

团 体 标 准

CIRA XXXXX—XXXX

辐射加工吸收剂量数学建模方法的 选择和使用指南

Guide for Selection and Use of Mathematical Methods for Calculating Absorbed
Dose in Radiation Processing Applications

(征求意见稿)

XXXX – – XX 发布

XXXX – XX – XX 实施

中国同位素与辐射行业协会 发布

目 次

前言	II
1 范围	1
2 规范性引用文件	1
3 术语和定义	1
4 常用的数学建模方法	4
5 数学建模的要求	5
6 数学建模方法的选择	6
7 模型的确认与验证	7
8 模型计算的不确定度	8
9 记录和归档	8
10 参考文献	9
附录 A（资料性附录）三维结构模型的建立和使用	11

前 言

本标准按照GB/T 1.1-2009给出的规则起草。

请注意本文件的某些内容可能涉及专利，本文件的发布机构不承担识别这些专利的责任。

本标准由中国同位素与辐射行业协会提出。

本标准由核工业标准化研究所归口。

本标准起草单位：上海金鹏源辐照技术有限公司、北京鸿仪四方辐射技术股份有限公司、北京核二院比尼新技术有限公司、山东蓝孚高能物理技术股份有限公司、同方威视技术股份有限公司、陕西方圆高科实业有限公司、黑龙江省科学院技术物理研究所、北京三强核力辐射工程技术有限公司、威高集团有限公司。

本标准主要起草人：陈强、燕瑾、吴勤良、彭伟、覃怀莉、金涛、赵弘韬、李召朋、赵素霞、刘江平、刘俊、刘戈、桑广星、杨光、王维、蒋继成、李春松和姜昊。

辐射加工吸收剂量数学建模方法的选择和使用指南

1 范围

本标准规定了用于计算辐射加工吸收剂量常见的五种数学建模方法的选择和使用。

本标准适用于能量低于25MeV的电子和光子的粒子输运计算，仅限于确定 ^{137}Cs 或 ^{60}Co 衰变时发射的光子、来自电子加速器的高能电子或由电子转靶产生的X射线的空间剂量分布。

2 规范性引用文件

下列文件对于本文件的应用是必不可少的。凡是注日期的引用文件，仅注日期的版本适用于本文件。凡是不注日期的引用文件，其最新版本（包括所有的修改单）适用于本文件。

GB/T 15446 辐射加工剂量学术语

GB/T 3102.10 核反应和电离辐射的量和单位

GB/T 16509 辐射加工剂量测量不确定度评定导则

3 术语和定义

下列术语和定义适用于本文件。

3.1

辐射场 radiation field

描述粒子密度以及能量、方向和粒子类型在任意点分布的函数。

3.2

粒子输运理论 radiation transport theory

根据辐射与物质相互作用的物理定律对辐射场传播进行的论述。

3.3

输运方程 transport equation

描述粒子或辐射通过介质的运动积分微分方程。

3.4

数值收敛 numerical convergence

方程或方程组的迭代解变化小于某个定义值的过程。

3.5

数学方法 mathematical method

一种利用代数关系和数学运算来表示某系统及其动力学来求解电子、光子及其耦合的输运问题的方法。

3.6

随机方法 stochastic methods

使用包含随机变量的数学方程来描述或概括所研究系统中的物理过程的方法。

3.7

数学模型 mathematical model

基于物理定律、经验关系式或两者兼有的物理问题的数学描述。

3.8

蒙特卡罗方法 Monte Carlo method

利用辐射相互作用的统计计算目标体积中的吸收剂量、能谱、电荷、注量和注量率的一种模拟方法。

3.9

偏倚(应用于蒙特卡罗模拟) biasing (in a Monte Carlo simulation)

以统计有效的方式调整源粒子选择或输运粒子的权重，以增加探测器响应最重要区域中的粒子。

3.10

累积因子 build-up factor

指定辐射量(如吸收剂量)在该介质中任何点的总值与到达该点的未碰撞入射辐射对该量的贡献之比。

3.11

(粒子) 历史 history (of a particle)

粒子历史是随机模拟事件(例如, 蒙特卡罗)中所使用粒子轨道上的所有模拟相互作用的记录。

3.12

确定性方法 deterministic method

利用输运方程直接计算辐射源和边界条件作用下的全空间辐射场的数学方法。

3.13

点核法 point kernel method

一种基于积分点源贡献计算剂量的确定性方法。

3.14

离散坐标法 discrete ordinate method

将运动方向分成有限个离散坐标角的输运方程近似数值解的确定性方法。

3.15

经验方法 empirical method

一种根据实验数据或蒙特卡罗计算结果拟合近似函数的方法。

3.16

半经验模型 semi-empirical model

一种经验模型，其中拟合参数受到约束，使得模型满足一个或多个物理定律或规则。

3.17

准确度 accuracy

测量结果与被测量真值之间的一致程度。

3.18

基准 benchmarking

使用规定的不确定度标准将模型预测与相似条件下的测量或计算进行比较。

注：在常规使用数学模型之前，基准测试是一个先决条件，具体参考7.1。

3.19

(标准不确定度的)A类评定 Type A evaluation (of standard uncertainty)

通过对重复性条件测量所得量值的统计分析，评定测量不确定度的方法。

注：蒙特卡罗方法的固有抽样不确定度可以通过对模拟历史数量的统计抽样技术估计为A类不确定度。对于没有偏倚的计算，统计不确定度按历史数的平方根的倒数进行计算。

3.20

(标准不确定度的)B类评定 Type B evaluation (of standard uncertainty)

通过不是对测量所得量值的统计分析手段，评定测量不确定度的方法。

注：B类不确定度与近似模型中电子的物理路径所需的必要简化假设和不同相互作用截面的不确定性有关。这些B类不确定度可以通过分析技术来估计。B类不确定度可能是由于模拟辐照容器与实际辐照容器的几何形状和材料组成不同造成的。B类不确定度的其他来源是对问题的描述和对实际物理过程的近似不足。

3.21

计算结果的不确定度 uncertainty of calculation result

与计算结果相关的非负参数，用于表征可合理归因于导出量的值的分布。

注：和吸收剂量测量类似，吸收剂量的计算也伴随着不确定度的估计。

3.22

确认 validation

收集文件化的实验证据，用于表明数学方法是一种可靠的预测技术。

3.23

验证 verification

通过对证据的检查，证实数学方法已正确地、成功地应用于该问题。

3.24

分区 zoning

用于将较大的区域分割成较小片段的几何描述，用于计算剂量。

3.25

空间网格 spatial mesh

将目标辐射相互作用体积细分为离散空间元素的网格，用于执行输运计算。

4 常用的数学建模方法

4.1 方法类型

4.1.1 常见的五种数学建模方法：蒙特卡罗方法、点核法、离散坐标法、半经验方法和经验方法。

4.1.2 蒙特卡罗方法、点核法、离散坐标法都是基于辐射与物质相互作用的物理学原理。其中点核法、离散坐标法为确定性方法。

4.1.3 经验方法和半经验方法是基于特定系统中测量或计算的统计关系。

4.1.4 粒子输运的数学方法可用于估计小体积或点的吸收剂量，通常使用水吸收剂量来表示被照材料的吸收剂量，在将水吸收剂量转换为被照材料的剂量时，应进行额外的修正。整个产品内的剂量分布可以通过计算产品内不同点处的吸收剂量来确定。

4.2 蒙特卡罗方法

4.2.1 蒙特卡罗方法用于模拟电子、光子从源到剂量记录体积的输运过程。

4.2.2 与其他方法不同，蒙特卡罗方法原则上可以解释所有粒子的相互作用，并提供所有实际的散射和能量损失事件的模拟。所有能对吸收剂量产生贡献的因素都可以考虑在内，例如，来自目标区域附近物体的散射电子和散射光子。此外，蒙特卡罗方法可很好地模拟复杂三维几何中粒子的实际输运问题。

4.2.3 蒙特卡罗方法不可能精确地模拟所有光子、电子的路径，可以采用近似电子路径和多重散射方法，这种粒子偏倚可能带来较大的误差，尤其是在表面或材料界面粒子输运中非常重要的位置，建模时需要注意。

4.2.4 蒙特卡罗方法的主要缺点包括：

- a) 在几何上应用时，由于厚屏蔽、复杂迷宫和空腔等因素会造成注量大幅度减少；
- b) 当计算区域体积较小时，蒙特卡罗计算可能需要减方差技巧。当使用减方差技巧时需谨慎，该技术通过引入抽样概率来增加低权重相空间的统计量，抽样概率可能变化很大，并且对蒙特卡罗计算的收敛性有不利影响。
- c) 在进行剂量计算与剂量测量比对时，由于剂量计放置的位置、方向可能会有偏差，所以宜在剂量计位置附近选取一系列位点进行计算，给出数值。

4.2.5 A类不确定度：蒙特卡罗方法中，由于抽样引起的吸收剂量计算值的固有不不确定度可以通过对历史数量应用统计抽样技术来估计。对于不带偏倚的计算，统计不确定度以历史数量平方根的倒数来衡量。

4.2.6 B类不确定度：可通过分析技术进行估算，其中包括敏感性分析（通过改变与不确定度相关的量的参数值，并重新运行计算以比较结果）。计算的各种不确定度分量可以通过剂量测量进行验证。

4.3 确定性方法

4.3.1 该方法使用解析方程来计算目标材料的粒子注量率，对于不能直接求解的复杂方程，可使用迭代法。

4.3.2 离散坐标法可用于电子和光子[1-2]。通过求解积分和偏导数项中都包含的输运方程来计算剂量。目前已开发了各种方法来求解这些方程[3]，所有这些方法都对角变量进行了限制，使得粒子入射仅表示沿有限方向输运，而不是输运方程中所包含的所有可能方向。该技术可扩展到二维和三维空间粒子输运[4]。

4.3.3 点核法主要用于光子输运[5]。在点核法中，辐射源体积近似为若干各向同性的点源，每个剂量点的吸收剂量是通过求和所有点源的剂量贡献得到的。计算中考虑了剂量点和点源之间的距离，并通过使用累积因子来近似中间产物中的散射。累积因子可通过理论计算，有时也拟合在经验函数中。这些累积因子为周围材料的散射光子的贡献提供了近似值，在不同的散射材料中，也需要近似计算能谱和原子序数的变化。

4.3.4 确定性方法比蒙特卡罗方法计算更快，并且可以作为剂量测量的基准。

4.3.5 点核法处理的精度与蒙特卡罗计算的精度相当[6]。

4.3.6 确定性方法没有给出统计不确定度的固有估计，迭代法易受数值收敛误差和振荡解的影响。

4.3.7 确定性模型中不确定度主要来自于三个方面：

- a) 用于创建物理模型和截面的近似值(例如，确定性方法中忽略了散射能量)；
- b) 表示空间、角度中连续问题的效果以及在这些变量中具有有限网格的能量；
- c) 由于有限数量的离散坐标导致的截断误差。

4.4 经验和半经验方法

4.4.1 经验方法通常涉及将分析函数拟合到实验测量或使用其他方法的计算。模型方程通常限于特定的设施，其预测能力通常不能转移到其他设施或产品。有一些简单的方程，可以用来计算凝聚态[7]物质中电子的范围、能量损失[8]和不同材料中的深度剂量关系[9]。

4.4.2 半经验方法通过拟合参数使得模型满足一个或多个物理定律或规则。该方法提供了比经验方法更普遍适用的数学模型，并且可以根据设备、源和产品的物理参数进行调整，例如能量、密度和组成。通常该方法基于软件的可变参数输入程序，可以使用方程、代码和数据库[10-13]计算。

4.4.3 经验模型和半经验模型计算速度快，不需要截面数据、累积因子和分区，因为它们包含在模型的系数中。与蒙特卡罗方法或确定性方法不同，该方法不需要专门的知识，半经验模型可适用于多种设施。

4.4.4 经验方法中，经验推导出的方程不能传递到其它装置或辐射应用，对于具有复杂几何形状的模式，该方法不适用。

4.4.5 这两种方法的不确定度都受到产品不均匀度、剂量计位置以及与剂量测量相关不确定度等因素的影响。

5 数学建模的要求

5.1 计算机设备和软件

5.1.1 应记录建模所选用的所有重要硬件设备的名称和序列号（如适用）。

5.1.2 应记录建模所选用的操作系统、建模软件、编译器和商业产品（包括电子表格和数据分析工具）的名称和版本号。

5.2 人员

参与模型建立、程序执行、数据处理和结果评估的人员应受过相关培训，并记录参与建模人员所有培训和工作经历。

5.3 设施和辐照物品

5.3.1 应获得辐照设施的详细图纸，以在模型中能够描述计算空间内各组成部分的尺寸及材料。建模后还应进行物理数据验证和记录。

5.3.2 应收集并记录要辐照的产品、剂量计的详细图纸，并对其物理数据（尺寸、组成材料、密度）进行核查。

5.3.3 应记录源的类型（电子或光子）、能谱、输出角分布、尺寸和强度等。

5.4 记录

按照本标准第9章的要求，收集和归档所有相关的剂量学数据、测量报告和其他物理数据，并以书面形式记录。

6 数学建模方法的选择

6.1 方法的比较

6.1.1 本标准描述的五种建模方法，其复杂程度各不相同。

6.1.2 易于应用的为经验方法和半经验方法：

- a) 经验方法是最简单的方法，完全不依赖于任何计算机代码。此种模型可以从剂量测量实验的结果来建立，仅限于实验和特定的设施。
- b) 半经验方法的代码最简单，且相对容易使用。在该方法中，物理学已经被参数化，并且有能力模拟源能量、密度和原子数(Z)的变化。允许在不可能进行测量的情况下进行剂量预测，但计算结果应该得到验证和测试。

6.1.3 确定性方法（点核法和离散坐标法），包含较多的物理知识和运用经验。该类方法基于求解一组用来描述粒子输运物理学的方程（波尔茨曼）。通常用于计算一维问题，但具有角度和空间分布，当在三维空间中应用时，可以进行剂量分布绘制：

- a) 优点：该方法速度快，在合理的时间内可以获得非常详细和精细的分辨率。
- b) 不足：波尔茨曼方程的求解虽然精确，但是只对给定的单位路径长度有效，并不能解释问题其余部分的散射辐射（三维），没有提供任何可能导致所描述的问题的误差的估计。

6.1.4 蒙特卡罗方法是一种随机抽样统计技术，基于物理过程原理，模拟真实的三维空间粒子输运问题：

- a) 优点：其代码相对复杂，能合理地模拟真实的粒子输运物理过程。对模型进行抽样运算，可提供具有统计不确定度的预测。
- b) 不足：由于样本是一批粒子历史，只是实际问题中粒子实际数量的一小部分，随着抽样量的增大，该方法可具有较高的精度，这对于设施设计和确定材料边界处的剂量不连续性非常重要。但计算需要相当长的时间才能获得期望的精度。
- c) 蒙特卡罗方法具有一些减少计算时间的技术（如：减方差技巧等），在某些实践中，这些代码也可以容易地应用于求解一维甚至二维（例如，圆柱几何）系统。该方法应用解决三维问题通常需要深入的知识 and 判断，这些知识和判断多来自实践经验。

6.1.5 五种方法有关属性对比如表 1。

表 1 相互对照表

属性	蒙特卡罗	点核法	离散坐标	半经验公式	经验公式
适用维度	三维	三维	三维	N/A	N/A
电子	适用	较少	适用	适用	适用
γ 、X射线和韧致辐射	适用	适用	适用	适用	适用
计算速度	慢	中	慢*	快	快
精确估算	适用	N/A	N/A	N/A	N/A
分辨率	低	高	高	中	N/A
验证要求	适用	适用	适用	适用	适用
是否可购买	适用	适用	适用	适用	N/A
注：对于一个剂量点，使用离散坐标方法比蒙特卡罗方法慢，但对于多个剂量点，则速度会更快。					

6.2 方法的选择

6.2.1 五种建模方法都适用于光子源，点核法不推荐用于电子束。

6.2.2 模型中包含的细节或精细程度将影响建模方法的选择。如果描述对象为均匀材料的区域，且对计算速度和空间分辨率有要求的情况下，点核法可能是最合适的；如果描述对象进一步分解为不同材料的较小区域，以获得更高准确度，则需要使用蒙特卡罗方法，建立更复杂的输入文件。

6.2.3 建模的主要工作包括输入文件中三维几何问题的描述、运行和输出文件的处理。不同建模方法需要的时间各不一样，应选取最优的方法。如果需要修改已建立的代码以解决特定的问题，则需要重新确认。

6.2.4 建模方法的选择应基于内部和外部建模专业知识、模型的测试历史以及经过确认和验证的可用的模型代码。

6.2.5 按照如下原则确定建模使用的最佳代码：

- a) 可根据实验结果建立、评估经验方程，当满足规定范围内标准时，可接受并应用；
- b) 如果经验方程不符合用户标准，可寻求确定性或随机性方法求解；
- c) 尽量选择使用剂量测量数据比对过的代码，具体参照第 7 节有关验证的内容执行。

7 模型的确认与验证

7.1 模型基准测试既用于确认数学方法，也用于验证方法的总体模型结构和基础物理，以产生可靠的结果。将当前模型的结果与先前具有良好特征的系统进行比较是模型测试的一部分。建议将模型计算结果与对应的剂量测量结果进行比较，测量和计算之间的差异应与测量和计算的不确定度估计相一致。

7.2 预期使用的模型应尽可能与基准示例相同。

7.3 测试所有假设的有效性，并将结果与剂量测量进行比较。

7.4 剂量测量可以用来微调当前系统的模型，应当由合格的人员执行该操作。

7.5 修订过的模型或代码也应经过确认和验证，至少应使用以前运行的输入文件的输出来验证更新的软件的输出。

8 模型计算的不确定度

8.1 吸收剂量数学计算存在不确定度。计算准确度可以通过吸收剂量数学计算结果和吸收剂量测量结果的比率来确定，计算与测量之间可接受程度取决于用户的要求。关于剂量测量方法和不确定度的有关内容可参考 GB/T 16509。

8.2 蒙特卡罗方法提供了统计不确定度的估计。

8.3 对待解决事项的描述不充分和编码错误是不确定度的主要来源。辐照产品的几何结构和组成材料的变化以及辐射源的特性产生的偏差会产生不确定度。对几何描述的限制和对实际物理的近似会导致计算值的不同。这些差异可以通过确认和验证来界定。

8.4 数学模型应用的影响因素包括：

a) 经验不足。采用的方法非常好，但在输入文件描述时出错。几何验证可用于大多数粒子输运代码，通过可视化检查重叠、编码错误的几何区域。

b) 专业知识不足。开发了一个好的模型，但应用失败。例如，在使用蒙特卡罗代码时，运行的历史记录数量不足；将距离划分为步长增量过小；以及在不同材料的薄层中，使用过高的能量截止。

c) 软件和硬件问题。在选择好建模方法后，建模的软件和运行的系统及硬件设备，在计算一些复杂的几何结构或问题时，可能存在局限性。例如，一维代码与问题中层数匹配的能力有限，迫使不同材料的组合、有限的入射角或无法以伴随模式运行蒙特卡罗程序。

d) 其他限制基准测试的因素。例如，能够进行剂量测量但与描述的问题不符、无法执行良好的剂量测量或缺乏可追溯性的剂量测量。

e) 对待解决事项的信息了解不足。例如，实验人员和建模人员之间的沟通不足，遗漏重要的细节。建模人员应见证实验和参与所有的测量。

9 记录和归档

9.1 一般要求

相关参数、数据和文件应按照规定的时间要求进行保存。每次计算的记录应包含足够的信息，以便重复，这些记录包括硬件配置、操作系统、应用软件的名称和版本及其必要的插件控件等、计算目的及结果、所有参与计算人员的身份。确保所有的纸质记录和电子记录得到适当的保护。

9.2 输入文件

9.2.1 所有相关的输入参数、输入文档都应包含在建模项目执行结果相关联的文件中。

9.2.2 模型应依照装置的设计数据，例如辐照容器材料及尺寸、辐射源的类型、尺寸、活度、能量及半高宽等，辐射能谱、源与被照物品的表面或中心之间的距离；被照物品物理数据（尺寸、质量、组成材料及占比）、辐照容器或设备的特性和源的几何形状以及放射性核素分布等。给出计算输出结果信息，例如：探测的射线类型、探测位置、能谱、能量沉积、通量、剂量分布或者角分布等。

9.2.3 输入参数还可以包括但不限于诸如指定源分布、分区描述、空间网格、离散角度、能量截止和任何非默认输出选项之类的信息。材料组成的横截面数据应从最大源能量一直到问题几何中定义的所有材料的所选截止点都可用。

9.3 输出文件

9.3.1 所有相关的输入和输出文档都应该包含在建模项目执行结果相关联的文件中。

9.3.2 相关输出的示例可以包括其他结果，例如运行时间、能量守恒、电荷守恒（如存在）、统计不确定度以及产生的级联粒子的数量和能量（总和超过截止值）。

9.3.3 应存储足够的信息（例如，所有操作系统软件、建模软件、编译器和电子表格及数据分析工具之类的商业产品的名称和版本号），当模型被重新计算，则模型计算的原始输出可以与重新执行的输出进行比较。

9.4 输出后文件

所有与输出后相关的过程（数据处理等）的结果应进行记录和归档。

9.5 确认文件

任何一组计算结果都应尽可能直接与剂量测量进行比较，应记录比较的结果并与输入和输出相关文件一起归档。应进行误差分析，以评估任何重大偏差的相关性，重大偏差应在报告中记录。

10 参 考 文 献

- [1] Drumm, C. R., Fan, W. C., and Renken, J. H., “Forward and Adjoint Methods and Applications for Deterministic Electron-Photon Transport,” *Nucl. Sci. Engin.*, 108, 1991, pp. 16-49.
- [2] Lorence, L. J., Nelson, W. E., and Morel, J. E., “Coupled Electron-Photon Transport Calculations Using the Method of Discrete Ordinates,” *IEEE Trans. Nuc. Sci.*, 32, 1985, pp. 4416-4420.
- [3] Duderstadt, J. J., and Martin, W. R., “Transport Theory,” Wiley Interscience, New York, 1979.
- [4] Drumm, C. R., “Multidimensional Electron-Photon Transport with Standard Discrete Ordinates Codes,” *Nucl. Sci. Engin.* 127, 1997, pp. 1-21.

- [5] Shultis, J. K., and Faw, R. E., *Radiation Shielding*, Prentice-Hall PTR., Upper Saddle River, NJ, 1996.
- [6] Carter, L. L., Morford, R. J., Frederickson, S. M., and Hillesland, K., *Point Kernel Option in MCNP at the Hanford Site*, Proceedings for 8th International Conference on Radiation Shielding at Arlington, Texas, April 1994.
- [7] Tabata, T., Andreo, P., and Shinoda, K., “An Analytic Formula for the Extrapolated Range of Electrons in Condensed Materials,” *Nucl. Instr. Meth.*, B119, 1996, pp. 463-470.
- [8] Tan, D., and Heaton, B., “Simple Empirical Relations for Electron CSDA Range and Electron Energy Loss,” *Appl. Radiat. Isot.*, 45, 1994, pp. 527-528.
- [9] Tabata, T., and Andreo, P., “A Method to Convert Absolute Depth-Dose Curves of Electrons Between Different Phantom Materials,” *Jap. J. Med. Phys.*, 17, 1997, pp. 151-160.
- [10] Tabata, T., and Ito, R., “An Algorithm for Electron Depth-Dose Distributions in Multilayer Slab Absorbers,” *Jap. J. Appl. Phys.*, 20, 1981, pp. 249-258.
- [11] Tabata, T., Ito, R., and Tsukui, S., “Simple Method of Evaluating Absorbed Dose in Electron-Beam Processing,” *Radiat. Phys. Chem.* 33, 1989, pp. 411-416.
- [12] Tabata, T., “Semiempirical Models for Depth-Dose Curves of Electrons in Matter: An Introductory Review,” *Bull. Univ. Osaka Prefect.*, 41, 1993, pp. 103-118.
- [13] Tabata, T., “Theoretical Evaluation of Absorbed Doses in Materials Irradiated by Low-Energy Electron Beams: A Short Review,” *Bull. Univ. Osaka Prefect.*, 44, 1995, pp. 41-46.
- [14] Weiss, D. E., Johnson, W. A., and Kensek, R. P., “Dose Distributions in Tubing: Monte Carlo Simulation and Measurement,” *Radiation Physics and Chemistry*, 50, 1997, pp. 475-485.
- [15] Weiss, D. E., Cleghorn, D. A., and Nablo, S. V., “Electron Beam Process Validation for Sterilization of Complex Geometries,” *Radiat. Phys. Chem.*, 2002, Vol. 63, pp 581 - 586.
- [16] Oliveira, A. D. and Oliveira, C., “Comparison of deterministic and Monte Carlo methods in shielding design,” *Radiat. Prot. Dosim.*, 115, 2005, pp. 254-257.
- [17] Amako, K., Guatelli, S., Icanchenko, V. N., Maire, M., Mascialino, B., Murakami, K. I., Nieminen, P., Pandola, L., Parlati, S., Pia, M. G., Piergentili, M., Sasakik, T., Urban, L., “Comparison of Geant4 electromagnetic physics models against the NIST reference data,” *IEEE Trans Nuc Sci.* 52, 2005, pp. 910-918.
- [18] Cramer, S. N., “Analytic radiation transport systems and Monte Carlo benchmarks,” *Nucl. Sci. Engin.* 139, 2001, pp.186-208.

附 录 A
(资料性附录)
三维结构模型的建立和使用

A.1 总则

A.1.1 模型应包含影响吸收剂量和剂量分布的所有几何元素,虽然详细描述所有的组成部分是必要的,但是在实际应用中简化描述是可取的。如果所选的方法允许建模时对复杂的几何形状进行简化处理,则可通过灵敏度计算来证明该简化的合理性。

A.1.2 辐射源应准确描述。辐照容器的几何细节应通过直接测量或参照设计图纸数据来准确描述。

A.1.3 为了简化输入文本,可以简化某些要素(钴源、钢辊等),但必须保证该简化要素的质量和尺寸不变。

A.1.4 允许通过几何上的对称来简化待解决事项,类似镜面对称。

A.1.5 简化假设需要两个附加环节来确认,所有此类操作都应记录并存档:

- a) 包括均质材料和异质产品模型构造;
- b) 是采用剂量测量来确认。

A.2 光子源模型的建立

A.2.1 对于光子源,模型通常包括同位素的排列、金属结构部件和混凝土墙等,它们在辐射环境中可影响产品的吸收剂量分布。

A.2.2 一个 ^{60}Co γ 源通常以其物理尺寸来描述,其发射两个完全各向同性的光子的概率大致相等。由于辐射源的物理几何形状,在自吸收、相互吸收、源架结构和封装材料的影响下,各向同性 γ 辐射源可能会成为非各向同性源。

A.3 电子束源模型的建立

A.3.1 对于电子束源,模型通常包括钛窗箔、扫描角度、产品以及传送系统的金属部件等,这些要素可能影响产品的剂量。散射结构改变一部分“逃逸”电子的方向,使其重新入射到产品中,建立该过程的模型可以评估这一影响。

A.3.2 电子束源可以建模为分布式源,这是模拟产品移动所必需的。源可以描述为一个点或一条线,该点源或线源发射的粒子仅限于一个平面,该平面尺寸应接近电子束扫描形成的扇形平面尺寸。源粒子的能量通常取决于加速电压,并且可根据特定设备的能谱特性进行修正。

A.4 产品移动

A. 4. 1 通常，设施建模采用的各种数学方法与时间无关，但是，可能需要对几何结构进行修改或调整剂量计算，以便准确地模拟产品通过辐射场的情况。当使用经验导出的参数方程时，则不需要考虑几何结构修改或调整剂量的情况，但对于电子束等小而集中的源，则需要考虑。

A. 4. 2 小型或集中的电子束源可以建模为分布式源，以便能够考虑辐射场内产品的移动情况[14-15]。

A. 4. 3 放射性同位素光子源，通常可以按照实际的结构方式建模，计算剂量是源强和时间的函数。

A. 5 使用均质产品的设施模型

A. 5. 1 可以将均质的产品（例如，泡沫、纸板等）装载在辐照容器中并在特定位置布置剂量计，这样对设施进行确认比较简便。

A. 5. 2 建立模型可使用固体单一均质材料，避免用大量的编码描述不同截面小阵列异质结构体。

A. 5. 3 对于实际产品，均匀近似并不准确，应通过剂量分布图来验证截面准确性。

A. 6 使用特定产品的设施模型

A. 6. 1 对于产品，可将几何体分解成密度、成分和尺寸组件来详细描述。

A. 6. 2 通过与密度的关联，组件的尺寸可用于描述物体，也就是说，可以通过该位置的密度、成分和尺寸来描述物体，而不是仅仅用物体的包装尺寸。

A. 6. 3 层状产品（如薄片材料）可能对入射电子束的方向很敏感。当定向平行于入射光束时，穿透深度、反向散射最大值的大小和位置可能会在产品中移动得更深。

A. 7 剂量计模型

A. 7. 1 均质产品或异质产品可被划分为若干个子区域来确定剂量分布。计算结果必须与实际产品中对应位置的剂量测量进行比较。

A. 7. 2 在某些情况下，剂量计可能是一个较大的物体，可直接建立剂量计模型。在产品几何结构中准确定位剂量计对于模型计算和实验测量之间的验证有效性至关重要，尤其是电子束装置。

A. 7. 3 多数情况下，剂量计可能太小，无法有效建模。在使用蒙特卡罗代码时，因为对象非常小，需要很长的运行时间才能获得足够的结果精度。该情况下，产品几何描述中的较大区域可用于通过扩展其厚度、面积或质量密度来定义剂量计。剂量计的位置应绘制成图形，以说明剂量计的移动/错位与产品几何结构中的实际位置，这决定了与剂量计放置相关的剂量灵敏度，并允许确定这一不确定度来源。

A. 7. 4 剂量计算的结果必须通过辐照特定位置含有剂量计的产品来验证[16-18]。

A. 8 剂量计算

A. 8. 1 对于电子束模型，剂量计算可表示为每个电子在每克物质中的能量(E)沉积，材料中电子束辐射参数获得的剂量如下：

$$D = \frac{\bar{\varepsilon}}{m} = \frac{E(\text{MeV cm}^2/\text{g} \cdot e)N_e}{A(\text{cm}^2)}$$

其中， N_e 表示从加速器出来的电子数量， A 表示辐照区域，单位 cm^2 。可以通过以下方式表示：

$$N_e = \frac{I(\text{mA}) \cdot t(\text{s})}{e(\text{mC})}$$

$$A(\text{cm}^2) = b(\text{cm}) \cdot v(\text{cm/s}) \cdot t(\text{s})$$

此处， I 表示电子加速器的束流， t 表示辐照时间， b 表示扫描宽度， v 表示束下线速度。 e 表示电子的电荷，单位 mC ，量值为 $1.6 \times 10^{-16} \text{ mC}$ 。所以， $1 \text{ MeV/g} = 1.6 \times 10^{-13} \text{ kGy}$ ，材料中的剂量可以计算为：

$$D(\text{kGy}) = 1000 \frac{E_e(\text{MeV cm}^2/\text{g} \cdot e) \cdot I(\text{mA})}{b(\text{cm}) \cdot v(\text{cm/s})}$$

A. 8. 2 需要对剂量计算方程进行适当修正，以调整产品通过辐射场的移动计算。

A. 8. 3 对于 ^{60}Co γ 射线模型，其剂量计算表示为每个光子在每克物质中的能量沉积，材料中的剂量计算如下：

$$D(\text{kGy}) = E_\gamma(\text{MeV/g})N_\gamma = 2E_\gamma(\text{MeV/g})S(\text{Bq})t(\text{s})$$

其中， N_γ 表示放射源发出的 γ 射线数量，对于 ^{60}Co 而言，等于 Bq 表示活度的两倍，使用转换因子 $1 \text{ MeV/g} = 1.6 \times 10^{-13} \text{ kGy}$ ，剂量为：

$$D(\text{kGy}) = 3.2 \times 10^{-13} E_\gamma(\text{MeV/g}) \cdot S(\text{Bq}) \cdot t(\text{s})$$
