Zdravstvena fizika: MC transport

April 13, 2018

1 Transportna (Boltzmanova) enačba

Transport delcev je poseben primer obravnave kontinuitetne enačbe. Spomnimo se:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \mathbf{j} = \sigma$$

kjer je ρ gostota delcev, $\mathbf{j}$ njen tok, σ pa gostota izvorov, podana kot število nastalih delcev na enoto gostote na enoto časa. Pri transportu nas zanima tok delcev, zato bomo gostoto izrazili kar s tokom:

$$\mathbf{j} = \rho \mathbf{v}$$

Uvedemo smer gibanja delcev $\mathbf{\Omega}$, velikost toka ϕ v smeri $\mathbf{\Omega}$ in velikost hitrosti v smeri $\mathbf{\Omega}$ $v_{\mathbf{\Omega}}$

$$\phi \mathbf{\Omega} = \rho v_{\mathbf{\Omega}} \mathbf{\Omega} \qquad \text{oz.} \qquad \phi = \rho v_{\mathbf{\Omega}}$$

Tok ϕ bo ekspliction odvisen od lege $\mathbf{r}$, časa t, smeri delcev $\mathbf{\Omega}$ in njihove kinetične energije T:

$$\phi = \phi(\mathbf{r}, t, \mathbf{\Omega}, T)$$

V nadaljevanju bomo pisanje opustili razen v primerih, ko to dodatno ilustrira opis.

Zdaj zapišimo parcialni časovni odvod:

$$\frac{\partial \rho v_{\mathbf{\Omega}}}{\partial t} = \frac{\partial \rho}{\partial t} v_{\mathbf{\Omega}} + \rho \frac{\partial v_{\mathbf{\Omega}}}{\partial t}$$

Delimo z $v_{\mathbf{\Omega}}$ in izrazimo s ϕ:

$$\frac{1}{v_{\mathbf{\Omega}}} \frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \phi \frac{\partial v_{\mathbf{\Omega}}}{\partial t}$$

Vstavimo nazaj v kontinuitetno enačbo ter upoštevamo izraz za tok v smeri:

$$\frac{1}{v_{\mathbf{\Omega}}}\frac{\partial\phi}{\partial t} = -\nabla\left[\mathbf{\Omega}\phi\right] + \phi\frac{\partial v_{\mathbf{\Omega}}}{\partial t} + \sigma$$

Zgornji izraz pojasnjuje temeljne izraze v **Boltzmanovi enačbi za tok nevtralnih delcev**, ki pa je zapisana malenkost drugače:

$$\frac{1}{v}\frac{\partial\phi}{\partial t} = -\nabla\left[\mathbf{\Omega}\ \phi\right] - \Sigma\phi + \int d\mathbf{\Omega}' \int dT'\Sigma_s(\mathbf{\Omega}' \to \mathbf{\Omega}, T' \to T)\phi'(\mathbf{r}, t, \mathbf{\Omega}', T') + \sigma$$

Nov je izraz:

$$\Sigma\phi + \int d\mathbf{\Omega}' \int dT'\Sigma_s(\mathbf{\Omega}' \to \mathbf{\Omega}, T' \to T)\phi'(\mathbf{r}, t, \mathbf{\Omega}', T')$$

ki kvalitetno spominja na člen:

$$\phi\frac{\partial v_{\mathbf{\Omega}}}{\partial t}$$

iz kontinuitetne enačbe. Gre za prehode med različnimi tokovi, parametriziranimi ne le z lokacijo $\mathbf{r}$ in časom t, ampak tudi s smerjo $\mathbf{\Omega}$ in energijo T.

Po vrsti so členi v transportni enačbi:

- **Prirastek:**

  $$\frac{1}{v}\frac{\partial\phi}{\partial t}$$

  Eksplicitna odvisnost toka od časa, recimo preko razpadnega časa delcev v toku τ. Dostikrat jo postavimo na 0, saj sledimo stabilnim delcem.

- **Puščanje:**

  $$-\nabla\left[\mathbf{\Omega}\ \phi\right]$$

  Gre za tok delcev iz izbrane prostornine, direktna posledica kontinuitetne enačbe.

- **Manjšanje zaradi reakcij:**

  $$-\Sigma\phi$$

  Tu je Σ vsota vseh procesov, ki lahko doletijo delec in mu spremenijo kateregakoli od parametrov (smer, energijo) tako da se tok z danimi parametri zmanjša. Sem spadajo vse interakcije, tako elastične kot neelastične, vključno z vplivi električnih in magnetnih polj.

- **Sipanje v tok:**

$$\int d\mathbf{\Omega}' \int dT' \Sigma_s(\mathbf{\Omega}' \to \mathbf{\Omega}, T' \to T)\phi'(\mathbf{r}, t, \mathbf{\Omega}', T')$$

  Interakcije tokov $\phi'(\mathbf{r}, t, \mathbf{\Omega}', T')$ lahko doživijo interakcije, tako da padejo nazaj v $\phi(\mathbf{r}, t, \mathbf{\Omega}, T)$. Verjetnost prehoda podaja funkcija Σ_s, integrirana po vseh možnih smereh in energijah delcev.

- **Izvori:**

$$\sigma$$

  Izvori delcev so lahko točkasti izotopi, katodne cevi rentgenskega aparata in podobno.

Boltzmanova enačba ima le redko eksplicitno rešitev. Zagonetna sta oba interakcijska člena s parametroma Σ, še posebej drugi, ki meša tokove med seboj. Zato gostoto ϕ računamo numerično.

2 MC transport

Med numeričnimi metodami se je najbolj uveljavila metoda Monte Carlo, kjer tok delcev sestavimo iz zgodovin naključno generiranih delcev. Pri tem člene Σ trivialno upoštevamo z verjetnostmi za reakcije, ki so pri danih parametrih delca dobro znane.

Pri generaciji zgodovine delca moramo biti pozorni, da v vsakem koraku pravilno upoštevamo verjetnostne porazdelitve.

Simulacija bo sestavljena iz tipičnih korakov:

- **Generacija delca pri izvoru ($\boldsymbol{\sigma}$).**

  Upoštevamo verjetnostne porazdelitve za začetno energijo, smer in morebiten trenutek izseva. Slednje je pomembno, ko ločujemo delce med seboj. Ko nas zanima doza, zgodovine delcev seštevamo in nas časovno zaporedje in potek interakcij ne zanima.

- **Iskanje proste poti**. Pri sledenju beležimo pot delca skozi snov. Sestavljena je iz treh procesov:

  – **Premik** delca z dano smerjo in hitrostjo do meje sredstva. Za mejo (ravnino) podano z enačbo $\mathbf{r}\hat{\mathbf{n}} = d$ bo dovoljen korak od trenutne točke $\mathbf{r_0}$ dolg:

$$s = \frac{d - \mathbf{r_0}\hat{\mathbf{n}}}{\mathbf{\Omega}\hat{\mathbf{n}}}$$

– Pri **zveznih interakcijah** se bodo lastnosti delca spreminjali vzdolž celotnega koraka.

Ko gre za izgubo energije zaradi ionizacije, v koraku dolžine Δh bo nova kinetična energija delca:

$$T' = T - \frac{dE}{dx}\Delta h$$

Pri tem je $\frac{dE}{dx}$ odvisen od energije, zato koraku Δh ustreza sprememba energije ΔE=$dE/dx\Delta h$. Meje podamo kar v energiji, in preračunamo mejo koraka Δh.

Ko gre za gibanje v magnetnem polju, bomo imeli dodaten zasuk v smeri prečno na magnetno polje. Smer $\mathbf{\Omega}$=$(\Omega_\perp, 0, \Omega_B)$ ki smo jo zapisali v sistemu z osjo z vzdolž magnentnega polja in osjo x vzdolž projekcije smeri delca na ravnino pravokotno na smer magnetnega polja se bo po koraku skupne dolžine Δh spremenila v:

$$\mathbf{\Omega} = (\Omega_\perp, 0, \Omega_B) \rightarrow \mathbf{\Omega'} = (\Omega_\perp \cos\Delta\varphi, \Omega_\perp \sin\Delta\phi, \Omega_B)$$

z zasukom φ:

$$\Delta\varphi = \frac{eB}{mv\Omega_\perp/\Omega_B}\Delta h_\perp$$

Premaknemo pa se v:

$$\mathbf{r} = \mathbf{r_0} + v(\Delta h_\perp \Omega_\perp \cos\Delta\varphi, \Delta h_\perp \Omega_\perp \sin\Delta\varphi, \Delta h_B \Omega_B)$$

Podobno bi lahko upoštevali tudi vplive magnetnega polja ipd. Pri tem moramo paziti, da korak Δh ni predolg da pravilno opišemo kroženje.

– **Točkovne interakcije**. Iz podanih presekov za reakcije σ_{atom} in atomske gostote $n = \rho N_A/A$ dobimo atenuacijski koeficient μ_i povprečno prosto pot $L_i = 1/\mu_i$ za vsako od možnih točkovinh interakcij i. Prosta pot za vsak proces je kombinacija lastnosti delca (npr. njegove energije) in snovi, zato je ne moremo poznati vnaprej.

Število prostih poti $n = x/L$ pa je od materiala in delca neodvisen parameter. Za konstantno verjetnost na enoto dolžine poti bo verjetnosti, da bo delec interagiral na intervalue dolžine dx pri x enaka:

$$dp = \exp(-\mu x)\mu\, dx$$

Verjetnost, da bo delec prepotoval n_0 interakcijskih dolžin pa bo:

$$P(n > n_0) = \int_{n_0 L}^{\infty} \mu \exp(-\mu x)\, dx = \exp(-n_0)$$

Iz naključnega števila med 0 in 1, ξ, lahko tako generiramo število prostih poti za dani proces:

$$n_i = \ln \xi$$

- **Korak** Nabor možnih korakov je sestavljen iz meje sredstva s, omejitve zaradi zveznih korakov $\Delta h_{\max}$ in nabora naključnih poti $\{n_i L_i\}$ za točkovne procese. Korak Δx bomo izvedli z najmanjšim od nabora:

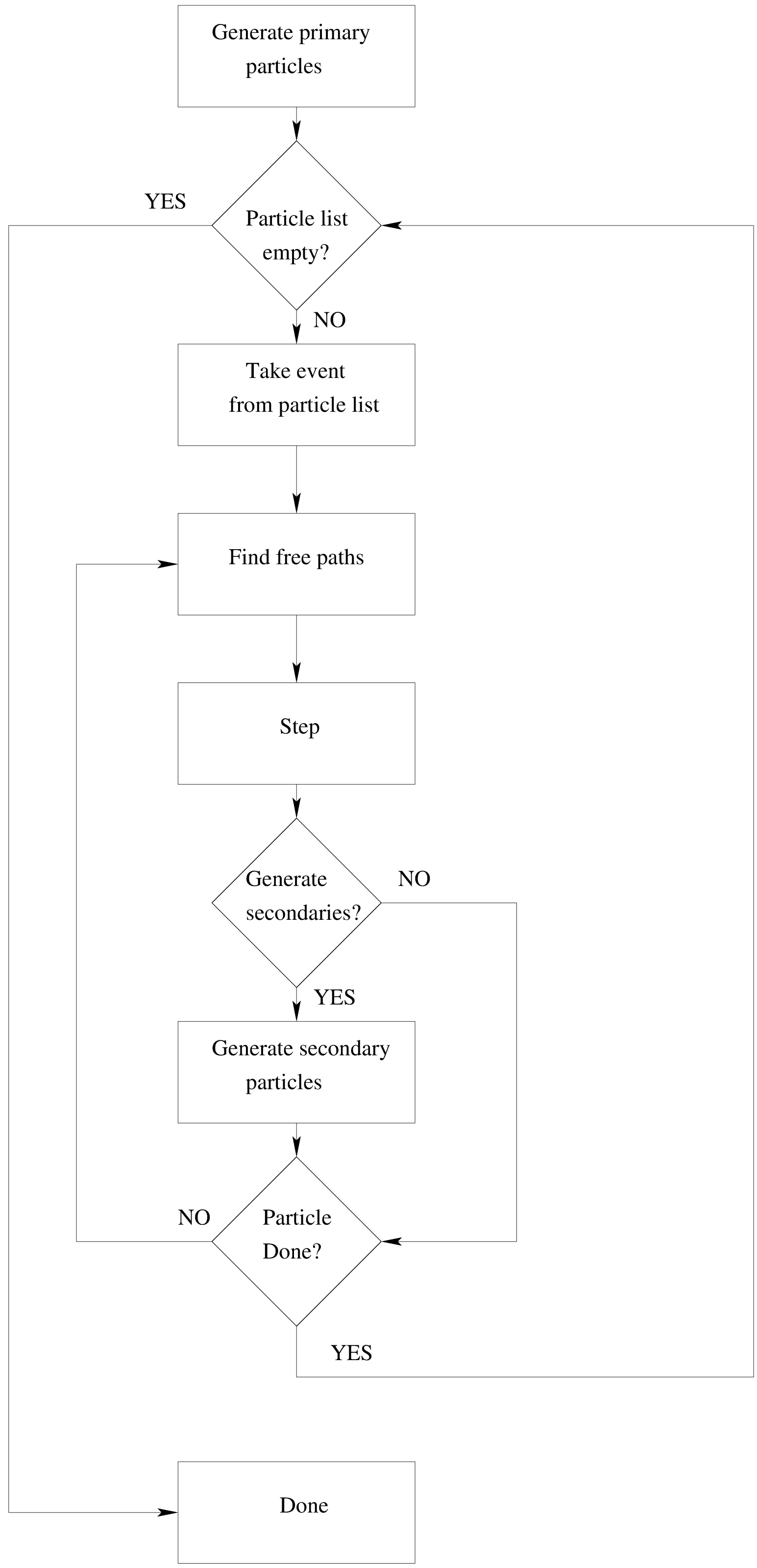
  $$\Delta x = \min\{s, \Delta h_{\max,j}, n_i L_i\}$$

  Nato izvedemo korak in popravimo parametre delca. Pozorni smo na pravilno izbiro smeri v skladu z verjetnostnimi porazdelitvami. Če je šlo za zvezen ali korak do meje, lahko uporabimo naključne n_i še za naslednji korak, a moramo odšteti prepotovano pot. Nov nabor bo:

  $$n_i' = n_i - \frac{\Delta x}{L_i}$$

  Pri točkovnih interakcijah se lastnosti delca spremenijo do te mere, da moramo število korakov zgenerirati na novo. Lahko se pojavijo novi delci, ki jih dodamo v vrsto za sledenje.

- **Zaključek**. Ko se delec ustavi (T=0) oz. uide iz opazovanega območja simulacijo za ta delec ustavimo. Preverimo novonastale delce in sledimo še njim.


Generate primary particles
Particle list empty?
YES
NO
Take event from particle list
Find free paths
Step
Generate secondaries?
NO
YES
Generate secondary particles
Particle Done?
NO
YES
Done