动: 水深改为 15cm , 探针长改为 2mm , 半径改为 0.025mm . 对于直接模拟和区域分裂由于探测器尺寸过小, 计算误差太大. 所以只使用Dxtran+强迫碰撞方法与相关抽样方法结合, 与本方法进行比较, 结果如表3.

从表3可以看出, 在探测器进一步变小, 其在水中的位置变得更深之后, 从能量沉积的计算效果上看, 改进后的粒子碰撞自动重要抽样方法比Dxtran球+强迫碰撞法的优越性进一步增加. 而它与相关碰撞方法结合后计算的校正因子的FOM值也超过了Dxtran球+强迫碰撞法, 说明它的综合效果比Dxtran球+强迫碰撞法要好.

表3 条件改动后探测器校正因子模拟计算结果

方法	粒子数	$10^{-9} \times E_{\text{C}_3\text{H}_7\text{NO}_2}$ /MeV	$10^{-9} \times E_{\text{H}_2\text{O}}$ /MeV	R_{corr}	R_{incorr}	FOM_{corr}	$\text{FOM}_{\text{incorr}}$	ρ
Dxtran球+强迫碰撞	1×10^7	3.338 ± 0.087	3.458 ± 0.089	0.9654 ± 0.0006	0.9654 ± 0.0354	123200	16	0.999
自动重要抽样(改进)	1×10^6	3.188 ± 0.021	3.300 ± 0.022	0.9659 ± 0.0008	0.9659 ± 0.0089	328000	1360	0.992

5 结论

在探测器校正因子的计算中, 相关抽样方法利用两个物理量的相关性, 可起到提高其相关量的计算效

率的作用. 而将其与改进后的粒子碰撞自动重要抽样方法相结合, 利用其将粒子引到感兴趣区域并强迫发生碰撞的优点, 很好地解决了由于探测器尺寸小, 粒子很难进入其中并发生碰撞的问题, 从而进一步提高了相关量的计算效率.

参考文献(References)

- 1 PEI Lu-Cheng, ZHANG Xiao-Ze. Monte Carlo Method and the Application in Particle Transport. Beijing: Science Press, 1980. 197—200 (in Chinese)
(裴鹿成, 张孝泽. 蒙特卡罗方法及其在粒子输运问题中的应用. 北京: 科学出版社, 1980. 197—200)
- 2 MA Chang-Ming, Nahum A E. Medical Physics, 1993, **20**(4): 1189—1199
- 3 Buckley L A, Kawrakow I, Rogers D W O. Medical Physics, 2004, **31**(12): 3425—3435
- 4 FAN Jia-Jin, LI Jun-Li et al. Science in China(Series E), 2003, **46**(3): 271—277 (in Chinese)
(范佳锦, 李君利等. 中国科学(E辑), 2003, **33**(5): 452—458)
- 5 FAN Jia-Jin. Research of Rare But Important Events Simulation in Monte Carlo Methods. Beijing: Department of Physics Engineering, Tsinghua University, 2004. 55—58 (in Chinese)
(范佳锦. 解小概率大贡献问题的蒙特卡罗方法研究. 北京: 清华大学工程物理系, 2004. 55—58)
- 6 Bielaiew A F. Physics in Medicine and Biology, **35**(4): 501—516
- 7 Hedtjarn H, Carlsson G, Williamson J F. Physics in Medicine and Biology, 2002, **47**(3): 351—376
- 8 Briesmeister J F. MCNPTM—A general Monte Carlo *N*-particle transport code (Version 4C): LA-13709-M-Manual. USA: Los Alamos Laboratory, 2000. 2150—2158

An Improved Correlated Sampling Method for Calculating Correction Factor of Detector^{*}

WU Zhen¹⁾ LI Jun-Li CHENG Jian-Ping

(Department of Engineering Physics, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

Abstract In the case of a small size detector lying inside a bulk of medium, there are two problems in the correction factors calculation of the detectors. One is that the detector is too small for the particles to arrive at and collide in; the other is that the ratio of two quantities is not accurate enough. The method discussed in this paper, which combines correlated sampling with modified particle collision auto-importance sampling, and has been realized on the MCNP-4C platform, can solve these two problems. Besides, other 3 variance reduction techniques are also combined with correlated sampling respectively to calculate a simple calculating model of the correction factors of detectors. The results prove that, although all the variance reduction techniques combined with correlated sampling can improve the calculating efficiency, the method combining the modified particle collision auto-importance sampling with the correlated sampling is the most efficient one.

Key words correction factor, Monte Carlo, correlated sampling, particle collision auto-importance sampling

Received 21 November 2005, Revised 21 December 2005

^{*} Supported by National Natural Science Foundation of China (10575065)

1) E-mail: wu_zhen01@mails.tsinghua.edu.cn