

بِسْمِ اللّٰهِ الرَّحْمٰنِ الرَّحِیْمِ

محاسبات کاربردی در فیزیک

روش مونت کارلو

تألیف:

محرم امینی

حمید موگوئی

سرشناسه	: امینی، محرم، ۱۳۶۹-
عنوان و نام پدیدآور	: محاسبات کاربردی در فیزیک: روش مونت کارلو / تألیف محرم امینی، حمید موگویی
مشخصات نشر	: تبریز: انتشارات پژوهش‌های دانشگاه، ۱۳۹۹.
مشخصات ظاهری	: ۱۴۱ ص. : جدول، نمودار
شابک	: 978-600-483-283-0
وضعیت فهرست‌نویسی	: فیبا
یادداشت	: کتابنامه
عنوان دیگر	: روش مونت کارلو
موضوع	: روش مونت کارلو - داده‌پردازی
موضوع	: Monte Carlo method – Data processing
موضوع	: روش مونت کارلو - شبیه‌سازی
موضوع	: Monte Carlo method – Simulation methods
موضوع	: فیزیک هسته‌ای - شبیه‌سازی کامپیوتری
موضوع	: Nuclear physics – Computer simulation
شناسه افزوده	: موگویی، حمید، ۱۳۶۶-
شناسه افزوده	: انتشارات پژوهش‌های دانشگاه
شناسه افزوده	: University Press Publications
رده‌بندی کنگره	: QA۲۹۸
رده‌بندی دیویی	: ۵۱۹/۲۸۲
شماره کتاب‌شناسی ملی	: ۷۳۲۹۴۶۲

عنوان کتاب: ----- محاسبات کاربردی در فیزیک (روش مونت‌کارلو)

مؤلف: ----- ممرم امینی - حمید موگویی

ناشر: ----- انتشارات پژوهش‌های دانشگاه

طراح روی جلد: ----- امین آقایی نوبه ده

صفحه‌آرایی: ----- امین آقایی نوبه ده

چاپ و صحافی: ----- مدیران

تیراژ: ----- ۱۰۰۰ جلد

نوبت چاپ: ----- اول/۱۳۹۹

شابک: ----- ۹۷۸-۶۰۰-۴۸۳-۲۸۳-۰

قیمت: ----- ۲۵۰۰۰ تومان



مؤسسه پژوهش‌های دانشگاه تبریز

انتشارات پژوهش‌های دانشگاه

عضو رسمی انجمن ناشران دانشگاهی



انتشارات پژوهش‌های دانشگاه تبریز
وزارت معارف و اوقاف و صنایع مستظرفه

آدرس دفتر مرکزی: آذربایجان شرقی، تبریز، آبرسان، مجتمع تجاری بلور، روبروی کلانتری، داخل حیاط (ضلع شرقی)، پلاک ۳۹
 تلفن‌های تماس بخش مدیریت: ۰۹۱۴۶۱۴۳۳۴۶/۰۴۱۳۲۲۶۲۱۱۶
 دفتر اهر: شهرستان اهر - میدان معلم - روبروی دارایی - انتشارات پژوهش‌های دانشگاه / دفتر اهر تلفن: ۰۹۳۰۸۱۴۸۴۸۶
www.Unpb.org / Info@unpb.org www.Pajohesh-daneshgah.ir / Info@pajohesh-daneshgah.ir

طبق قانون حمایت از حقوق ناشران و مؤلفان هر شخص حقیقی و حقوقی که تمام یا قسمتی از این اثر را بدون اجازه ناشر و مؤلف، نشر یا عرضه یا تکثیر یا تجدید چاپ نماید مورد پیگیری جدی قانونی خواهد گرفت و مطابق با جرائم قوانین اسلامی برخورد خواهد شد.

Applied computational in physics

Monte Carlo Method

[Pick the date]

[Type the company name]

Novin Pendar

فهرست مطالب

۷	فصل اول: تاریخچه مونت کارلو.....
۸	۱-۱- ایجاد انگیزه مونت کارلو.....
۱۴	۲-۱- مونت کارلو در فیزیک پزشکی.....
۲۰	۳-۱- سیستم‌های کد EGSX.....
۲۱	۴-۱- کاربرد: دزی متری محفظه یا اتاقک یون.....
۲۲	۵-۱- کاربردهای اولیه پرتودرمانی.....
۲۳	۶-۱- آینده مونت کارلو.....
۲۵	پیوست: مونت کارلو و تریب عددی.....
۲۶	A-1- ابعاد روش‌های قطعی.....
۲۹	A-2- همگرایی راه‌حل‌های قطعی.....
۳۱	A-3- همگرایی راه‌حل‌های مونت کارلو.....
۳۱	A-4- مقایسه بین مونت کارلو و تریب عددی.....
۳۵	فصل دوم: مبانی شبیه‌سازی مونت کارلو.....
۳۶	۱-۲- روش مونت کارلو.....
۳۷	۱-۱-۲- نمونه‌گیری عدد تصادفی.....
۳۹	۲-۱-۲- یکپارچه‌سازی عددی.....
۴۴	۳-۱-۲- روش‌های نمونه‌گیری غیریکنواخت.....
۴۶	۲-۲- انتقال مونت کارلو در پرتودرمانی.....
۴۷	۱-۲-۲- انتقال ذرات آنالوگ.....
۵۰	۲-۲-۲- انتقال ذرات باردار.....
۵۰	۱-۲-۲-۲- تکنیک تاریخچه فشرده.....
۵۴	۲-۲-۲-۲- از دست دادن انرژی پیوسته.....
۵۶	۳-۲-۲-۲- پراکندگی چندگانه.....
۵۸	۴-۲-۲-۲- مکانیک انتقال.....
۵۹	۵-۲-۲-۲- عبور از مرز.....
۶۲	۳-۲-۲- سطح مقطع.....
۶۲	۱-۳-۲-۲- ضرایب برهم‌کنش فوتون.....
۶۴	۲-۳-۲-۲- قدرت پراکندگی و توقف ذرات باردار.....
۶۹	فصل سوم: تکنیک‌های کاهش واریانس.....
۷۰	۱-۳- مقدمه.....
۷۰	۱-۱-۳- بهره‌وری محاسبه.....
۷۲	۲-۱-۳- بهبود عملکرد سخت‌افزار.....
۷۲	۳-۱-۳- روش‌های تقریبی.....

۷۳ ۳-۱-۴- انتقال الکترونی تاریخچه فشرده.
۷۳ ۳-۲- تکنیک‌های پایه کاهش واریانس
۷۳ ۳-۲-۱- تقسیم ذرات یکنواخت.
۷۶ ۳-۲-۲- رولت روسی
۷۷ ۳-۲-۳- رد محدوده
۷۷ ۳-۲-۴- افزایش سطح مقطع
۷۷ ۳-۲-۵- اجبار تعامل
۷۹ ۲-۳-۶- تبدیل نمایی
۸۰ ۳-۲-۷- پیگردی WOODCOCK
۸۲ ۳-۲-۸- نمونه‌گیری همبسته
۸۳ ۳-۲-۹- محاسبه اولیه تراکم تعامل اولیه
۸۴ ۳-۲-۱۰- اعداد شبیه تصادفی
۸۵ ۳-۳- تکنیک‌های پیشرفته کاهش واریانس
۸۶ ۳-۳-۱- تقسیم انتخابی تابش ترمزی
۸۷ ۳-۳-۲- تقسیم جهتی تابش ترمزی
۸۸ ۳-۳-۳- ماکرو مونت کارلو
۹۰ ۳-۳-۴- تکرار تاریخ
۹۳ ۳-۳-۵- انتقال هم‌زمان مجموعه ذرات
۹۵ ۳-۳-۶- عبور مداوم از مرز
۹۶ ۳-۳-۷- انتقال چندین فوتون
۹۹ ۳-۴- تکنیک‌های کاهش واریانس تقریبی خالص
۹۹ ۳-۴-۱- تقریب KERMA
۹۹ ۳-۴-۲- تقریب کاهش پیوسته
۱۰۱ ۳-۴-۳- بهینه‌سازی پارامتر انتقال
۱۰۳ فصل چهارم: استفاده از روش مونت کارلو در حل معادلات کاربردی
۱۰۴ ۴-۱- اعداد تصادفی
۱۰۸ ۴-۲- حل معادلات دیفرانسیل با روش مونت کارلو
۱۰۸ ۴-۲-۱- حل معادله لاپلاس یک‌بعدی
۱۱۲ ۴-۲-۲- حل معادله لاپلاس در دو بعد
۱۱۸ ۴-۳- حل معادله هدایت حرارت با روش مونت کارلو
۱۱۹ ۴-۳-۱- حالت اول FRW
۱۳۱ ۴-۳-۲- حالت دوم SFRW
۱۳۸ ۴-۳-۳- حالت سوم FFRW
۱۴۱ منابع

فصل ۱

تاریخچه مونت کارلو

۱-۱- ایجاد انگیزه مونت کارلو

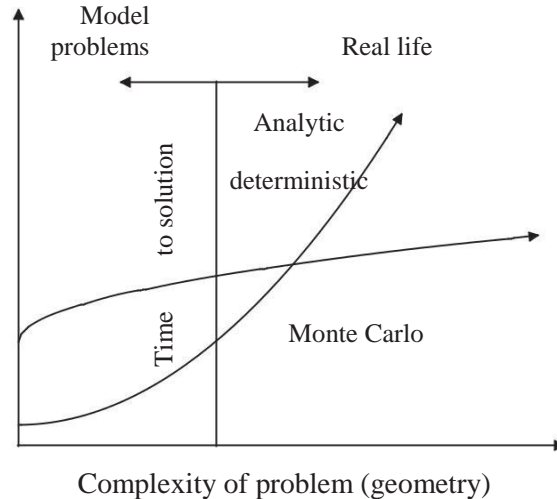
به طور کلی، روش مونت کارلو یک راه حل عددی برای مسئله فراهم می کند که می تواند به عنوان تکامل زمانی ("انتقال / بازتاب / جهش") اشیاء ("ذرات کوانتومی" [فوتون، الکترون، نوترون، پروتون، هسته های دارای بار، اتم ها و مولکول ها]، در مورد فیزیک پزشکی) در تعامل با اشیاء دیگر بر اساس روابط تعاملی شیء - شیء ("سطح مقطع") توصیف شود. با تقلید از طبیعت، قواعد تعامل به صورت تصادفی و بارها و بارها پردازش می شود، تا زمانی که نتایج عددی به صورت سودمندانه ای به میانگین های برآورد شده، لحظات و واریانس آن ها همگرا شوند. مونت کارلو نشان دهنده تلاش برای مدل سازی طبیعت از طریق شبیه سازی مستقیم پویایی ضروری سیستم مورد بحث است. در این معنا، روش مونت کارلو، در اصل، در رویکرد ساده است - راه حلی برای یک سیستم ماکروسکوپی از طریق شبیه سازی فعل و انفعالات میکروسکوپی آن. اینجا مزیت استفاده از این روش است. همه تعاملات در طبیعت میکروسکوپی هستند. هندسه محیط، در توسعه راه حل های ماکروسکوپی بحرانی، به جز تعریف محیط محلی اشیاء در حال تعامل در یک محل معین و در یک زمان معین، نقش کمی ایفا می کند.

روش علمی وابسته به مشاهدات (سنجش) و فرضیه (نظریه) برای توضیح طبیعت است. مجرا بین این دو توسط بی شماری از تکنیک های ریاضی، محاسباتی و شبیه سازی تسهیل می شود. روش مونت کارلو از همه آن ها بهره می گیرد. مونت کارلو اغلب به عنوان یک "رقیبی" برای روش های دیگر محاسبه ماکروسکوپی مشاهده می شود، که ما روش های قطعی و / یا تحلیلی خواهیم خواند. اگرچه طرفداران هر دو روش گاهی اوقات در بحث های خود به سطحی از تعصب نزدیک می شوند، یک متخصص علم ابتدا باید پرسد، "من می خواهم چه چیزی را به انجام برسانم؟" به دنبال آن "کارآمدترین راه برای انجام آن چیست؟" و پس از آن، "چه چیزی به بهترین شکل به علم خدمت می کند؟". گاهی اوقات پاسخ صحیح "قطعی" خواهد بود و دفعات دیگر "مونت کارلو" خواهد بود. موفق ترین دانشمند خود بیش از یک روش رویکرد سود خواهد برد.

با این حال، دو واقعیت غیرقابل اجتناب^۱ وجود دارد. اول اینکه نظریه ماکروسکوپی، به ویژه نظریه انتقال، بینش عمیقی فراهم می کند و به شخص اجازه می دهد تا شهود پیچیده را همان گونه توسعه دهد که می توان انتظار داشت میدان ذرات ماکروسکوپی رفتار کنند. مونت کارلو نمی تواند به خوبی با این به رقابت پردازند. در کشف خواص رفتار میدان ماکروسکوپی، متخصصین مونت کارلو بسیار بسیار شبیه به اهل تجربه عمل می کنند. بدون تئوری برای ارائه راهنمایی، کشف از طریق آزمون و خطا ساخته انجام می شود، و شاید توسط برخی از شهود درخشان هدایت می شود.

با این حال پیچیدگی اندازه گیری می شود، زمانی که به توسعه درک یک مسئله فیزیکی می رسد، تکنیک های مونت کارلو در برخی نقاط به سودمندترین روش تبدیل می شوند. اثباتی در پیوست این فصل ارائه می شود، که روش مونت کارلو در تکامل سیستم های پنج بعدی و با ابعاد بیش تر، سودمندتر است. تعداد ابعاد فقط یک سنجش از "پیچیدگی" مسئله است. مسئله در RTP (تمرین هدف رادیوترایی) و دزی متری (تعیین دوز جذب شده) معمولاً از بعد 6.8 و یا 7.8 است. به عبارت دیگر، ذرات در فضای دکارتی با موقعیت x حرکت می کنند، که به طور مداوم تغییر می کند، به جز در آغاز به کار و یا انتهای مهلت ذرات. آن ها با اندازه حرکت p حرکت می کنند، که به صورت مجزا و به طور پیوسته تغییر می کند. بعد زمان معمولاً برای مسائل ایستا نادیده گرفته می شود، هر چند نمی تواند برای مسائل غیرخطی نادیده گرفته شود، که در آن تکامل یک ذره می تواند با حضور ذرات دیگر در شبیه سازی تحت تأثیر قرار بگیرد (تأثیر "فضا - بار" مثال خوبی از این است). در نهایت، ϵ یک بعد گسسته است که می تواند شامل گونه ذرات مختلف و همچنین اسپین ذاتی باشد.

Monte Carlo versus deterministic/analytic methods



شکل ۱-۱- زمان به راه حل با استفاده از مونت کارلو در مقابل روش های قطعی / تحلیلی

سبک و سنگین کردن بین پیچیدگی و زمان برای راه حل در شکل ۱-۱ بیان شده است.

اگرچه نام "روش مونت کارلو" در سال ۱۹۴۷ یعنی در آغاز عصر کامپیوتر ابداع شد، روش های نمونه گیری تصادفی خیلی قبل تر از ظهور کامپیوترها شناخته شده بودند. اولین مرجع شناخته شده برای این نویسنده، مرجع Comte de Buffon (1777) است که روش شبیه مونت کارلو را برای تعیین نتیجه یک "تجربه" متشکل از پرتاب مکرر یک سوزن بر روی یک ورق کاغذ خطدار است، که برای تعیین احتمال یک عبور سوزن از خطوط می باشد. این مرجع به سال ۱۷۷۷ برمی گردد، درست قبل از تفکر ماشین های محاسبه اتوماتیک. به علاوه، Buffon محاسبه کرد که اگر یک سوزن به طول L به طور تصادفی در یک صفحه خطدار با خطوط موازی و از فاصله d می شود، که در آن $d > L$ ، احتمال عبور یک از خطوط خواهد بود:

$$\frac{2L}{p} = \pi d$$

(1.1)

خیلی بعد، Laplace (1886) پیشنهاد کرد که این پروسه می‌تواند برای تعیین مقدار π به کار گرفته شود، هرچند به کندی. چند تن دیگر از مونت کارلو استفاده تاریخی کردند که به زمانی برمی‌گردد که Kalos and Whitlock (2008) به کامپیوترها اشاره کردند.

ایده استفاده از روش نمونه‌گیری تصادفی برای اولین بار برای Ulam رخ داد^۱، کسی که در حالی که دوره نقاهت بیماری را می‌گذراند، بارها و بارها ورق بازی کرد و سپس تعجب کرد که او می‌تواند احتمال موفقیت‌ها را با تجزیه و تحلیل ترکیبی محاسبه کند. این اتفاق برای وی رخ داد، که با بازی کردن به دفعات، می‌تواند تعداد بازی‌های موفق را بشمارد (Metropolis, 1987; Eckhart, 1987)، و سپس احتمال موفقیت را برآورد کند. Ulam این ایده را برای von Neumann مطرح کرد، کسی که همراه با Ulam و Metropolis، روی محاسبات نظری مربوط به توسعه بمب هسته‌ای حرارتی کار می‌کردند. محاسبات دقیق انتقال نوترونی در طراحی بمب هسته‌ای حرارتی ضروری است. بمب اتمی به واسطه آزمایشات و اساساً با پشتیبانی نظری نسبتاً کم طراحی شد. محرک برای یک بمب هسته‌ای حرارتی یک بمب اتمی است، و تجهیزات قبل از اینکه سیگنال‌های مفید بتوانند استخراج شوند، نابود می‌شود^۲. به خصوص، Von Neumann نسبت به این ایده بسیار کنجکاو بود. مونت کارلو مدرن بعداً به عنوان طلیعه‌ای بود، زمانی که در ۱۱ مارس سال ۱۹۴۷، اولین پیشنهاد مستند استفاده از روش‌های نمونه‌گیری تصادفی اعمال شده به محاسبات انتقال تابش در مکاتبات بین von Neumann و Richtmyer پدیدار شد (Metropolis, 1987; Eckhart, 1987) Richtmyer رهبر بخش نظری در آزمایشگاه‌های ملی Los Alamos [LANL] بود. این نامه، استفاده از کامپیوتر ENIAC مربوط به LANL را برای انجام نمونه‌گیری تکراری پیشنهاد کرد. کمی بعد از آن، یک طرح پیشنهادی کامل‌تر نوشته شد. اگرچه این گزارش در اواخر سال ۱۹۸۸ از حالت محرمانه خارج شد، اطلاعات مختصر در مورد روش، با اشاره به عنوان "ترکیبی از فرآیندهای قطعی و تصادفی / تصادفی" برای پدیدار شدن در ادبیات آغاز شد که به صورت خلاصه منتشر شد (Ulam and von Neumann, 1945, 1947). سپس در سال ۱۹۴۹، Metropolis و Ulam، مقاله اصلی و مؤسس خود، "روش مونت کارلو" را منتشر کردند

^۱نقل قول مستقیم از زندگینامه Ulam (Ulam, 1991). (ص. ۱۹۶، چاپ ۱۹۹۱): "ایده برای آنچه بعدها روش مونت کارلو نامیده شد، زمانی برای من اتفاق افتاد که در طول بیماری خود بازی یک نفره (ورق) انجام می‌دادم."
^۲کتاب خورشید تیره، نوشته Richard Rhodes، یک نقطه شروع عالی برای تاریخ آن موضوع است (Rhodes, 1988).

(Metropolis and Ulam, 1949)، که اولین مقاله طبقه‌بندی نشده در روش مونت کارلو بود، و برای اولین بار نام "مونت کارلو" در ارتباط با نمونه‌گیری تصادفی بود.

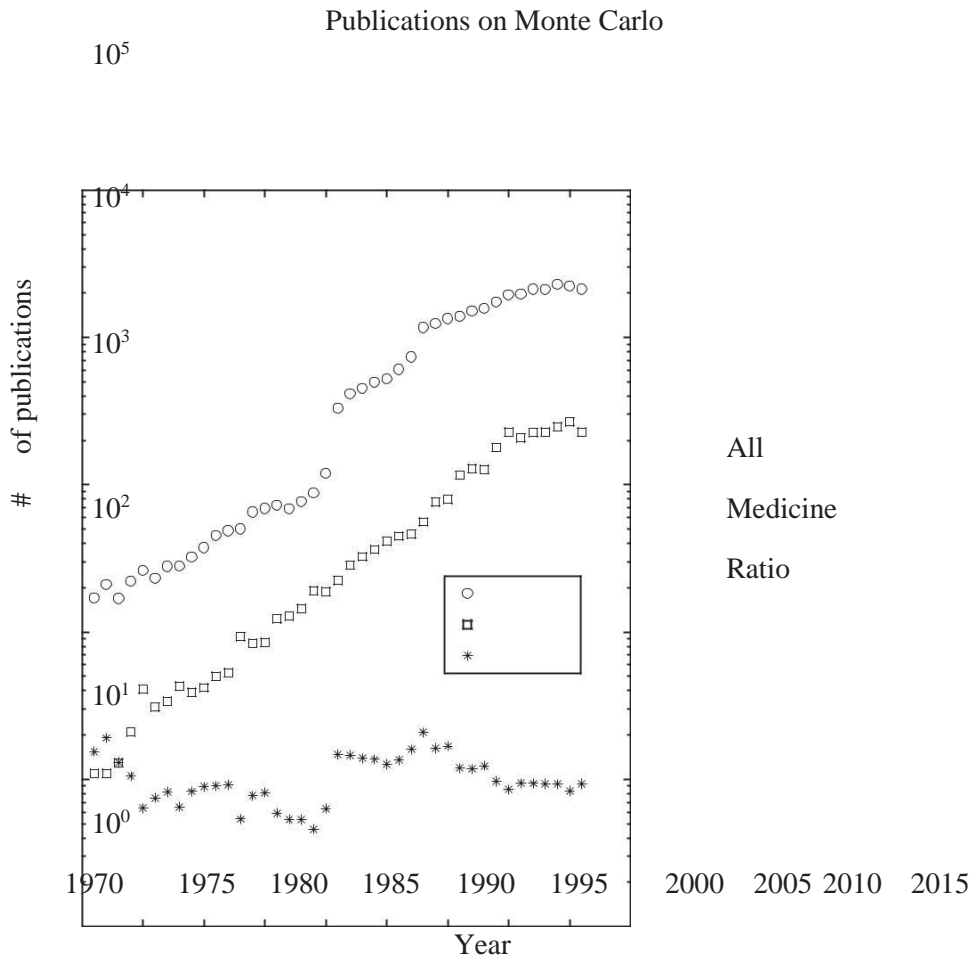
در حال حاضر تا ۱۹۴۹، سمپوزیوم‌هایی در مورد روش مونت کارلو و در درجه اول با تمرکز بر تکنیک‌های ریاضی، فیزیک هسته‌ای، مکانیک کوانتومی و تجزیه و تحلیل آماری کلی، در حال سازمان‌دهی شدن بود. به ویژه کنفرانس بعدی، سمپوزیوم روش‌های مونت کارلو که در سال ۱۹۵۴ در دانشگاه فلوریدا برگزار شد (Meyer, 1981)، مهم بود. ۷۰ شرکت‌کننده وجود داشت، که بسیاری از آن‌ها به عنوان "بنیان‌گذاران" توسط متخصصین مونت کارلو در علوم رادیولوژی شناخته شدند. بیست مقاله از جمله دو مقاله در مورد اشعه گاما ارائه شد که ۲۸۲ صفحه را در مجموعه مقالات پوشش می‌دادند. این مجموعه مقالات شامل یک کتابشناسی ۹۵ صفحه‌ای، خلاصه‌ای عظیم از کار تا آن زمان، و بسیاری از مراجع بود که دارای خلاصه و توضیحات منتشر شده در مجموعه مقالات بودند.

بقیه نقل قول یک عبارت که به صورت مفرط استفاده شده، تاریخ است. جالب است به این کنایه فوق‌العاده توجه داشته باشید: این روش ریاضی برای تخریب با استفاده از وحشتناک‌ترین سلاح‌ها در تاریخ، بمب هسته‌ای حرارتی ساخته شد. خوشبختانه، این سلاح هرگز در جنگ مورد استفاده قرار نگرفته است. در عوض، میلیون‌ها نفر از توسعه روش مونت کارلو برای پزشکی، بهره‌مند شده‌اند. این موضوع، حداقل یک زیرمجموعه کوچک از آن، بقیه این فصل را به خود اختصاص خواهد داد.

از تاریخ این نوشته، با داده‌هایی از سال ۲۰۱۱ که هنوز ناقص است، دریافته‌ایم که حدود ۳۰۰۰۰۰ مقاله در مورد روش مونت کارلو منتشر شده است. اگر ما این جستجو را تنها به آن دسته مقالات مربوط به پزشکی محدود کنیم، تعداد نشریات تقریباً ۳۰۰۰۰ است. به نظر می‌رسد ۱۰٪ سهم نسبت به روش مونت کارلو در طول زمان و حداقل از سال ۱۹۷۰، ثابت باشد. این نشان‌دهنده یک سرمایه‌گذاری عظیم در سرمایه انسانی به منظور توسعه این ابزار مفید است. تکامل زمانی این تلاش انسانی در شکل ۱-۲ نشان داده شده است. قبل از سال ۲۰۰۵، رشد در هر دو حوزه به صورت نمایی در همه جا به نظر می‌رسد. کل تلاش نشان‌دهنده سه حوزه مجزای شیب، با تغییرات

ناگهانی، به طور جاری بیان نشده است، هر چند که ممکن است به علت ظهور ناگهانی "بردار" و ماشین‌های "شدیداً موازی"، و افزایش در تحقیقات مرتبط با این معماری کامپیوتر اساساً جدید باشد. رشد در حوزه "پزشکی" ثابت شده است.

از سال ۲۰۰۵، هر دو حوزه از روی آمار با خروجی ثابت سازگار هستند، حوزه "دارو" در بیش‌تر از ۲۱۰۰ نشریه / سال برابری می‌کند. به نظر می‌رسد که این ارتباطات در اوج این تلاش علمی نوشته شده است!



شکل ۱-۲- تعداد مقالات منتشر شده در هر سال از وب دانش ("همه") و Medline ("پزشکی") به دست آمد. Martin Berger، در ساحلی نزدیک Erice، سال ۱۹۸۷. (تواضع عکس RalphNelson)

۱-۲- مونت کارلو در فیزیک پزشکی

هر بررسی تاریخی تعصبات خود را دارد، و مورد به کار رفته در اینجا، بحث را به کاربردهای رادیوتراپی و دزی متری (دوز جذب شده) پرتوافکنی محدود خواهد کرد. علاوه بر این، بنا به دلایلی که در پاراگراف زیر توضیح داده شده است، تمرکز بر توسعه مونت کارلوی الکترون خواهد بود. بررسی‌های زیادی در مورد استفاده از مونت کارلو در فیزیک پزشکی وجود دارد. تعداد کمی از موارد اخیر که در مورد فیزیک رادیوتراپی و دزی متری توضیح می‌دهند عبارت‌اند از: (1985, 1991) Andreo، (1990) Mackie، (1990) Rogers and Bielajew، Ma and (1999) Jiang، (2003) Verhaegen and Seuntjens و (2006) Rogers.

افزایش استفاده از شتاب‌دهنده‌های الکترونی خطی (LINAC^۱) برای پرتودرمانی نیز در نیاز به منظور توسعه روش‌های مونت کارلو به منظور پیش‌بینی دوز و دزی متری مطرح شد. LINAC‌های به کار رفته در پرتودرمانی، منبع پرنرژی و نافذ فوتون‌هایی را فراهم می‌کنند که به طور عمیق وارد بافت شده، و سطح را نگه داشته و به طور قابل ملاحظه‌ای به سرعت کم‌تر از پرتوهای ⁶⁰Co یا ¹³⁷Cs کاهش می‌دهند. الکترون‌های نسیتی برای هر ۲MeV انرژی جنبشی در آب دارای محدوده ۱ سانتی متری هستند. در حداکثر مقدار آن، با شروع با یک پرتو مداد الکترون، قطر رسوب انرژی الکترون، "ستون" گلابی شکل نیز حدود ۱ سانتی متر در هر ۲ مگا الکترون‌ولت انرژی جنبشی اولیه است. این ابعاد با اندام تحت درمان، و همچنین اندام در خطر متناسب هستند. نواحی درمان با تفاوت در ترکیب و تراکم، ناهمگن هستند. علاوه بر این، ابزار مورد استفاده برای اندازه‌گیری دوز، حتی بیش‌تر متنوع هستند. در حال حاضر درست است، که روش مونت کارلو تنها پیش‌بینی مقادیر تابش را فراهم می‌کند که تقاضای دقت پرتودرمانی را برآورده می‌کنند.

بنابراین، تاریخ سودمندی روش مونت کارلو در فیزیک پزشکی به طور جدایی‌ناپذیری به توسعه روش‌های مونت کارلوی انتقال الکترون در هندسه‌های پیچیده و در توصیف آبشارهای الکترومغناطیسی گره خورده است.^۲

^۱ linear electron accelerators (LINACs)

^۲ بدیهی است کاربردهای مهمی در براکی‌تراپی و تصویربرداری وجود دارد که از انتقال الکترون چشم‌پوشی می‌کنند. با این حال، ما باید این توضیحات را دیگر نویسندگان واگذار کنیم.

اولین مقالاتی که روش مونت کارلو را با استفاده انتقال الکترون به کار برده‌اند، توسط Robert R. Wilson (1950, 1951, 1952, p. 261) نوشته شد، کسی که محاسبات خود را با استفاده از یک "چرخش چرخ احتمال" انجام داد^۱. اگرچه ظاهراً کاملاً خسته کننده بود، روش Wilson هنوز هم بهبودی در روش‌های تحلیلی زمان بود - به ویژه در مطالعه رفتار متوسط و نوسانات در مورد میانگین (Rossi, 1952). (Hebbard and P. R. Wilson (1955)). برای بررسی متفرق شدن الکترون و از دست دادن انرژی در ورقه‌های (ورقه‌های فلزی) ضخیم استفاده کرد. اولین استفاده از یک رایانه دیجیتال الکترونیکی در شبیه‌سازی آبشارهای با انرژی بالا با استفاده از روش‌های مونت کارلو توسط (Butcher and Messel (1958, 1960)، و به طور مستقل توسط (Varfolomeev and Svetloolobov (1959) گزارش شده است. این دو گروه در یک کار بسیار علنی همکاری کردند (Messel et al., 1962) که در نهایت به مجموعه گسترده‌ای از جداول توصیف کننده توابع توزیع shower منجر شد (Messel and Crawford, 1970) - به اصطلاح "کتاب shower" نامیده شد.

به دلایل مختلف، دو کد کاملاً متفاوت در اوایل تا اواسط دهه ۱۹۶۰ برای شبیه‌سازی آبشارهای الکترومغناطیسی نوشته شد. ابتدا توسط (Zerby and Moran (1962a,b, 1963) از آزمایشگاه ملی Oak Ridge نوشته شد، که با ساخت مرکز شتاب دهنده خطی Stanford برانگیخته شد. بسیاری از مسائل فیزیک و مهندسی به عنوان نتیجه‌ای از پرتوهای الکترونی با انرژی بالا پیش‌بینی شد که در دستگاه‌ها و ساختارهای مختلف در آن وسیله افشاندن می‌شود. این کد توسط (Alsmiller and Barish, 1969, 1974;) (Alsmiller and Moran, 1966, 1967, 1968, 1969; Alsmiller et al., 1974) برای تعدادی مطالعات از زمان توسعه آن استفاده شده بود^۲.

کد دوم توسط Nagel توسعه داده شد (Nagel and Schlier, 1963; Nagel, 1964,) (Völkel, 1966; Nicoli, 1965) و چندین اقتباس گزارش شده است (Ford and Nelson, 1978; Burfeindt, 1967;) (Ford, 1966). نسخه اصلی، که

^۱ R. R. Wilson نیز به عنوان بنیان‌گذار پروتودرمایی پروتون شناخته شده است (Wilson, 1946).

^۲ طبق (Alsmiller with W. R. Nelson, 1970) (Alsmiller Jr. private communication. (conversation with R. G. Alsmiller Jr. Moran and Zerby از ORNL ناپدید شد و آن‌ها مجبور شدند با نسخه مبنای هشت کار کنند.

و Nelson، SHOWER1 نامیدند، یک کد فورترن نوشته شده برای رویداد الکترون‌های با انرژی بالا (≥ 1000 مگا الکترون‌ولت) بر سرب در هندسه استوانه‌ای بود. شش تعامل قابل توجه الکترون و فوتون (تابش ترمزی^۱، پراکندگی الکترون-الکترون، از دست دادن یونیزاسیون، تولید جفت، پراکندگی کامپتون و اثر فوتوالکتریک) به علاوه چند پراکندگی کولن به آن افزوده شد. به جز برای نابودی، پوزیترون‌ها و الکترون‌ها به طور یکسان رفتار کردند و تا زمانی دنبال شد که آن‌ها به انرژی قطع جریان $1/5$ مگا الکترون‌ولت (انرژی کل) رسیدند. فوتون‌ها پایین به $0/25$ مگا الکترون‌ولت دنبال شدند. انرژی‌های قطع جریان به همان اندازه کم یا پایین تر از آن چیزی بودند که توسط Messel و Crawford یا Moran و Zerby استفاده شد. دسترس پذیری پایان‌نامه Nagel (۱۹۶۴) و یک کپی از برنامه shower اصلی او، انگیزه‌ای برای Nicolì فراهم کرد (Nicolì, 1966) تا محدوده انرژی پویا و انعطاف‌پذیری کد امنیتی را به گونه‌ای گسترش دهد تا به عنوان یک ابزار عملی برای فیزیکدان تجربی در دسترس باشد. این نسخه‌ای از کد بود که در نهایت به نمونه سیستم‌های کد EGS (shower گامای الکترون) تبدیل شد (Ford and Nelson, 1978; Nelson et al., 1985; Bielajew, 1987; Kawrakow and Rogers, 2000; Hirayama et al., 2005).

در یک مسیر کاملاً مستقل، و ظاهراً مستقل از جامعه آشبار الکترومغناطیسی، کد γ - e برگر (Berger) بود. در نهایت، در سال ۱۹۶۸ برای عموم مردم به عنوان ETRAN منتشر شد (Berger and Seltzer, 1968)، هر چند روشن است که از اوایل دهه ۱۹۶۰ نسخه‌های داخلی بر NBS (در حال حاضر NIST) (Seltzer, 1989)، بر پایه و اساس مطرح شده توسط مقاله راهنمای Berger (1963) تأثیر گذاشتند. سپس کد ETRAN راه خود را پیدا کرده، تا حدودی به کدهای Sandia، EZTRAN (Halbleib and Vandevender, 1971)، EZTRAN2 (Halbleib and Vandevender, 1973)، SANDYL (Colbert, 1973)، TIGER (Halbleib and Vandevender, 1975)، CYLTRAN (Halbleib and Vandevender, 1976)، CYLTRANNM (Halbleib and Vandevender, 1977) و CYLTRANP (منتشر نشده)،

^۱ bremsstrahlung

ACCEPT، (Halbleib and Morel, 1979) TIGERP، (Halbleib, 1978) SPHERE (Miller et al., 1981) SPHEM، (Halbleib et al., 1981) ACCEPTTM، (Halbleib, 1980) و در نهایت به کدهای ITS همه‌جانبه (Halbleib and Mehlhorn, 1986; Halbleib et al., 1992) اصلاح شد. کد انتقال الکترون ITS در سال ۱۹۹۰ در نسخه ۴ کد MCNP (N-ذرات مونت کارلو) گنجانیده شد (Hendricks and Briesmeister, 1991). کد MCNP این ادعا را مطرح می‌سازد که از نسل مستقیم کدهای نوشته شده توسط بنیان‌گذاران روش مونت کارلو، Fermi، von Neumann، Ulam، و همچنین Richtmyer و Metropolis می‌باشد (Briesmeister, 1986). با نقل قول مستقیم^۱، بیش تر کار اولیه در اولین کتابی خلاصه می‌شود که توسط Cashwell و Everett در سال ۱۹۵۷ در مورد مونت کارلو پدید آمد^۲. مدت کوتاهی پس از اولین کد انتقال نوترون مونت کارلو MCS نوشته شد، که در سال ۱۹۶۷ به دنبال آن MCN نوشته شد. سپس، کدهای فوتون MCC و MCP اضافه شد و در سال ۱۹۷۳، MCN و MCC برای تشکیل MCNG با هم ادغام شدند. کار بالا در نسخه ۱ از MCNP در سال به نتیجه عالی رسید. اولین کتابچه‌های راهنمای کاربر بزرگ توسط W. L. Thompson در سال‌های ۱۹۷۹ و ۱۹۸۱ منتشر شد. این کتابچه راهنمای کاربر از ماقبل‌های آن نتیجه می‌شود.

اولین حضور انتقال الکترون در MCNP با نسخه ۴ در سال ۱۹۹۰ رخ داد (Hendricks and Briesmeister, 1991). پس از آن زمان، MCNP به نقش آفرین مهمی در پژوهش‌های مرتبط با پزشکی تبدیل شد، که بعداً مورد بحث قرار می‌گیرد.

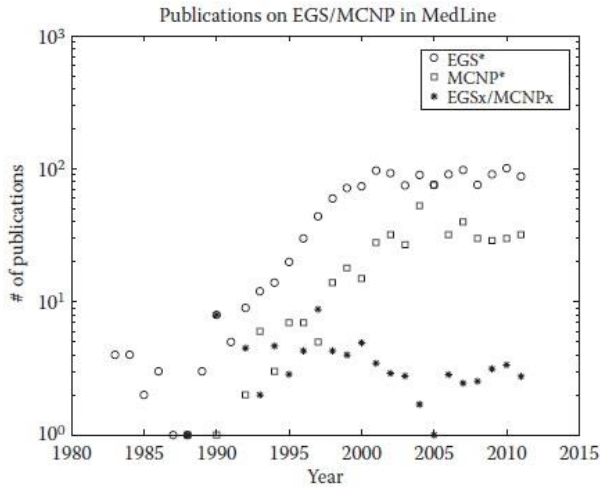
سهم Berger (۱۹۶۳) به عنوان مقاله غیررسمی (و Berger پدر بنیان‌گذار) میدان انتقال الکترون و فوتون مونت کارلو در نظر گرفته می‌شود. این مقاله با ۸۱ صفحه، چارچوبی برای نسل بعدی فیزیکدانان محاسباتی مونت کارلو ایجاد کرد. همچنین تمام فیزیک نظری ضروری برای توسعه الگوریتم مونت کارلو خلاصه شد. علاوه بر این، Berger یک روش تخصصی برای انتقال الکترون معرفی کرد. انتقال الکترون و پراکندگی، برای فیزیک پزشکی، دزی متری و بسیاری از کاربردهای دیگر، موضوعی برای تدابیر خاص است. به جای مدل‌سازی هر تعامل گسسته الکترون (مرتبۀ ۱۰^۶

^۱ به نظر می‌رسد کدها و دستورالعمل‌های اشاره شده در این نقل قول، از بین رفته‌اند.
^۲ ۱۹۵۹، به صورت دقیق (Cashwell and Everett, 1959).

برای الکترون‌های نسبیته، نظریه‌های پراکندگی تجمعی، که به موجب آن 10^3 – 10^5 رویداد منفرد ارتجاعی و غیر ارتجاعی به رویدادهای واحد "مجازی" تک پراکندگی "متراکم می‌شوند"، در نتیجه به طور معمول امکان تسریع عوامل صدها مورد فراهم می‌شود. Nelson، مبتکر سیستم کد EGS، عنوان کرد (W. R. Nelson، ارتباطات شخصی، ۲۰۱۱): "اگر من در مورد کار Berger آگاه شده بودم، ممکن بود کار در مورد EGS انجام نداده بودم!"

همان‌طور برای استفاده همه‌منظوره در زمینه‌های مرتبط با پزشکی، با هندسه‌های ترکیبی و چند مواد، دو نقش آفرین بارز از لحاظ تاریخی RTP / دوزیمتری^۱، کدهای EGS و MCNP در بالا معرفی شد. در دهه گذشته، GEANT (Brun et al., 1982; Allison et al., 2006) نیز کمک قابل توجهی کرده است و همچنین، فعلاً در استفاده در MCNP به صورت برابر کمک کرده است. نمودار تعداد مقالات چاپ شده، با استفاده از این روش در شکل ۱–۳ ترسیم شده است. با توجه به شکل ۱–۳ مشاهده می‌کنیم، هنگامی که MCNP انتقال الکترون را معرفی کرد، که استفاده از MCNP رشد نمایی در استفاده آن در حوزه‌های مرتبط با پزشکی تجربه کرد. آن رشد نمایی در حدود سال ۲۰۰۰ به پایان رسید. از آن زمان، به نظر می‌رسد هر دو سیستم کد EGS و MCNP استفاده مداومی را تجربه می‌کنند، و GEANT هنوز هم، مسلماً، در حال افزایش است. اگر کسی همه ادبیات غیرپزشکی مربوط به مونت کارلو را در نظر بگیرد، MCNP به طور غیرقابل انکاری توسط تقریباً یک عامل ۷ در EGS، بیش‌ترین ارجاع را بین کدهای مونت کارلو داشته است.

^۱ بسیاری رویکردهای مرتبط و جایگزین وجود دارد، که خواننده باید در مورد آن‌ها بداند؛ یعنی FLUKA (Aarnio et al., 1984; Fasso et al., 2005; Battistoni et al., 2007)، Penelope (Ranfitt, 1964)، و کد (Salvat and Parrellada, 1984; Baró et al., 1995). از تاریخ این نوشته، تعداد مقالات ارائه شده با استفاده از این کدها در حوزه‌های پزشکی حدود ۲۴۰ است، حدود نیمی از MCNP.



شکل ۱-۳- مقالاتی که از EGSx، MCNPx و GEANTx استفاده می‌کنند، که در MedLine ثبت شده است.

باید تأکید کرد که این دو سیستم کد در طبیعت بسیار متفاوت هستند. به ویژه از سال ۱۹۸۴، EGS حوزه پزشکی را هدف قرار داده است، هر چند که از برخی استفاده در حوزه‌های دیگر فیزیک نیز برخوردار شده است. برخی از ویژگی‌ها واقعاً منحصر به فرد هستند، مانند ردگیری چرخش الکترون جداگانه، یک ویژگی (Namito et al., 1993) در EGS5 (Hirayama et al., 2005) و همچنین گسترش Doppler (Namito et al., 1994)، که هر دو نتیجه علاقه زیاد به انجام پژوهش در منابع نور تابش سینکروترون^۱ هستند. با این حال، به طور کلی، با توجه به اینکه مونت کارلو در همه حوزه‌ها استفاده می‌شود، انتقال نوترون جدیدترین تکنولوژی MCNP، آن را به پیش‌تاز جهان در اختلاط علوم هسته‌ای و رادیولوژیکی تبدیل می‌کند. سیستم‌های کد EGS، توسط متخصصینی پشتیبانی می‌شود که مجموعه‌ای از رشته‌های علمی را ارائه می‌کنند: فیزیک پزشکی، دانشمندان رادیولوژی، فیزیکدانان محض و کاربردی. MCNP به این جوامع نیز خدمت می‌کند، اما از حمایت حرفه پر جنب و جوش مهندسی هسته‌ای نیز برخوردار است، که در آن نظریه انتقال نوترون‌ها یک حوزه پژوهشی غنی و فعال است.

^۱ synchrotron

۱-۳- سیستم‌های کد EGSx

تاریخچه EGS بدین صورت است که، در درجه اول کدی برای شبیه‌سازی آشکارساز و استحفاظ فیزیک انرژی بالا توسعه یافت، در فیزیک پزشکی استفاده شد، در کل هرگز در متن ظاهر نشد. فروتنی Rogers (۲۰۰۶) احتمالاً با بیان آن در مقاله خود مداخله کرد. با این حال، من ناظر آن وقایع اولیه بودم، و فکر می‌کنم ممکن است برخی بینش‌هایی ارائه دهد. در سال ۱۹۷۸، SLAC، EGS3 را منتشر کرد (Ford and Nelson, 1978)، و Rogers از آن در چندین نشریه مهم استفاده کرد (Rogers, 1982, 1983a,b, 1984a,b). یکی از اهمیت‌های ویژه این نشریه این بود که یک پچ (patch) برای الگوریتم EGS3 ارائه شد تا از روش به کار رفته در ETRAN تقلید کرده، و با کوتاه کردن مراحل به تعاملات مجازی، محاسبات وابسته به الکترون را قابل اعتماد سازد. در آن زمان، مصنوعات اندازه گام انتقال الکترون به طور کامل غیرقابل توضیح بود. کوتاه شدن مراحل برای حل این مسئله قابل درک است، که با فصاحت بسیاری توسط Larsen (1992) توضیح داده شد، اما هزینه زمان محاسباتی اضافه شده را در برداشت. این "مصنوعات اندازه گام" توجه Nelson را به خود جلب کرد، که Rogers را دعوت کرد تا در نوشتن نسخه بعدی EGS، EGS4، (Nelson et al., 1985)، همراه با Hirayama، دانشمند محقق در KEK، سازمان پژوهش شتاب‌دهنده انرژی بالا، تسوکوبا، ژاپن، شرکت کند.

به دنبال انتشار آن در دسامبر ۱۹۸۵، نهاد Rogers (آزمایشگاه استانداردهای تابش، و یک آزمایشگاه نزدیک به NIST برگر) به هسته فیزیک پزشکی و انتشار مونت کارلوی دزی‌متری تبدیل شد. آن پشتیبانی و توزیع کد EGS4 را به عهده گرفت و شروع به ارائه دوره‌های آموزشی در سراسر جهان کرد. Hirayama در تلاش مشابهی در مناطق آسیایی مشغول بود.

با این حال، مصنوعات اندازه گام در EGS4 غیرقابل توضیح باقی مانده است. Nahum، که به مدل‌سازی پاسخ اتاقک یونیزاسیون علاقه‌مند بود، در بهار ۱۹۸۴ از آزمایشگاه Rogers دیدن کرد تا در مورد این موضوع همکاری کند. Nahum دارای سابقه علمی در مونت کارلوی الکترون بود (Nahum, 1976)، که آنچه را تولید می‌کرد که در نهایت از طریق تجزیه و تحلیل گشتاور متوجه خواهد شد (Lewis (1950)، تا الگوریتم انتقال الکترون به مراتب برتری باشد. در حالی که با

استفاده از EGS4 برای پیش‌بینی پاسخ اتافک یونیزاسیون، EGS4 پاسخ‌هایی را پیش‌بینی خواهد کرد که می‌توانند ۶۰٪ خیلی کم باشند. به نقل از Nahum، "محاسبه‌ای که یک نفر می‌تواند در پشت یک پاکت نامه خلاصه کند، و تا ۵٪ صحیح باشد، چگونه با استفاده از مونت کارلو ۶۰٪ می‌تواند اشتباه باشد؟" کاهش اندازه گام مسئله را حل کرد (Bielajew et al., 1985; Rogers et al., 1985)، اما جستجو برای قدرت تفکیک نسبت به ناهنجاری‌های اندازه گام آغاز شد که منجر به الگوریتم PRESTA شد (Bielajew and Rogers, 1987, 1989). انتشار PRESTA توسط اثبات کاستی‌های مختلف کوچک، اما مهم دنبال شد (Rogers, 1993; Foote and Smyth, 1995). بهبودهایی طی سال‌ها وجود داشت (Bielajew and Kawrakow, 1997a,b,c, Kawrakow and Bielajew, 1998)، که در نهایت به بازبینی کد EGS منجر شد، که به عنوان EGSnrc (Kawrakow and Rogers, 2000) و EGS5 (Hirayama et al., 2005) منجر شد. بهبود ETRAN مانند PRESTA (Seltzer, 1991; Kawrakow, 1996) حتی توسعه داده شد.

۱-۴- کاربرد: دزی‌متری محفظه یا اتافک یون

مقاله مؤسس برای استفاده از روش‌های مونت کارلو جهت پاسخ اتافک یونیزاسیون به Bond et al. (1978) نسبت داده می‌شود، که با استفاده از یک کد مونت کارلوی داخلی، پاسخ اتافک یونیزاسیون را به عنوان تابعی از ضخامت دیواره، نسبت به تابش گامای ^{60}Co محاسبه کرد. در حین معتبر ساختن کد EGS برای این کاربرد، مشخص شد که کد EGS مشکلات الگوریتمی اساسی با این رژیم کم انرژی، و همچنین این کاربرد داشت. وضوح این مشکلات، که در دیگر کدهای همه‌منظوره مونت کارلو مطرح نشده است، مورد علاقه این نویسنده بود. در حالی که بهبودهای کلی نسبت به انتقال الکترون صورت گرفت، مشکل اساسی کاملاً ظریف بود، و در نهایت به ظرافت توسط Foote and Smyth (1995) شرح داده شد. به طور خلاصه، دلیل الگوریتمی زمینه‌ای که مشخص شد از متوقف شدن مسیرهای الکترونی که در مرزهای مواد به وجود آمد، که در آن سطح مقطع تغییر می‌کند. EGS از مسیر الکترون جزئی برای مدل‌سازی انحراف الکترون، از قدرت پراکندگی انباشته شده استفاده کرد. نتیجه اثر نادر اما مهمی بود، یعنی تولید ساختگی تکینگی فلوئنس.

ادبیات در مورد دزی متری اتاقک یونیزاسیون گسترده است. گردآوری جزئی همکاری‌های بسیار اولیه عبارت‌ست از (Bielajew et al., 1985; Rogers et al., 1985; Andreo et al., 1986;) (Bielajew, 1990; Rogers and Bielajew, 1990; Ma and Nahum, 1991).

در حال حاضر، محاسبه اصلاحات اتاقک یونیزاسیون یک اقدام مهم بسیار بهبود یافته با نتایجی است که بهتر از ۰/۱٪ محاسبه شده است. ادبیات در مورد این موضوع توسط Bouchard و Seuntjens در فصل خود در این کتاب "کاربرد مونت کارلو برای دزی متری تابش" خلاصه شده است. آن فصل سهم مونت کارلو برای پروتکل دزی متری و داده‌های دزی متری پایه، برخی از اولیه‌ترین کاربردهای مونت کارلو برای پزشکی را خلاصه می‌کند.

۱-۵- کاربردهای اولیه پرتودرمانی

برای اختصار، فقط اولین مقالات در این بخش ذکر شده، و خواننده را تشویق می‌کند تا از بررسی های جامعی استفاده کند که قبلاً در این مقاله ذکر شده است. قدری از تاریخچه کاربردهای پرتودرمانی به ندرت ذکر شده‌اند، و من تلاش کرده‌ام تا آن‌ها را اینجا گردآوری کنم.

مدل‌سازی مونت کارلو در مورد واحدهای درمانی کبالت ۶۰ برای اولین بار در گزارش ICRU شماره ۱۸ (۱۹۷۱) اشاره شده است. با این حال، کار توصیفی کامل‌تر کمی بعد دنبال شد (Rogers et al., 1985; Han et al., 1987).

مدل‌سازی واحدهای درمان LINAC برای اولین بار توسط Petti و همکاران (1983a,b) انجام شد و سپس، به زودی پس از آن توسط Mohan و همکاران (۱۹۸۵) انجام شد.

آلودگی فوتون‌تورون یک واحد درمانی برای اولین بار توسط Ing و همکاران توضیح داده شد (۱۹۸۲)، اگرچه هندسه شبیه‌سازی ساده‌سازی شد.

Mackie و همکاران پیشگام روش کانولوشن بودند (Mackie et al., 1985) و پس از آن با دیگر همکاران، اولین پایگاه داده "هسته" یا "آرایه‌های گسترش دوز" را برای استفاده در پرتودرمانی تولید کردند (Mackie et al., 1988). به طور مستقل، این تلاش‌ها توسط Ahnesjö و همکاران (۱۹۸۷) توسعه داده شد. این‌ها هنوز هم در حال استفاده هستند.

مدل‌سازی پرتوهای الکترون از LINAC‌های پزشکی برای اولین بار توسط (Teng et al. (1986، Hogstrom et al. (1986 و سپس (Manfredotti et al. (1990 انجام شد.

طرح اصلی برای استفاده از محاسبه مونت کارلو برای "دکمه هدف برای دوز بیمار" توسط Mackie et al. (1990 پیشنهاد شد. این تلاش به عنوان "پروژه OMEGA (مخفف الگوریتم گامای الکترونی Ottawa Madison)" شناخته شد. با این حال، در اوایل پروژه، یک رویکرد "تقسیم و تسخیر" به تصویب رسید، که به موجب آن خروجی‌های ماشین ثابت ("فایل‌های فضای فاز") به عنوان ورودی‌هایی برای یک هدف خاص بیمار (درخواست کنندگان و بیمار) به منظور تولید یک برنامه درمانی کامل مورد استفاده قرار گرفت. این دوشاخه‌شدن دو صنعت را ایجاد کرد، مدل‌سازی سر درمان، که کد BEAM/EGSx تا بیش‌ترین حد بهینه می‌شود (Rogers et al., 1995) و مقاله‌ای است که در "وب دانش" با "مونت کارلو" در عنوان "راديوتراپی" به عنوان موضوع بیش‌تر ذکر می‌شود. صنعت دوم ایجاد شده توسط پروژه OMEGA، توسعه‌ای از الگوریتم‌های محاسبه سریع دوز بر اساس مونت کارلوی خاص بیمار بود (Kawrakow et al., 1995, 1996; Sempau et al., 2000; Gardner et al., 2007). برای بحث بیش‌تر در مورد روش‌های فعلی و سریع مونت کارلو مورد استفاده، خواننده به دیدن بررسی عالی توسط (Spezi and Lewis (2008 تشویق می‌شود.

۱-۶- آینده مونت کارلو

اولین گام در پیش‌بینی آینده، نگاه به آن چیزی است که فرآیند را برون‌یابی کرده است، و در نتیجه آینده را پیش‌بینی نموده است. دومین گام در پیش‌بینی آینده، درک این موضوع است که اولین گام شامل برخی استدلال‌ات بسیار فریبنده و مشکل است!

پیشرفت زمان، با حوادثی که شامل می‌شود، فی‌نفسه در طبیعت "فاجعه‌بار" است. یک کشف علمی می‌تواند بسیار مخرب زمین باشد، که دستورالعمل جدید پژوهشی تولید می‌شود، در حالی که بقیه به بی‌ربطی منحل می‌شود. با این حال، ما در عمل پیش‌بینی اصرار می‌کنیم. بنابراین، اجازه دهید تا در این تلاش بسیار جدی باشم.

قانون Amdahl (۱۹۶۷): تنگناهای ارتباط داخلی چندپردازنده‌ها ادامه خواهد یافت تا عامل محدودکننده‌ای برای ماشین‌های موازی باشد. با این حال، به دنبال قانون Moore به نظر نمی‌رسد افزایش در سرعت تراشه واحد، تک لایه‌ای و سنتی به کندی باشد.^۱

پیش‌بینی سخت‌تر توسعه الگوریتم خاص کاربرد مونت کارلو در RTP است. سابقه تاریخی برای این در استناد وجود دارد. در سال ۱۹۹۱، افزایش ۲/۸ عامل در بهره‌وری تنها در یک سال وجود داشت، که به دنبال آن در سال ۱۹۹۸ عامل ۱/۶ وجود داشت. این افزایش‌ها زیاد و غیرقابل توضیح هستند. با این حال، آن‌ها ماهیت بی‌نظم در این زمینه را نشان می‌دهند.

پیشنهادی قوی وجود دارد که تحقیقات در مونت کارلو اشباع می‌شود. اگرچه حوزه‌های جدید پژوهشی ممکن است به وجود آمده و رشد کنند، "همه" داده‌ها و "پزشکی" از حدود سال ۲۰۰۵ ثابت بوده است. خروجی MCNP و EGS از سال ۲۰۰۰ ثابت بوده است. شاید ما در اوج هستیم؟ ما با خیال راحت می‌توانیم پیش‌بینی کنیم، در حالی که رویکرد نسبت به اوج می‌تواند تا حدودی بی‌نظم باشد، کاهش تدریجی خواهد بود. کدهای مونت کارلو برای استفاده آسان‌تر به دست آمده‌اند، با رابط کاربرپسندتری بسته‌بندی شده‌اند، و به سیستم‌های نرم‌افزاری "با بسته‌بندی کوچک" و "جامع"^۲ توسعه می‌یابند. چگونه باید باشد. واقعیت این است که یک روش مونت کارلو "موتوری" تحت یک الگوریتم محاسباتی است، نسبت به محقق که از ابزار استفاده می‌کند باید شفاف باشد، اما نامرئی نباشد.

^۱ در سال ۱۹۶۵، Gordon E. Moore، از بنیانگذاران شرکت اینتل، پیش‌بینی کرد که تراکم ترانزیستور فضایی هر ۱۸ ماه دو برابر خواهد شد. در واقع، می‌توان افزایش متناسب در سرعت کامپیوتر را استنباط کرد. Moore در سال ۱۹۷۵، پیش‌بینی خود را به "دو برابر شدن در هر دو سال" تغییر داد. طراحی‌های تراشه‌های فعلی حداقل تا سال ۲۰۱۵ از قانون Moore پیروی می‌کنند.

^۲ turn-key

گفته Martin Berger (Seligman et al., 1991)، بنیان‌گذار رشته ما، طی سخنرانی خود در سمپوزیوم یادنامه بازنشستگی (۱۹۹۱) این چنین است:

من مورد توجه عمومی بسیاری قرار نگرفته‌ام. امشب برای من کاملاً غیرمعمول است. امیدوارم که، پس از امشب، بتوانم در گمنامی ناپدید شوم که مطمئناً آرزو دارم.

و بنابراین ممکن است برای پژوهش مونت کارلو باشد - حداقل، تا زمانی که چیز بزرگ بعدی پیشرفت کند.

یک بار دانشجویی بسیار دانا به من گفت: "ما دیگر گروه مهندسی راه آهن نداریم"، در تلاش برای بیان (پس از آن) کاهش گروه مهندسی هسته‌ای، قبل از "رنسانس هسته‌ای". ممکن است که توسعه روش مونت کارلو به کاهشی محدود شود که کامل شود، اما برای همیشه جزء اساسی از زیرساخت علمی ما باقی خواهد ماند.

پیوست: مونت کارلو و تربیع عددی

در این ضمیمه، اثبات ریاضی ارائه می‌کنیم که روش مونت کارلو در مقایسه با روش‌های قطعی مرتبه اول (تحلیلی، تکامل فضای فاز)، کارآمدترین راه تخمین برچسب‌ها در سه بعد فضایی است. با وجود این نظر که روش مونت کارلو به عنوان ارائه‌دهنده دقیق‌ترین محاسبه در نظر گرفته می‌شود، ممکن است استدلالی این گونه صورت گیرد، که آن مستقل از مطالب فیزیک الگوریتم زمینه‌ای و یا کیفیت زمینه تابش رویداد است.

A-1- ابعاد روش‌های قطعی

به منظور برآورد برچسب‌ها از شروع الکترون‌ها، فوتون‌ها و نوترون‌ها، فرآیند انتقالی که مسیر ذرات را توصیف می‌کند، به اندازه کافی به واسطه معادله انتقال بولتزمن خطی توصیف می‌شود (Duderstadt and Martin, 1979):

$$\left[\frac{\partial}{\partial s} + \frac{p}{|p|} \cdot \frac{\partial}{\partial x} + \mu(x, p) \right] \psi(x, p, s) = \int dx' \int dp' \mu(x, p, p') \psi(x', p', s) \quad (\text{A.1})$$

که در آن x موقعیت است، p تکانه ذره است، $\partial/\partial x \cdot (p/|p|)$ مشتق جهت‌ی (به عنوان مثال، در سه بعد $\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla}$) و s اندازه طول مسیر ذرات است. ما از نمادی استفاده می‌کنیم که x و p متغیرهای چندبعدی ابعاد N_x و N_p هستند. کاربردهای معمولی در محدوده $1 \leq N_{p,x} \leq 3$ هستند. سطح مقطع پراکندگی دیفرانسیل ماکروسکوپی (احتمال در طول واحد) $\mu(x, p, p')$ پراکندگی از تکانه p' به p را در محل x توصیف می‌کند، و سطح مقطع ماکروسکوپی به صورت ذیل تعریف می‌شود:

$$\mu(x, p) = \int dp' \mu(x, p, p') \quad (\text{A.2})$$

$\psi(x, p, s) dx dp$ احتمال وجود داشتن یک ذره در dx در مورد x ، dp در مورد p و در طول مسیر s است. شرایط مرزی که باید اعمال شود این گونه است:

$$\psi(x, p, 0) = \delta(x) \delta(p_0 - p) \delta(s) \quad (\text{A.3})$$

که در آن p_0 نشان‌دهنده تکانه شروع یک ذره در $s=0$ است. ویژگی اساسی معادله A.1، تا آنجا که به این اثبات مربوط می‌شود، راه‌حلی است که شامل محاسبات انتگرال $(N_x + N_p)$ بعدی است. راه‌حل کلی ممکن است به طور رسمی این گونه بیان شود:

$$\psi(x, p, s) = \int dx' \int dp' G(x, p, x', p', s) Q(x', p') \quad (\text{A.4})$$

که در آن $G(x, p, x', p', s)$ تابع Green است و $Q(x', p')$ یک منبع است. تابع Green شامل عملیات انتقال (رانش بین نقاط پراکندگی، $x' \rightarrow x$)، پراکندگی (یعنی، تغییر در تکانه) و از دست دادن انرژی، $p' \rightarrow p$ است. تفسیر $G(x, p, x', p', s)$ این است که اپراتوری ذرات را از یک نقطه در فضای فاز $(N_x + N_p)$ بعدی، به دیگری، (x, p) منتقل می‌کند و می‌تواند از قوانین جنبشی و پراکندگی فیزیکی محاسبه شود.

دو شکل از معادله A.4 به طور گسترده برای اهداف محاسبات عمومی مورد استفاده قرار گرفته است. روش‌های پیچیدگی معادله A.4 را نسبت به طول مسیر s یکپارچه می‌کنند و بیش‌تر فرض می‌کنند (حداقل برای محاسبه تابع Green) که رسانه یا محیط نامحدود است. بدین ترتیب،

$$\psi(x, p) = \int dx' \int dp' G \left(|x - x'|, \left[\frac{p}{|p|} \cdot \frac{p'}{|p'|} \right], |p'| \right) Q(x', p') \quad (\text{A.5})$$

که در آن تابع Green، تابعی از فاصله بین نقطه منبع x' و x ، زاویه بین بردار تعریف شده توسط منبع p' و p و اندازه تکانه این مسافت، $|p'|$ ، یا به طور معادل، انرژی است.

به منظور برآورد برچسب با استفاده از معادله A.5، $\psi(x, p)$ در φ را با یک تابع پاسخ، $R(x, p)$ یکپارچه می‌کنیم (Shultis and Faw, 1996):

$$T(x) = \int dx' \int dp' F(|x - x'|, p') Q(x', p') \quad (\text{A.6})$$

که در آن "هسته"، $F(|x - x'|, p')$ ، این گونه تعریف می‌شود:

$$F(|x - x'|, p') = \int dp' R(x, p) G \left(|x - x'|, \left[\frac{p}{|p|} \cdot \frac{p'}{|p'|} \right], |p'| \right) \quad (\text{A.7})$$

$F(|x - x'|, p')$ دارای تفسیر رابطه تابعی است که نفوذ ذرات در مکان فضای فاز x', p' را به برچسب محاسبه شده در x متصل می‌کند. این روش دارای یک مشکل شناخته شده است - عملیات ناهمگنی و رابط‌های آن. ناهمگنی و رابط می‌تواند با مقیاس گذاری $|x - x'|$ به وسیله تراکم

برخورد به صورت تقریبی تحت عمل قرار گیرد. این برای بخشی از هسته دقیق است که اولین سهم پراکندگی را توصیف می کند اما سهم پراکندگی برای مرتبه بالاتر تقریب می زند. همچنین می تواند برای درجات مختلف تقریبی باشد، در صورتی که پراکندگی ذرات دیگر را با قوانین مختلف مقیاس گذاری تولید می کند، مانند مجموعه الکترون در حرکت توسط اولین برخورد کامپتون فوتون.

برای روش های محاسبه ای که در رابطه با ذرات باردار شده اولیه هستند، مشکل ناهمگنی شدیدتر است. راه حل درست در این مورد زمانی حاصل می شود که گام های طول مسیر، s در معادله A.4 کوچک تعیین شوند (Larsen, 1992) و بنابراین، یک طرح تکرار کننده ایجاد می شود:

$$\begin{aligned}\psi_1(x, p) &= \int dx' \int dp' G(x, p, x', p', \Delta s) Q(x', p') \\ \psi_2(x, p) &= \int dx' \int dp' G(x, p, x', p', \Delta s) \psi_1(x', p') \\ \psi_3(x, p) &= \int dx' \int dp' G(x, p, x', p', \Delta s) \psi_2(x', p') \\ \psi_N(x, p) &= \int dx' \int dp' G(x, p, x', p', \Delta s) \psi_{N-1}(x', p')\end{aligned}\tag{A.8}$$

که زمانی به پایان می رسد که بزرگ ترین انرژی در $\psi_N(x, p)$ به زیر یک آستانه انرژی کاهش یابد و یا هیچ x باقیمانده ای در هدف وجود نداشته باشد. تصویر از فضای فاز ارائه شده توسط "تکامل" $\psi(x, p)$ است، همان گونه که s تجمع می یابد. این روش به عنوان مدل "تکامل فضای فاز" شناخته شده است. ناهمگنی این گونه در نظر گرفته می شود که s "کوچک" شود و از یک تابع $G()$ استفاده می شود که مربوط به ترکیب اتمی محیط محلی است. به این معنا که:

$$T(x) = \sum_{i=1}^N \int dx' \int dp' F(x, x', p, p', \Delta s) \psi_i(x', p')\tag{A.9}$$

که در آن "هسته"، $F(x, x', p, p', s)$ ، این گونه تعریف می شود:

$$F(x, x', p, p', \Delta s) = \int dp' R(x, p) G(x, p, x', p', \Delta s)\tag{A.10}$$

در تجزیه و تحلیل زیر، ما هرگونه خطای سیستماتیک مربوط به عملیات ناهمگنی در مورد روش پیچیدگی، و مربوط به "خطاهای گام" در ارتباط با افزایش s با استفاده از s در مدل تکامل فضای فاز، در نظر نخواهیم گرفت. علاوه بر این، فرض می‌کنیم که توابع Green و یا هسته‌های پاسخ می‌توانند "دقیقاً" محاسبه شوند - یعنی هیچ خطای سیستماتیک مربوط به آن‌ها وجود ندارد. نتیجه مهم این بحث، نشان دادن این موضوع است که بعد رویکرد تحلیلی $N_x + N_p$ است.

A-2- همگرایی راه‌حل‌های قطعی

بحث بخش قبلی نشان می‌دهد که راه‌حل‌های قطعی معادل حل یک انتگرال D بعدی از آن فرم هستند:

$$I = \int_D du H(u) \quad (\text{A.11})$$

در D بعد، محاسبه سخت‌تر از دو بعد نیست، تنها نشان‌گذاری مشکل است. یکی اشاره می‌کند که انتگرال این شکل را می‌گیرد:

$$\begin{aligned} I &= \int_{u_{1,\min}}^{u_{1,\max}} du_1 \int_{u_{2,\min}}^{u_{2,\max}} du_2 \cdots \int_{u_{D,\min}}^{u_{D,\max}} du_D H(u_1, u_2 \cdots u_D) \\ &= \sum_{i_1=1}^{N_{\text{cell}}^{1/D}} \int_{u_{i_1} - \Delta u_1 / 2}^{u_{i_1} + \Delta u_1 / 2} du_1 \sum_{i_2=1}^{N_{\text{cell}}^{1/D}} \int_{u_{i_2} - \Delta u_2 / 2}^{u_{i_2} + \Delta u_2 / 2} du_2 \cdots \int_{u_{i_D} - \Delta u_D / 2}^{u_{i_D} + \Delta u_D / 2} du_D \\ &\times \sum_{i_D=1}^{N_{\text{cell}}^{1/D}} H(u_1, u_2 \cdots u_D) \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

بسط Taylor این شکل را می گیرد:

$$\begin{aligned}
 H(u_1, u_2 \dots u_D) &= H(u_{i_1}, u_{i_2} \dots u_{i_D}) + \sum_{j=1}^D (u_i - u_{i_j}) \\
 &\times \partial H(u_{i_1}, u_{i_2} \dots u_{i_D}) / \partial u_j + \sum_{j=1}^D \frac{(u_i - u_{i_j})^2}{2} \\
 &\times \partial^2 H(u_{i_1}, u_{i_2} \dots u_{i_D}) / \partial u_j^2 + \sum_{j=1}^D \sum_{k \neq j=1}^D (u_i - u_{i_j})(u_i - u_{i_k}) \\
 &\times \partial^2 H(u_{i_1}, u_{i_2} \dots u_{i_D}) / \partial u_i \partial u_j \dots
 \end{aligned}
 \tag{A.13}$$

شرایط خطی فرم $(u_i - u_{ij})(u_i - u_{ik})$ و شرایط دوسویه (دارای دو خط مستقیم) فرم $(u_i - u_{ij})(u_i - u_{ik})$ برای $k \neq j$ همگی توسط تقارن ناپدید می شوند و یک $N^{-2/D}$ وابسته از شرایط درجه دوم پس از یکپارچگی استخراج می شود. نتیجه این است که:

$$\begin{aligned}
 &\left[\sum_{i_1=1}^{N_{cell}^{1/D}} \sum_{i_2=1}^{N_{cell}^{1/D}} \dots \sum_{i_D=1}^{N_{cell}^{1/D}} \sum_{d=1}^D (u_{d,max} - u_{d,min})^2 \right] \\
 \frac{\Delta I}{I} &= \frac{1}{24 N_{cell}^{2/D}} \frac{\times \partial^2 H(u_{i_1}, u_{i_2} \dots u_{i_D}) / \partial u_d^2}{\sum_{i_1=1}^{N_{cell}^{1/D}} \sum_{i_2=1}^{N_{cell}^{1/D}} \dots \sum_{i_D=1}^{N_{cell}^{1/D}} H(u_{i_1}, u_{i_2} \dots u_{i_D})}
 \end{aligned}$$

(A.14)

توجه داشته باشید که نتایج یک و دوبعدی می تواند از معادله بالا به دست آید. ویژگی های مهمی که باید توجه داشته باشید، نرخ همگرایی $N_{cell}^{-2/D}$ کلی است. هر چه ابعاد در مسئله بیش تر باشد، همگرایی برای تربیع عددی کندتر خواهد بود.

A-3- همگرایی راه‌حل‌های مونت کارلو

روش جایگزین برای حل معادله A.1 روش مونت کارلو است که به موجب آن تاریخ ذرات N_{hist} شبیه‌سازی می‌شود. در این مورد، با توجه به قضیه حد مرکزی، روش مونت کارلو به پاسخ درست همگرا می‌شود (Feller, 1967) که این گونه بیان می‌شود:

$$\frac{\Delta T_{MC}(x)}{T_{MC}(x)} = \frac{1}{\sqrt{N_{hist}}} \frac{\sigma_{MC}(x)}{T_{MC}(x)}$$

(A.15)

که در آن $T_{MC}(x)$ برچسب محاسبه شده در یک وکسل^۱ واقع در x است که توسط روش مونت کارلو محاسبه شده است و $\sigma_{MC}^2(x)$ واریانس مربوط به توزیع $T_{MC}(x)$ است. توجه داشته باشید که این واریانس $\sigma_{MC}^2(x)$ یک ویژگی ذاتی است که چگونه مسیر ذرات انرژی را در وکسل فضایی کنار می‌گذارد. این برای مجموعه‌ای معین از شرایط اولیه یک "ثابت" است و به طور قراردادی از واریانس نمونه ارزیابی می‌شود. همچنین به منظور این بحث فرض می‌شود که واریانس نمونه وجود دارد و محدود است.

A-4- مقایسه بین مونت کارلو و تربیع عددی

مدل‌های قطعی در نظر گرفته شده در این بحث، قبلاً $F(|x-x'|, p')$ را از معادله A.7 یا $F(x, x', p, s)$ را از معادله A.10 محاسبه کرده و آن‌ها را در آرایه‌هایی برای استفاده تکرار شونده ذخیره می‌کنند. سپس، طی فاز محاسبه تکرار شونده، عملیات ماتریس ریز انجام می‌شود. حاصل ضرب ماتریس مربوطه از لحاظ ریاضی شبیه به یکپارچگی $N_x + N_p$ چندبعدی "نقطه میانه" است که قبلاً توضیح داده شده است:

$$T(x) = \int_D du H(u, x)$$

(A.16)

^۱ voxel

که در آن $D=N_x+N_p$ و $u = (x_1, x_2, x_{N_x}, p_1, p_2, p_{N_p})$ یعنی u یک متغیر چندبعدی است که شامل فضا و تکانه می‌باشد. در مورد پیچیدگی فوتون، $H(u, x)$ می‌تواند از معادله A.6 استنباط شده و شکل صریح و روشن بگیرد:

$$H(u, x) = \int dp F(|x - x'|, p') Q(x', p') \quad (\text{A.17})$$

عبارت مشابهی برای مدل تکامل فضای فاز وجود دارد.

یکپارچگی "نقطه میانه" نشان‌دهنده یک روش قطعی "مرتب اول" است و به طور کلی بیش از کاربردهای پیچیدگی یا تکامل فضای فاز مورد استفاده قرار می‌گیرد. همان‌گونه که قبلاً نشان داده شد، همگرایی این روش از رابطه زیر پیروی می‌کند:

$$\frac{\Delta T_{NMC}(x)}{T_{NMC}(x)} = \frac{1}{N_{cell}^{2/D}} \frac{\sigma_{NMC}(x)}{T_{NMC}(x)} \quad (\text{A.18})$$

که در آن $T_{NMC}(x)$ برجسب در یک وکسل فضایی در هندسه دلخواه N_x بعدی محاسبه شده توسط روش غیر مونت کارلو است که در آن اجزای تکانه N_p در نظر گرفته می‌شود. فضای فاز D بعدی به N_{cell} "سلول" که به طور مساوی بین همه ابعاد تقسیم شده‌اند، تقسیم شده است، به طوری که "اندازه مش" هر یک از ابعاد فضای فاز $N_{cell}^{1/D}$ است. ثابت تناسب همان‌طور که قبلاً به دست آمده است، به صورت ذیل می‌باشد:

$$\sigma_{NMC}(x) = \frac{1}{24} \sum_{i_1=1}^{N_{cell}^{1/D}} \sum_{i_2=1}^{N_{cell}^{1/D}} \cdots \sum_{i_D=1}^{N_{cell}^{1/D}} \times \sum_{d=1}^D (u_{d,\max} - u_{d,\min})^2 \partial^2 H(u_{i_1}, u_{i_2}, \dots, u_{i_D}) / \partial u_d^2 \quad (\text{A.19})$$

که در آن فضای u مربوط به $H(u)$ به همان شیوه‌ای جزءبندی شده است که فضای فاز در بالا توصیف شد. $u_{d,\min}$ ، حداقل مقدار u_d است، در حالی که $u_{d,\max}$ حداکثر مقدار آن است. u_{ij} نقطه میانی سلول در بعد j ام مشخص است.

معادله برای عامل تناسب کاملاً پیچیده است. با این حال، نکته مهمی که باید توجه داشته باشید، این است که آن تنها به مشتق دوم $H(u)$ نسبت به متغیرهای فضای فاز، u بستگی دارد. علاوه بر این، عامل تناسب غیر مونت کارلو کاملاً متفاوت از عامل تناسب مونت کارلو است. پیش‌بینی اینکه کوچک‌تر خواهد بود، دشوار خواهد بود و تقریباً به طور قطع، وابسته به کاربرد خواهد بود.

اکنون فرض می‌کنیم که زمان محاسبه در هر دو مورد متناسب با N_{hist} یا سلول است. به عبارت دیگر، $T_{\text{MC}} = \alpha_{\text{MC}} N_{\text{hist}}$ و $T_{\text{NMC}} = \alpha_{\text{NMC}} N_{\text{cell}}$. در مورد مونت کارلو، زمان محاسبه به سادگی N_{hist} برابر متوسط زمان محاسبه/تاریخ است. در مورد غیر مونت کارلو، عملیات ماتریس به طور بالقوه می‌تواند به اتصال هر سلول در فضای فاز D بعدی به برجسب در نقطه x کمک کند. بنابراین، تعداد معینی از عملیات متمیز شناور و عدد صحیح برای هر سلول در مسئله مورد نیاز است. همگرایی روش مونت کارلو و غیر مونت کارلو را در نظر بگیرید. با استفاده از روابط فوق، می‌توان نشان داد که:

$$\frac{\Delta T_{\text{MC}}(x)/T_{\text{MC}}(x)}{\Delta T_{\text{NMC}}(x)/T_{\text{NMC}}(x)} = \left(\frac{\sigma_{\text{NMC}}(x)}{\sigma_{\text{MC}}(x)} \right) \left(\frac{\alpha_{\text{NMC}}^D}{\alpha_{\text{MC}}} \right)^{1/2} t^{(4-D)/2D} \quad (\text{A.20})$$

که در آن t زمان اندازه‌گیری تلاش محاسباتی برای هر دو روش است. فرض کرده‌ایم که هر دو روش محاسباتی یکسان هستند. بنابراین، زمان کافی، $D_{\text{MC}}(x) \approx D_{\text{NMC}}(x)$ اختصاص داده شد. مشاهده می‌شود که، با توجه به اندازه کافی طولانی، روش مونت کارلو همیشه برای $D > 4$ دارای مزیت بیشتری است. همچنین توجه داریم که برنامه‌نویسی ناکارا در روش غیر مونت کارلو در این مقایسه دو روش، به شدت جریمه می‌شود.

فرض کنید که فردی بخواهد محاسبه‌ای برای $\varepsilon = \Delta T(x)/T(x)$ تعیین شده انجام دهد. با استفاده از روابطی که تاکنون به دست آمده است، مقدار زمان نسبی را برای اجرای وظیفه محاسبه می‌کنیم که این گونه می‌باشد:

$$\frac{t_{NMC}}{t_{MC}} = \left(\frac{\alpha_{MC}}{\alpha_{NMC}} \right) \left(\frac{[\sigma_{NMC}(x)/T_{NMC}(x)]^{D/2}}{\sigma_{MC}(x)/T_{MC}(x)} \right) \varepsilon^{(4-D)/2} \quad (\text{A.21})$$

که دوباره مزیتی برای روش مونت کارلو برای $D > 4$ نشان می‌دهد. البته، این نتیجه تا حدودی به مفروضات نسبت بازده α_{MC}/α_{NMC} بستگی دارد که به جزئیات روش محاسبات وابسته خواهد بود. نتیجه‌گیری ما نیز به نسبت $[\sigma_{MC}(x)/T_{MC}(x)] / \{[\sigma_{NMC}(x)/T_{NMC}(x)]^{D/2}\}$ وابسته است که مربوط به شکل دقیق توابع پاسخ است. برای توزیع‌هایی که می‌تواند به سرعت تغییر کند، روش مونت کارلو باید مورد توجه قرار گیرد. هنگامی که توزیع‌ها یکنواخت هستند، تکنیک‌های غیرمونت کارلو ممکن است مورد توجه قرار گیرند.

با این حال، در برخی سطوح پیچیدگی (تعداد زیادی از N_{cell} مورد نیاز)، مونت کارلو دارای مزیت بیش‌تری است. به هر حال، کاربرد از این "آستانه" پیچیدگی عبور می‌کند، و باید بر اساس مورد به مورد تعیین شود.

مسائل بعدی کوچک‌تر، استفاده از تکنیک‌های غیر مونت کارلو را ترجیح خواهند داد. درجه مزیت به جزئیات کاربرد بستگی خواهد داشت.

فصل ۲

مبانی شبیه‌سازی مونت کارلو

۲-۱- روش مونت کارلو

روش‌های مونت کارلو (MC) به طور گسترده‌ای در علوم طبیعی و اجتماعی مورد استفاده قرار می‌گیرند. "طعم و بوی" مختلف بسیاری برای نحوه کار با این تکنیک‌ها وجود دارد. همان‌طور که در فصل قبل دیده‌ایم، سنت طولانی استفاده از روش MC در حوزه‌های متفاوت، از جمله فیزیک پزشکی، وجود دارد. بنابراین، ارائه تعریف کلی از روش MC دشوار است. در نتیجه، جستجوی ادبیات منجر به تعاریف بسیاری می‌گردد. برخی نمونه‌های معرفی ادبیات، مفید برای کار قبلی با روش‌های MC، فصول کتاب درسی مربوطه در "دستورالعمل عددی در C" (Press et al., 1992) و یا در "مروری بر فیزیک ذرات" (Nakamura et al., 2010) گروه داده‌های ذرات هستند. مقدمه خوبی نیز توسط James در "ثوری و عمل مونت کارلو" ارائه شده است (James, 1980). منابع بیش‌تر در مورد تکنیک‌های MC و نمونه‌گیری عدد تصادفی می‌تواند در این بررسی‌ها یافت شود.

برای اهداف خود، روش MC را به صورت کوتاه به شرح ذیل تعریف می‌کنیم:

مونت کارلو یک روش عددی برای حل معادلات و یا برای محاسبه انتگرال‌ها بر اساس نمونه‌گیری عدد تصادفی است.

دو جنبه این تعریف، نمونه‌گیری عدد تصادفی و یکپارچه‌سازی عددی، به طور مفصل در دو بخش بعدی مطرح می‌شوند.

۲-۱-۱- نمونه‌گیری عدد تصادفی

الگوریتم‌های MC از یک برنامه کامپیوتری، یک پروسه یا یک زیر روال، به نام "مولد عدد تصادفی" (RNG^۱) استفاده می‌کنند. با این حال، کامپیوترها واقعاً نمی‌توانند اعداد "تصادفی" تولید کنند، چون خروجی هر برنامه - بنا به تعریف - قابل پیش‌بینی است؛ از این رو، واقعاً "به صورت تصادفی" نیست. بنابراین، نتیجه این مولدها باید به درستی "اعداد شبه تصادفی" عنوان شوند.

دنباله عظیمی از این اعداد شبه تصادفی برای حل یک مسئله پیچیده مورد نیاز است. اعداد در دنباله‌ای از اعداد تصادفی باید ناهمبسته باشند، به عبارت دیگر، آن‌ها نباید به یکدیگر وابسته باشند. از آنجا که این با یک برنامه کامپیوتری غیرممکن است، آن‌ها باید حداقل مستقل به نظر برسند. به عبارت دیگر، هر برنامه آزمون آماری باید نشان دهد که اعداد در دنباله ناهمبسته هستند و هر کد کامپیوتری که به اعداد تصادفی مستقل نیاز دارد، باید همان نتیجه را با دنباله‌های مختلف تولید کند. در صورتی که این موردی در عدم اطمینان شبیه‌سازی باشد، این دنباله‌ها می‌توانند شبه تصادفی نمی‌ده شوند. با این وجود، برای کوتاه نگه داشتن نماد در سراسر این کتاب، آن‌ها را تنها "اعداد تصادفی" خواهیم خواند. با این حال، باید ویژگی واقعی این اعداد را به خاطر داشته باشیم. یک شبه RNG قبل از اینکه بتواند برای هدف خاصی مورد استفاده قرار گیرد، باید به دقت مورد بررسی قرار گیرد. مولد سودمند برای شبیه‌سازی‌ها در پرتودرمانی باید دو ویژگی مهم را فراهم کند:

- دوره دنباله باید به اندازه کافی بزرگ باشد. در غیر این صورت، اگر دنباله چندین بار مورد استفاده مجدد قرار گیرد، نتایج حاصل از شبیه‌سازی MC همبسته خواهند بود.
- آن‌ها باید به طور یکنواخت در چند بعد توزیع شوند. این بدان معناست که بردارهای تصادفی ایجاد شده از یک n تایی اعداد تصادفی باید به طور یکنواخت در فضای n بعدی توزیع شوند. به طور معمول، نحوه تشخیص همبستگی در ابعاد بالاتر، مشهود نیست.

^۱ random number generator (RNG)

اکثر مولدها اعداد تصادفی توزیع شده به صورت یکنواخت را در یک بازه، به طور معمول در [۰,۱] تولید می‌کنند. نگاه به RNGهای ساده برای درک اصل عامل سودمند است. کلاسی از RNGهای ساده، مولدهای خطی متجانس نامیده می‌شود. آنها دنباله‌ای از اعداد صحیح I_1, I_2, I_3, \dots را با استفاده از رابطه بازگشتی زیر تولید می‌کنند که هر کدام بین ۰ و $m-1$ هستند:

$$I_{j+1} = aI_j + c \pmod{m} \quad (2.1)$$

پارامترهای رابطه عبارت‌اند از:

a : ضریب

c : افزایش

m : مدول یا پیمانانه

یک نمونه، مولد سریع و چرکین استفاده شده توسط پیاده‌سازی‌های قدیمی EGS4 است (Nelson et al., 1985):

$$I_{j+1} = aI_j \quad (2.2)$$

با

$$a = 663608941$$

$$c = 0$$

$$m = 2^{32}$$

در مورد ماشینی با نمایش عدد صحیح ۳۲ بیتی، ضرب دو عدد صحیح بدون علامت، مرتبه پایین ۳۲ بیت نتیجه ۶۴ بیتی واقعی است. از آنجا که $m = 2^{32}$ می‌باشد، مدول به طور خودکار در نظر گرفته می‌شود. بنابراین، این RNG بسیار سریع است. با این حال، طول دنباله 2^{32} آن برای کاربردهای MC در پرتودرمانی کافی نیست.

RNGهای عرضه شده - سیستم عامل کامپیوتر معمولاً از همان نوع تجانس خطی هستند. از این رو، توصیه نمی‌شود به آنها اعتماد کنید. برای کاربردهای MC در پرتودرمانی، RNGهای با دنباله

طولانی مورد نیاز است. آن‌ها باید قابل انتقال نیز باشند، به عبارت دیگر، دنباله یکسان باید در ماشین‌های مختلف تولید شود. منبع خوبی از RNGهای با کیفیت بالا از جمله برنامه‌های تست برای بررسی دنباله‌های ایجاد شده در چندین بعد، کتابخانه برنامه CERN است (<http://www.cern.ch>).

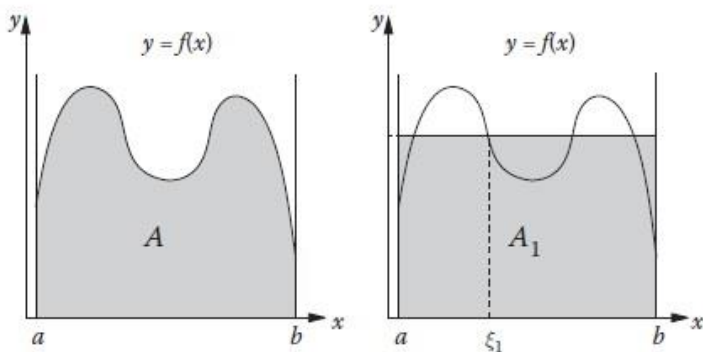
یک کلاس از RNGهای با دنباله طولانی به نام الگوریتم‌های "تفریق با رقم قرضی" توسط Marsaglia and Zaman (1991) توسعه داده شده‌اند. برای مثال، RANMAR تابع کتابخانه CERN دارای طول دنباله 2^{144} است. به عنوان مثال، توسط EGS4 (Nelson et al. 1985) و XVMC (Fippel, 1999) مورد استفاده قرار می‌گیرد.

در EGSnrc (Kawrakow, 2000a)، استفاده از RANLUX (Lüscher, 1994) توصیه می‌شود. اجازه سطوح لوکس مختلف بین ۰ و ۴ را می‌دهد. کیفیت و همچنین زمان شبیه‌سازی با افزایش سطح لوکس افزایش می‌یابد. RANMAR نیز می‌تواند در EGSnrc انتخاب شود. طبق اسناد کتابخانه CERN، کیفیت آن مربوط به RANLUX با سطح لوکس بین ۱ و ۲ است. طبق کتابچه راهنمای EGSnrc (Kawrakow et al., 2011)، با سطح لوکس ۱ و یا بالاتر، هیچ مسئله‌ای در محاسبات عملی EGSnrc کشف نشده است.

۲-۱-۲- یکپارچه‌سازی عددی

تابع $y = f(x)$ باید در بازه $[a, b]$ یکپارچه شود، یعنی، ناحیه A محصور شده توسط تابع $f(x)$ ، محور x و همچنین محدوده بازه a و b باید محاسبه شود (به شکل ۲-۱ نگاه کنید):

$$A = \int_a^b f(x) dx \quad (2.3)$$



شکل ۲-۱- طرح سمت چپ سطح A را نشان می‌دهد که با یکپارچه‌سازی تابع $y = f(x)$ در بازه $[a, b]$ محاسبه شده است. طرح سمت راست تخمین خیلی ناصاف سطح A را نشان می‌دهد که توسط سطح مستطیل $A_1 = (b-a)f(\xi_1)$ مشخص شده است.

اگر از نظر تحلیلی غیرممکن باشد، برخی روش‌های عددی باید به کار برده شوند. یکی از گزینه‌های عددی یکپارچه‌سازی MC نامیده می‌شود، زیرا بر اساس دنباله‌ای از اعداد تصادفی با توزیع یکنواخت است. به طور کلی، یک عدد تصادفی η_i تولید شده با کامپیوتر، به طور یکنواخت در بازه $[0, 1]$ توزیع شده است. این می‌تواند در بازه $[a, b]$ توسط رابطه زیر مقیاس گذاری شود:

$$\xi_i = (b-a)\eta_i + a \quad (2.4)$$

که، ξ_i به صورت یکنواخت در $[a, b]$ توزیع می‌شود. برخی از اولین تقریب‌های ناصاف ناحیه واقعی A در حال حاضر توسط رابطه زیر مشخص می‌شود (شکل ۲-۱):

$$A_1 = (b-a)f(\xi_1) \quad (2.5)$$

که، مستطیل با مقدار تابع در نقطه تصادفی ξ_1 و طول بازه مشخص شده است. این برآورد واقعاً ناصاف است. بنابراین، باید این کار را برای بار دوم انجام شود:

$$A_2 = \frac{1}{2} \{ (b-a)f(\xi_2) + A_1 \} = \frac{b-a}{2} \{ f(\xi_1) + f(\xi_2) \} \quad (2.6)$$

توجه داشته باشید که ما در نواحی از هر دو اجرا میانگین محاسبه کرده‌ایم که به روشی برآورد بهتری از انتگرال واقعی ارائه کرده‌اند. اکنون تعمیم واضح است؛ بعد از N اجرا (با N عدد تصادفی)، به دست می‌آوریم:

$$A_N = \frac{b-a}{N} \sum_{i=1}^N f(\xi_i) = (b-a) \langle f(x) \rangle \quad (2.7)$$

با متوسط مقدار تابع برای N نمونه داریم:

$$\langle f(x) \rangle \equiv \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(\xi_i) \quad (2.8)$$

قضیه اساسی یکپارچه‌سازی MC (Press et al., 1992) نیز اطلاعاتی در مورد عدم اطمینان از برآورد ارائه می‌کند:

$$A = A_N \pm (b-a) \sqrt{\frac{\langle f^2(x) \rangle - \langle f(x) \rangle^2}{N}} \quad (2.9)$$

متوسط مربع مقدار تابع توسط رابطه زیر تعریف می‌شود:

$$\langle f^2(x) \rangle \equiv \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f^2(\xi_i) \quad (2.10)$$

ناحیه برآورد شده A_N به انتگرال حقیقی A در حد $N \rightarrow \infty$ همگرا می‌شود. به دلیل رفتار $1/N$ ، همگرایی آهسته است، به عبارت دیگر، در صورتی که تعداد نقاط تصادفی N (و زمان محاسبه) توسط عاملی از ۴ افزایش یابد، عدم قطعیت آماری توسط عاملی از ۲ کاهش می‌یابد. بنابراین، روش MC نباید برای این نوع ساده از یکپارچه‌سازی عددی استفاده شود. گزینه‌های بهتری وجود دارد؛ به عنوان مثال، (Press et al., 1992). با این حال، روش MC در صورتی وارد بازی می‌شود که تمام روش‌های دیگر موفق نشوند، برای مثال، اگر ابعاد مسئله بسیار بزرگ شوند، یعنی، انتگرال باید در فضایی با ۱۰، ۱۰۰ و یا حتی تعداد نامحدودی بعد محاسبه شود.

فرض کنیم که تابع $f(x)$ باید در حجم V از فضای D بعد یکپارچه شود. به جای اعداد تصادفی برای یکپارچه‌سازی MC، نقاط (یا بردارهای) تصادفی که به صورت یکنواخت در حجم چندبعدي V توزیع شده است، مورد نیاز است. چون حجم V دارای D بعد است، ما به D عدد تصادفی برای تشکیل یک نقطه تصادفی نیاز داریم. برای نمونه‌گیری N نقطه تصادفی در این حجم، ما به $D \times N$ عدد تصادفی نیاز داریم. بنابراین، کیفیت RNG باید برای ابعاد بالاتر بررسی شود، نه تنها برای مورد یک‌بعدي، دوبعدي و یا سه‌بعدي. اغلب، همبستگی‌ها می‌توانند در ابعاد بالاتر مشاهده شوند حتی اگر RNG در ابعاد پایین‌تر یکنواخت ظاهر شود.

اکنون، اجازه دهید فرض کنیم که ما N نقطه تصادفی را نمونه‌گیری کرده‌ایم، $\vec{\xi}_1, \dots, \vec{\xi}_N$ ، که به صورت یکنواخت در حجم چندبعدي V توزیع شده‌اند. سپس قضیه اساسی یکپارچه‌سازی MC توسط رابطه زیر مشخص می‌شود (Press et al., 1992):

$$\int dV f(\vec{x}) \approx V \langle f(\vec{x}) \rangle \pm \sqrt{\frac{\langle f^2(\vec{x}) \rangle - \langle f(\vec{x}) \rangle^2}{N}} \quad (2.11)$$

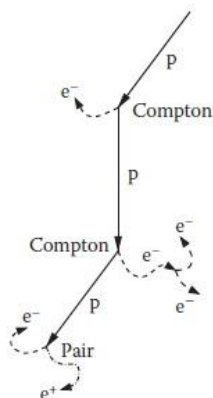
با

$$\langle f(\vec{x}) \rangle \equiv \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(\vec{\xi}_i) \quad \text{and} \quad \langle f^2(\vec{x}) \rangle \equiv \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f^2(\vec{\xi}_i) \quad (2.12)$$

یکپارچه‌سازی عددی چندبعدي برای حل سیستم معادلات انتقال جفت شده برای مسائل پرتودرمانی لازم است، برای مثال، برای محاسبه دوز. این یک سیستم معادلات است، زیرا مسئله انتقال برای فوتون‌ها و الکترون‌ها (پوزیترون) باید حل شود. سیستم جفت شده است، چرا که الکترون‌ها، انتقال فوتون (تابش ترمزی) و بالعکس (پراکندگی کامپتون، جذب فتوالکتریک، تولید جفت). از لحاظ تئوری، مسئله دارای یک فضای پارامتر نامحدود می‌باشد، چون تعداد الکترون‌ها و فوتون‌های ثانویه از نظر فیزیکی نامحدود است، زمانی که ما با ذره اولیه انرژی قطعی شروع کنیم. بنابراین، یکپارچه‌سازی عددی باید در فضایی با ابعاد نامحدود انجام شود. در عمل، ابعاد

محدود است، چرا که منطقه مورد نظر محدود می‌شود و ما معمولاً شبیه‌سازی را در صورتی متوقف می‌کنیم که انرژی فوتون یا الکترون در زیر برخی از حداقل انرژی بیفتد.

با این وجود، برای یکپارچه‌سازی عددی با استفاده از MC، یک نقطه تصادفی در یک فضای پارامتر با تعداد ابعاد بالا باید نمونه‌گیری شود. این نقطه می‌تواند توسط اصطلاح "تاریخ ذرات"، بارانی از ذرات ثانویه تولید شده توسط یک ذره اولیه شامل تمام ذرات دختر، نشان داده شود. نمونه‌ای از تاریخ ذرات در شکل ۲-۲ نشان داده می‌شود. این شکل به شماتیک نشان می‌دهد که طی یک شبیه‌سازی انتقال تابش MC چه اتفاقی می‌افتد. آن با یک ذره اولیه منتشر شده از منبع ذرات آغاز می‌کند. شبیه‌سازی هندسه مسئله را در نظر می‌گیرد؛ به عنوان مثال، هندسه سر شتاب‌دهنده خطی مشخص شده توسط مشخصات فنی و / یا آناتومی بیمار ارائه شده توسط تصاویر CT. همچنین خواص انتقال مواد ارائه شده توسط سطح مقطع داده‌ها را در نظر می‌گیرد. برای فوتون اولیه در نمونه‌ای از شکل ۲-۲، فاصله نسبت به اولین مکان برخورد باید بر اساس سطح مقطع کل محیط مربوطه نمونه‌گیری شود. در محل برخورد، نوع برخورد (پراکندگی کامپتون در این مورد) باید نمونه‌گیری شود. تمام پارامترهای ذرات ثانویه (انرژی ذرات ثانویه و زوایای پراکندگی) با استفاده از سطح مقطع و توابع توزیع احتمال مربوطه تعیین می‌شود. این مراحل تا زمانی تکرار می‌شود که ذرات اولیه و ثانویه، هندسه شبیه‌سازی را رها نکرده‌اند و یا انرژی ذرات در زیر حداقل انرژی قرار گیرد. به عنوان مثال، دوز، با جمع‌آوری انرژی جذب شده در هر منطقه محاسبه می‌شود. واضح است که تعداد زیادی از مکان ذرات باید برای دستیابی به نتیجه نویز کم، شبیه‌سازی شود. به دلیل معادله ۲-۱۱، سطح نویز و عدم قطعیت آماری می‌توانند به واسطه عاملی از ۲ کاهش یابند، در صورتی که تعداد تاریخچه‌ها به واسطه عاملی از ۴ افزایش یابد. این باعث ایجاد زمان محاسباتی بسیار طولانی برای مسائل شبیه‌سازی انتقال در پرتودرمانی می‌شود.



شکل ۲-۲- نمونه‌ای از یک تاریخ ذرات شروع با یک فوتون اولیه p (خط مستقیم) از طریق فعل‌وانفعالات کامپتون و رویدادهای تولید زوج منجر به فوتون‌های ثانویه p (خطوط مستقیم) و الکترون‌های ثانویه e^- (خطوط منقطع) و پوزیترون e^+ (خط چین نقطه‌چین).

۲-۱-۳- روش‌های نمونه‌گیری غیریکنواخت

همان‌طور که در بخش ۲-۱-۱ آموخته‌اید، RNGها معمولاً اعداد تصادفی تولید می‌کنند که به صورت یکنواخت توزیع شده‌اند. با این حال، برای شبیه‌سازی‌های انتقال MC در پرتودرمانی، اعداد تصادفی توزیع شده طبق توابع توزیع مخصوص وزن احتمال $p(x)$ چندین بار درون الگوریتم مورد نیاز است.

اجازه دهید فرض کنیم که می‌خواهیم عدد تصادفی ξ را در بازه $[a, b]$ و توزیع شده طبق تابع وزن احتمال غیریکنواخت $p(x)$ تولید کنیم. یک RNG تولیدکننده تنها اعداد تصادفی η توزیع شده به صورت یکنواخت در بازه $[0, 1]$ در دسترس است. ξ چگونه می‌تواند از $p(x)$ نمونه‌گیری شود؟ این با استفاده از تابع توزیع تجمعی $P(x)$ تعریف شده به واسطه انتگرال زیر امکان‌پذیر است:

$$p(x) = \int_a^x dx' p(x')$$

$$a \leq x \leq b$$

$$P(a) = 0$$

$$P(b) = 1$$

(2.13)

تابع $P(x)$ به صورت یکنواخت در بازه $[a, b]$ افزایش می‌یابد. مقادیر تابع $y=P(x)$ محدود به بازه $[0, 1]$ هستند. اگر فرمول $y=P(x)$ بتواند نسبت به x منتقل شود، یعنی، معکوس بتواند به صورت ذیل تعیین شود:

$$x = P^{-1}(y) \quad (2.14)$$

سپس می‌توان نشان داد که:

$$\xi = P^{-1}(\eta) \quad (2.15)$$

طبق تابع وزن احتمال $p(x)$ توزیع می‌شود. به عنوان مثال، برای اثبات، Nelson et al. (1985) را ببینید. این روش نمونه‌گیری عدد تصادفی غیریکنواخت، روش مستقیم و یا تبدیل نامیده می‌شود. آن به این واقعیت بستگی دارد که معکوس $P(x)$ بتواند به راحتی و به صورت کارآمد محاسبه شود.

اگر این غیرممکن باشد، روش غیرمستقیم و یا رد (Nelson et al. 1985) باید به جای آن به کار گرفته شود. آن یک تابع مقایسه به طور مناسب منتخب انتخاب $g(x)$ را با $g(x) > p(x)$ در بازه $[a, b]$ در نظر می‌گیرد. شرط دیگر $g(x)$ این است که یک عدد تصادفی ξ_0 می‌تواند به راحتی از $g(x)$ نمونه‌گیری شود، برای مثال، با استفاده از روش تبدیل. اکنون، ما یک عدد تصادفی جدید یکنواخت η_0 از بازه $[0, g(\xi_0)]$ نمونه‌گیری می‌کنیم. ما ξ_0 را به عنوان عدد تصادفی معتبر می‌پذیریم، در صورتی که $\eta_0 < p(\xi_0)$ باشد. در صورتی که $p(\xi_0) \leq \eta_0 \leq g(\xi_0)$ باشد، ξ_0 را رد می‌کنیم. در صورت رد کردن، ما با نمونه‌گیری یک عدد تصادفی جدید ξ_0 از $g(x)$ شروع می‌کنیم و به همین ترتیب. باز هم، ما در اینجا ثابت نمی‌کنیم که ξ_0 نمونه‌گیری شده به این روش، طبق $p(x)$ توزیع می‌شود. اما روش رد می‌تواند با استفاده از مثال ساده یک تابع رد ثابت $g(x) = p(x_{\max}) = \text{const}$ ، با x_{\max} به عنوان موقعیت حداکثر $p(x)$ در بازه $[a, b]$ نشان داده شود. در این مورد، ξ_0 تنها از یک توزیع یکنواخت در $[a, b]$ نمونه‌گیری می‌شود. با عدد تصادفی رد $\eta_0 < p(\xi_0)$ آشکار است که ξ_0 طبق $p(x)$ توزیع می‌شود.

البته، روش رد باید با دقت استفاده شود. به عبارت دیگر، تابع مقایسه $g(x)$ نباید خیلی بیش از حد متفاوت از $p(x)$ باشد. در صورتی که انحراف بیش از حد بزرگ باشد، تعداد رد می‌تواند بیش از حد بزرگ شده و روش ناکارآمد گردد.

۲-۲- انتقال مونت کارلو در پرتودرمانی

مفاهیم اولیه برای شبیه‌سازی انتقال فوتون‌ها، الکترون‌ها، پوزیترون‌ها، نوترون‌ها، پروتون‌ها و یا یون‌های سنگین در محدوده انرژی پرتودرمانی، پیچیده هستند. بنابراین، این فصل تنها می‌تواند اصول روش را ارائه کند. برای درک تمام تکنیک‌ها با جزئیات کامل، خواننده به ادبیات مربوطه، مانند کتاب درسی انتقال الکترون‌ها و فوتون‌های مونت کارلو ارجاع داده می‌شود (Jenkins et al., 1988). اطلاعات زیادی نیز در کتابچه راهنمای کاربر بسته‌های MC که اغلب استفاده می‌شوند، در دسترس می‌باشد؛ مانند EGS4 (Nelson et al., 1985)، EGSnrc، (Kawrakow, 2000a; Kawrakow et al., 2011) Penelope، (Salvat et al., 2011) MCNP، (Briesmeister, 1997) و GEANT4 (Agostinelli et al., 2003). ادبیات پایه بیشتر در مقالات مروری در مورد برنامه‌ریزی عملیات MC ذکر شده است (Chetty et al., 2007; Reynaert et al., 2007).

در بخش بعدی، نشان می‌دهیم که چگونه برخورد به برخورد انتقال ذرات با جزئیات شبیه‌سازی می‌شود. این به اصطلاح طرح شبیه‌سازی انتقال ذرات آنالوگ با استفاده از فوتون به عنوان مثال نشان داده می‌شود. بخش دیگر روش تاریخچه فشرده (CH) را معرفی می‌کند که امکان شبیه‌سازی های کارآمد انتقال ذره باردار را در پرتودرمانی معرفی می‌کند.

۲-۲-۱- انتقال ذرات آنالوگ

فرض کنیم که یک فوتون انرژی E به سطح محیط همگن برخورد می‌کند. پس از آن، احتمال $p(s)$ که این فوتون بعد از طول مسیر s با محیط در تعامل است، به واسطه توسط قانون میرایی تعیین می‌شود:

$$p(s) ds = \mu(E) e^{-\mu(E)s} ds \quad (2.16)$$

پارامتر $\mu(E)$ ضریب میرایی خطی محیط برای فوتون انرژی E نامیده می‌شود. میانگین طول مسیر آزاد $\langle s \rangle$ تا زمانی که تعامل بتواند از این تابع توزیع محاسبه شود، در صورتی که محیط به صورت بی‌نهایت زیر سطح گسترش یابد:

$$\langle s \rangle = \int_0^{\infty} ds s p(s) = \mu(E) \int_0^{\infty} ds s e^{-\mu(E)s} = \frac{1}{\mu(E)} \quad (2.17)$$

این به ما اجازه می‌دهد تا قانون میرایی (۲-۱۶) را بر حسب تعداد میانگین طول مسیر آزاد بیان کنیم:

$$\lambda = \frac{s}{\langle s \rangle} = \mu(E) s \quad (2.18)$$

یعنی

$$p(\lambda) d\lambda = e^{-\lambda} d\lambda \quad (2.19)$$

مزیت این نماد این است که برای هندسه‌های ناهمگن نیز کار می‌کند، در صورتی که تعداد میانگین طول مسیر آزاد توسط رابطه زیر تعریف شود:

$$\lambda = \sum_{Start}^P \mu_i(E) s_i \quad (2.20)$$

برای محاسبه λ ، فوتون باید در یک خط مستقیم از موقعیت شروع بر روی سطح در میان مناطق مختلف i شامل مواد مختلف تا نقطه تعامل P ترسیم شود. در هر منطقه i با ضریب میرایی خطی $\mu_i(E)$ ، بخش خط مربوطه S_i باید تعیین شود. این الگوریتم ردیابی برای محاسبه λ ، بخشی ضروری از شبیه‌سازی‌های MC در پرتودرمانی است. زمان محاسبه می‌تواند غیر لزوماً طولانی باشد، در صورتی که به صورت ناکارآمد پیاده‌سازی شده باشد.

قانون میرایی (۲-۱۹) تابع توزیع وزن احتمال $p(\lambda)$ را ارائه می‌کند. تابع توزیع تجمعی توسط رابطه زیر تعیین می‌شود:

$$P(\lambda) = \int_0^{\lambda} d\lambda' p(\lambda') = \int_0^{\lambda} d\lambda' e^{-\lambda'} = 1 - e^{-\lambda}, P(0) = 0, P(\infty) = 1 \quad (2.21)$$

این تابع به صورت یکنواخت در $[0, \infty]$ افزایش می‌یابد. اکنون می‌توانیم λ_1 ، فاصله نسبت به سایت تعامل اول را با استفاده از روش تبدیل و یک عدد تصادفی یکنواخت ξ_1 از بازه نیمه‌باز $[0, 1)$ نمونه‌گیری کنیم:

$$\xi_1 = 1 - e^{-\lambda_1}, \Rightarrow \lambda_1 = -\ln(1 - \xi_1) \quad (2.22)$$

به نمادسازی خاص محدودیت‌های بازه در بالا توجه کنید. این بدان معنی است که عدد ۱ نباید در دنباله اعداد تصادفی گنجانده شود. اگر گنجانده شود، لگاریتم در معادله ۲-۲۲ تعریف نشده است.

با در نظر گرفتن راه‌اندازی هندسی شبیه‌سازی، فوتون، متوسط طول مسیر آزاد λ به اولین نقطه تعامل ردیابی می‌شود. سپس، نوع تعامل باید نمونه‌گیری شود. در محدوده انرژی پرتودرمانی، چهار فرآیند رایج‌ترین موارد هستند؛ جذب فوتوالکتریک، پراکندگی Raleigh، پراکندگی کامپتون و تولید زوج. آن‌ها با ضرایب تعامل متناظر به عنوان پارامترهای مواد در محل تعامل نشان داده می‌شوند:

$$\mu(E) \equiv \mu_{tot}(E) = \mu_A(E) + \mu_R(E) + \mu_C(E) + \mu_P(E) \quad (2.23)$$

و آن‌ها برای تقسیم بازه $[0, 1]$ به چهار بخش بکار می‌روند:

جذب فوتوالکتریک: $[P_0, P_1]$

پراکندگی Raleigh: $[P_1, P_2]$

پراکندگی کامپتون: $[P_2, P_3]$

تولید زوج: $[P_3, P_4]$

با

$$P_0 = 0, P_1 = P_0 + \frac{\mu_A}{\mu_{tot}}, P_2 = P_1 + \frac{\mu_R}{\mu_{tot}}, P_3 = P_2 + \frac{\mu_C}{\mu_{tot}}, P_4 = 1 \quad (2.25)$$

نوع تعامل با استفاده از عدد تصادفی یکنواخت دوم ξ_2 از بازه $[0, 1]$ و با چک کردن اینکه ξ_2 کدوم کدام زیر بازه واقع شده است، نمونه‌گیری می‌شود.

با نوع تعامل شناخته شده، پارامترهای همه ذرات ثانویه می‌توانند تعیین شوند. این پارامترها، یعنی، انرژی و زوایای پراکندگی، با استفاده از توزیع‌های احتمال مشخص شده توسط سطح مقطع دیفرانسیل متناظر نمونه‌گیری می‌شوند. علاوه بر این، قوانین حفاظت جنبش‌شناسی باید در نظر گرفته شود. به طور کلی، برای این منظور، روش انتقال کار نمی‌کند، به عبارت دیگر، روش رد روش انتخابی است.

پس از آن، همه‌چیز برای تکرار سه مرحله با ذرات ثانویه شناخته شده است. حتی الکترون‌ها و پوزیترون‌ها می‌توانند به این روش آنالوگ شبیه‌سازی شوند. کل تاریخچه ذرات (مثال شکل ۲-۲ را ببینید) از جمله تمام ذرات ثانویه و ذرات دختر آن شبیه‌سازی می‌شود. شبیه‌سازی انتقال یک ذره در صورتی متوقف می‌شود که هندسه مورد توجه را رها کنند و یا انرژی آن در زیر برخی از حداقل انرژی‌های از پیش تعریف شده بیفتد. این پارامترهای برش معمولاً برای فوتون به صورت P_{cut} و یا برای ذرات باردار به صورت E_{cut} نشان داده می‌شوند. در طول هر مرحله از تاریخچه، مقادیر مورد توجه برای تجمع محاسبه می‌شود. به عنوان مثال، انرژی جذب شده در هر منطقه

(وکسل) در صورتی انباشته می شود که دوز محاسبه شود. طبق معادله ۲-۱۱، تعداد تاریخچه ذرات شبیه سازی شده، دقت آماری و در نتیجه زمان محاسبه را تعیین می کند.

۲-۲-۲- انتقال ذرات باردار

۲-۲-۲-۱- تکنیک تاریخچه فشرده

بخش ۲-۲-۱ پروسه اساسی برای شبیه سازی انتقال هر نوع ذره در میان ماده را مطرح کرد. به طور کلی، این روش شبیه سازی استاندارد برای ذرات خنثی است، چون طول مسیر آزاد بین دو فعل وانفعال به ترتیب اندازه هندسه شبیه سازی است. به عنوان مثال، میانگین طول مسیر آزاد فوتون ها در محدوده انرژی درمانی به ترتیب ۱۰ سانتی متر در آب و بافت های بدن انسان می باشد. منطقه مورد نظر برای محاسبه دوز در پرتودرمانی دارای اندازه حدود ۳۰ سانتی متر است. بنابراین، به طور متوسط، تعاملات فوتون کمی شبیه سازی می شود.

این برای ذرات باردار مانند الکترون و پروتون کاملاً متفاوت است. برای انرژی پرتودرمانی، آن ها تعداد بسیار زیادی از تعاملات واحد را تجربه می کنند. در نتیجه، شبیه سازی تاریخچه یک الکترون (پوزیترون یا پروتون) به زمان محاسبه بسیار طولانی تر از شبیه سازی یک تاریخچه فوتون نیاز خواهد داشت. از این رو، این روش برای بسیاری از مسائل انتقال در پرتودرمانی غیر عملی است.

خوشبختانه، تقریباً همه این فعل وانفعالات ارتجاعی یا نیمه ارتجاعی هستند. این بدان معناست که هیچ انرژی منتقل نمی شود و یا مقدار کمی از انرژی از ذرات باردار به مواد اطراف منتقل می شود. علاوه بر این، جهت ذرات به طور کلی فقط به واسطه زوایای پراکندگی کوچک تغییر می کند. این به ما اجازه می دهد تا بسیاری از این وقایع ارتجاعی و نیمه ارتجاعی را به یک مرحله CH گروه بندی کنیم. روش در سال ۱۹۶۳ توسط برگر (۱۹۶۳) معرفی شد و تکنیک CH نامیده می شود. اکثر الگوریتم های MC، مورد استفاده در پرتودرمانی، انتقال الکترون، پوزیترون، پروتون و یا ذرات باردار سنگین تر را با استفاده از روش CH انجام می دهند.

در حال حاضر، پیاده سازی های CH همه فعل وانفعالات تاریخچه یک ذره باردار را به برخوردهای سخت و نرم و همچنین رویدادهای تولید تابش ترمزی سخت و نرم تقسیم می کنند. دو نوع

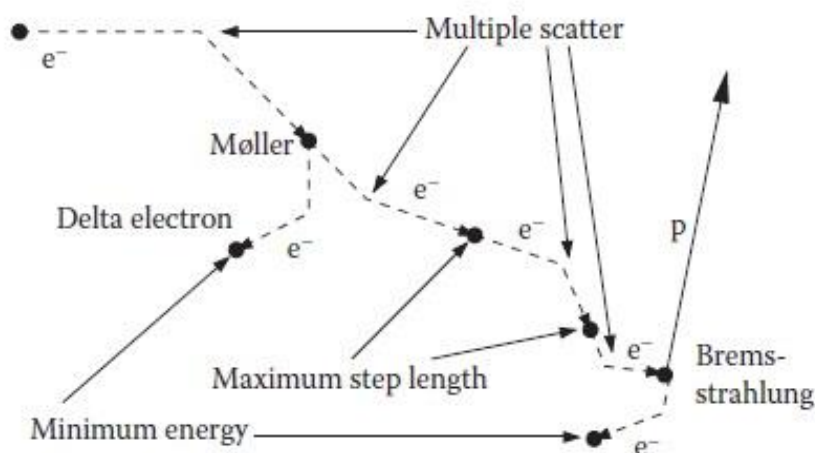
برخورد به واسطه یک آستانه دلخواه از دست دادن انرژی جنبشی E_c مشخص شده است. تولید تابش ترمزی سخت و نرم با استفاده از پارامتر k_c مشخص می‌شود. رویدادهای برخورد با یک انتقال انرژی پایین تر از E_c به الکترون‌های ثانویه، برخوردهای نرم نامیده می‌شوند. این برخوردهای نرم به طور ضمنی با انتقال انرژی پیوسته از ذره باردار بر روی مواد اطراف مسیر ذره شبیه‌سازی می‌شوند. تغییر جهت ذرات به دلیل بسیاری از زوایای کوچک توسط یک زاویه چند پراکندگی بزرگ شبیه‌سازی می‌شود. همه برخوردهای سخت به صراحت مثلاً در مورد فوتون‌ها شبیه‌سازی می‌شوند. حداقل انرژی ذرات ثانویه ایجاد شده طی برخوردهای سخت معادل E_c می‌باشد. همچنین حداکثر انرژی و در نتیجه حداکثر محدوده ذرات ثانویه باردار تولید شده را طی برخوردهای نرم فراهم می‌کند. این محدوده باید کوچک‌تر از تفکیک‌پذیری فضایی هندسه شبیه‌سازی باشد. معنای این آستانه تولید تابش ترمزی k_c مشابه است. بنابراین، پارامترهای دلخواه E_c و k_c باید با دقت انتخاب شوند. نتایج شبیه‌سازی در صورتی می‌تواند به صورت منفی تحت تأثیر قرار بگیرد که آن‌ها خیلی بزرگ باشند. از سوی دیگر، شبیه‌سازی در صورتی می‌تواند بیش از حد به طول انجامد که این پارامترها بیش از حد کوچک انتخاب شده باشند. لطفاً توجه داشته باشید که پارامتر E_c نباید با انرژی انتهای مسیر ذرات E_{cut} اشتباه گرفته شود. با این حال، در بسیاری از شبیه‌سازی‌های MC، هر دو پارامتر مساوی انتخاب می‌شوند.

علاوه بر این، به دلیل ماهیت تقریبی انتقال CH، برای محدود کردن حداکثر مسافت طی شده در یک گام CH سودمند است.

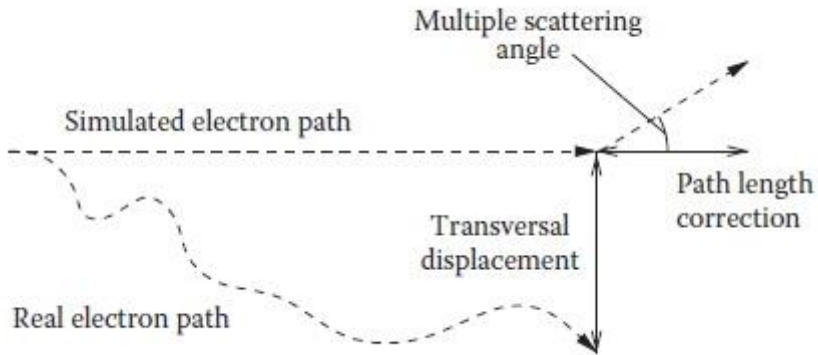
این می‌تواند به واسطه پارامتر دلخواه کاربر، حداکثر اندازه گام سراسری s_{max} ، و یا به واسطه پارامترهای وابسته به چگالی جرم مواد s_{max}^i تحقق یابد. در بسیاری از الگوریتم‌های MC، حداکثر اندازه گام بر اساس درصد حداکثر از دست دادن انرژی E_{step} تعیین می‌شود. به این ترتیب، حداکثر اندازه گام فضایی به طور خودکار به قدرت توقف و چگالی جرم مواد حاضر بستگی دارد.

با تمام این احتمالات، پایان یک مرحله CH با حداکثر اندازه گام و یا با تعامل سخت بعدی پایان می‌پذیرد. به عنوان نتیجه، تاریخچه کامل الکترون ممکن است مانند مثال نشان داده شده در شکل

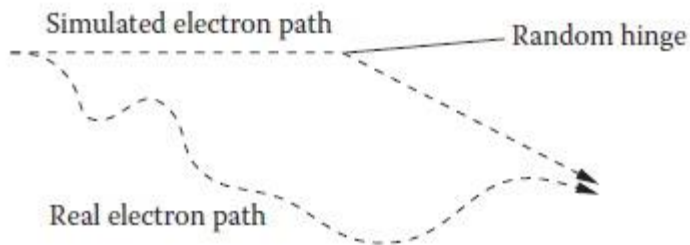
۳-۲ باشد. الکترون‌ها در مرحله CH به طور کلی در خطوط مستقیم حرکت می‌کنند. به دلیل چندین پراکندگی در پایان مرحله (شکل ۲-۴ را ببینید) و یا (مثلاً در مورد اشکال ۲-۳ و ۲-۵) بین محدودیت‌های گام، آن‌ها جهت را تغییر می‌دهند. در مورد دوم، به عنوان مثال، موقعیت پراکندگی‌های متعدد می‌تواند به طور تصادفی با استفاده از روش به اصطلاح مفصل تصادفی تعیین شود. شکل ۲-۳ نشان می‌دهد که اولین گام CH توسط یک تعامل مولر سخت محدود می‌شود. تعاملات مولر به الکترون‌های ثانویه منجر می‌شود، که الکترون‌های دلتا نیز نامیده می‌شوند. الکترون‌های دلتا به همان شیوه با استفاده از روش CH شبیه‌سازی می‌شوند تا زمانی که انرژی آن‌ها در زیر E_{cut} واقع شود و یا در صورتی که آن‌ها منطقه مورد نظر را ترک کنند. شکل ۲-۳ نیز نشان می‌دهد که مراحل CH می‌توانند به واسطه حداکثر طول گام یا به واسطه رویدادهای سخت تابش ترمزی محدود شوند. فوتون‌های تابش ترمزی ثانویه مانند تمام فوتون‌های دیگر با استفاده از روش آنالوگ شبیه‌سازی می‌شوند (بخش ۲-۲-۱ را ببینید).



شکل ۲-۳- نمونه‌ای از تاریخچه ذرات شروع با الکترون اولیه e^- (خط چین) از طریق پراکندگی متعدد، تعاملات مولر و رویدادهای تولید تابش ترمزی منجر به الکترون‌های (دلتا) ثانویه e^- (خط چین) و فوتون ثانویه p (خطوط مستقیم).



شکل ۲-۴- نمونه‌ای از یک مسیر الکترون شبیه‌سازی شده با استفاده از تکنیک CH و پراکندگی متعدد در مقایسه با مسیر الکترون واقعی ممکن (و یا شبیه‌سازی شده با استفاده از روش آنالوگ). به عنوان نتیجه‌ای از انتقال CH، طول مسیر شبیه‌سازی شده باید اصلاح شود و یک جابجایی تراگذار باید در نظر گرفته شود.



شکل ۲-۵- همانند شکل ۲-۴، اما این بار الکترون با استفاده از روش مفصل یا لولای تصادفی شبیه‌سازی می‌شود. به این ترتیب، اصلاحات طول مسیر و جابجایی‌های تراگذار به صورت تقریبی در نظر گرفته می‌شود.

اجزای مختلف روش CH در زیر بخش‌های بعدی با استفاده از الکترون به عنوان یک مثال مشخص می‌شود.

۲-۲-۲-۲- از دست دادن انرژی پیوسته

طی یک گام CH، به دلیل فعل و انفعالات نرم، ذره باردار به طور مداوم انرژی از دست می‌دهد. متوسط از دست دادن انرژی dE در هر طول گام CH، ds ، در نقطه \vec{r} توسط قدرت توقف خطی محدود مشخص می‌شود:

$$L(\vec{r}, E, E_c, k_c) \equiv -\left(\frac{dE}{ds}\right)_{res} = L_{col}(\vec{r}, E, E_c) + L_{rad}(\vec{r}, E, k_c) \quad (2.26)$$

با

$$L_{col}(\vec{r}, E, E_c) \equiv -\left(\frac{dE}{ds}\right)_{res,col} \quad \text{and} \quad L_{rad}(\vec{r}, E, k_c) \equiv -\left(\frac{dE}{ds}\right)_{res,rad} \quad (2.27)$$

به عنوان برخورد خطی محدود و قدرت توقف تابش تعریف شد. آن‌ها می‌توانند با استفاده از سطح مقطع برخورد $\sigma_{col}(\vec{r}, E, E')$ و سطح مقطع تولید تابش ترمزی $\sigma_{rad}(\vec{r}, E, k')$ با استفاده از روابط زیر محاسبه شوند:

$$L_{col}(\vec{r}, E, E_c) = N(\vec{r}) \int_0^{E_c} dE' E' \sigma_{col}(\vec{r}, E, E')$$

$$L_{rad}(\vec{r}, E, k_c) = N(\vec{r}) \int_0^{k_c} dk' k' \sigma_{rad}(\vec{r}, E, k')$$
(2.28)

$N(\vec{r})$ تعداد اهداف پراکندگی در حجم واحد در نقطه \vec{r} است. توجه داشته باشید که یکپارچه‌سازی قدرت توقف به انرژی‌های زیر E_c و k_c محدود می‌شود. این بدان معناست که انتقال انرژی به ذرات باردار ثانویه باید به زیر E_c محدود شود و انتقال انرژی به فوتون‌های ثانویه باید محدود به زیر k_c باشد. تعاملات با انتقال انرژی بالاتر به صراحت در این طرح CH شبیه‌سازی می‌شود.

طول گام s برای یک الکترون با انرژی اولیه E_0 که انرژی E را به دلیل انتقال CH از دست می‌دهد، می‌تواند با یکپارچه‌سازی معادله ۲-۲۶ محاسبه شود:

$$s = - \int_{E_0}^{E_1} \frac{dE}{L(\vec{r}, E, E_c, k_c)} = \int_{E_1}^{E_0} \frac{dE}{L(\vec{r}, E, E_c, k_c)} \quad (2.29)$$

با $E_1 = E_0 - \Delta E$ که انرژی الکترون در پایان مرحله است. علامت منفی در تعریف (۲-۲۶) در اینجا برای تبادل محدودیت‌های یکپارچه‌سازی بالا و پایین مورد استفاده قرار می‌گیرد. یکپارچه‌سازی (۲-۲۹) در طول مسیر الکترون شبیه‌سازی شده انجام می‌شود و وابستگی فضایی قدرت توقف در \vec{r} در نظر گرفته می‌شود. بنابراین، این بدان معناست که تابع $L(\vec{r}, E, E_c, k_c)$ در صورتی تغییر می‌کند که از مرزی به یک منطقه با مواد مختلف عبور شود.

معادله ۲-۲۹ وابستگی عملکردی منحصربه‌فردی از طول گام CH، s ، و انرژی پایان گام E_1 فراهم می‌کند. بنابراین، تمام الکترون‌ها با انرژی اولیه E_0 و انتقال یافته در طول همان مرحله با همان انرژی E_1 به پایان گام خواهند رسید. در اینجا، روشن می‌شود که این روش تقریبی است، چون در واقعیت، تنها متوسط انرژی پایان گام می‌تواند توسط معادله ۲-۲۹ محاسبه شود. شبیه‌سازی‌های آنالوگ MC نشان می‌دهند که انرژی‌های پایان گام واقعی طبق توزیع با مقدار متوسط E_1 تصادفی می‌باشند. این اثر به عنوان سرگردانی یا متفرق شدن انرژی شناخته می‌شود. در طرح شبیه‌سازی CH که در اینجا تعریف شد، باید بین سرگردانی انرژی نرم و سرگردانی انرژی سخت تمایز قائل شویم. سرگردانی انرژی سخت به صراحت شبیه‌سازی می‌شود و اثرات مربوطه به درستی در نظر گرفته می‌شوند. سرگردانی انرژی نرم یا زیرآستانه یا نادیده گرفته می‌شود و یا توسط یک تابع توزیع سرگردانی مناسب شبیه‌سازی می‌شود.

در واقع، سرگردانی زیرآستانه می‌تواند در طول یک شبیه‌سازی CH MC مسائل خاص نادیده گرفته شود، در صورتی که ما پارامتر E_c و اندازه گام را به اندازه کافی کوچک انتخاب کنیم. در این مورد، سرگردانی انرژی توسط رویدادهای یونیزاسیون سخت مدل‌سازی شده به صورت صریح با انتقال انرژی بزرگ‌تر از E_c کنترل می‌شود و نوسانات کم انرژی تأثیر ناچیزی بر نتیجه

نهایی دارد. علاوه بر این، در بسیاری از موارد، سرگردانی انرژی زیر آستانه در مقایسه با نفوذ عقب سرگردانی محدوده ناچیز است (بخش ۲-۲-۲-۴ را ببینید).

نقطه ضعف بالقوه نادیده گرفتن نوسانات انرژی نرم این است که زمان محاسبه می‌تواند غیر لزوماً افزایش یابد. بنابراین، پیاده‌سازی برخی از نظریه‌های سرگردانی زیر آستانه می‌تواند به سرعت بخشیدن به شبیه‌سازی و یا به اجتناب از محصولات مصنوعی کمک کند. به عنوان مثال، یک تابع توزیع گاوسی طبق رویکرد Bohr (1948) می‌تواند برای مدل‌سازی سرگردانی انرژی مورد استفاده قرار بگیرد. نظریه‌های Landau (1944) و Vavilov (1957) دقیق‌تر هستند.

۲-۲-۳-۲-۳ پراکندگی چندگانه

در مقابل با واقعیت و همان‌طور که در شکل ۲-۴ نشان داده شد، در یک رویکرد CH، ذرات باردار در خطوط راست در طول یک گام حرکت می‌کنند. اثر ترکیبی بسیاری از برخوردهای نیمه ارتجاعی و ارتجاعی با زاویه کوچک در طول یک گام با استفاده از نمونه‌گیری انحراف زاویه‌ای بر اساس یک نظریه پراکندگی چندگانه اختصاصی شبیه‌سازی می‌شود. یک نمونه، نظریه توسعه یافته توسط Fermi and Eyges (Eyges, 1948) می‌باشد. این نظریه، احتمال $p(\theta, \varphi) d\theta d\varphi$ را مدل‌سازی می‌کند که الکترون در داخل بخش زاویه‌ای ثابت پراکندگی چندگانه $[\theta, \theta + d\theta], [\varphi, \varphi + d\varphi]$ همانند توزیع گاوسی ۲ بعدی پراکنده می‌شود:

$$p(\theta, \varphi) d\theta d\varphi = \frac{\theta}{\pi \theta^2(s)} \exp\left(-\frac{\theta^2}{\theta^2(s)}\right) d\theta d\varphi \quad (2.30)$$

که در آن θ سمتی زاویه پراکندگی چندگانه است، φ زاویه پراکندگی چندگانه قطبی است، و $\overline{\theta^2}(s)$ میانگین مربع زاویه انحراف پس از طول گام است. توزیع (۲-۳۰) نرمال‌سازی نمی‌شود، چون θ به جای بازه $[0, \infty]$ به بازه $[0, \pi]$ محدود می‌شود. معادله ۲-۳۰ منجر به دو تابع توزیع تجمعی جداگانه می‌شود:

$$P_0(\theta) = 1 - \exp\left(-\frac{\theta^2}{\theta^2(s)}\right), P_\varphi(\varphi) = \frac{\varphi}{2\pi} \quad (2.31)$$

روش تبدیل از بخش ۲-۱-۳ و یک عدد تصادفی یکنواخت ξ_θ می‌تواند برای نمونه‌گیری θ استفاده شود:

$$\theta = \sqrt{-\theta^2(s) \ln(1 - \xi_\theta)} \quad (2.32)$$

لازم به ذکر است که ξ_θ به صورت یکنواخت در بازه $[0, \xi_\theta^{\max}]$ با $\xi_\theta^{\max} < 1$ توزیع می‌شود تا تضمین کند که $\theta \leq \pi$. گزینه دیگر، نمونه‌گیری ξ_θ از $[0, 1]$ و رد θ در صورتی است که $\theta > \pi$ باشد. به دلیل تقارن چرخشی، زاویه پراکندگی قطبی φ از یک توزیع یکنواخت در $[0, 2\pi]$ تعیین می‌شود.

مقدار $\bar{\theta}^2(s)$ با استفاده از قدرت پراکندگی خطی $T_s(\bar{r}, E)$ در نقطه \bar{r} محاسبه می‌شود:

$$\bar{\theta}^2(s) = \int_0^s ds' T_s(s', E) \quad (2.33)$$

پارامتر مواد $T_s(\bar{r}, E)$ به ترکیب اتمی در نقطه \bar{r} و همچنین به انرژی الکترون E بستگی دارد. این باید در معادله ۲-۳۳ در نظر گرفته شود، چون الکترون انرژی را بین آغاز و پایان گام از دست می‌دهد.

گاوسی (۲-۳۰)، تقریب خوبی از واقعیت برای زوایای کوچک پراکندگی تجمعی θ است. با این حال، زوایای پراکندگی بزرگ با استفاده از این توزیع ناچیز پنداشته می‌شوند. بنابراین، اغلب در گذشته (به عنوان مثال، در EGS4 (Nelson et al., 1985)) توزیع پراکندگی چندگانه Molière (1948) استفاده شد. با این وجود، این بهبود نیز بر اساس تقریب زاویه کوچک، و به‌ویژه برای زوایای بزرگ است، نظریه Molière هنوز هم محدودیت‌هایی دارد.

مناسب‌ترین مورد برای شبیه‌سازی‌های MC، الگوریتم‌های مبتنی بر تئوری دقیق Goudsmit and Saunderson (1940a,b) هستند. نمونه‌ها، الگوریتم‌های پراکندگی چندگانه هستند که در MCNP (Briesmeister, 1997)، Penelope (Salvat et al., 2011) و EGSnrc

(Kawrakow et al., 2011) پیاده‌سازی شده‌اند. این الگوریتم‌ها، زوایای پراکندگی متعدد را نزدیک به واقعیت نمونه‌گیری می‌کنند، حتی برای زوایای بزرگ.

۲-۲-۴- مکانیک انتقال

شکل ۲-۴ یک گام الکترون CH را نسبت به برخی از مسیرهای الکترون واقعی ممکن و یا نسبت به یک مسیر الکترون شبیه‌سازی شده با استفاده انتقال MC آنالوگ مقایسه می‌کند. این شکل نشان می‌دهد که مسائل متعددی می‌توانند از یک شبیه‌سازی CH مورد انتظار باشند. برای درک بهتر، در این بخش، ما از دست دادن انرژی در گام CH را نادیده می‌گیریم. این بدان معناست که در اینجا انرژی الکترون بین آغاز و پایان گام تغییر نکرده است و فرض می‌شود همه فعل و انفعالات در طول گام الاستیک ارتجاعی هستند. همان‌طور که در شکل ۲-۴ نشان داده شده است، بسیاری از کدهای MC، زاویه پراکندگی چندگانه را در پایان گام نمونه‌گیری می‌کنند، یعنی، الکترون در یک خط مستقیم تا موقعیت نهایی حرکت می‌کند و سپس به دلیل چندین پراکندگی تغییر جهت می‌دهد. واضح است که در این مورد، فاصله الکترون بیش از حد برآورد شده است. همچنین در شکل ۲-۴ نشان داده شده است، مسیر الکترون واقعی خمیده است. بنابراین، محدوده الکترون واقعی در صورتی که کوتاه‌تر که فرض کنیم هر دو الکترون (الکترون واقعی و الکترون CH) با طول مسیر یکسان حرکت می‌کنند. علاوه بر این، محدوده الکترون واقعی در اطراف برخی مقادیر متوسط در نوسان است. این اثر سرگردانی محدوده نامیده می‌شود و نباید با سرگردانی انرژی که در بخش ۲-۲-۲ توضیح داده شد، اشتباه گرفته شود. سرگردانی محدوده مستقل از دست دادن انرژی الکترون است.

بسیاری از الگوریتم‌های تاریخچه CH، الگوریتم تصحیح طول مسیر (PLC) را برای در نظر گرفتن برآورد اضافی محدوده و سرگردانی محدوده به کار می‌گیرند. علاوه بر این، یک الگوریتم جابجایی عرضی (TD)^۱ برای در نظر گرفتن نوسانات عرضی الکترون واقعی و موقعیت پایان نسبت به موقعیت شبیه‌سازی شده در مرحله CH سودمند است. یک PLC بسیار ساده و رویکرد TD، روش مفصل تصادفی نامیده می‌شود، که در شکل ۲-۵ نشان داده شده است. به عنوان مثال، این در

^۱ transverse displacement (TD)

Penelope (Salvat et al., 2011) و یا XVMC (Kawrakow and Fippel, 2000) پیاده‌سازی می‌شود. در این روش، کل طول گام s با استفاده از یک عدد تصادفی توزیع شده به صورت یکنواخت ξ از بازه $[0, 1]$ به دو زیر گام $s\xi$ و $s(1-\xi)$ تقسیم می‌شود. زاویه پراکندگی چندگانه بین دو زیر گام نمونه‌گیری می‌شود، به جای اینکه در پایان مرحله نمونه‌گیری شود. متوسط جابجایی طولی (PLC) و جانبی (یا عرضی) (TD) شبیه‌سازی شده در این روش بسیار نزدیک به مقادیر دقیق هستند. الگوریتم انتقال گام الکترون کاهش یافته پارامتر که توسعه یافته توسط Kawrakow و Bielajew (۱۹۹۸) توسعه یافت، دقیق‌تر است (گاهی اوقات PRESTA-II نامیده می‌شود) که در EGSnrc پیاده‌سازی شد (Kawrakow, 2000a). این الگوریتم تکانه فضایی مرتبه اول و دوم را در $1/0\%$ دوباره تولید می‌کند.

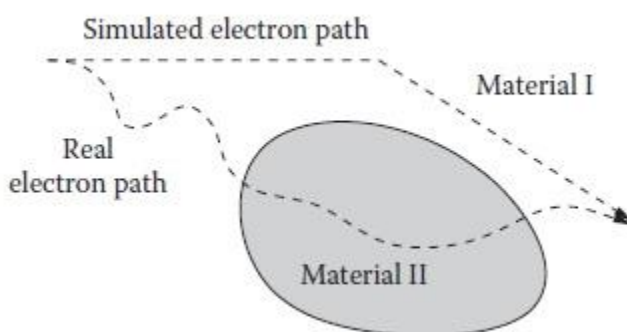
مسائل و الگوریتم‌های مورد بحث در این بخش می‌توانند در صورتی به طور کامل نادیده گرفته شوند که مراحل انتقال ذرات باردار به اندازه کافی کوچک باشد. در حد اندازه‌های گام کوچک بی‌نهایت کوچک، هر الگوریتم CH به پاسخ درست همگرا خواهد شد. با این حال، به این ترتیب، شبیه‌سازی بسیار ناکارآمد می‌شود. بنابراین، با پیاده‌سازی یک الگوریتم پیچیده برای مکانیک انتقال، انتقال ذره باردار می‌تواند به طور مؤثر برای شبیه‌سازی‌های MC در پرتودرمانی مورد استفاده قرار بگیرد.

۲-۲-۵- عبور از مرز

از لحاظ تئوری، انتقال MC ذره باردار با استفاده از روش CH با پراکندگی متعدد تنها در مناطق همگن شامل یک محیط قطعی، کار می‌کند. مسئله شرایط با بیش از یک ماده به صورت شماتیک در شکل ۲-۶ نشان داده شده است. این شکل، دو منطقه متشکل از مواد مختلف و همچنین دو مسیر الکترون، یک مسیر الکترون واقعی محاسبه شده با استفاده از طرح پراکندگی واحد و یک مسیر الکترون شبیه‌سازی شده CH را نشان می‌دهد. با استفاده از تعریف، روش CH باید اثر فشرده تعداد زیادی از مسیرهای الکترون واقعی، از جمله مسیر واقعی نشان داده شده در شکل ۲-۶ را شبیه‌سازی کند. این مسیر تا حدودی در مواد II واقع می‌شود و باید (برای این بخش از مسیر)

خواص تعامل مواد II را در نظر بگیرد. برای بقیه مسیر، آن باید خواص مواد I را در نظر بگیرد. دیگر الکترون‌های واقعی ممکن است به طور کامل در مواد I ردیابی شوند.

شکل ۲-۶ به وضوح نشان می‌دهد که، برای رابط‌های مواد شکل گرفته به صورت دلخواه، یک نظریه دقیق پراکندگی چندگانه وجود ندارد. در نتیجه، روش CH فقط می‌تواند در مناطقی مورد استفاده قرار بگیرد که در آن فاصله تا مرز ماده بعدی، بسیار بزرگ‌تر از اندازه گام الکترون موجود است. در مقابل، این بدان معنی است که حداکثر اندازه گام s_{max} در صورتی باید کاهش یابد که یک الکترون نزدیک به یک رابط مادی بیاید و در صورتی می‌تواند دوباره افزایش یابد که الکترون به دور از مرز حرکت کند. این نوع از تنوع اندازه گام، به عنوان مثال، در نسخه اصلی PRESTA معرفی شده است (Bielajew and Rogers 1987). برای هندسه‌هایی با بسیاری از مناطق کوچک مواد مختلف، این به اندازه گام کوچک و زمان‌های محاسبه طولانی منجر می‌شود. مسئله دیگر این است که قبل از اینکه یک الکترون از مرز عبور کند، اندازه گام CH آن بی‌نهایت کوچک می‌شود. برای مجاز کردن عبور از مرز در هر صورت، کاهش اندازه گام باید در صورتی خاموش شود که حداقل اندازه گام به دست آید. با این حال، پس از آن اندازه گام شبیه به فاصله مرز می‌شود و مصنوعات اندازه گام ممکن است رخ دهد که ما در شکل ۲-۶ و بحث بالا ملاحظه کرده‌ایم.



شکل ۲-۶- نمونه‌ای از یک مسیر الکترون شبیه‌سازی شده با استفاده از روش مفصل تصادفی. در مقابل اشکال ۲-۴ و ۲-۵، دو ماده مختلف درگیر هستند. این می‌تواند باعث مصنوعات شبیه‌سازی شود، چون مسیر الکترون شبیه‌سازی شده با استفاده از روش CH توسط مواد II تحت تأثیر قرار نمی‌گیرد؛ با این حال، مسیر الکترون واقعی توسط مواد II تحت تأثیر قرار می‌گیرد.

برای جلوگیری از آثار اندازه گام، الگوریتم دقیق‌تری در EGSnrc پیاده‌سازی شده است (Kawrakow, 2000a). در اینجا، حداقل فاصله d_{\min} تا رابط ماده بعدی می‌تواند توسط کاربر تعریف شود و انتقال CH تنها در صورتی انجام می‌شود که نسبت به این حداقل فاصله، الکترون به دور از مرز باشد. اگر الکترون به مرز نسبت به d_{\min} نزدیک‌تر شود، الکترون در حالت پراکندگی واحد با استفاده از روش آنالوگ منتقل می‌شود. این الگوریتم آزاد از مصنوعات اندازه گام است. با این حال، آن نیز بدان معنی است که الکترون‌ها در حالت پراکندگی واحد خالص در داخل هندسه‌هایی با مناطق بسیار کوچک شبیه‌سازی می‌شوند، یعنی، در صورتی که متوسط قطر یک منطقه کوچک‌تر از d_{\min} باشد. در نتیجه، زمان محاسبه می‌تواند به طور چشمگیری افزایش یابد. بنابراین، این روش شامل انتخاب مناسب پارامتر d_{\min} تنها برای شبیه‌سازی‌هایی با الزامات دقت بالا، معقول به نظر می‌رسد. یک نمونه، شبیه‌سازی پاسخ اتافک یونی است (Kawrakow, 2000b).

برای اکثر شبیه‌سازی‌های MC در پرتودرمانی، مصنوعات به دلیل عبور از مرز می‌تواند به دلیل نفوذ ناچیز آن‌ها در نتیجه نادیده گرفته شود. به عنوان مثال، یک روش سودمند، شبیه‌سازی گذرگاه مرزی الکترون بدون توقف در رابط با استفاده از روش مفصل تصادفی است. در اینجا، خواص پراکندگی چندگانه مواد I در صورتی مورد استفاده قرار می‌گیرد که "مفصل" در مواد I نمونه‌گیری شود؛ در غیر این صورت، خواص مواد II استفاده می‌شود. کل طول گام الکترون به قدرت توقف و بخش‌های گام مربوطه در هر دو ماده بستگی دارد. مطابق راهنمای کاربر PENELOPE (Salvat et al., 2011)، این رویکرد یک "توصیف نسبتاً دقیق از عبور از رابط" فراهم می‌کند. به عنوان مثال، روش کارآمد و دقیقی برای مدل‌سازی سر شتاب‌دهنده خطی یا یک الگوریتم محاسبه دوز مبتنی بر MC در برنامه‌ریزی درمان پرتودرمانی است.

۲-۲-۳- سطح مقطع

۲-۲-۳-۱- ضرایب برهم کنش فوتون

در بخش ۲-۲-۱، ضریب میرایی خطی $\mu(E)$ برای نمونه گیری فاصله بین دو برهم کنش فوتون معرفی شده است. برای عناصر، ترکیبات و مخلوطها، این پارامتر ماده می تواند از کل سطح مقطع $\sigma_i(E)$ عنصر i ام در مواد به صورت زیر محاسبه شود:

$$\mu(E) = \sum_i N_i(\vec{r}) \sigma_i(E) \quad (2.34)$$

$N_i(\vec{r})$ تعداد اتمهای عنصر i در حجم واحد در نقطه \vec{r} است و توسط رابطه زیر محاسبه می شود:

$$N_i(\vec{r}) = \frac{\rho(\vec{r}) w_i(\vec{r})}{m_u A_i(\vec{r})} = \frac{\rho(\vec{r}) N_A w_i(\vec{r})}{M_i(\vec{r})} \quad (2.35)$$

$\rho(\vec{r})$ چگالی جرم در نقطه \vec{r} است، $w_i(\vec{r})$ کسر وزنی از عنصر i ام در نقطه \vec{r} است، $A_i(\vec{r})$ جرم اتمی نسبی عنصر i ام در نقطه \vec{r} است، $M(\vec{r})$ جرم مولی عنصر i ام در نقطه \vec{r} است، $m_u = 1.6605388.10 \text{ kg}$ واحد جرم اتمی است، و $N_A = 6.0221418 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$ ثابت Avogadro است (Nakamura et al. 2010).

متناظر با معادله ۲-۲۳، کل سطح مقطع اتمی با استفاده از مجموع سطح مقطع برای فرآیندهای مختلف مشخص می شود:

$$\sigma_i(E) = \sigma_{i,A}(E) + \sigma_{i,R}(E) + \sigma_{i,C}(E) + \sigma_{i,P}(E) \quad (2.36)$$

که در آن، جذب فوتوالکتریک (A)، پراکندگی Raleigh (R)، پراکندگی کامپتون (C)، و تولید جفت (P).

اگر ترکیب مواد دقیقاً شناخته شده باشد، سطح مقطع برای برهم کنشهای مختلف فوتون می تواند با استفاده از برخی پایگاه دادهها، مانند XCOM (Berger and Hubbell, 1987) و یا EPDL97

(Cullen et al., 1997) محاسبه شود. این پایگاه داده‌ها به صورت آنلاین در دسترس هستند و از زمانی تا زمان دیگر به‌روزرسانی می‌شوند تا شامل اخیرترین نتایج اندازه‌گیری و محاسبه باشند. اکثر کدهای همه‌منظوره و خاص MC بر اساس یک یا تعداد بیش‌تری از این پایگاه داده‌ها هستند. به‌خصوص در پرتودرمانی، ترکیبات مواد همیشه در دسترس نیستند. از ده، تنها یک تعداد CT (یا واحد Hounsfield، HU) شناخته شده است. بنابراین، کمیسیون بین‌المللی اندازه‌گیری و واحدهای پرتو (ICRU^۱) لیستی از حدود ۱۰۰ نوع بافت انسانی، از جمله ترکیبات مواد و داده‌های تعاملی گردآوری کرده‌اند (به عنوان مثال، سطح مقطع فوتون). این داده‌ها در گزارش ICRU شماره ۴۶ (داده‌های تعامل فوتون، الکترون، پروتون و نوترون برای بافت‌های بدن، ۱۹۹۲) منتشر شده است. با یک کالیبراسیون CT مناسب، تعداد HU می‌تواند به یک نوع بافت خاص بدن نگاهت شود. از استفاده تعداد بسیار محدودی از مواد، به عنوان مثال، شش ماده مانند هوا، جگر سفید (ریه)، آب، بافت نرم، استخوان نرم و استخوان سخت، باید اجتناب شود. درون‌یابی خطی بین این نقاط پشتیبانی می‌تواند به اشتباهات بزرگ سطح مقطع منجر شود.

احتمالات برهم‌کنش $\mu_k(E, \rho)$ ($k = A, R, C, P$) معادله ۲-۲۳ برای بافت‌های بدن انسان نیز می‌تواند به طور مستقیم، بدون دانستن ترکیب مواد، با استفاده از روش ارائه شده برای محاسبه دوز MC تعیین شود (Kawrakow et al., 1996; Fippel, 1999):

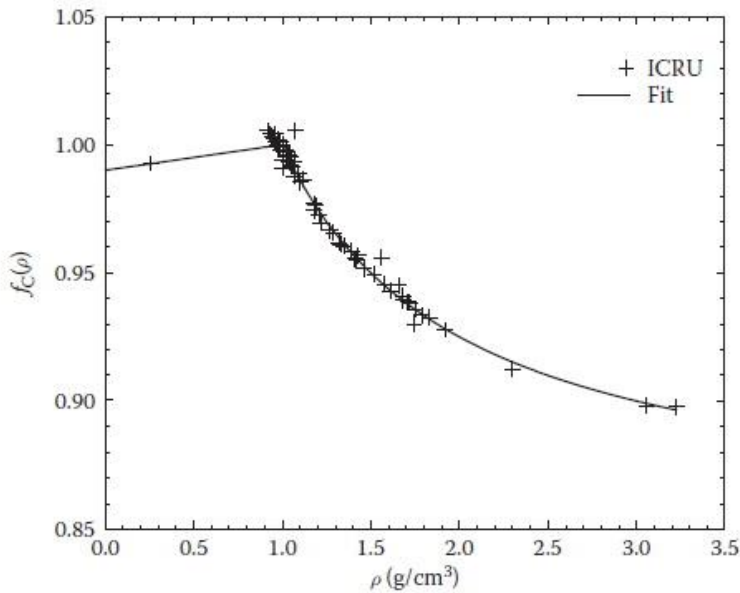
$$\mu_k(E, \rho) = \frac{\rho}{\rho^w} f_k(\rho) \mu_k^w(E) \quad (2.37)$$

$\mu_k^w(E)$ ضرایب تعامل آب هستند و ρ^w چگالی جرم آب است. به عنوان مثال، در شکل ۲-۷، نسبت سطح مقطع کامپتون $f_c(\rho)$ برای تمام مواد گزارش ICRU شماره ۴۶ رسم می‌شود. این نشان می‌دهد که اکثر نقاط داده (تقاطع) نزدیک به خط پر واقع می‌شوند که نشان‌دهنده تابع برازنده است:

$$f_c(\rho) \approx \begin{cases} 0.99 + 0.01\rho / \rho^w, & \rho \leq \rho^w \\ 0.85 + 0.15\rho^w / \rho, & \rho \geq \rho^w \end{cases}$$

^۱ International Commission on Radiation Units and Measurements (ICRU)

(2.38)



شکل ۲-۷- نسبت ضرایب تعامل کامپتون جرم تمام مواد از گزارش شماره ۴۶ متعلق به ICRU به ضریب تعامل کامپتون آب (تقاطع). خط نشان‌دهنده مناسب بودن طبق معادله ۲-۳۸ است.

عدم قطعیت نسبی تابع (۲-۳۸) بهتر از ۱٪ برای تقریباً تمام مواد گزارش شماره ۴۶، ICRU است. تنها استثنا سنگ کیسه صفر با خطای ۱/۶٪ است. تناسب مشابه برای انواع تعاملات دیگر وجود دارد. بنابراین، برای تعیین چگالی جرم در یک منطقه معین و برای استفاده از معادلات مانند (۲-۳۸) به منظور محاسبه سطح مقطع مربوطه کافی است.

۲-۲-۳-۲- قدرت پراکندگی و توقف ذرات باردار

برای شبیه‌سازی MC انتقال ذره باردار با استفاده از روش CH مطابق بخش ۲-۲-۲-۲، دانش قدرت برخورد و توقف تابش محدود خطی، $L_{col}(\vec{r}, E, E_c)$ و $L_{rad}(\vec{r}, E, k_c)$ ، ضروری است. این مقدار در صورتی می‌تواند محاسبه شوند که قدرت برخورد و توقف تابش نامحدود، $L_{col}(\vec{r}, E)$ و $L_{rad}(\vec{r}, E)$ ، برای این محیط در نقطه \vec{r} شناخته شده باشند.

آن‌ها متوسط از دست دادن انرژی dE را در هر گام ds بدون محدود کردن از دست دادن انرژی به واسطه برخی آستانه‌ها فراهم می‌کنند. کل قدرت توقف خطی نامحدود به واسطه رابطه زیر تعریف می‌شود:

$$S(\vec{r}, E) \equiv -\left(\frac{dE}{ds}\right) = S_{col}(\vec{r}, E) + S_{rad}(\vec{r}, E) \quad (2.39)$$

قدرت برخورد و توقف تابش خطی نامحدود با استفاده از سطح مقطع برخورد $\sigma_{col}(\vec{r}, E, E')$ و سطح مقطع تولید تابش ترمزی $\sigma_{rad}(\vec{r}, E, k')$ با استفاده از رابطه زیر محاسبه می‌شود:

$$\begin{aligned} S_{col}(\vec{r}, E) &= N(\vec{r}) \int_0^E dE' E' \sigma_{col}(\vec{r}, E, E') \\ S_{rad}(\vec{r}, E) &= N(\vec{r}) \int_0^E dk k' \sigma_{rad}(\vec{r}, E, k') \end{aligned} \quad (2.40)$$

$N(\vec{r})$ تعداد اهداف پراکندگی در هر حجم واحد در نقطه \vec{r} است و می‌تواند با استفاده از معادله ۲-۳۵ تعیین شود.

همان‌طور که در بخش ۲-۲-۲-۲ اشاره شد، این روش CH ترکیبی به دانش برخورد غیر الاستیک سخت و سطح مقطع تابش ترمزی، $\sigma_{col}(\vec{r}, E, E')$ و $\sigma_{rad}(\vec{r}, E, k')$ ، به ترتیب برای مقادیر انتقال انرژی $E' > E_c$ و $k' > k_c$ نیاز دارد. با معادلات ۲-۲۸ و ۲-۴۰، امکان محاسبه قدرت توقف محدود را طبق رابطه زیر فراهم می‌کند:

$$\begin{aligned} L_{col}(\vec{r}, E, E_c) &= S_{col}(\vec{r}, E) - N(\vec{r}) \int_{E_c}^E dE' E' \sigma_{col}(\vec{r}, E, E') \\ L_{rad}(\vec{r}, E, k_c) &= S_{rad}(\vec{r}, E) - N(\vec{r}) \int_{k_c}^E dk k' \sigma_{rad}(\vec{r}, E, k') \end{aligned} \quad (2.41)$$

جداول قدرت توقف مناسب برای شبیه‌سازی‌های MC در پرتودرمانی منتشر شده است؛ به عنوان مثال، توسط ICRU برای الکترون‌ها و پوزیترون‌ها در گزارش ۳۷ (قدرت توقف برای الکترون و

پوزیترون، ۱۹۸۴)، برای الکترون‌ها و پروتون‌های در گزارش ۴۶ (داده‌های تعامل فوتون، الکترون، پروتون و نوترون برای بافت‌های بدن، ۱۹۹۲)، و همچنین برای پروتون‌ها و ذرات آلفا در گزارش ۴۹ (محدوده و قدرت توقف برای پروتون‌ها و ذرات آلفا، ۱۹۹۳). پایگاه داده‌های آنلاین مانند ESTAR، PSTAR و ASTAR (Berger, 1993) نیز می‌توانند به منظور تعیین قدرت توقف برای عناصر، ترکیبات و مخلوط‌های مختلف استفاده شوند.

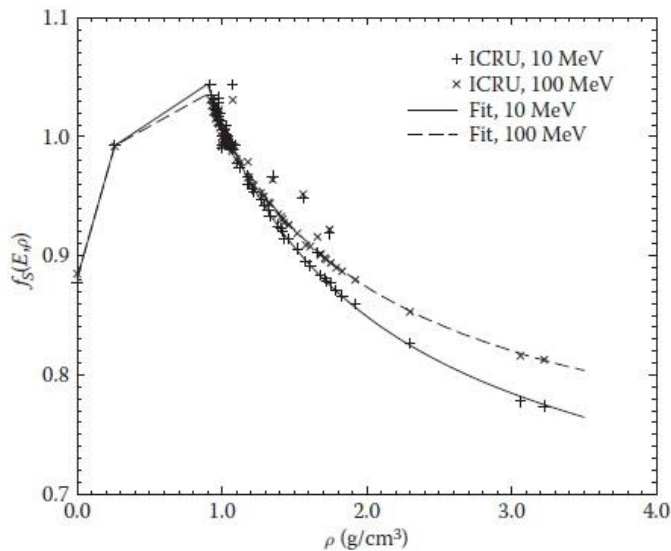
در مقایسه با معادله ۲-۳۷، قدرت توقف نیز می‌تواند به طور مستقیم با استفاده از نسبت قدرت توقف جرم $f_k(E, \rho)$ و قدرت توقف جرم آب $S_k^w(E)/\rho^w$ ($k = tot, col, rad, \dots$) تعیین شود:

$$S_k(E, \rho) = \frac{\rho}{\rho^w} f_k(E, \rho) S_k^w(E) \quad (2.42)$$

به عنوان مثال، این رویکرد به منظور توسعه یک الگوریتم محاسبه دوز MC پروتون درمانی اتخاذ شده است (Fippel and Soukup, 2004). شکل ۲-۸ کل نسبت قدرت توقف پروتون $f_s(E, \rho)$ را برای دو انرژی پروتون (۱۰ و ۱۰۰ مگا الکترون‌ولت) و برای همه مواد گزارش شماره ۴۶، ICRU (داده‌های تعامل فوتون، الکترون، پروتون و نوترون برای بافت‌های بدن، ۱۹۹۲) نشان می‌دهد. پس از تجزیه و تحلیل جداول و محاسبات گزارش ICRU شماره ۴۶ (داده‌های تعامل فوتون، الکترون، پروتون و نوترون برای بافت‌های بدن، ۱۹۹۲)، گزارش ICRU شماره ۴۹ (محدوده و قدرت توقف برای پروتون‌ها و ذرات آلفا، ۱۹۹۳)، و پایگاه داده آنلاین PSTAR (Berger, 1993)، فرمول مناسب زیر منتشر شده است (Fippel and Soukup, 2004):

$$f_s(E, \rho) = \begin{cases} 1.0123 - 3.386 \cdot 10^{-5} E + 0.291(1 + E^{-0.3421})(\rho^{-0.7} - 1) & \text{for } \rho \geq 0.9 \\ 0.9925 & \text{for } \rho = 0.26 \text{ (lung)} \\ 0.8815 & \text{for } \rho = 0.0012 \text{ (air)} \\ \text{Interpolate for all other } \rho \leq 0.9 \end{cases} \quad (2.43)$$

با انرژی پروتون جنبشی E با واحد مگا الکترون‌ولت (شامل بقیه جرم نمی‌شود) و چگالی جرم ρ با واحد g cm^{-3} . شکل ۲-۸ این تابع را برای دو انرژی پروتون به صورت خطوط پر و خط چین نشان می‌دهد. علاوه بر برخی نقاط دورافتاده (سنگ کیسه صفر، پروتین، کربوهیدرات و سنگ ادراری)، معادله ۲-۴۳ دقت بهتری نسبت به ۱٪ ارائه می‌کند، یعنی، دانش ترکیب اتمی در هر وکسل لازم نیست. معادله ۲-۴۳ و شکل ۲-۸ نیز نشان می‌دهند که وابستگی انرژی نسبت قدرت توقف می‌توان با استفاده از فرمول‌های مناسب در نظر گرفته شود.



شکل ۲-۸- نسبت قدرت توقف جرم تمام مواد از گزارش شماره ۴۶، ICRU به قدرت توقف جرم آب برای پروتون‌های ۱۰ و ۱۰۰ مگا الکترون‌ولت (تقاطع). خطوط نشان‌دهنده تناسب برای هر دو انرژی هستند.

فرمول‌های مشابهی برای قدرت توقف تابش و برخورد الکترون و پوزیترون وجود دارد. وابستگی چگالی جرم و ماده توزیع پراکندگی چندگانه ذرات باردار نیز می‌تواند با این روش مدل‌سازی شوند.

فصل ۳

تکنیک‌های کاهش واریانس

۳-۱-۱- مقدمه

محاسبات مونت کارلو (MC) می‌تواند وقت گیر باشد، به خصوص برای کاربردهای پرتودرمانی (RT). بنابراین، تکنیک‌های الگوریتمی برای سرعت بخشیدن به شبیه‌سازی‌ها ضروری است. این تکنیک‌ها، تکنیک‌های کاهش واریانس (VRT^1) نامیده می‌شوند. در این فصل، VRT ها با تمرکز ویژه بر RT معرفی شده و شرح داده می‌شوند. برای وضوح، از نقطه نظر تعاملات فوتون - الکترون نوشته شده است. با این حال، مفاهیم مشابه می‌تواند برای ذرات سنگین باردار و خنثی (پروتون، نوترون و غیره) استفاده شود.

اطلاعات بیشتری در مورد VRT ها در دسترس است؛ به عنوان مثال، در فصل‌های کتاب (1988) Bielajew and Rogers و یا (2006) Sheikh-Bagheri et al. در مقاله‌ای توسط (2000a) Kawrakow and Fippel و در دو گزارش گروه کار (Chetty et al., 2007; Reynaert et al., 2007). این نوشته‌ها شامل مراجع نشریات اصلی برای اکثر VRT های ارائه شده در بخش‌های زیر نیز می‌باشد.

۳-۱-۱- بهره‌وری محاسبه

بسته به تعداد تاریخچه‌ها N ، دقت و صحت هر مقدار متوسط محاسبه شده MC ، $\langle f(N) \rangle$ مقدار f با عدم قطعیت آماری آن محدود می‌شود. این عدم قطعیت توسط واریانس $\sigma(N)$ مشخص می‌شود و اندازه‌گیری نوسانات آماری مقدار میانگین محاسبه شده $\langle f(N) \rangle$ در اطراف مقدار واقعی f آن مقدار را فراهم می‌کند. واضح است که $\sigma(N)$ با افزایش تعداد تاریخچه‌ها N کاهش می‌یابد و در صورتی صفر می‌شود که N به بی‌نهایت نزدیک شود. به طور کلی، $\sigma(N)$ قابل محاسبه نیست، چون مقدار واقعی f ناشناخته است. از سوی دیگر، یک واریانس برآورد شده $s(N)$ می‌تواند در طول شبیه‌سازی MC با رابطه زیر محاسبه شود:

$$s(N) = \sqrt{\frac{\langle f^2(N) \rangle - \langle f(N) \rangle^2}{N-1}} \quad (3.1)$$

¹ variance reduction techniques (VRT)

با $\langle f^2(N) \rangle$ که میانگین محاسبه شده MC برای f^2 است. بهترین برآورد واریانس در صورتی به دست می‌آید که $\langle f(N) \rangle$ و $\langle f^2(N) \rangle$ با استفاده از روش تاریخ به تاریخ محاسبه شوند، یعنی، آن‌ها با میانگین‌گیری تمام تاریخچه‌ها محاسبه می‌شوند (Salvat et al., 2011). $\langle f(N) \rangle$ و $\langle f^2(N) \rangle$ تمایل دارند تا برای تعداد زیادی N به ثابت تبدیل شوند. بنابراین، معادله ۳-۱ روش ساده‌ای برای کاهش واریانس فقط با افزایش تعداد تاریخچه‌ها N فراهم می‌کند، یعنی، افزایش زمان محاسبه $T(N)$. با این حال، این یک VRT در نظر گرفته نمی‌شود. هدف کاهش واریانس، کاهش زمان شبیه‌سازی‌های MC با اصلاح الگوریتم در حین حفظ تخمین نااریب واریانس $s(N)$ است. نااریب بدان معنی است که برای هر تعداد تاریخچه واقعی N ، نتیجه MC، از جمله VRT، نباید به طور سیستماتیک از نتیجه مربوطه بدون VRT منحرف شود.

به جای VRT، روش‌های اشاره شده در این کتاب باید تکنیک‌های افزایش یا بهبود بهره‌وری نامیده شوند، زیرا آن‌ها بهره‌وری شبیه‌سازی‌های MC را بهبود می‌بخشند. بهره‌وری محاسبه ε به صورت ذیل تعریف می‌شود:

$$\varepsilon = \frac{1}{[s(N)]^2 T(N)} \quad (3.2)$$

از معادله ۳-۱، نتیجه می‌شود که $[s(N)]^2$ به تناسبی به $1/N$ برای N بزرگ تبدیل می‌شود. $T(N)$ متناسب با N است. بنابراین، بهره‌وری ε تقریباً مستقل از N است. بهره‌وری محاسبه می‌تواند با کاهش واریانس $s(N)$ برای تعداد معینی از تاریخچه‌ها N ، با کاهش زمان محاسبه $T(N)$ برای تعداد معینی از تاریخچه‌ها N ، یا با انجام هر دو بهبود یابد. به دلایل تاریخی، ما همچنان به فراخوانی این تکنیک‌های VRT در این فصل ادامه خواهیم داد.

۳-۱-۲- بهبود عملکرد سخت افزار

زمان محاسبات می تواند به سادگی با استفاده از کامپیوترهای سریع تر و یا با پیاده سازی فرآیندهای محاسبه موازی در ایستگاه های کاری چند هسته ای و خوشه های محاسبات کاهش یابد. با این حال، این روش ها VRT نامیده نمی شوند، چرا که آن ها الگوریتم MC زمینه ای را سریع تر نمی سازند. آن ها فقط استفاده از یک نرم افزار معین بر روی سخت افزاری با عملکرد بهتر استفاده می کنند. به خصوص، موازی سازی محاسبات MC آسان است. بنابراین، انتظار می رود که هر الگوریتم جدی MC به طور کامل از مزایای سخت افزار محاسبات کنونی استفاده خواهد کرد.

۳-۱-۳- روش های تقریبی

در اکثر موارد، زمان محاسبه در هر تاریخچه با ایجاد تقریب کاهش می یابد. حتی اگر نتیجه نهایی به روشی مهم تحت تأثیر قرار نگیرد، در واقع، روش های تقریبی به VRT ها تعلق ندارند. مطابق تعریف اصلی آن، VRT ها نباید نتیجه مورد انتظار یک شبیه سازی بی نهایت طولانی MC را تحت تأثیر قرار دهند. با این حال، در ادبیات، روش های تقریبی اغلب به عنوان VRT ذکر می شوند. برخی از آن ها، برای مثال، روش تاریخچه فشرده (یا خلاصه) (CHT)، امروزه اساس تقریباً تمام محاسبات MC در پرتودرمانی را تشکیل می دهند. بنابراین، در این فصل، روش های تقریبی نیز بحث خواهند شد. ممکن است بین تکنیک های کاهش واریانس حقیقی (RVRT) و تکنیک های کاهش واریانس تقریبی (AVRT) تمایز قائل شویم.

واضح است که برخی از تکنیک ها AVRT هستند، به عنوان مثال، تقریب کم کردن سرعت پیوسته (CSDA) انتقال الکترون. از سوی دیگر، تصمیم گیری در مورد اینکه آیا یک روش معین متعلق به RVRT ها است یا متعلق به AVRT ها، دشوار است. گاهی اوقات، این تصمیم صرفاً بر اساس درک مستقیم است و یا به صورت عددی نشان داده می شود که برخی از تکنیک ها RVRT هستند. با این حال، آزمایش های عددی در این رابطه قابل بحث هستند، چون نتایج هر دو، RVRT و AVRT، نباید به طور قابل توجهی تحت تأثیر قرار گیرد. تنها با اثبات ریاضی، می توان نشان داد که یک تکنیک قطعی RVRT است. این اثبات ها می توانند پیچیده باشند، به عبارت دیگر، آن ها مقدار قابل توجهی از فضای این فصل را پوشش خواهند داد. از این رو، آن ها در اینجا نشان داده

نخواهند شد. این کتاب بر استفاده از تکنیک‌های MC در پرتودرمانی، تمرکز دارد. در هر دو نوع VRT، این بدان معنی است که آن‌ها باید شبیه‌سازی را بدون از دست دادن قابل توجهی دقت عددی، سرعت بخشند. بنابراین، معقول به نظر می‌رسد که در بخش‌های ذیل برای همه مواردی که VRT خاص یک AVRT یا RVRT است، اثبات نکنیم.

۳-۱-۴- انتقال الکترونی تاریخچه فشرده

اکثر الگوریتم‌های MC در RT، انتقال الکترون را با استفاده از CHT انجام می‌دهند. CHT یک AVRT است، و شامل تقریب می‌باشد و انتقال الکترون MC را در مقایسه با شبیه‌سازی آنالوگ به طور قابل توجهی تسریع می‌بخشد. به دلیل ماهیت اساسی آن، توضیح عمقی CHT در فصل ۲ ارائه شده است.

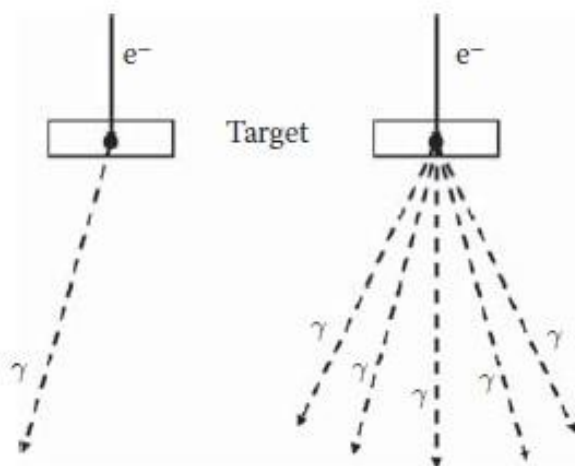
۳-۲- تکنیک‌های پایه کاهش واریانس

در این بخش، VRT‌های پایه مطرح می‌شوند. آن‌ها مقدمه‌ای بر روش‌های عنصری ارائه می‌کنند که زمان شبیه‌سازی MC چگونه می‌تواند به طور مؤثر کاهش یابد و برای جلوگیری از اریب نتایج چه چیزی باید در نظر گرفته شود. برای تشکیل یک VRT پیشرفته‌تر، برخی از VRT‌های پایه می‌توانند ترکیب شوند (بخش ۳-۳ را ببینید).

۳-۲-۱- تقسیم ذرات یکنواخت

مثال معمول برای توضیح کاهش واریانس روش تقسیم ذرات است. این روش می‌تواند برای فوتون‌ها و همچنین برای ذرات باردار استفاده شود. شکل ۳-۱ روش تقسیم اعمال شده به فوتون‌های تابش ترمزی را نشان می‌دهد. طرح سمت چپ نشان‌دهنده شبیه‌سازی MC یک الکترون است که به هدف یک شتاب‌دهنده خطی پزشکی (LINAC) برخورد کرده و یک فوتون تابش ترمزی تولید می‌کند. برای سادگی، ما تنها مورد فوتون تابش ترمزی را در نظر می‌گیریم، چون به طور کلی، چندین فوتون می‌توانند با استفاده از یک الکترون در هدف تولید شوند. در یک شبیه‌سازی MC "عادی" (آنالوگ نیز نامیده می‌شود)، فوتون وزن آماری $w=1$ را حمل می‌کند. این بدان معنی است که یک فوتون واقع‌بینانه توسط یک فوتون در شبیه‌سازی نشان داده می‌شود. طرح سمت راست نشان‌دهنده موردی با عامل تقسیم ذرات $N_{split}=5$ است، یعنی به جای

یکی، پنج فوتون مستقل تابش ترمزی از توزیع تولید تابش ترمزی یکسان الکترون معینی نمونه گیری می شود. VRT در صورتی تقسیم تابش ترمزی یکنواخت (UBS) نامیده می شود که تمام فوتون ها با غیر وابستگی احتمال یکسان انرژی و جهت آن ها ایجاد می شوند. سپس، هر یک از پنج فوتون باید یک وزن آماری $w=1/N_{\text{split}}=0.2$ را حمل کنند، یعنی، یک فوتون واقع بینانه در شبیه سازی توسط پنج فوتون نشان داده می شود تا کل وزن را حفظ کند.



شکل ۳-۱- نمایش شماتیک شبیه سازی MC یک الکترون تولید فوتون تابش ترمزی در هدف یک شتاب دهنده خطی پزشکی (سمت چپ). در سمت راست، پنج فوتون تابش ترمزی به جای یکی با استفاده از روش تقسیم، هر یک با وزن آماری $w=1/5$ ایجاد شده است.

دلیل تقسیم تابش ترمزی به هدف شبیه سازی MC ارائه می شود. دو نمونه عبارت اند از: (۱) طیف تابش ترمزی هدف LINAC باید محاسبه شود یا (۲) جزء هدف بخشی از یک شبیه سازی سر LINAC کامل با هدف نهایی محاسبه دوز در فانتوم و یا بیمار است. در هر دو مورد، ما به تعداد زیاد فوتون ها برای افزایش دقت آماری با کاهش واریانس علاقه مند هستیم. روش تقسیم، زمان مورد نیاز برای ایجاد پنج فوتون در مثال شکل ۳-۱ را کاهش می دهد، چون شبیه سازی انتقال چهار الکترون اضافی ذخیره می شود. به عبارت دیگر، در طول شبیه سازی آنالوگ MC، زمان زیادی برای انتقال الکترون "هدر" خواهد شد. با این حال، تقریباً همه الکترون ها در داخل هدف جذب می شوند، یعنی، علاوه بر ایجاد تابش ترمزی، آن ها واقعاً به نتیجه نهایی کمک نمی کنند.

تقسیم ذرات به عنوان یک RVRT شناخته شده است، هر چند اثبات در اینجا نشان داده نمی‌شود. در حد اعداد تاریخچه بی‌نهایت (تعداد الکترون‌هایی که به هدف برخورد می‌کنند)، نتایج حاصل از MC آنالوگ و شبیه‌سازی‌ها با تقسیم فوتون یکسان هستند. این واقعیت آشکار نیست و می‌تواند در صورت پیاده‌سازی نشدن صحیح، اشتباه باشد. یک پیاده‌سازی نادرست به وجود خواهد آمد، برای مثال، در صورتی که انرژی الکترون با مجموع وزنی همه انرژی‌های فوتون تقسیم کاهش یابد (پنج انرژی در شکل ۳-۱). چنین رویکردی به شکل طیف انرژی (همچنین به عنوان سرگردانی شناخته می‌شود) الکترون پس از اولین رویداد تابش ترمزی تعصب خواهد داشت. از آنجا که این الکترون‌ها می‌توانند فوتون‌های ثانویه و تابش ترمزی بیش‌تری تولید کنند، همه نتایج دیگر به واسطه این اشتباه تحت تأثیر قرار خواهند گرفت. برای اجتناب از این اثر، معمولاً انرژی الکترون فقط با انرژی یک فوتون که به صورت دلخواه از تمام فوتون‌های تقسیم انتخاب شده است، کاهش می‌یابد. بدیهی است، با استفاده از این روش انرژی در داخل تاریخچه حفظ نمی‌شود. از سوی دیگر، قانون حفاظت انرژی هنوز به طور متوسط برای اعداد تاریخچه بزرگ اجرا می‌شود.

مهم است توجه داشته باشید، که نباید MC آنالوگ و تقسیم و یا تقسیم با اعداد بسیار متفاوت تقسیم از روی بی‌فکری در یک شبیه‌سازی ترکیب شوند. این می‌تواند فوتون‌های وزن آماری بسیار مختلف ایجاد کند، یعنی، فوتون‌های "چاق" با وزن بالا و فوتون‌های "ناچیز" با وزن کم. تنها فوتون‌های "چاق" به دقت آماری نتیجه نهایی کمک خواهند کرد و زمان برای شبیه‌سازی فوتون "ناچیز" به هدر خواهد رفت. پیاده‌سازی هوشمند هر VRT می‌تواند ذرات یک وزن آماری بسیار متفاوت را در یک حالت میانی تولید کند؛ با این حال، زمانی که خواص ذرات برای نتیجه محاسبه نهایی تجزیه و تحلیل شده و یا در یک شبیه‌سازی دیگر پردازش می‌شود، در صورتی کارآمدترین است که وزن آماری تمام ذرات مشابه باشد.

۳-۲-۲- رولت روسی

رولت روسی می‌تواند به عنوان مخالف تقسیم ذرات در نظر گرفته شود. در اغلب موارد، هر دو روش در ترکیب استفاده می‌شوند. در یک روش رولت روسی، برای یک نوع ذره قطعی (فوتون یا ذرات باردار)، یک احتمال بقا $p_{survive}$ با $1 \ll p_{survive}$ تعریف می‌شود. اگر یک ذره از این نوع در شبیه‌سازی MC ایجاد شود، عدد تصادفی ξ از توزیع یکنواخت در بازه $[0, 1]$ نمونه‌گیری می‌شود. ذره در صورتی باقی می‌ماند که $\xi < p_{survive}$ باشد، در غیر این صورت از بین می‌رود، یعنی، شبیه‌سازی این ذرات متوقف می‌شود. برای باقی ماندن در مطابقت با واقعیت، وزن آماری ذرات باقیمانده باید با عامل $w=1/p_{survive}$ افزایش یابد.

رولت روسی می‌تواند به صورت مؤثر اعمال شود، به عنوان مثال، طی شبیه‌سازی یک هندسه سر LINAC در ترکیب با روش تقسیم بیان شده در بخش ۳-۲-۱. فوتون‌های تابش ترمزی با وزن $w=1/N_{split}$ ایجاد شده در هدف می‌تواند به موازی‌ساز ثانویه LINAC برخورد کند. یک تعامل ممکن کامپتون در مواد جذب با Z بالا است که منجر به ایجاد الکترون‌های کامپتون با وزن $w=1/N_{split}$ می‌شود. اکثر این الکترون‌ها بدون تولید هیچ تابش (تابش ترمزی) ثانویه جذب می‌شوند و زمان محاسبه برای انتقال این الکترون‌ها در صورتی به هدر خواهد رفت که همه آن‌ها شبیه‌سازی شده باشند. بنابراین، کشتن این الکترون‌ها با احتمال $1-p_{survive}=1-1/N_{split}$ معقول به نظر می‌رسد. وزن الکترون‌های باقیمانده باید توسط عامل $1/p_{survive}=N_{split}$ افزایش یابد، یعنی، در نهایت آن‌ها وزن $w=1$ را مانند الکترون‌های اصلی حمل می‌کنند که به هدف تابش ترمزی برخورد می‌کنند. پس از آن، استفاده از تقسیم دوباره در صورتی می‌تواند مفید باشد که الکترون‌های کامپتون تابش ترمزی تولید کنند. با این حال، در این مورد، شبیه‌سازی این فوتون‌ها تنها در صورتی معقول به نظر می‌رسد که به منطقه مورد نظر (ROI) برسند. بنابراین، برخی روش‌های پیشرفته‌تر غیر از تقسیم یکنواخت باید روش انتخاب باشند (به عنوان مثال، بخش ۳-۳-۲ را ملاحظه کنید).

۳-۲-۳- رد محدود

الکترون‌های کامپتون ایجاد شده در مثال بخش ۳-۲-۲ نیز می‌تواند به جای رولت روسی با استفاده از رد محدود حذف شود. برای این VRT، کوتاه‌ترین فاصله از موقعیت ذرات باردار حاضر نسبت به مرز منطقه باید محاسبه شده و با حداکثر محدوده آن ذرات در مواد مناطق مقایسه شود. بنابراین، این روش تنها می‌تواند به ذرات با حداکثر محدوده قطعی وابسته به انرژی اعمال شود، یعنی، به ذرات باردار. اگر این محدوده کوچک‌تر از کوتاه‌ترین فاصله به مرز منطقه باد، ذره باردار هرگز نمی‌تواند منطقه حاضر را ترک کند و متوقف کردن شبیه‌سازی در اینجا مفید است.

بدیهی است، رد محدود یک AVRT است، زیرا تولید امکان‌پذیر فوتون‌های تابش ترمزی با این روش نادیده گرفته می‌شود و فوتون‌های دارای احتمال متناهی ترک منطقه موجود هستند. البته به صورت صحیح در نظر گرفتن این فوتون‌ها با اضافه کردن آن‌ها از طریق نمونه‌گیری از یک توزیع تقریبی، امکان‌پذیر است.

۳-۲-۴- افزایش سطح مقطع

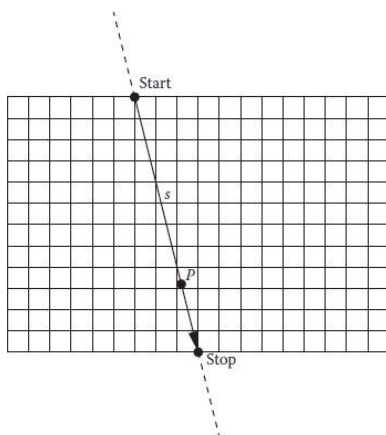
برای شبیه‌سازی یک اتاقک یونی و یا یک حفره هوا در آب با تمرکز بر انرژی جذب شده در هوا، افزایش مصنوعی کل سطح مقطع فوتون به واسطه برخی عوامل $N_{enhance}$ در یک منطقه از پیش تعریف شده در اطراف اتاقک و یا حفره، سودمند است. بنابراین، تعداد تعاملات فوتون به واسطه عامل $N_{enhance}$ افزایش می‌یابد که در آن منطقه باعث فلوننس الکترون افزایش یافته به همان نسبت می‌شود. برای حفظ یک شبیه‌سازی بی‌طرفانه، وزن همه ذرات ثانویه تولید شده در این برهم‌کنش‌ها باید توسط ضرب با عامل $w=1/N_{enhance}$ کاهش یابد.

۳-۲-۵- اجبار تعامل

در مقایسه با افزایش سطح مقطع و همچنین قابل اجرا تنها برای فوتون‌ها، روش اجبار تعامل، به صورت شماتیک در شکل ۳-۲ نشان داده شده است. این روشی است که می‌تواند برای یک موتور محاسبه دوز MC فوتون در برنامه‌ریزی درمان RT استفاده شود. در شکل ۳-۲، یک فوتون دریافتی به سطح شبکه محاسبه در نقطه اشاره شده به نام شروع برخورد می‌کند. سپس، در امتداد خط نشان داده شده با s تا نقطه تعامل ردیابی می‌شود. در بدترین حالت، این نقطه می‌تواند در

خارج شبکه محاسبه باشد، یعنی، پشت موقعیت توقف و فوتون به برجسب کمک نمی کند. بنابراین، زمان صرف شده در یافتن منابع فوتون و انتقال آن از طریق شبکه محاسبه هدر می رود. برای جلوگیری از هدر رفتن زمان محاسبه، فوتون می تواند مجبور به تعامل بین شروع و توقف شود.

اجبار تعامل در صورتی امکان پذیر است که تعداد میانگین طول مسیر فوتون آزاد $\Lambda = \sum_{Start}^{Stop} \mu_i S_i$ بین شروع و توقف بتواند به راحتی و سریع برای همه وکسل های عبوری i محاسبه شود. در اینجا، μ_i ضریب خطی میرایی در وکسل i است و S_i طول مرحله فوتون در وکسل i است. پس از آن، تعداد متوسط طول مسیر فوتون آزاد λ را می تواند از تابع توزیع انتخاب شود:



شکل ۳-۲- اجبار تعامل یک فوتون شبیه سازی شده در منطقه مورد نظر، یعنی، بین موقعیت های شروع و توقف. تعداد متوسط طول مسیر فوتون آزاد $\Lambda = \sum_{Start}^{Stop} \mu_i S_i$ بین شروع و توقف باید برای همه وکسل های عبوری i از پیش محاسبه شود. این می تواند وقت گیر باشد، چون به طور کلی، هر وکسل شامل یک محیط مختلف با ضریب میرایی متفاوت μ_i است.

$$p(\lambda) d\lambda = \frac{1}{1 - e^{-\Lambda}} e^{-\lambda} d\lambda$$

(3.3)

با λ محدود شده به بازه $[0, \Lambda]$. یعنی، با یک عدد تصادفی ξ با توزیع یکنواخت از بازه $[0, 1]$ ، تعداد متوسط طول مسیر فوتون آزاد λ به نقطه تعامل که با رابطه ذیل محاسبه می‌شود:

$$\lambda = -\ln\left[1 - \xi\left(1 - e^{-\Lambda}\right)\right] \quad (3.4)$$

سپس، فاصله تا نقطه تعامل P با ردیابی فوتون در امتداد خط s تا $s = \sum_{\text{Start}}^P \mu_i s_i$ مشخص می‌شود. اجبار فوتون به یک تغییر وزن فوتون با استفاده از عامل نیاز دارد:

$$w = 1 - e^{-\Lambda} \quad (3.5)$$

که در نتیجه، وزن فوتون کاهش می‌یابد.

به طور کلی، هر وکسل شامل یک محیط متفاوت با ضریب میرایی مختلف μ_i است. بنابراین، اجبار تعامل تنها در صورتی سودمند است که Λ بتواند به اندازه کافی سریع محاسبه شود. در غیر این صورت، بازده محاسبه MC به جای افزایش می‌تواند کاهش یابد.

۲-۳-۲-۶- تبدیل نمایی

تبدیل نمایی به شیوه‌ای مشابه با اجبار تعامل کار می‌کند. در اینجا، توزیع عمق نمایی فوتونها توسط عامل $F > 0$ کشیده شده و یا کوتاه می‌شود، یعنی، تعداد میانگین طول مسیر فوتون آزاد λ از توزیع نمونه‌گیری می‌شود:

$$p(\lambda)d\lambda = \frac{1}{F} e^{-\lambda/F} d\lambda \quad (3.6)$$

یک عدد تصادفی با توزیع یکنواخت ξ از بازه $[0, 1]$ تعداد متوسط طول مسیر فوتون آزاد λ تا نقطه تعامل را به واسطه رابطه زیر ارائه می‌کند:

$$\lambda = -F \ln(1 - \xi) \quad (3.7)$$

که در آن برای $F < 1$ ، λ کوتاه می‌شود، و برای $F > 1$ ، کشیده می‌شود. نمایی تبدیل به یک تغییر وزن فوتون با استفاده از عامل نیاز دارد:

$$w = Fe^{-\lambda(F-1)/F} = F(1-\xi)^{(F-1)/F} \quad (3.8)$$

که، وزن فوتون بسته به نتیجه λ یا عدد تصادفی ξ تغییر می‌کند. این VRT برای افزایش بهره‌وری محاسبه نزدیک به سطح (نقطه ورود فوتون) در هزینه بهره‌وری کاهش یافته در عمق بزرگ‌تر ($F < 1$) و یا بالعکس ($F > 1$) سودمند است.

۳-۲-۷- پیگردی Woodcock

ایده اصلی پیگردی Woodcock (همچنین روش تعامل ساختگی نامیده می‌شود)، همگن ساختن هندسه شبیه‌سازی ناهمگن با اضافه کردن یک سطح مقطع تعامل ساختگی به سطح مقطع کل در هر منطقه است. سطح مقطع ساختگی به روشی برای رسیدن به یک جمع مقطع ثابت برای تمام هندسه انتخاب می‌شود.

به عنوان مثال، برای پیگیری فوتون‌های انرژی E در شبکه مواد ناهمگن، ما باید حداکثر سطح مقطع کل $\mu_{\max}(E)$ را برای تمام هندسه شبیه‌سازی تعیین کنیم. سپس، در هر منطقه و یا هر وکسل با شاخص i ، سطح مقطع تعامل ساختگی به صورت زیر تعیین می‌شود:

$$\mu_{\text{fict}}^i(E) = \mu_{\max}(E) - \mu_{\text{tot}}^i(E) \quad (3.9)$$

به دلیل مستقل بودن سطح مقطع $\mu_{\max}(E)$ از موقعیت در هندسه، امکان ردیابی فوتون‌ها را بدون ردیابی اشعه فراهم می‌کند. به محض اینکه فوتون به سایت تعامل برسد، یک عدد تصادفی می‌تواند برای تعیین نوع تعامل، واقعی یا ساختگی استفاده شود. احتمالات برای تعاملات واقعی و ساختگی در هر وکسل با استفاده از روابط زیر بیان می‌شود:

$$P_{real}^i(E) = \frac{\mu_{tot}^i(E)}{\mu_{\max}(E)} \quad (3.10)$$

$$P_{fict}^i(E) = \frac{\mu_{fict}^i(E)}{\mu_{\max}(E)} \quad (3.11)$$

اگر یک تعامل واقعی نمونه‌گیری شود، شبیه‌سازی با تعیین نوع تعامل فوتون ادامه می‌یابد، به عنوان مثال، پراکندگی کامپتون و یا تولید زوج. به عبارت دیگر، هیچ تفاوتی نسبت به ردیابی MC متعارف وجود ندارد. با این حال، اگر یک تعامل ساختگی نمونه‌گیری شود، ردیابی فوتون اصلی با شروع از موقعیت حاضر بدون تغییر انرژی و جهت فوتون ادامه می‌یابد. یعنی، تعامل ساختگی هیچ اثری ندارد.

ردیابی Woodcock پیاده‌سازی شده با این روش به تنظیم وزن ذرات اولیه و ثانویه نیاز ندارد. با این حال، تغییر این VRT با معرفی تغییرات وزن بسته به هدف شبیه‌سازی امکان‌پذیر است. به عنوان مثال، به جای نمونه‌گیری هر دو تعامل واقعی و ساختگی، تنها فعل‌وانفعالات واقعی با احتمال $P=1$ نمونه‌گیری می‌شوند. در این مورد، وزن همه ذرات ثانویه تولید شده در طی این فعل‌وانفعالات باید توسط عامل کاهش یابد:

$$w = P_{real}^i(E) = \frac{\mu_{tot}^i(E)}{\mu_{\max}(E)} \quad (3.12)$$

در ترکیب با رولت روسی، اصلاحات وزن دیگر برای اطمینان از اینکه وزن آماری تمام ذرات نهایی قابل مقایسه است، امکان پذیر می باشد.

۳-۲-۸- نمونه گیری همبسته

برای مسئله محاسبه دوز در یک هندسه ناهمگن استفاده شده، نمونه برداری های همبسته را با توزیع دوز شناخته $D_{\text{hom}}(\vec{r})$ در فانتوم همگن آغاز می کند، به عنوان مثال، در آب. این می تواند یک توزیع دوز اندازه گیری شده باشد، اما همچنین می تواند یک توزیع دوز MC صاف محاسبه شده با دقت آماری بسیار بالا باشد. به عنوان مثال، این توزیع دوز می تواند، در حافظه کامپیوتر ذخیره شود. سپس الگوریتم محاسبه هم زمان دو توزیع دوز MC همبسته، یک توزیع $D_{\text{hom}}^c(\vec{r})$ در فانتوم آب همگن و توزیع دیگری $D_{\text{het}}^c(\vec{r})$ را در هندسه ناهمگن اجرا کند. همبسته بدان معنی است که دو شبیه سازی با استفاده از همان دنباله اعداد تصادفی انجام می شوند. برای سریع کردن این محاسبه، دو شبیه سازی با دقت آماری کم انجام می شوند، یعنی، با تعداد کمی تاریخچه.

شبیه سازی هم زمان برای تعیین توزیع عوامل اصلاح در هر و کسل مورد استفاده قرار می گیرد، که توسط نسبت دوز مشخص می شود:

$$C(\vec{r}) = \frac{D_{\text{hom}}(\vec{r})}{D_{\text{hom}}^c(\vec{r})} \quad (3.13)$$

سپس توزیع دوز نهایی در هندسه ناهمگن توسط رابطه زیر محاسبه می شود:

$$D_{\text{het}}(\vec{r}) = C(\vec{r}) D_{\text{het}}^c(\vec{r}) \quad (3.14)$$

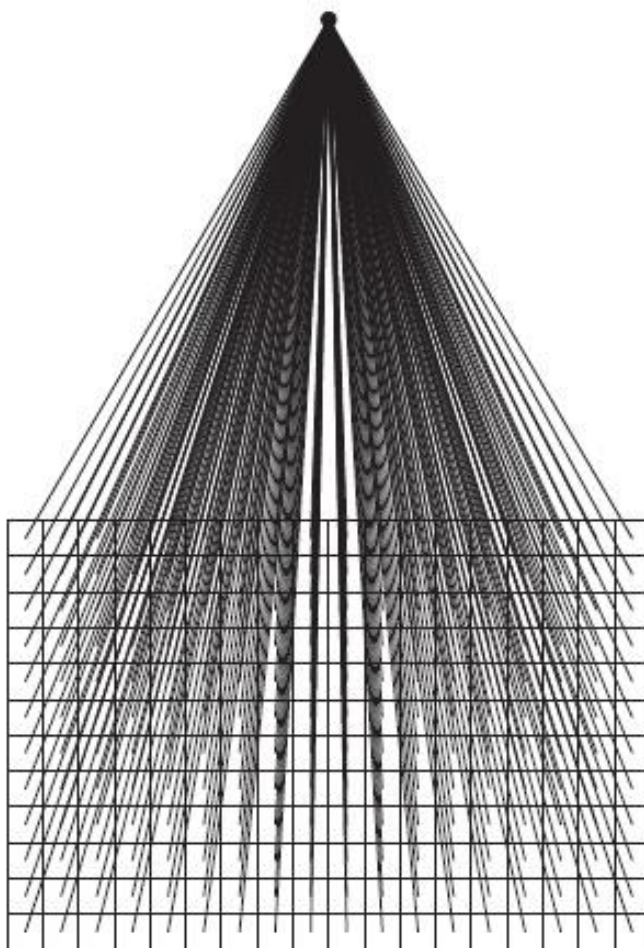
نشان داده شده است که این روش تنها در صورتی بسیار مفید است که هندسه ناهمگن بیش از حد متفاوت از هندسه همگن مربوطه نباشد، چون ناهمگونی قوی همبستگی بین دو شبیه سازی را از بین می برد.

این تکنیک همچنین می‌تواند به دو هندسه ناهمگن تعمیم داده شود در صورتی که یک راه‌حل دقیق برای یکی از هندسه‌ها شناخته شده باشد. یک نمونه محاسبه هم‌زمان دوز به حجم حفره هوا در آب با و بدون حضور مواد دیواره است.

۳-۲-۹- محاسبه اولیه تراکم تعامل اولیه

برای محاسبات دوز با یک مدل ساده از سر LINAC، به عنوان مثال، یک منبع نقطه، چگالی تعاملات فوتون اولیه می‌تواند در هر وکسل با انجام یک ردیابی اشعه فوتون اولیه، پیش محاسبه شود. این به صورت شماتیک در شکل ۳-۳ نشان داده شده است. سپس شبیه‌سازی MC پس از این مرحله پیش محاسبه با شبیه‌سازی شماره مربوطه فوتون ثانویه و ذرات باردار در هر وکسل شروع می‌شود. واریانس کاهش می‌یابد، چرا سایت‌های تعامل فوتون اولیه به صورت بهینه توزیع می‌شوند. تحقیقات نشان داده است که بهره‌وری می‌تواند با یک عامل در حدود ۲ با استفاده از این روش بهبود یابد.

نقطه ضعف اصلی این روش این است که کاربردپذیری کد را به منابع نسبتاً ساده محدود می‌کند. با این حال، موتورهای محاسبه دوز MC پیشرفته در RT، سر LINAC را با استفاده از شبیه‌سازی‌های کامل، با استفاده از مدل‌های منبع مجازی تعمیم یافته، و یا ترکیبی از هر دو مدل‌سازی می‌کنند. بنابراین، محاسبه اولیه چگالی تعامل اولیه برای این نوع از کاربردهای MC امکان‌پذیر نیست.



شکل ۳-۳- پیش محاسبه چگالی تعامل فوتون اولیه در هر وکسل از شبکه محاسبه با انجام یک ردیابی اشعه اولیه بین هر وکسل و منبع فوتون. MC با شبیه‌سازی شماره مربوطه فوتون ثانویه و الکترون‌های گسیل در هر وکسل شروع می‌کند.

۳-۲-۱۰- اعداد شبیه تصادفی

راه حل مسئله انتقال در فیزیک پرتودرمانی مربوط به یکپارچه‌سازی در یک فضای پارامتر با تعداد نامحدودی از ابعاد است. اگر این به صورت عددی با استفاده از روش MC انجام شود، ابعاد مسئله باید به تعداد متناهی از ابعاد محدود شوند، برای مثال، n بعد. با استفاده از یک مولد عدد تصادفی، نمونه‌برداری بردارهای تصادفی در این فضای n بعدی با تولید دنباله‌ای از n عدد، تشکیل یک

n تایی با این روش، امکان‌پذیر است. به طور کلی، یک n تایی مربوط به یک تاریخچه ذرات شبیه‌سازی MC است. شبیه‌سازی N تاریخچه ذرات متناظر با تولید دنباله‌ای از N تا n تایی است. اگر یک مولد عدد شبه تصادفی نرمال با کیفیت خوب برای این منظور استفاده شود، توزیع n تایی کم‌تر از حد مطلوب است، یعنی، خطای آماری نتیجه به صورت $1/\sqrt{N}$ کاهش می‌یابد.

دنباله‌ای از n تایی که به طور یکنواخت فضای n بعدی را بیش از اعداد شبه تصادفی ناهمبسته پر می‌کند، توالی شبه تصادفی نامیده می‌شود. این دنباله‌ها برای بهبود اساسی بهره‌وری یکپارچه‌سازی در انواع خاصی از مسائل شناخته شده هستند. با استفاده از اعداد شبه تصادفی، خطای آماری نتیجه در صورتی می‌تواند به صورت مجانبی $1/N$ کاهش یابد که n تایی شبه تصادفی به صورت بهینه توزیع شود. انواع مختلفی از اعداد شبه تصادفی وجود دارد؛ نمونه‌ها عبارت‌اند از دنباله Halton یا دنباله Sobol (Press et al., 1992).

مشابه اعداد شبه تصادفی، اعداد شبیه تصادفی واقعاً تصادفی نیستند. با این حال، در مقابل اعداد شبه تصادفی، اعداد شبیه تصادفی نمی‌توانند به صورت ناهمبسته در نظر گرفته شوند. به عنوان مثال، دنباله Sobol در یک بعد با $0.5, 0.75, 0.25, 0.375, \dots$ آغاز می‌کند، یعنی، تلاش می‌کند تا بازه $[0, 1]$ را به روشی مطلوب پر کند. روش برای مورد یک‌بعدی واضح است، اما برای ابعاد بالاتر پیچیده می‌شود ($0.5, 0.75, 0.25, 0.375, \dots$).

۳-۳- تکنیک‌های پیشرفته کاهش واریانس

VRT‌های پیشرفته به طور کلی با ترکیب VRT‌های مختلف پایه تشکیل می‌شوند. نشان داده شده است که برخی از آنها برای محاسبات MC در RT بسیار مؤثر هستند، به عنوان مثال، برای محاسبات دوز. آنها به زودی در این بخش مطرح می‌شوند.

۳-۳-۱- تقسیم انتخابی تابش ترمزی

با UBS (بخش ۳-۲-۱)، عامل تقسیم N_{split} در سراسر شبیه‌سازی ثابت است، یعنی، مستقل از جهت الکترون تولید فوتون تابش ترمزی است. با تقسیم تابش ترمزی انتخابی (SBS) (Sheikh-) (Bagheri et al., 2006)، $N_{split}(\theta)$ تابعی از متغیر θ ، زاویه بین جهت حاضر الکترون و محور پرتو مرکزی. از آنجا که فوتون‌های تابش ترمزی نسبت به یک جهت نوک تیز روبه‌جلو هستند که تنها کمی از جهت الکترون اولیه متفاوت است، استفاده از عوامل تقسیم کوچک‌تر $N_{split}(\theta)$ با افزایش θ ، عاقلانه است. حداکثر باید در $\theta = 0$ و حداقل در $\theta = 180^\circ$ باشد. اکثر فوتون‌های انتقال یافته با زوایای بزرگ فقط در کولیماتورهای اولیه یا ثانویه سر LINAC جذب می‌شوند و زمان محاسبه آن‌ها به هدر خواهد رفت. SBS این اتلاف زمان را کاهش می‌دهد. فوتون‌ها با شانس بهتر برای رسیدن به ROI با احتمال بالاتر با استفاده از SBS ایجاد می‌شوند.

با این حال، نقطه‌ضعف جدی این روش وجود دارد؛ آن یک توزیع غیریکنواخت از وزن آماری معرفی می‌کند:

$$w(\theta) = \frac{1}{N_{split}(\theta)} \quad (3.15)$$

در حالی که θ است زاویه فوتون نیست؛ زاویه الکترون اصلی است. این بدان معنی است که فوتون‌ها در یک مکان امتیازبندی کوچک خاص می‌توانند وزن‌های مختلفی داشته باشند. این واریانس را در این مکان امتیازبندی تحت تأثیر قرار می‌دهد و افزایش بهره‌وری نهایی روش بسیار کم‌تر از حد انتظار است. SBS بهره‌وری را با عامل ۲-۳ در مقایسه با UBS بهبود می‌بخشد (Kawrakow et al., 2004).

۳-۳-۲- تقسیم جهتی تابش ترمزی

معایب SBS با استفاده از روش تقسیم جهتی تابش ترمزی (DBS) حذف می‌شوند. برخلاف UBS و SBS، DBS یک الگوریتم پیچیده است. از این رو، انتشار اصلی و سیستماتیک Kawrakow et al. (2004) در صورتی اشاره می‌شود که خواننده به جزئیات این روش علاقه‌مند باشد. در اینجا، تنها خلاصه‌ای ارائه خواهد شد.

DBS (به عنوان UBS) از یک عامل ثابت تقسیم تعریف شده توسط کاربرد N_{split} برای تولید تابش ترمزی استفاده می‌کند. پس از آن، الگوریتم جهت فوتون‌های تولید شده را تجزیه و تحلیل می‌کند. آن‌ها همیشه انتقال می‌یابند، در صورتی که به ROI هدایت شوند. اگر نه، رولت روسی (بخش ۳-۲-۲ را ببینید) با احتمال بقای $p_{survive}=1/N_{split}$ اجرا می‌شود. بنابراین، فوتون‌های هدایت شده به ROI، وزن $w=1/N_{split}$ را حمل می‌کنند. فوتون‌ها با هدف دور شدن از ROI، وزن $w=1$ را حمل می‌کنند. زمان محاسبه اضافی در صورتی می‌تواند حفظ شود که وابستگی جهتی فوتون‌ها از قبل به واسطه اصلاح هوشمند سطح مقطع تولید تابش ترمزی محاسبه شود (Kawrakow et al., 2004).

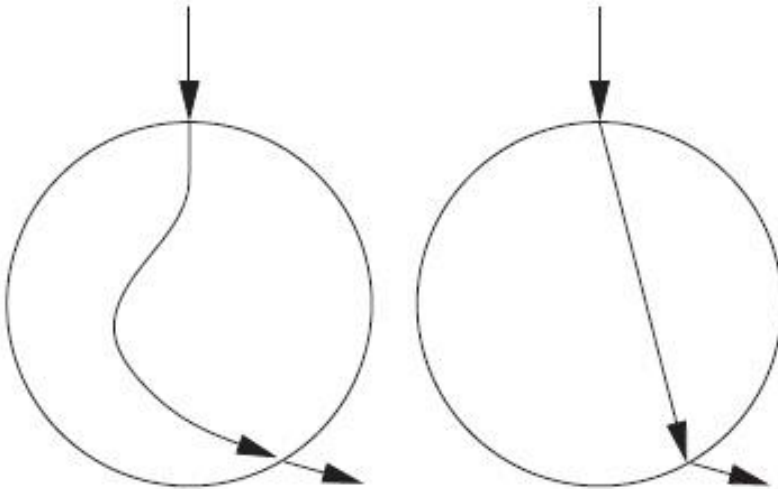
با ترکیب بیش تر تقسیم و رولت روسی، با پردازش ذرات "چاق" و "ناچیز" به صورت متفاوت در سراسر بقیه شبیه‌سازی و همچنین با درمان فوتون‌ها در مواد گاز و با چگالی بالاتر به صورت متفاوت، می‌تواند تضمین شود که تمام فوتون‌ها در داخل ROI "ناچیز" خواهند بود، یعنی وزن $w=1/N_{split}$ خواهند داشت و موارد خارج از ROI با وزن $w=1$ "چاق" خواهند بود.

اشکال این، پیاده‌سازی پیش فرض DBS است که همه الکترون‌ها "چاق" هستند. هنگامی که آن‌ها به نتیجه کمک می‌کنند، برای مثال، برای محاسبه دوز، الکترون‌ها به شیوه‌ای منفی واریانس را تحت تأثیر قرار خواهند داد. برای این منظور، یک DBS با تقسیم الکترون در دسترس است. این روش تضمین می‌کند که الکترون‌هایی که به ROI می‌رسند، "ناچیز" هستند؛ با این حال، بهره‌وری محاسبه کلی نسبت به DBS پیش فرض کاهش می‌یابد.

۳-۳-۳- ماکرو مونت کارلو

ماکرو مونت کارلو (MMC) مبتنی بر این فرض است که زمان شبیه‌سازی می‌تواند با استفاده از نتایج از قبل محاسبه شده کاهش یابد. یکی از این تکنیک‌های پیش محاسبه به منظور محاسبه دوز در برنامه‌ریزی درمان RT پرتوهای الکترونی، MMC نامیده می‌شود (Neuenschwander and Born, 1992). همان‌طور که در شکل ۳-۴ نشان داده می‌شود، این تکنیک مبتنی بر توزیع شار پیش محاسبه شده در سطح کره برای الکترون‌هایی است که به کره برخورد می‌کنند. یک الگوریتم MC همه‌منظوره می‌تواند جهت محاسبه توزیع برای الکترون‌های دریافتی انرژی‌های مختلف و همچنین کره‌ها با قطرهای مختلف و حاوی مواد مختلف، مورد استفاده قرار بگیرد. طرح سمت چپ در شکل ۳-۴ یک شبیه‌سازی MC "کامل" مسیر الکترون را در چنین کره همگنی به صورت شماتیک نشان می‌دهد. با این پیش شبیه‌سازی، توزیع نقاط خروج، زوایا و انرژی‌ها محاسبه شده و به صورت تابعی از شعاع کره، مواد و انرژی الکترون اولیه ذخیره می‌شوند.

محاسبه دوز با استفاده از هندسه بیمار با تجزیه و تحلیل اطلاعات توموگرافی کامپیوتری (CT) و پردازش شبکه محاسبه آغاز می‌شود. هر وکسل با یک ماده مشخص و قطر کره قطعی، متناظر با فاصله تا تغییرات مواد، اختصاص می‌یابد. در مناطق همگن، کره‌ها با قطرهای بزرگ‌تر می‌توانند مورد استفاده قرار بگیرند. در مناطق با نوسانات چگالی قوی، قطرهای کوچک‌تری باید به وکسل‌ها اختصاص داده شود. زمانی که یک الکترون به شبکه محاسبه برخورد می‌کند، شعاع کره و مواد بر اساس نتیجه پیش‌پردازش تعیین می‌شود. پارامترهای الکترونی که کره را ترک می‌کند، به صورت تصادفی از توزیع فلوئنس ماکروسکوپی از قبل محاسبه شده انتخاب می‌شود، یعنی، الکترون به طور مستقیم از ورود به نقطه خروج کره می‌پرد (طرح سمت راست شکل ۳-۴ را ببینید). از دست دادن انرژی در کره برای محاسبه دوز جذبی در هر وکسل مورد استفاده قرار می‌گیرد.



شکل ۳-۴- اصل مونت کارلو کلان. طرح سمت چپ یک شبیه‌سازی MC "کامل" مسیر الکترون در یک کره همگن با قطر قطعی را نشان می‌دهد. تعداد زیادی از الکترون‌هایی که به آن کره‌ها برخورد می‌کنند، پیش محاسبه می‌شوند و توزیع نقاط خروج، زوایا و انرژی به عنوان تابعی از شعاع کره، مواد و انرژی الکترون اولیه ذخیره می‌شود. در طول یک محاسبه دوز MC، با استفاده از هندسه بیمار، این توزیع‌های ماکروسکوپی برای پرش مستقیم پرش از نقطه ورود به نقطه خروج مورد استفاده قرار می‌گیرد (طرح سمت راست).

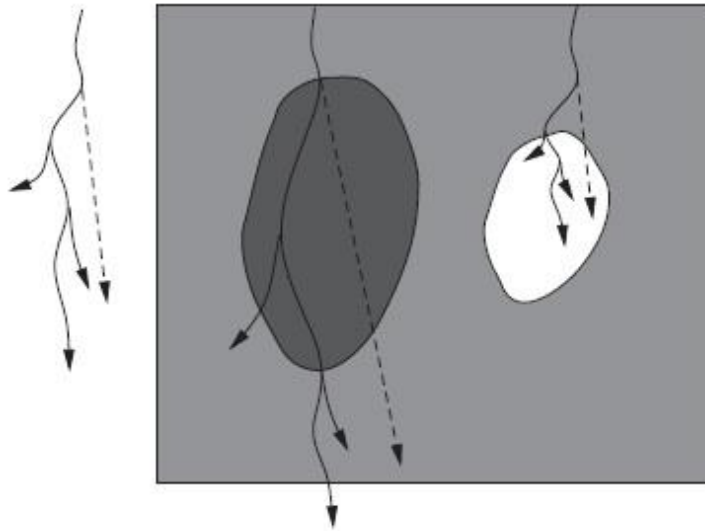
فرآیند با تعیین پارامترهای جدید کره برای الکترون رهاکننده کره قدیمی همچنان ادامه دارد. این تا زمانی تکرار می‌شود که تاریخچه کل الکترون شبیه‌سازی شده و انرژی الکترون اولیه مصرف شود.

در مقایسه با MC معمولی، MMC تا حدودی سریع‌تر است. با این حال، یکی از معایب آن این است که تنها سرعت انتقال الکترون می‌واند افزایش داده شود. این بدان معنی است که MMC نمی‌تواند به صورت مؤثر به پرتوهای فوتونی اعمال شود.

۳-۳-۴- تکرار تاریخ

تکنیک دیگر با بازیافت نتایج شبیه‌سازی، تکرار تاریخ نامیده می‌شود. این VRT، که به صورت شماتیک در شکل ۳-۵ نشان داده شده است، در اصل برای افزایش سرعت محاسبات دوز MC برای پرتوهای الکترونی در RT توسعه یافته است. تکرار تاریخ الکترون بر اساس تاریخ‌های الکترون کامل از پیش محاسبه شده در فانتوم آب همگن اندازه بی‌نهایت است. نمونه‌ای از چنین تاریخ از پیش محاسبه شده در شکل ۳-۵ نشان داده می‌شود که داخل کادر مشکی قرار داده شده است. پیش محاسبه شده بدان معنی است که تمام پارامترهای این تاریخ (طول گام تاریخ فشرده، زوایای پراکندگی چندگانه، از دست دادن انرژی، پارامترهای ذرات ثانویه) برای استفاده مجدد ذخیره می‌شوند.

در سمت راست شکل ۳-۵، تاریخ برای هندسه بیمار واقعی $N_{\text{repeat}}=2$ بار، با شروع در موقعیت‌های متفاوت و با جهت‌های مختلف در سطح ماتریس محاسبه، بکار گرفته می‌شود. در واقع، N_{repeat} بهینه به اندازه میدان الکترونی بستگی دارد. افزایش بهره‌وری بهینه (به طور تقریبی یک عامل از ۲) با حدود یک تکرار در هر ۵ سانتی‌متر مربع از این میدان به دست می‌آید، یعنی، برای یک میدان الکترونی $10 \times 10 \text{ cm}^2$ ، تعداد تکرار باید حدود $N_{\text{repeat}}=20$ باشد. اگر N_{repeat} کوچک‌تر باشد، پتانسیل تکرار تاریخ به طور کامل مورد بهره‌برداری قرار نمی‌گیرد. اگر N_{repeat} خیلی بزرگ باشد، متوسط فاصله بین دو تاریخ همسایه کوچک می‌شود و واریانس توسط همبستگی‌های بین این تاریخ‌های همسایه تحت تأثیر قرار می‌گیرد.



شکل ۳-۵- تکرار تاریخ الکترونی. تاریخ الکترون در یک فانتوم همگن آب با اندازه بی‌نهایت شبیه‌سازی می‌شود و تمام پارامترها (طول گام، زوایای پراکندگی، تلفات انرژی و پارامترهای ذرات ثانویه) برای استفاده مجدد در شبیه‌سازی واقعی ذخیره می‌شود (سمت چپ). در طرح سمت راست، این تاریخ چندین بار به هندسه بیمار حاضر و با مقیاس‌گذاری تمام پارامترها بسته به محیط و چگالی جرم در هر وکسل اعمال می‌شود.

پیش محاسبه می‌تواند از قبل (به عنوان مثال، با استفاده از یک الگوریتم MC همه‌منظوره) برای داده‌های بزرگ تاریخ الکترون در آب انجام می‌شود. سپس، تمام پارامترهای همه تاریخچه‌ها برای استفاده در محاسبه دوز باید در یک پایگاه داده ذخیره شود. در روش دوم، یک تاریخ در آب در طول محاسبه دوز بلافاصله قبل از این شبیه‌سازی می‌شود که N_{repeat} بار به هندسه بیمار اعمال شود. پس از تکرار این تاریخ، حافظه مربوطه پاک شده و تاریخچه بعدی در آب می‌تواند شبیه‌سازی شده و به بیمار اعمال شود. این روش دوم امکان شبیه‌سازی به تعداد دلخواه از تاریخ ذرات را فراهم می‌کند و واریانس نهایی دوز می‌تواند به اندازه مورد نظر کوچک شود. از سوی دیگر، روش اول توسط تعدادی از تاریخچه‌های از پیش تعیین شده در پایگاه داده محدود شده است.

فوتون‌های تابش ترمزی به طور کلی در تکرار گنجانده نمی‌شوند. آن‌ها در جنبش شبیه‌سازی شده و با رولت روسی کشته می‌شوند و یا با استفاده از انرژی جنبشی آزاد شده در تقریب جرم واحد (KERMA) منتقل می‌شوند.

برای صحیح در نظر گرفتن ناهمگنی، هنگامی که به هندسه بیمار اعمال شد، تاریخ در آب باید با مقیاس گذاری پارامترهای ذخیره شده بسته به محیط، قدرت توقف، قدرت پراکندگی و چگالی جرم در هر وکسل تنظیم شود. به طور عمده طول گام الکترون و زوایای پراکندگی چندگانه، مقیاس گذاری می شوند.

یکی از الزامات مهم تکرار تاریخ این است که تاریخ باید مقیاس پذیر باشد. مقیاس پذیری می تواند تضمین شده باشد، به عنوان مثال، اگر تمام پارامترهای انتقال، مانند قدرت توقف و پراکندگی، این گونه تقریب زده شوند، داریم:

$$S^T(M, E) = f_c^T(M) f_0^T(E) \quad (3.16)$$

این بدان معنی است که هر تابع پارامتر انتقال از نوع T که به محیط M و انرژی الکترون E بستگی دارد، به عنوان محصولی از یک تابع اصلاح بسته به رسانه و تابع دیگر بسته به انرژی، تقریب زده می شود. نشان داده شده است که این برای انواع متفاوت بافت انسان، از جمله برخی از مواد فانتوم مانند آب با دقت ۱-۲٪ امکان پذیر است. با استفاده از این فاکتورگیری و بدون از دست دادن بیش تر کلیت، یک محیط مرجع می تواند انتخاب شود. در اغلب موارد، این آب است، یعنی، برای $f_0^T(E)$ پارامتر انتقال مربوطه در آب انتخاب می شود:

$$f_0^T(E) = S^T(H_2O, E) \quad (3.17)$$

در نتیجه، به دست می آوریم:

$$S^T(M, E) = f_c^T(M) S^T(H_2O, E) \quad (3.18)$$

به عنوان مثال، اگر S^T قدرت توقف برخورد خطی باشد $dE/dx = S^{coll}$ ، برای از دست دادن انرژی بی‌نهایت کوچک معین dE ، طول گام dx طبق از دست دادن برخورد توسط رابطه زیر مقیاس گذاری می‌شود:

$$dx(M) = \frac{dE}{f_c^{coll}(M) S^{coll}(H_2O, E)} = \frac{dx(H_2O)}{f_c^{coll}(M)} \quad (3.19)$$

فاکتورگیری معادله ۳-۱۶ شرط لازم برای تاریخ‌های الکترون نیست تا مقیاس پذیر باشد. اصلاح $f_c^T(M)$ می‌تواند با وابستگی انرژی کمی تعمیم یابد. با این حال، تکرار تاریخ الکترون، برای مواد دلخواه کار نمی‌کند، به عنوان مثال، فلزات. بنابراین، این تکنیک یک AVRT است.

۳-۳-۵- انتقال هم‌زمان مجموعه ذرات

محدودیت‌های تکرار تاریخ می‌تواند با استفاده از انتقال هم‌زمان تکنیک مجموعه ذرات (STOPS) اجتناب شود. با STOPS، چندین ذره از نوع یکسان (الکترون، پوزیترون یا فوتون) و با همان انرژی به صورت هم‌زمان به عنوان مجموعه‌ای منتقل می‌شوند. همان‌طور با تکرار تاریخ، موقعیت‌ها، جهات و وزن‌های اولیه مختلف می‌باشند. در مقابل با تکرار تاریخ، تاریخ در یک مجموعه با طول مسیر و مقیاس گذاری زوایای پراکندگی به یکدیگر تبدیل نمی‌شود. با این حال، انواع پارامترها مستقل از مواد هستند، به طوری که آن‌ها یک بار برای همه ذرات در مجموعه نمونه گیری می‌شوند.

STOPS می‌تواند برای فوتون‌ها و همچنین برای ذرات باردار اعمال شود. در اینجا، الکترون‌ها برای بیان روش مورد استفاده قرار می‌گیرند، چون STOPS در اصل در VMC++ توسعه داده شده است (Kawrakow, 2000; Kawrakow and Fippel, 2000b) تا تکرار تاریخ الکترون را جایگزین کند. الکترون‌ها در اکثر الگوریتم‌های MC با استفاده از یک کلاس CHT II (برای اطلاعات بیشتر تر فصل ۲ را ببینید) با از دست دادن پیوسته انرژی منقل می‌شوند تا برخورد نیمه ارتجاعی و همچنین مولر گسسته (Bhabha برای پوزیترون) را مدل‌سازی کنند و تعاملات تابش ترمزی برای مدل‌سازی حوادث سخت کشش است. CHT اجازه می‌دهد تا فاصله بین

فعل و انفعالات گسسته به صورت از دست دادن انرژی بیان شود. برای مواد نوع M ، آن‌ها با استفاده از کل سطح مقطع تعامل گسسته (تعداد تعاملات) در هر واحد از دست دادن انرژی نمونه‌گیری می‌کنند:

$$\sum_E (M, E) = \frac{\sum (M, E)}{L(M, E)} \quad (3.20)$$

$\Sigma(M, E)$ سطح مقطع کل در واحد طول است و $L(M, E)$ قدرت توقف محدود است. یکی از مزایای $\Sigma_E(M, E)$ این است که تنها به نوع مواد M و همچنین به انرژی E و حداکثر سراسری Σ_E^{\max} برای همه M بستگی دارد و E می‌تواند به صورت مؤثر برای انجام ردیابی Woodcock مورد استفاده قرار بگیرد (بخش ۳-۲-۷). این بدان معناست که هندسه بر حسب تعداد فعل و انفعالات (ساختگی و یا واقعی) می‌تواند همگن شود و از دست دادن انرژی ΔE می‌تواند یک بار برای همه الکترون‌ها در درون مجموعه نمونه‌گیری شود. بنابراین، در پایان مرحله، همه الکترون‌ها دارای انرژی یکسان هستند.

طول گام هندسی بین نقاط ابتدایی و انتهایی به E و به قدرت توقف $L(M, E)$ بستگی دارد. آن‌ها به طور جداگانه برای هر الکترون در مجموعه محاسبه می‌شوند، چون $L(M, E)$ برای مواد مختلف متفاوت است. علاوه بر این، چندین خواص پراکندگی وابسته مواد هستند، که، زوایای پراکندگی چندگانه نیز به صورت جداگانه برای هر ذره در مجموعه نمونه‌گیری می‌شود.

در پایان مرحله، نوع تعامل (ساختگی، مولر، یا تابش ترمزی برای الکترون‌ها) باید برای هر ذره به صورت جداگانه تعیین شود؛ با این حال، عدد تصادفی یکسان می‌تواند برای همه ذرات استفاده شود. به دلیل وابستگی ضعیف مواد و خواص تعامل، باعث می‌شود که شانس بسیار بالای فعل و انفعالات یکسان، به ویژه برای بافت‌های بدن انسان به وجود آید. اگر نوع تعامل روش یکسانی برای همه ذرات باشد، مجموعه کامل زنده باقی می‌ماند. اگر ذرات با یک نوع تعامل مختلف وجود داشته باشد، مجموعه به زیرمجموعه‌ها تقسیم می‌شود و پس از این، زیرمجموعه‌های جدید به طور مستقل منتقل می‌شوند.

اگر تعامل گسسته خاص نمونه‌گیری شود، پارامترهای ذرات ثانویه از قبیل انرژی الکترون δ برای تعاملات مولر و یا انرژی فوتون برای تولید تابش ترمزی باید با استفاده از سطح مقطع دیفرانسیل تعیین شود. سطح مقطع مولر دیفرانسیل مستقل از مواد است و اگر ما همین را برای تابش ترمزی فرض کنیم، انرژی ذرات ثانویه می‌تواند یک بار برای کل مجموعه نمونه‌گیری شود. زاویه پراکندگی قطبی به صورت منحصر به فرد توسط سینماتیک فرآیندها تعیین می‌شود. زاویه پراکندگی همیشه یک توزیع یکنواخت را در بازه $[0, 360^\circ]$ دنبال می‌کند. این توزیع مستقل از نوع مادی است، یعنی، زاویه سمتی پراکندگی نیز می‌تواند یک بار برای مجموعه ذرات انتخاب شود. زیرا انرژی‌های یکسان برای ذرات ثانویه معادل درون مجموعه نمونه‌گیری می‌شوند، شبیه‌سازی با به پایان رسیدن از دست دادن انرژی ادامه یافته با استفاده دوباره از طرح Woodcock به تعامل بعدی می‌رود. تمام مراحل شبیه‌سازی تا زمانی تکرار می‌شود که کل انرژی مجموعه جذب شود و یا ذرات هندسه شبیه‌سازی را ترک نکرده باشند.

افزایش بهره‌وری STOPS تقریباً یک عامل از ۲ است؛ یعنی با تکرار تاریخ قابل مقایسه است. در مقابل با تکرار تاریخ، STOPS می‌تواند برای محیط‌های دلخواه استفاده شود.

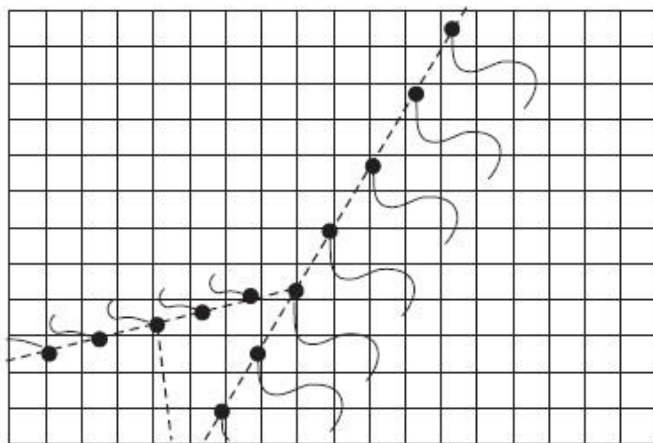
۳-۳-۶- عبور مداوم از مرز

الگوریتم‌های همه‌منظوره MC معمولاً شبیه‌سازی ذرات باردار را در رابط‌های مواد متوقف می‌کنند. این لازم است، زیرا فیزیک بنیادی فقط برای یک منطقه همگن متشکل از یک ماده خاص معتبر است. به خصوص، خواص پراکندگی چندگانه وابسته مادی هستند. بنابراین، نزدیک به مرز مواد، یک الگوریتم دقیق MC باید به حالت پراکندگی سوئیچ کند.

با این حال، این بسیار وقت‌گیر است و برای بسیاری از کاربردها، لازم نیست. برای محاسبه دوز در برنامه‌ریزی درمان RT، تکرار تاریخ (بخش ۳-۳-۴) می‌تواند بدون از دست دادن دقت استفاده شود. زاویه پراکندگی چندگانه و طول گام در آب پیش محاسبه شده و بسته به خواص مواد در هر وکسل مقیاس‌گذاری می‌شود. بنابراین، برای ذرات باردار امکان‌پذیر است که از مرزها به طور مداوم عبور کرده و آن‌ها را به صورت مؤثر مانند فوتون‌ها ردیابی کنند.

۳-۳-۷- انتقال چندین فوتون

در ترکیب با تقسیم فوتون و رولت روسی، تکرار تاریخ (بخش ۳-۳-۴) و STOPS (بخش ۳-۳-۵) نیز می‌تواند برای مونت کارلو فوتون استفاده شود. برای جلوگیری از سردرگمی با تکنیک‌های مختلف تقسیم مشخص شده در بخش‌های ۳-۳-۱، ۳-۳-۲ و ۳-۳-۳، در اینجا، ما این روش را انتقال چندین فوتون (MPT) می‌نامیم. روش در (Kawrakow and Fippel (2000a) برای سرعت بخشیدن به محاسبه دوز MC برای پرتوهای فوتونی در برنامه‌ریزی در مان RT مطرح شده است.



شکل ۳-۶- انتقال چندین فوتون ترکیبی از تقسیم فوتون، رولت روسی، و تکرار تاریخ الکترون یا STOPS است. به جای یک فوتون، تعداد متعددی از فوتون‌های یکسان (خطچین) در یک ردیابی اشعه در میان هندسه واقعی شبیه‌سازی می‌شود. فقط طول مسیر آزاد به نقطه تعامل به صورت متفاوت برای این فوتون‌ها نمونه‌گیری می‌شود. از آنجا که فرض می‌شود فعل‌وانفعالات یکسان هستند، برای همه الکترون‌های ثانویه (خطوط پر)، روش تکرار تاریخ (یا STOPS) می‌تواند استفاده شود. فوتون‌های ثانویه مانند فوتون‌های کامپتون با استفاده از رولت روسی کشته می‌شوند. بازمانده فوتون‌های ثانویه مانند فوتون‌های اولیه با استفاده از همان الگوریتم شبیه‌سازی می‌شوند.

شکل ۳-۶ به صورت شماتیک این VRT را نشان می‌دهد. ایده اصلی از اجبار تعامل (بخش ۳-۲-۵) می‌آید؛ فوتون مجبور می‌شود تا در شبکه محاسبه تعامل کند. با این حال پیش محاسبه وقت گیر تعداد متوسط طول مسیر فوتون آزاد Λ بین نقاط ورود و خروج شبکه با MPT اجتناب می‌شود.

با MPT، به جای یک فوتون، تعداد متعددی N_{split} فوتون یکسان به طور هم‌زمان در یک ردیابی اشعه در میان هندسه واقعی شبیه‌سازی می‌شود. هر یک از فوتون‌ها وزن $w=1/N_{split}$ را حمل می‌کنند. یکسان به این معنی است که فوتون‌ها دارای انرژی، جهت، و موقعیت ورود یکسانی در سطح شبکه محاسبه هستند. فقط طول مسیر آزاد λ_i به اولین نقاط تعامل به صورت متفاوت برای فوتون‌ها نمونه‌گیری می‌شود. در واحدهای متوسط طول مسیر فوتون آزاد، آن‌ها با استفاده از یک عدد تصادفی ξ که به صورت یکنواخت در $(0,1)$ توزیع شده است، به واسطه رابطه زیر محاسبه می‌شوند:

$$\lambda_i = -\ln \left[1 - \frac{\xi + i}{N_{split}} \right], \quad i = 0, \dots, N_{split} - 1 \quad (3.21)$$

این بدان معنی است که ξ به منظور تولید اعداد تصادفی برای تعیین طول مسیر N_{split} فوتون مورد استفاده قرار می‌گیرد، در حالی که این اعداد با یکنواختی مطلوب در بازه $(0,1)$ توزیع می‌شوند (شکل ۳-۷ را ببینید).

همراه با تکرار تاریخ الکترون، شبیه‌سازی MC با تکرار مراحل زیر انجام می‌شود:

۱- اگر $i=0$ ، فوتون‌های اولیه را از سطح مکعب به λ_0 ردیابی کن و یا فوتون‌های پراکنده را از سایت تعامل به λ_0 ردیابی کن.

۲- اگر $i=0$ ، یک نوع تعامل (پراکندگی کامپتون، تولید زوج، جذب فوتوالکتریک و غیره) را برای همه N_{split} زیر فوتون پرتو یکسان نمونه‌گیری کن.

۳- اگر $i=0$ ، پارامترهای ذرات ثانویه و تاریخ ذره باردار در آب را نمونه‌گیری کن:

آ- برای جذب فوتوالکتریک، جهت فوتوالکترتون را نمونه‌گیری کن، یک تاریخ متناظر در آب ایجاد کن، و پارامترها را ذخیره کن.

ب- برای تولید جفت، انرژی و جهت الکترون و پزیترون را نمونه‌گیری کن، دو تاریخ در آب ایجاد کن، و پارامترها را ذخیره کن.

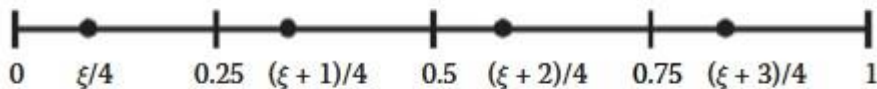
ج- برای پراکندگی کامپتون، انرژی و جهت ذرات پراکنده را نمونه گیری کن، تاریخ الکترون کامپتون در آب را ایجاد کن، و پارامترها ذخیره کن.

۴- اگر $i > 0$ ، فوتون‌ها را اثری از λ_{i-1} به λ_i در میان هندسه و کسل ناهمگن ردیابی کن.

۵- با شروع از نقطه تعامل i ام، تاریخ ذرات باردار را به هندسه بیمار اعمال کن.

۶- در مورد پراکندگی کامپتون، ولت روسی را با فوتون ثانویه با استفاده از احتمال بقای $p_{\text{survive}} = 1/N_{\text{split}}$ اجرا کن و پارامترهای آن را در صورتی که زنده هستند، ذخیره کن.

۷- i را ۱ واحد افزایش بده، یعنی، زیر فوتون بعدی از پرتو را بگیر و به مرحله ۴ برو.



شکل ۳-۷- برای روش انتقال چندین فوتون، یک عدد تصادفی یکنواخت ξ برای تولید $N_{\text{split}}=4$ (در این مثال) عدد تصادفی مورد استفاده قرار گرفته است، با یکنواختی مطلوب در بازه $[0, 1]$ توزیع شده است.

این پروسه برای N_{split} فوتون اولیه زمانی متوقف می‌شود که به مرز مکعب رسیده باشد. پس از آن، فوتون‌های کامپتون باقیمانده به همان روش با اجرای تابع MPT به صورت بازگشتی شبیه‌سازی می‌شوند. این پروسه با STOPS به جای تکرار تاریخ به همان نسبت کار می‌کند.

MPT سریع است، زیرا N_{split} فوتون با ردیابی تنها یک اشعه تنها در میان هندسه منتقل می‌شود. علاوه بر این، بسیاری از مقادیر با تکرار تاریخ یا STOPS مورد استفاده مجدد قرار می‌گیرند. MPT نیز واریانس را کاهش می‌دهد، چون این سایت‌های تعامل فوتون به صورت بهینه در امتداد اشعه توزیع می‌شوند. با تقسیم تعداد حدود $N_{\text{split}} = 40$ ، بهره‌وری محاسبه دوز MC توسط یک عامل ۱۰-۵ با استفاده از MPT افزایش می‌یابد.

۳-۴- تکنیک‌های کاهش واریانس تقریبی خالص

برخی از AVRTها نباید واقعاً به عنوان VRT در نظر گرفته شوند، در صورتی که روش مربوطه توسط یک یا چند تقریب کنترل شود. در اینجا، برخی از این تکنیک‌ها، به نام AVRTهای خالص، ارائه شده است.

۳-۴-۱- تقریب KERMA

یک تقریب بر اساس KERMA توسط این واقعیت برانگیخته می‌شود که انرژی آزاد شده توسط فوتون‌های کم انرژی در همسایگی مستقیم اشعه فوتون جذب می‌شود. برای این فوتون‌ها، انتقال MC الکترون‌های ثانویه می‌تواند خاموش شود. یعنی، برای همه وکسل‌های همراه اشعه فوتون، انرژی تابش شده با استفاده از رابطه زیر محاسبه می‌شود:

$$\Delta E_{dep} = E \mu_{en}^M(E) \Delta s \quad (3.22)$$

در اینجا، s طول مسیر فوتون در وکسل معین است، E انرژی فوتون است، و $\mu_{en}^M(E)$ ضریب جذب انرژی خطی برای فوتون‌های انرژی E و ماده M در وکسل مربوط است. انحراف سیستماتیک توزیع دوز در صورتی می‌تواند با این روش به حداقل برسد که حداکثر محدوده الکترون‌های ثانویه کوچک‌تر از تفکیک فضایی شبکه محاسبه باشد. این مسئله در صورتی ممکن است که تقریب KERMA تنها به فوتون‌های با انرژی E کوچک‌تر از برخی حداکثر انرژی از پیش تعریف شده K_{cut} باشد. علاوه بر این، اعمال این روش فقط برای فوتون‌های پراکنده مرتبه دوم و بالاتر سودمند است، نه برای فوتون‌های اولیه که به طور مستقیم از سر LINAC می‌آیند.

۳-۴-۲- تقریب کاهش پیوسته

در CSDA، الکترون‌ها (یا دیگر ذرات باردار) در یک مرحله بدون ایجاد ذرات ثانویه منتقل می‌شوند. طول مرحله از انرژی الکترون و قدرت توقف کل و بدون محدودیت محاسبه می‌شود. این محدوده پیوسته کاهش، تابع منحصربه‌فردی از انرژی الکترون است. بنابراین، سرگردانی انرژی با استفاده از این روش نادیده گرفته می‌شود.

نسخه‌هایی از CSDA با و بدون پراکندگی چندگانه وجود دارد. بدون پراکندگی چندگانه، ذره باردار در یک خط مستقیم منتقل می‌شود. در غیر این صورت، یک زاویه پراکندگی چندگانه نمونه‌گیری شده و در شبیه‌سازی گنجانده می‌شود.

CSDA باید تنها برای ذرات باردار کم انرژی استفاده شود، به عنوان مثال، برای الکترون در یک شبیه‌سازی MC، زمانی که انرژی آن‌ها زیر برخی انرژی آستانه تعریف شده توسط کاربر E_{cut} واقع می‌شود. با این حال، CSDA برای الکترون‌های زیرآستانه دقیق‌تر است و نوسانات آماری کم‌تری نسبت به جذب محلی انرژی پایان مسیر تولید می‌کند.

۳-۴-۳- بهینه‌سازی پارامتر انتقال

هر دو دقت و سرعت شبیه‌سازی MC انتقال الکترون - فوتون ترانس جفت شده در RT به انتخاب پارامترهای مختلف انتقال بستگی دارد؛ از جمله انرژی قطع انتقال ذرات، انرژی‌های آستانه تولید ذرات و اندازه گام تاریخ فشرده (یا خلاصه شده).

الگوریتم‌های MC معمولاً از یک پارامتر قطع انرژی فوتون P_{cut} استفاده می‌کنند، یعنی، فوتون‌ها در صورتی منتقل نمی‌شوند که در شبیه‌سازی با انرژی زیر P_{cut} تولید شده باشند. انرژی باقیمانده می‌تواند نادیده گرفته شود و یا می‌تواند آن را به صورت محلی سپرده شود. واضح است که دقت و صحت نتایج با کاهش P_{cut} افزایش می‌یابد، با این حال، زمان محاسبات نیز افزایش می‌یابد. از سوی دیگر، اگر انرژی فوتون‌های باقیمانده به صورت محلی جذب شود، یک مقدار بزرگ برای P_{cut} می‌تواند باعث نوسانات اضافی شود. این می‌تواند بهره‌وری محاسبه را کاهش دهد، هر چند زمان محاسبه نیز کاهش یافته است.

پارامتر مهم دیگر، انرژی آستانه تواید فوتون P_{min} است، برای مثال، برای تابش ترمزی. این بدان معنی است که تنها فوتون‌های تابش ترمزی با انرژی بزرگ‌تر از P_{min} می‌توانند در طول شبیه‌سازی MC تولید شوند. اثر توقف الکترون به دلیل فوتون‌های تابش ترمزی زیر P_{min} توسط قدرت توقف تابش محدود در نظر گرفته می‌شود. اما سؤال اینجا است که چگونه باید به انرژی تابشی منتشر شده توسط این الکترون‌ها رسیدگی کرد؟ هر دو جذب محلی و ناپدید شدن کل این انرژی تقریب هستند. برای جلوگیری از نفوذ قابل توجه بر نتیجه از یک سو و برای اطمینان از زمان کوتاه محاسبه از سوی دیگر، P_{min} بسته به نوع محاسبه باید با دقت انتخاب شود.

مسئله برای انرژی‌های آستانه تولید و قطع ذرات باردار، E_{min} و E_{cut} کم‌تر پیچیده است. به دلیل همبستگی قوی بین انرژی و محدوده، هر دو پارامتر می‌توانند بسته به قدرت تفکیک فضایی هندسه محاسبه انتخاب شوند. از سوی دیگر، بهره‌وری می‌تواند با استفاده از مقدار بالاتر E_{cut} و با شبیه‌سازی الکترون‌های انتهای مسیر با انرژی کم‌تر از E_{cut} در CSDA بهبود یابد (بخش ۳-۴-۲).

یکی دیگر از پارامترهای مهم در الگوریتم‌های الکترون MC تاریخ فشرده، اندازه گام (یا روش مورد استفاده برای تعیین اندازه گام واقعی بسته به انرژی، مواد، هندسه و غیره) است. اندازه گام

باید با حداکثر محدود شود، در صورتی که یک تئوری پراکندگی چندگانه تقریبی، برای مثال، یک تقریب زاویه کوچک پیاده‌سازی شود. روش‌هایی با حداکثر از دست دادن انرژی تعریف شده توسط کاربر در هر پارامتر E_{step} مورد استفاده گسترده هستند. مقدار E_{step} باید بسته به الگوریتم و نوع کاربرد بهینه‌سازی شود.

فصل ۴

**استفاده از روش مونت کارلو
در حل معادلات کاربردی**

قبل از اینکه به حل معادله‌ای با روش مونت کارلو بپردازیم، بسیار آموزنده است که با ارائه چند مثال ساده به توضیح اینکه اصولاً روش مونت کارلو بر چه اساسی معادلات را حل می‌کند بپردازیم. ابتدا کمی در مورد اعداد تصادفی توضیح می‌دهیم و ضمن ارائه مثال‌هایی از کاربرد این اعداد به هم کار ما که شامل حل معادلات دیفرانسیل با مشتقات جزئی است می‌پردازیم. سعی می‌کنیم با ارائه یک چارچوب مناسب در حل معادلات گوناگون به روش مونت کارلو به یک الگوی مشخص برای چنین معادلاتی دست یابیم. برای نوشتن برنامه به یک نرم‌افزار محاسباتی نیاز داریم که ما از نرم‌افزار متلب^۱ استفاده کرده‌ایم.

۴-۱- اعداد تصادفی

مجموعه‌ای از اعداد را تصادفی می‌نامیم، وقتی که نتوانیم راجع به عددی که تولید می‌شود حدسی بزنیم چیزی شبیه به بیرون کشیدن یک عدد از داخل یک کیسه پر از اعداد). رابطه زیر یک رابطه بازگشتی برای تولید اعداد تصادفی را نشان می‌دهد.

$$x_{n+1} = ax_n + c \bmod(m)$$

به عنوان مثال اگر داشته باشیم:

$$m = 16, \quad x_0 = 1, \quad c = 1, \quad a = 5$$

در نتیجه خواهیم داشت:

$$x_1 = 5 \cdot x_0 + 1 = 6 \rightarrow x_1 = 6$$

$$x_2 = 5 \cdot x_1 + 1 = 31 \bmod(16) \rightarrow x_2 = 15 \bmod(16)$$

در واقع ۱۵ باقیمانده تقسیم ۳۱ بر ۱۶ است.

$$1, 6, 15, 12, 13, 2, 11, 8, 9, 14, 7, 4, 5, 10, 3, 0, 1$$

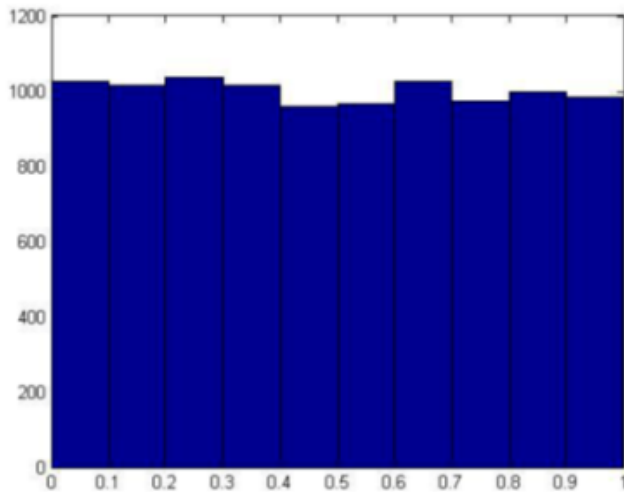
در مثال فوق دوره گردش برابر \bmod یعنی ۱۶ می‌باشد. واضح است که اگر به اندازه کافی بزرگ باشد دوره گردش نیز بزرگ خواهد بود. البته این موضوع به مقدار اولیه برمی‌گردد، بدین معنی که مقدار اولیه باید به گونه‌ای انتخاب شود تا دوره گردش کوچک نباشد. اعدادی که دوره

^۱ MATLAB

تناوب داشته باشند تصادفی واقعی نیستند و به آن‌ها اعداد شبه تصادفی^۱ می‌گوییم. در نرم‌افزار متلب با اعداد شبه تصادفی روبرو هستیم (دوره تناوب بزرگ ولی محدود است که با دستور rand تولید می‌گردند (بین ۰ و ۱)). در برنامه کوتاه زیر ۱۰۰۰۰ عدد شبه تصادفی تولید کرده و نمودار فراوانی آن‌ها را رسم می‌کنیم.

```
۱ RandomNumber=rand(1,10000);
۲ hist(RandomNember)
```

برنامه تولید ۱۰۰۰۰ عدد شبه تصادفی توسط متلب



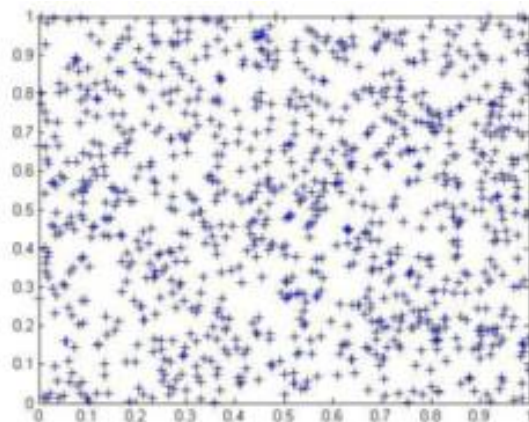
شکل ۴-۱- نمودار تولید ۱۰۰۰۰ عدد شبه تصادفی در نرم‌افزار متلب

و یا دستور زیر که مجموعه‌ای از اعداد شبه تصادفی را در یک سطح مربعی تولید می‌کند

```
۱ alpha=rand(1,1000);
۲ y=rand(1,1000);
۳ plot(x,y,'+')
```

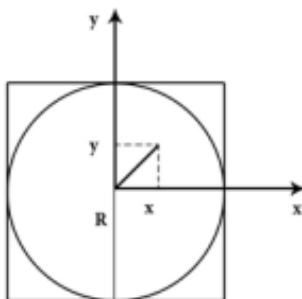
برنامه تولید عدد شبه تصادفی در سطح یک مربع توسط متلب

^۱ Pseudo random number



۴-۲- نحوه توزیع ۱۰۰۰ عدد شبه تصادفی در سطح یک مربع توسط متلب

شکل‌های فوق نشان دهنده این واقعیت‌اند که این اعداد شبه تصادفی هر کدام با احتمال یکسان بدون برتری بر دیگری تولید می‌شوند، بدین معنی که احتمال اینکه عدد تولیدی مثلاً $0/۲۱$ باشد با احتمال اینکه عدد تولیدی $0/۷۹$ باشد یکسان می‌باشد. این مطلب موضوع مهمی در به کارگیری اعداد تصادفی است. یکی از کاربردهای جالب اعداد تصادفی استفاده از آنها برای محاسبه عدد π می‌باشد، روش کار بدین صورت است که دایره‌ای به شعاع R را در داخل مربعی به ضلع $2R$ محاط می‌کنیم.



۴-۳- شکل مربوط به محاسبه عدد π

مساحت دایره

$$\frac{\text{مساحت دایره}}{\text{مساحت مربع}} = \frac{\pi R^2}{2R^2} = \frac{\pi}{4}$$

$$\pi = 4 \frac{\text{مساحت دایره}}{\text{مساحت مربع}} \rightarrow \pi = 4 \frac{\text{تعداد برخورد های دایره}}{\text{تعداد برخورد های مربع}} \rightarrow \pi = 4 \frac{n'}{n}$$

یعنی با استفاده از تولید یک سری اعداد تصادفی می‌توانیم این نسبت را به دست آوریم. اما نکته‌ای که در اینجا باید رعایت شود این است که این اعداد لزوماً داخل مربع قرار گیرند یعنی اعدادی را که خارج از مربع هستند به حساب نیاوریم این امر با محاسبات ساده زیر امکان‌پذیر است،

$$\begin{cases} -R \leq x \leq R \\ -R \leq y \leq R \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} 0 \leq x + R \leq 2R \\ 0 \leq y + R \leq 2R \end{cases}$$

$$\begin{cases} 0 \leq \frac{x+R}{2R} \leq 1; \frac{x+R}{2R} = \xi_1 : \text{randomnumber} \\ 0 \leq \frac{y+R}{2R} \leq 1; \frac{y+R}{2R} = \xi_2 : \text{randomnumber} \end{cases} \rightarrow \begin{cases} x = R(-1+2\xi_1) \\ y = R(-1+2\xi_2) \end{cases}$$

برنامه زیر یک الگوی ساده برای محاسبه π بر مبنای روش مونت کارلو می‌دهد:

```

۱ %Monte carlo computation of Pi
۲ n=input('Enter n: ');
۳ count=0;
۴ for i=1:n
۵ x=2.*(rand)-1;
۶ y=2.*(rand)-1;
۷ if ((x.^2+y.^2) <=1)
۸ count=count+1;
۹ end
۱۰ end
۱۱ piapproximation =4.*(count./n)
۱۲ Enter n: 10000000
۱۳ piapproximation = 3.1417

```

برنامه محاسبه عدد با روش مونت کارلو π شبیه

این برنامه را می‌توان برای یک کره محاط در مکعب هم نوشت و عدد ۱ را به دست آورد. از روش مونت کارلو و تولید اعداد تصادفی برای محاسبه انتگرال‌ها نیز می‌توانیم بهره ببریم. در زیر برنامه‌ای برای محاسبه انتگرال معین آورده‌ایم که کارایی روش را بیش‌ازپیش تأیید می‌کند.

```

۱ %[[Integral from 0 to 1]][[Integral from 0 to x^3]dx
۲ clear all;
۳ clc;
۴ n=1000;
۵ x=rand(n,1);
۶ y=rand(n,1);
۷ y= ((y>0)&(y<x.^3));
۸ ans = sum(y)/n
۹ realvalue=int('x^3','x',0,1)

```

برنامه محاسبه انتگرال معین نمونه با روش مونت کارلو

بعد از ارائه چند مثال ساده به نحوه حل معادلات دیفرانسیل با کمک روش مونت کارلو می‌پردازیم.

۴-۲- حل معادلات دیفرانسیل با روش مونت کارلو

۴-۲-۱- حل معادله لاپلاس یک‌بعدی

فرض می‌کنیم معادله لاپلاس^۱ یک‌بعدی با شرایط مرزی دیریکله^۲ به صورت زیر داده شده است:

$$\frac{d^2 f}{dx^2} = 0, \quad f(a) = c_1, \quad f(b) = c_2, \quad a < x < b$$

با استفاده از روش اختلاف محدوده^۳ سعی می‌کنیم عبارت دیفرانسیل فوق را به یک عبارت جبری تبدیل کنیم. با استفاده از تکنیک بسط توابع به روش تیلور^۴ داریم:

$$f(x + \Delta x) = \frac{(\Delta x)^0}{0!} f(x) + \frac{(\Delta x)^1}{1!} \frac{\delta f(x)}{\delta x} + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \frac{\delta^2 f(x)}{\delta x^2} + \dots \quad (4.1)$$

$$f(x - \Delta x) = \frac{(\Delta x)^0}{0!} f(x) - \frac{(\Delta x)^1}{1!} \frac{\delta f(x)}{\delta x} + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \frac{\delta^2 f(x)}{\delta x^2} - \dots$$

^۱ Laplace

^۲ Dirichlet

^۳ Finite Difference

^۴ Taylor

(4.2)

اگر روابط ۱،۴ و ۲،۴ را با هم جمع کنیم و از جملات با درجات بالاتر صرف نظر کنیم خواهیم داشت:

$$f(x+\Delta x) + f(x-\Delta x) = 2f(x) + \Delta x^2 \frac{\delta^2 f(x)}{\delta x^2}$$

$$\rightarrow \frac{\delta^2 f(x)}{\delta x^2} = \frac{f(x+\Delta x) + f(x-\Delta x) - 2f(x)}{\Delta x^2}$$

با جایگذاری عبارات فوق در معادله لاپلاس و پس از مرتب‌سازی آن داریم:

$$f(x) = \frac{1}{2} f(x+\Delta x) + \frac{1}{2} f(x-\Delta x)$$

(4.3)

عبارت فوق را می‌توانیم به صورت زیر نیز بنویسیم:

$$f(x) = P_{x+} f(x+\Delta x) + P_{x-} f(x-\Delta x)$$

(4.4)

ضرایب P_{x+} و P_{x-} را به عنوان ضرایب احتمالی در نظر می‌گیریم. برای درک بهتر این روش فرض کنید یک ذره فرضی در نقطه، قرار دارد و می‌خواهد یک گام به اندازه Δx برداشته و جابجا شود. اینکه ذره به سمت مثبت و یا منفی حرکت کند با توجه به عدد تصادفی تولیدی تعیین می‌شود.

P_{x+} : احتمال اینکه گام تصادفی^۱ ذره را به اندازه Δx به سمت مثبت ببرد.

P_{x-} : احتمال اینکه گام تصادفی ذره را به اندازه Δx به سمت منفی ببرد.

چون در این مثال با معادله لاپلاس در یک بعد روبرو هستیم، لذا ذره فقط در دو جهت چپ و یا راست مجاز به گام برداشتن است (به همین ترتیب در حالت دوبعدی ذره در چهار جهت و در حالت سه‌بعدی در شش جهت می‌تواند حرکت کند). یادآور می‌شود طولی که ذره در هر بار گام برداشتن طی می‌کند برابر عدد است. مجموع ضرایب احتمالاتی باید یک باشند:

$$P_{x+} = P_{x-} = \frac{1}{2} \rightarrow P_{x+} + P_{x-} = 1 \quad (4.5)$$

با توجه به مساوی بودن احتمالات در دو جهت +۱ و ۱ می‌توانیم روش فوق را به صورت زیر خلاصه کنیم:

۱. یک عدد تصادفی بین ۰ و ۱ تولید می‌کنیم ($\zeta = \text{rand}$)

۲. اگر $0.5 > \varepsilon > 0$ باشد ذره به اندازه Δx به سمت مثبت حرکت خواهد کرد.

۳. اگر $1 > \varepsilon > 0.5$ باشد ذره به اندازه Δx به سمت منفی حرکت خواهد کرد.



شکل ۴-۴- نحوه حرکت ذره فرضی در میله‌ای به طول دلخواه

این کار را تا زمانی انجام می‌دهیم که ذره به یکی از مرزها یعنی $x=a$ یا $x=b$ برسد (نقطه اولیه به صورت دلخواه بین a و b انتخاب می‌شود. اگر به مرز نرسیده بود عدد تصادفی را دوباره تولید می‌کنیم و با توجه به محدوده عدد تصادفی، ذره به سمت مثبت و یا منفی حرکت خواهد کرد. با رسیدن ذره به هر کدام از مرزها مقدار تابع در آن مرز را یادداشت می‌کنیم و ذره بعدی را دوباره از همان نقطه اول آزاد می‌کنیم تا بالاخره به مرز برسد.

جمع‌کننده مقدار تابع $F(m) = 0 \rightarrow$

اگر ذره به مرز a رسیده باشد $F(m+1) = F(m) + f(a)$

اگر ذره به مرز b رسیده باشد $F(m+1) = F(m) + f(b)$

$F(m) = F(m+1)$

اگر N ذره از نقطه x شروع به حرکت کرده و به مرز رسیده باشند، آنگاه مقدار تابع در نقطه x از رابطه زیر به دست خواهد آمد:

$$f(x) = \frac{1}{N} F(m) \quad (4.6)$$

با میل دادن N به سمت بی نهایت مقداری که برای تابع به دست می آید دقیق تر خواهد بود. به حل معادله با این روش، *Fired Random Walking* گویند. در این حالت جهت حرکت ذره به تنها دو جهت محدود بود و اندازه گام آن نیز ثابت بوده و از قبل تعیین می شود و به همین دلیل این روش به *Fired Random Walking* نام گذاری شده است.

مثال ۱: معادله زیر را به روش *Fired Random Walking* حل کرده ایم. نتایج تا حدود زیادی به نتایج واقعی نزدیک است.

$$\frac{d^2 f}{dx^2} = 0, \quad f(0) = 50, \quad f(1) = 80, \quad 0 < x < 1$$

جدول ۴-۱- مقایسه نتایج مونت کارلو با جواب واقعی برای مثال ۱

NO.	Number of rand	X.	Fired Random Walking	Exact solution
۱	۵۰۰	۰/۱	۵۳/۴۸	۵۳
۲	۱۰۰۰	۰/۱	۵۲/۷۶	۵۳
۳	۲۰۰۰	۰/۱	۵۳/۱۸	۵۳
۴	۵۰۰	۰/۵	۶۴/۵۲	۶۳
۵	۱۰۰۰	۰/۵	۶۵/۳۳	۶۳
۶	۲۰۰۰	۰/۵	۶۵/۴۳	۶۳

```

۱  %=====
۲  nrun = 2000; % nrun : number of random particles
۳  delta = 0.1; % dx
۴  A=1.0;      % length
۵  xo=.2;     % initial point
۶  io=xo/delta;
۷  imax=A/delta;
۸  sum=0;
۹  for k=1:nrun
۱۰     i=io;
۱۱     while i<=imax
۱۲         r=rand;      %random number between 0 and 1
۱۳         if (r >= 0.0 && r <= 0.5)
۱۴             i=i+1;
۱۵         end
۱۶         if (r >= 0.5 && r <= 1.0)
۱۷             i=i-1;
۱۸         end
۱۹         if(i == 0.0)      % check if (i) is on the boundary
۲۰             sum=sum+50;
۲۱             break;
۲۲         end
۲۳         if(i == imax)
۲۴             sum=sum+80;
۲۵             break;
۲۶         end
۲۷     end % while
۲۸ end
۲۹ T=sum/nrun

```

برنامه مربوط به مثال ۱

۴-۲-۲- حل معادله لاپلاس در دو بعد

معادله لاپلاس دوبعدی به صورت زیر است:

$$\nabla^2 f(x, y) = 0 \rightarrow \frac{d^2 f}{dx^2} + \frac{d^2 f}{dy^2} = 0 \quad (4.7)$$

با استفاده از بسط تیلور داریم:

$$\frac{d^2 f}{dx^2} = \frac{f(x + \Delta x, y) - 2f(x, y) + f(x - \Delta x, y)}{\Delta x^2} \quad (4.8)$$

$$\frac{d^2 f}{dy^2} = \frac{f(x, \Delta x + y) - 2f(x, y) + f(x, \Delta x - y)}{\Delta y^2} \quad (4.9)$$

روابط ۸,۴ و ۹,۴ را در معادله ۷,۴ جاگذاری می‌کنیم و اگر عبارت به دست آمده را بر حسب $f(x, y)$ حل کنیم خواهیم داشت:

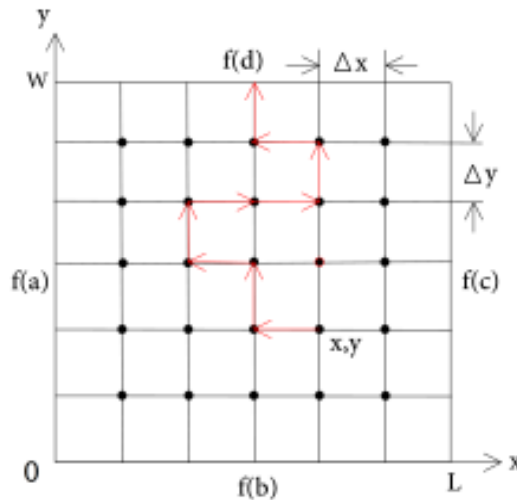
$$f(x, y) = P_{x+} f(x + \Delta x, y) + P_{x-} f(x - \Delta x, y) + P_{y+} f(x, \Delta x + y) + P_{y-} f(x, \Delta x - y) \quad (4.10)$$

در عبارت فوق ضرایب احتمالاتی به صورت زیر هستند:

$$P_{x+} = P_{x-} = \frac{\Delta y^2}{2(\Delta y^2 + \Delta x^2)}, P_{y+} = P_{y-} = \frac{\Delta x^2}{2(\Delta y^2 + \Delta x^2)} \quad (4.11)$$

به عنوان یک حالت خاص اگر $\Delta x = \Delta y = \Delta$ باشد، داریم:

$$P_{x+} = P_{x-} = P_{y+} = P_{y-} = \frac{1}{4}$$



شکل ۴-۵- نحوه حرکت ذره فرضی در صفحه

بدین ترتیب با تولید یک عدد تصادفی روش زیر را پیش می‌گیریم:

$\varepsilon = \text{random number}$

$$\text{if } : 0.00 < \varepsilon < 0.25 \Rightarrow (x, y) \rightarrow (x + \Delta, y)$$

$$\text{if } : 0.25 < \varepsilon < 0.50 \Rightarrow (x, y) \rightarrow (x - \Delta, y)$$

$$\text{if } : 0.50 < \varepsilon < 0.75 \Rightarrow (x, y) \rightarrow (x, y + \Delta)$$

$$\text{if } : 0.75 < \varepsilon < 1.00 \Rightarrow (x, y) \rightarrow (x, y - \Delta)$$

در هر گام باید چک کنیم که آیا ذره به مرز رسیده است یا نه؟ اگر ذره به مرز نرسیده بود دوباره عدد تصادفی را تولید می‌کنیم و با توجه به محدوده عدد تصادفی ذره گام بعدی را برمی‌دارد. اگر ذره به مرز رسیده بود مقدار تابع در آن مرز را به صورت زیر یادداشت می‌کنیم و ذره‌های بعدی حرکت خود را دوباره از همان نقطه اول آغاز می‌کند.

$F(m) = 0 \Rightarrow$ جمع‌کننده مقدار تابع

$$\text{اگر ذره به مرز } a \text{ رسیده باشد} \rightarrow F(m+1) = F(m) + f(a)$$

$$\text{اگر ذره به مرز } b \text{ رسیده باشد} \rightarrow F(m+1) = F(m) + f(b)$$

$$\text{اگر ذره به مرز } c \text{ رسیده باشد} \rightarrow F(m+1) = F(m) + f(c)$$

$$\text{اگر ذره به مرز } d \text{ رسیده باشد} \rightarrow F(m+1) = F(m) + f(d)$$

$$F(m) = F(m+1)$$

در نتیجه مقدار تابع در نقطه x, y برابر خواهد بود با $(f(a), f(b), f(c), f(d))$ شرایط مرزی هستند:

$$f(x, y) = \frac{1}{N} F(m)$$

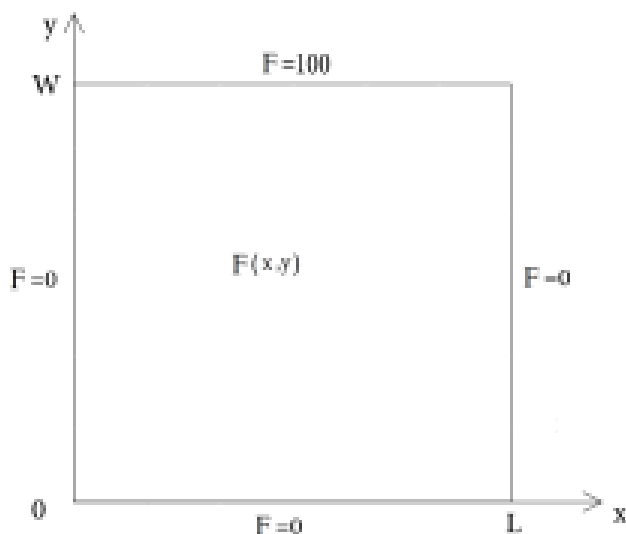
مثال ۲: معادله زیر را در نظر می‌گیریم:

$$\frac{d^2 f(x, y)}{dx^2} + \frac{d^2 f(x, y)}{dy^2} = 0$$

$$f(0, y) = f(1, y) = 0, \quad f(x, 0) = 0, \quad f(x, 1) = 100$$

حل دقیق این معادله جواب زیر را به دست می‌دهد:

$$f(x, y) = \frac{400}{\pi} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\sin(k\pi x) \sin(k\pi y)}{k \sinh(k\pi)}, \quad k = 2n + 1$$



شکل ۴-۶- شکل مربوط به مثال ۲

جدول ۴-۲- مقایسه نتایج مونت کارلو با جواب واقعی برای مثال ۲

NO.	Number of rand	X.	Fired Random Walking	Exact solution
۱	۵۰۰	۰/۱	۴۳	۴۴/۲۰
۲	۱۰۰۰	۰/۱	۴۵/۲	۴۴/۲۰
۳	۲۰۰۰	۰/۱	۴۲/۹۵	۴۴/۲۰
۴	۵۰۰	۰/۵	۲۷/۶	۲۵
۵	۱۰۰۰	۰/۵	۲۴/۳	۲۵
۶	۲۰۰۰	۰/۵	۲۴/۹۵	۲۵
۷	۵۰۰	۰/۵	۶/۰۰	۶/۷۹۷
۸	۱۰۰۰	۰/۵	۶/۵	۶/۷۹۷
۹	۲۰۰۰	۰/۵	۶/۷۵	۶/۷۹۷

اکنون که با نحوه حل معادلات دیفرانسیل به کمک روش مونت کارلو آشنا شدیم، می‌توانیم این روش را برای حل معادلات هدایت حرارت استفاده کنیم. در بخش بعدی ضمن حل معادله هدایت حرارتی در یک جسم جامد به روش Fixed Random Walking، به معرفی دو روش دیگر که مبتنی بر مونت کارلو بوده ولی دارای تفاوت‌هایی با Fired Random Walking می‌باشد می‌پردازیم.

```

۱ %=====
۲ % This program solves two-dimensional equation  $d^2 f/dx^2 + d^2 f/dy^2 = 0$ ;
۳ nrun =2000;
۴ delta = .05;
۵ A=1.0;
۶ B=1.0;
۷ xo=.5;
۸ yo=.25;
۹ io=xo/delta;
۱۰ jo=yo/delta;
۱۱ imax=A/delta;
۱۲ jmax=B/delta;
۱۳ sum=0;
۱۴ for k=1:nrun
۱۵     i=io;
۱۶     j=jo;
۱۷     while (i<=imax && j<=jmax)
۱۸         r=rand; %random number between 0 and 1
۱۹         if (r >= 0.0 && r <= 0.25)
۲۰             i=i+1;
۲۱         end
۲۲         if (r >= 0.25 && r <= 0.5)
۲۳             i=i-1;
۲۴         end
۲۵         if (r >= 0.5 && r <= .75)
۲۶             j=j+1;
۲۷         end
۲۸         if (r >= 0.75 && r <= 1.0)
۲۹             j=j-1;
۳۰         end
۳۱ % check if (i,j) is on the boundary
۳۲         if(i == 0.0)
۳۳             sum=sum+ 0;
۳۴             break;
۳۵         end
۳۶         if(i == imax)
۳۷             sum=sum+ 0;
۳۸             break;
۳۹         end
۴۰         if(j == 0.0)
۴۱             sum=sum+ 0;
۴۲             break;
۴۳         end
۴۴         if(j == jmax)
۴۵             sum=sum+ 100;
۴۶             break;
۴۷         end
۴۸     end % while
۴۹ end
۵۰ T=(sum)/nrun

```

برنامه مربوط به مثال ۲

۴-۳- حل معادله هدایت حرارت با روش مونت کارلو

در روش مونت کارلو دمای نقطه‌ای دلخواه در یک جسم جامد، بر اساس قدم زدن تصادفی یک ذره فرضی برآورد می‌شود. منظور از قدم زدن تصادفی در واقع حرکت با گام یا جهت تصادفی می‌باشد. ایده اولیه استفاده از این روش هوشمندانه در به دست آوردن توزیع دمای یک جسم به معادلات مربوط به پخش نوترون برمی‌گردد. در اکثر مطالعات هسته‌ای راکتور، حرکت نوترون را به عنوان فرایند انتشار مورد بحث قرار می‌دهند. در واقع فرض می‌شود نوترون همانند گرما که از نواحی با دمای بالاتر به نواحی با دمای کم‌تر انتشار می‌یابد، از نواحی با چگالی بالاتر نوترون، به نواحی با چگالی پایین‌تر نوترون، انتشار یابند. به عنوان مثال دیگر می‌توان نوترون‌ها را همانند مولکول‌های گازی دانست که تمایل دارند برای کاهش گرادیان غلظت، پراکنده شوند. در به دست آوردن توزیع دما در یک جسم با روش مونت کارلو، برعکس حالت فوق در نظر گرفته می‌شود. یعنی با فرض اینکه معادلات حرکت (انتشار) ذره را می‌دانیم، می‌خواهیم نحوه پخش حرارت را به دست آوریم؛ بنابراین با حرکت یک ذره فرضی (مانند نوترون تک انرژی و بدون شکافت و بدون جذب) در محیط مورد نظر، نحوه پخش حرارت تقریب زده می‌شود. بسته به اینکه گام و جهت حرکت ذره را چگونه تعریف کنیم، می‌توان سه نوع قدم زدن تصادفی در نظر گرفت:

۱. *Fired Random Walking (FRW)*: که در آن طول گام ذره ثابت بوده و از پیش تعیین می‌شود و جهت حرکت ذره نیز محدود است.

۲. *Semi Floating Random Walking (SFRW)*: در این حالت حرکت ذره به گونه‌ای است که طول گام مانند حالت قبل ثابت است ولی جهت حرکت محدود نبوده و حرکت با هر زاویه ممکن است و به طور تصادفی تعیین می‌شود.

۳. *Full Floating Random Walking (FFRW)*: در این حالت طول گام ذره ثابت نیست و در هر گام عوض می‌شود و جهت حرکت آن نیز مانند حالت دوم محدود نبوده و حرکت با هر زاویه ممکن است.

در هر کدام از حالت‌های فوق وقتی ذره در حین حرکت به دمای معلوم رسید، حرکت آن متوقف شده و به عبارتی ذره جذب می‌شود و آن دمای معلوم یادداشت می‌شود. در ادامه هر کدام از حالت‌های اشاره شده را به تفصیل بررسی خواهیم کرد.

۴-۳-۱- حالت اول FRW

معادله هدایت حرارت در شرایط مانا در یک جسم جامد مطابق رابطه زیر است:

$$\nabla^2 T + \frac{\dot{q}}{k} = 0 \quad (4.12)$$

که در آن T دمای جسم بر حسب k ، C° ضریب هدایت حرارتی بر حسب $C^\circ \cdot W/m^2$ ، \dot{q} نرخ تولید حرارت در واحد حجم بر حسب W/m^3 و ∇^2 عملگر لاپلاسین^۱ می‌باشند. شکل ۴-۸ را که در آن دمای دیواره‌های جسم مشخص است در نظر بگیرید، رابطه ۴-۱۲ برای این شکل (حالت دوبعدی و در دستگاه کارتزین) به صورت زیر است که در واقع همان رابطه پواسون^۲ است و اگر چشمه‌ای تولید حرارت صفر باشد به رابطه آشنای لاپلاس تبدیل خواهد شد):

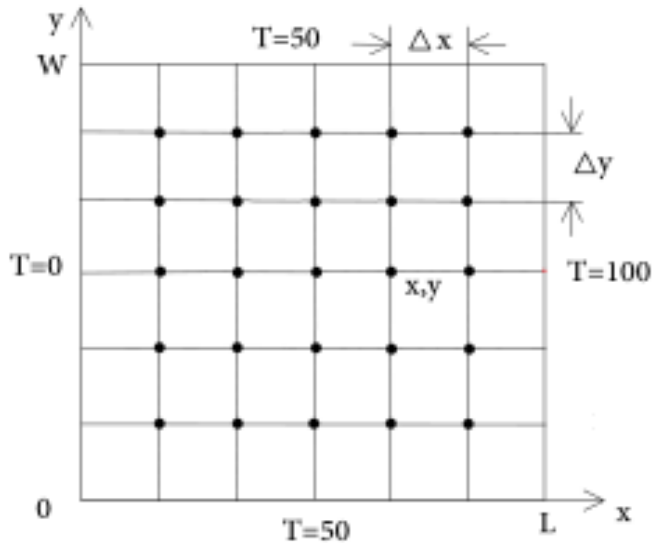
$$\frac{\delta^2 T}{\delta x^2} + \frac{\delta^2 T}{\delta y^2} + \frac{\dot{q}}{k} = 0 \quad (4.13)$$

در روش‌های عددی مانند تفاضل محدود و احجام محدود^۳، برای به دست آوردن توزیع دما در مسائلی مشابه مسائل فوق، ابتدا جسم را نودبندی می‌کنند و سپس معادله هدایت مربوطه را برای هر نود جداسازی می‌کنند (روش تفاضل محدود) و یا برای هر نود معادله انرژی را می‌نویسند (روش احجام محدود) و در نهایت به تعداد نودهای در نظر گرفته شده معادله داریم که باید به صورت هم‌زمان حل شوند. در حل مسأله به روش FRWV نیز همانند این روش‌ها جسم را نودبندی می‌کنیم (شکل ۴-۷).

^۱ laplacian

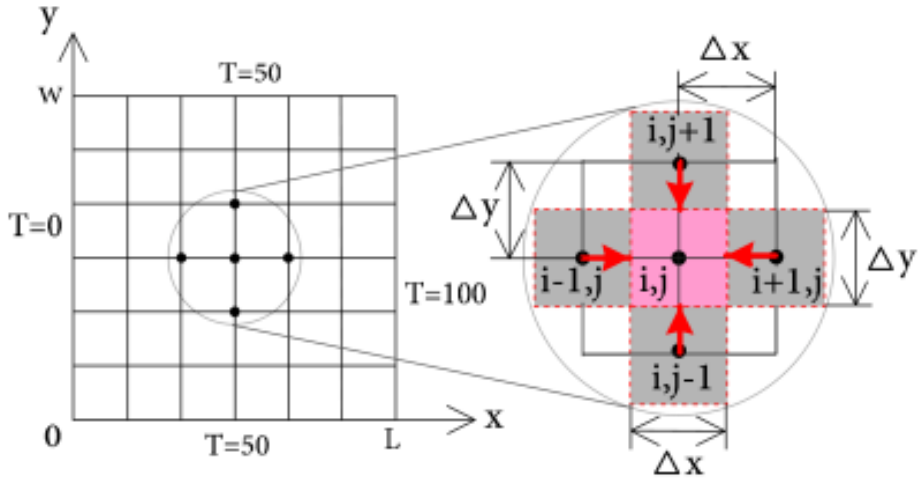
^۲ Poisson

^۳ Finite Volume



شکل ۴-۷- نودبندی جسم دوبعدی در دستگاه کارترین

همانند آنچه که در بخش قبل انجام دادیم می‌توانیم از روش تفاضل محدود استفاده کنیم و با کمک بسط تیلور، رابطه ۱۳,۴ را به یک عبارت جبری تبدیل کنیم. اما برای درک بهتر فیزیک مسأله از روش احجام محدود استفاده می‌کنیم و معادله انرژی را برای هر نود می‌نویسیم. در نهایت باز هم به همان عبارت جبری خواهیم رسید. همانند شکل ۴-۸ برای هر نود دلخواه یک حجم کنترل در نظر می‌گیریم و معادله انرژی را برای آن می‌نویسیم.



شکل ۴-۸- حجم کنترل برای نود نمونه

طبق شکل ۴-۸ اگر فرض کنیم که برای نود مدنظر انرژی از تمام جهات در حال ورود به حجم کنترل است، معادله انرژی برای حجم کنترل نشان داده شده به صورت زیر خواهد بود:

$$\dot{E}_{\text{in}} + \dot{E}_g + \frac{\delta E}{\delta t} \quad (4.14)$$

یعنی مجموع نرخ انرژی ورودی و تولیدی در حجم کنترل برابر تغییرات انرژی در واحد زمان است. چون فعلاً در حال بررسی مسأله در شرایط مانا هستیم سمت راست عبارت فوق برابر صفر بوده و لذا به صورت زیر ساده می‌گردد:

$$\dot{E}_{\text{in}} + \dot{E}_g = 0 \quad (4.15)$$

برای به دست آوردن میزان انرژی در حال ورود به حجم کنترل با استفاده از قانون فوریه خواهیم داشت:

$$\left\{ \begin{array}{l} q(i-1, j) \rightarrow (i, j) = k(\Delta y \times 1) \frac{T_{i-1, j} - T_{i, j}}{\Delta x} \\ q(i+1, j) \rightarrow (i, j) = k(\Delta y \times 1) \frac{T_{i+1, j} - T_{i, j}}{\Delta x} \\ q(i, j-1) \rightarrow (i, j) = k(\Delta x \times 1) \frac{T_{i, j-1} - T_{i, j}}{\Delta y} \\ q(i, j+1) \rightarrow (i, j) = k(\Delta x \times 1) \frac{T_{i, j+1} - T_{i, j}}{\Delta y} \end{array} \right.$$

$$\rightarrow k\Delta y \frac{T_{i-1, j} - T_{i, j}}{\Delta x} + k\Delta y \frac{T_{i+1, j} - T_{i, j}}{\Delta x} + k\Delta x \frac{T_{i, j-1} - T_{i, j}}{\Delta y} + k\Delta x \frac{T_{i, j+1} - T_{i, j}}{\Delta y} + \dot{q}\Delta x\Delta y = 0$$

اگر فرض کنیم $\Delta x = \Delta y$ آنگاه داریم:

$$T_{i-1, j} + T_{i+1, j} + T_{i, j+1} + T_{i, j-1} + \frac{\Delta x^2}{k} \dot{q} - T_{i, j} = 0 \rightarrow$$

$$T_{i, j} = \frac{1}{4} (T_{i-1, j} + T_{i+1, j} + T_{i, j+1} + T_{i, j-1}) + \frac{\Delta x^2}{4k} \dot{q}$$

(4.16)

دیدیم که با استفاده از روش معادله انرژی نیز، معادله جبری مورد نیاز را به دست آوردیم. رابطه ۱۶،۴ را مانند بخش قبل به صورت زیر می‌نویسیم:

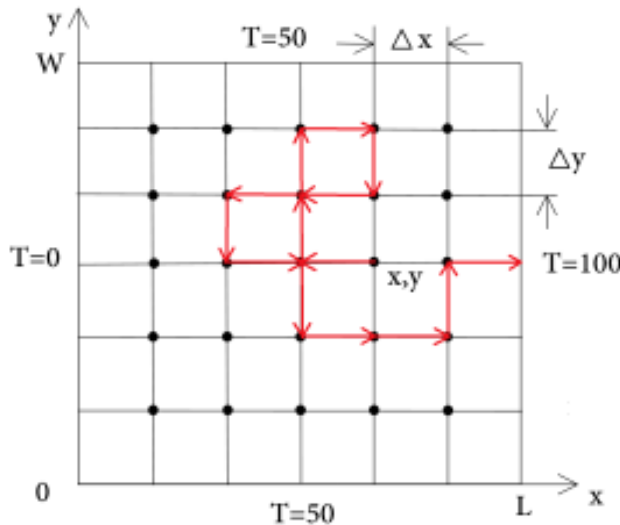
$$T_{i, j} = P_{x-} T_{i-1, j} + P_{x+} T_{i+1, j} + P_{y+} T_{i, j+1} + P_{y-} T_{i, j-1} + \frac{\Delta x^2}{4k} \dot{q}$$

(4.17)

که در آن تمام ضرایب احتمالاتی برابر $\frac{1}{4}$ می‌باشند. اینجا هم دقت داشته باشید که مجموع ضرایب یک هستند:

$$P_{x-} + P_{x+} + P_{y-} + P_{y+} = 1$$

همان‌طور که پیش‌تر اشاره شد در این روش هم اندازه گام مشخص است و هم جهت حرکت به یکی از چهار جهات بالا، پایین، چپ و راست محدود است، و یا به عبارتی می‌توان گفت که در یک جسم شبکه‌بندی شده حرکت روی خطوط شبکه مجاز است و طول هر گام هم به اندازه طول مش می‌باشد. حال برای هر نود دلخواه با مختصات (x,y) در همان شکل، ذره فرضی را در نظر بگیرید که می‌خواهد قدم زدن تصادفی خود را آغاز کند و از آن نقطه به یکی از نقاط موجود در همسایگی خود برود، یعنی به یکی از نودهای بالایی، پایینی، سمت راستی و یا سمت چپی. طبق روالی که در بخش قبل معرفی شد با توجه به محدوده عدد تصادفی تولید شده ذره جهت حرکت خود را تعیین می‌کند. وقتی ذره با توجه به عدد تصادفی تولیدی یک گام برداشته و به یکی از نودهای موجود در همسایگی خود رفت، فرایند تولید عدد تصادفی تکرار می‌شود و ذره دوباره حرکت می‌کند. این کار آن‌قدر ادامه می‌یابد تا بالاخره ذره به یکی از مرزها (یعنی دمای معلوم) برسد. وقتی ذره به هر کدام از مرزها رسید، حرکت آن پایان یافته و به عبارتی ذره جذب می‌شود شکل (۹-۴).



شکل ۹-۴- یک نمونه از مسیر حرکت ذره فرضی تا رسیدن به مرز

برای اینکه اثر چشمه حرارتی را در نظر بگیریم دقت داشته باشید به ازای هر بار که ذره گام برمی دارد، عبارت $\frac{\Delta x^2}{4k} \dot{q}$ جمع می شود، یعنی داریم:

جمع کننده اثر چشمه حرارتی $S(m) = 0 \rightarrow$

$$S(m+1) = S(m) + \frac{\Delta x^2}{4k} \dot{q}$$

$$S(m+1) = S(m)$$

با توجه به توضیحات بالا وقتی ذره به هر کدام از مرزها (یعنی دمای معلوم) رسید، جذب شده و حرکت آن پایان می یابد. با جذب شدن ذره، دمای آن مرز را به همراه اثر چشمه حرارتی به صورت زیر یادداشت می کنیم:

جمع کننده دما $T(m) = 0 \rightarrow$

$$T(m+1) = T(m) + T(\text{boundary}) + S(m)$$

$$T(m+1) = T(m)$$

با جذب شدن ذره اول، ذره بعدی را دوباره از همان نقطه (x,y) آزاد می کنیم تا حرکت کرده و بالاخره به مرز (دمای معلوم) رسیده و جذب شود. اگر تعداد ذراتی که از نقطه (x,y) آزاد می شوند N باشد، آنگاه دمای نقطه (x,y) از رابطه زیر به دست خواهد آمد:

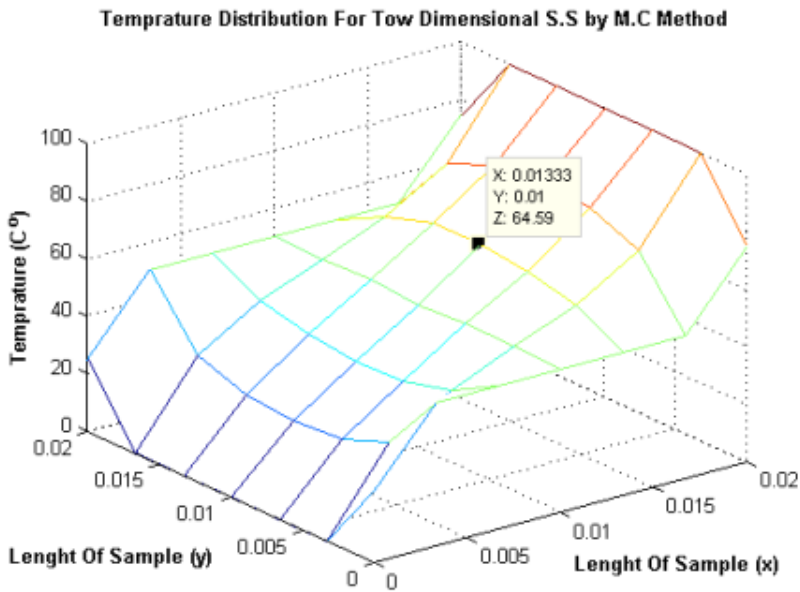
$$T(x, y) = \frac{1}{N} T(m)$$

با افزایش N جواب به دست آمده برای $T(x,y)$ به جواب واقعی نزدیک تر خواهد شد. دمای نقطه (x,y) را با فرض داده‌های زیر به ازای تعداد ذرات مختلف را در جدول ۳-۴ می‌بینیم.

$$\dot{q} = 0, \quad L = 2\text{cm}, \quad W = 2\text{cm}, \quad N_y = N_x = 5, \quad y = 0.5W, \quad x = 0.67L$$

جدول ۳-۴- دمای نقطه x,y به ازای تعداد ذرات مختلف

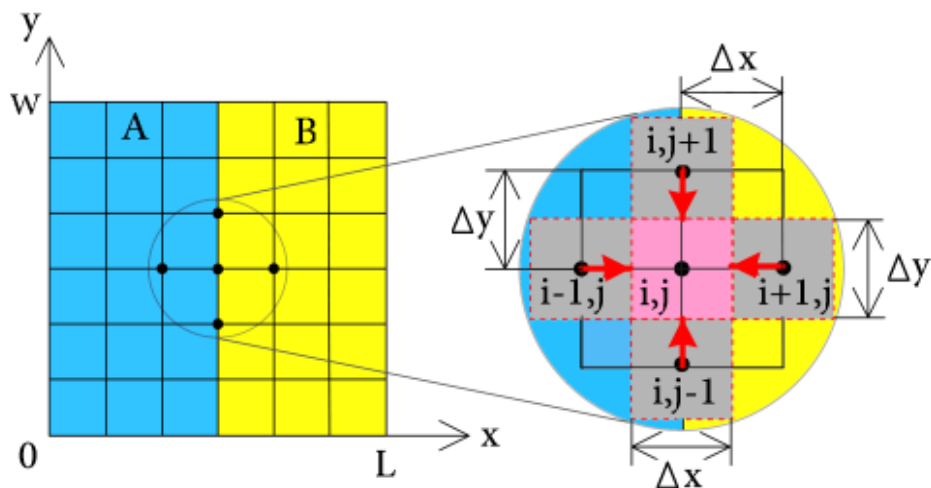
N	$T_{x,y} (C)$
۱۰۰۰	۶۳/۶۵
۵۰۰۰	۶۴/۵۹
۱۰۰۰۰	۶۳/۷۶
Finite Volume	۶۴/۰۴



شکل ۴-۱۰- توزیع دما در کل جسم

با این روش دمایی که برای نقطه (x,y) به دست آمد مستقل از سایر نقاط می‌باشد. همین مسأله را اگر بخواهیم با روش‌های عددی مانند تفاضل محدود و احجام محدود حل کنیم، به ازای تعداد نودها معادله داریم که باید به طور هم‌زمان حل شوند. مثلاً اگر تعداد نودها در راستای x برابر N_x و تعداد نودها در راستای y برابر N_y باشد، تعداد معادلات برابر $m=N_x \times N_y$ می‌باشد و باید ماتریسی به ابعاد $N_x \times N_y$ حل شود. با زیاد شدن ابعاد ماتریس، حل کردن آن مشکلات مربوط به خود را دارد.

در مثال قبل فرض کنید محیط مربوطه دارای دو ناحیه باشد که از مواد مختلف با مشخصات مختلف تشکیل شده باشد (شکل ۴-۱۱).



شکل ۴-۱۱- حجم کنترل برای نود روی مرز بین دو ناحیه

قابل حدس زدن است که احتمال دارد ذره وقتی به مرز رسید از هر دو ناحیه عبور کرده باشد؛ بنابراین با توجه به ناحیه‌ای که ذره در آن قدم می‌زند مشخصات ماده را در نظر می‌گیریم. مثلاً فرض کنید در ناحیه A چشمه حرارت نداریم و در ناحیه B چشمه حرارت داریم. برای نودی که روی مرز بین دو ناحیه قرار می‌گیرد معادلات را به صورتی که در ادامه خواهیم دید به دست می‌آوریم. حجم کنترل را برای این نود به صورت نشان داده شده در شکل ۴-۱۱ در نظر می‌گیریم. همان‌طور که در شکل مشخص است بخشی از حجم کنترل در ناحیه A و بخش

دیگری از آن در ناحیه B قرار دارد. انرژی ای که به نود i,j از طریق نودهای $i,j-1$ و $i,j+1$ وارد می شود، از در محیط مختلف صورت می گیرد. اگر معادلات انرژی را برای حجم کنترل نشان داده شده با کمک قانون فوریه بنویسیم خواهیم داشت:

$$k_A (\Delta y \times 1) \left(\frac{T_{i-1,j} - T_{i,j}}{\Delta x} \right) + k_A (\Delta y \times 1) \left(\frac{T_{i,j-1} - T_{i,j}}{\frac{\Delta x}{2}} \right) + k_A (\Delta y \times 1) \frac{T_{i,j+1} - T_{i,j}}{\frac{\Delta x}{2}}$$

$$+ k_g (\Delta y \times 1) \frac{T_{i+1,j} - T_{i,j}}{\Delta x} + k_g (\Delta x \times 1) \frac{T_{i,j-1} - T_{i,j}}{\frac{\Delta y}{2}}$$

$$+ k_g (\Delta x \times 1) \frac{T_{i,j+1} - T_{i,j}}{\frac{\Delta y}{2}} + d_{vA} \times 0 + d_{vB} \times \dot{q}, d_{vA} = \frac{\Delta x}{2} \times \Delta y \times 1$$

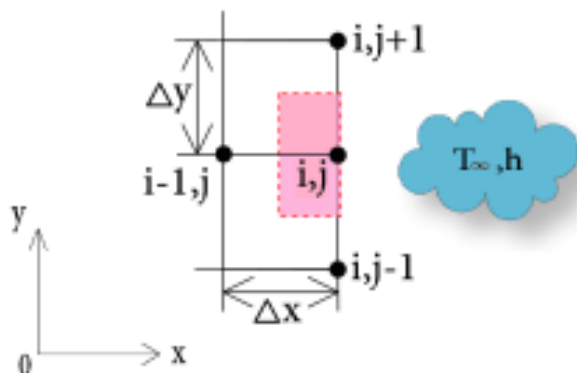
در رابطه فوق d_{vA} حجم قرار گرفته در ناحیه A و d_{vB} حجم قرار گرفته در ناحیه B می باشد. چون در ناحیه A چشمه انرژی نداریم، مقدار چشمه را صفر در نظر گرفتیم. بنابراین اگر رابطه فوق را با در نظر گرفتن $\Delta y = \Delta x$ بر حسب $T_{i,j}$ حل کنیم داریم:

$$T_{i,j} = \frac{1}{2(k_A + k_B)} \left(k_A T_{i-1,j} + k_B T_{i+1,j} + \frac{k_A + k_B}{2} (T_{i,j-1} + T_{i,j+1}) + \frac{\Delta x^2}{2} \dot{q} \right) \quad (4.18)$$

ضرایب احتمالاتی نیز به صورت زیر خواهند بود:

$$P_{x-} = \frac{k_A}{2(k_A + k_B)} \quad \text{و} \quad P_{x+} = \frac{k_B}{2(k_A + k_B)} \quad , \quad P_{y+} = P_{y-} = \frac{1}{4}$$

در حالتی که بررسی کردیم دمای مرزها مشخص و ثابت بود. حال فرض کنیم جسم با سیالی با دمای ثابت T_∞ و ضریب انتقال حرارت جابجایی^۱ (h) مشخص در تماس است. به عبارت دیگر در مرز کانوکشن وجود دارد (شکل ۴-۱۸).



شکل ۴-۱۲- حجم کنترل برای نود روی مرز Convective

با توجه به حجم کنترل نشان داده شده در شکل ۴-۱۸ معادلات به صورت زیر به دست می آیند:

$$k(\Delta y \times 1) \left(\frac{T_{i-1,j} - T_{i,j}}{\Delta x} \right) + k \left(\frac{\Delta x}{2} \times 1 \right) \left(\frac{T_{i,j-1} - T_{i,j}}{\Delta y} \right) + k \left(\frac{\Delta x}{2} \times 1 \right) \frac{T_{i,j+1} - T_{i,j}}{\Delta y} + h(\Delta y \times 1)(T_\infty - T_{i,j}) + dv \times \dot{q} = 0$$

$$dv = \frac{\Delta x}{2} \times \Delta y \times 1$$

$$\rightarrow (T_{i-1,j} + T_{i,j+1} + T_{i,j-1}) + \frac{2h\Delta x}{k} T_\infty - 2 \left(\frac{h\Delta x}{k} + 2 \right) T_{i,j} = 0$$

اگر $Bi = \frac{h\Delta x}{k}$ در نظر بگیریم و عبارت فوق را بر حسب $T_{i,j}$ حل کنیم خواهیم داشت:

$$T(i, j) = \frac{1}{2 + Bi} \left(T_{i-1,j} + 0.5T_{i+1,j} + 0.5T_{i,j+1} + BiT_\infty + \frac{\Delta x^2}{2} \dot{q} \right) \quad (4.19)$$

^۱ heat transfer convective coefficient

و این بار ضرایب احتمالاتی به صورت زیر خواهند بود:

$$P_{x-} = \frac{1}{2+Bi} \quad \text{و} \quad P_{x+} = \frac{Bi}{2+Bi}, \quad P_{y+} = P_{y-} = \frac{0.5}{2+Bi}$$

و مثل حالت قبل دقت داشته باشید که مجموع ضرایب یک می باشد:

$$P_{x-} + P_{x+} + P_{y-} + P_{y+} = 1 \quad (4.20)$$

با این شرایط مرزی چون دمای مرز معلوم نیست، وقتی ذره به نود واقع در روی مرز رسید، باز هم عدد تصادفی را تولید می کنیم و به صورت زیر عمل می کنیم:

$\varepsilon = \text{random number}$

$$\text{if} : 0 < \varepsilon < P_{x-} \Rightarrow (x, y) \rightarrow (x + \Delta, y)$$

$$f : P_{x-} < \varepsilon < (P_{x-} + P_{y+}) \Rightarrow (x, y) \rightarrow (x - \Delta, y)$$

$$\text{if} : (P_{x-} + P_{y+}) < \varepsilon < (P_{x-} + P_{y+} + P_{y-}) \Rightarrow (x, y) \rightarrow (x, y + \Delta)$$

$$\text{if} : (P_{x-} + P_{y+} + P_{y-}) < \varepsilon < 1.00 \Rightarrow (x, y) \rightarrow (x, y - \Delta)$$

با توجه به رابطه ۱۹،۴ که برای نودهای روی مرز Contective به دست آمد، دقت داشته باشید اضافه شدن عبارت چشمه برای این گونه نودها به صورت زیر خواهد بود:

$$S(m) = 0 \rightarrow \text{جمع کننده اثر چشمه حرارتی}$$

$$S(m+1) = S(m) + \frac{\Delta x^2}{2(2+Bi)k} \dot{q}$$

$$S(m+1) = S(m)$$

اگر محدوده عدد تصادفی طوری بود که ذره با گام بعدی خود وارد سیال شود، آنگاه دمای سیال را یادداشت می کنیم (T_∞) و حرکت ذره پایان می یابد. به همین ترتیب ذره بعدی را از همان نقطه اول آزاد می کنیم تا بالاخره وارد سیال شده و جذب شود.

$$T(m) = 0 \rightarrow \text{جمع کننده دما}$$

$$T(m+1) = T(m) + T_\infty + S(m)$$

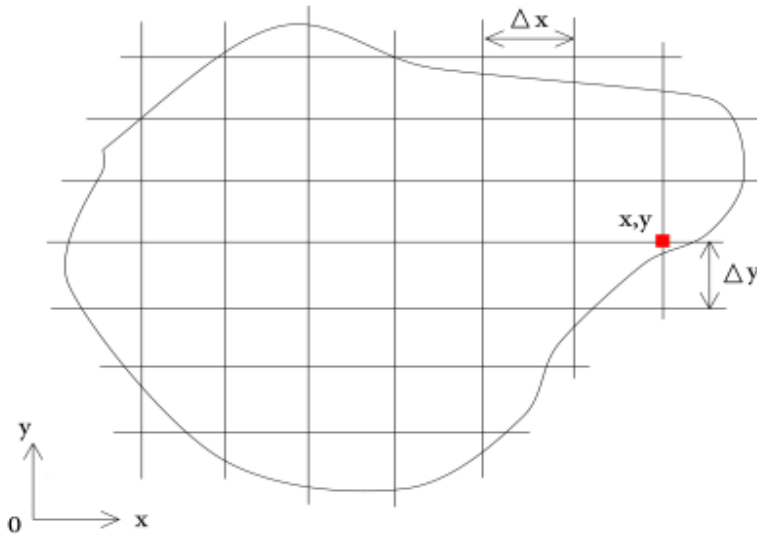
$$T(m+1) = T(m)$$

با توجه به توضیحات بالا برای نودهای میانی برای تعیین جهت حرکت ذره از رابطه $17,4$ و برای نودهایی که روی مرز Convective قرار دارند از رابطه $19,4$ استفاده می‌کنیم. با این شرایط مرزی نیز اگر تعداد ذراتی که از نقطه (x,y) آزاد می‌شوند N باشد، آنگاه دمای نقطه (x,y) از رابطه زیر به دست خواهد آمد:

$$T(x, y) = \frac{1}{N} T(m)$$

با افزایش N جواب به دست آمده برای $T(x,y)$ به جواب واقعی نزدیک‌تر خواهد شد.

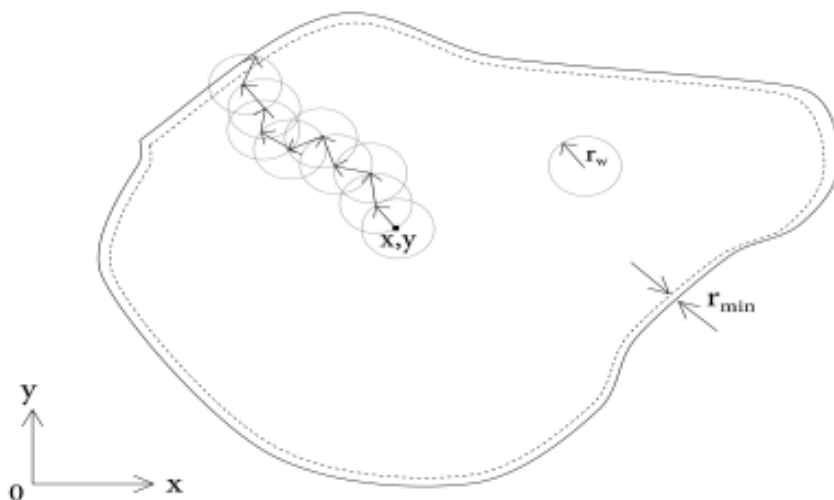
اگر از روش FRW برای به دست آوردن دمای تمامی نقاط استفاده شود. در واقع به دست آوردن توزیع دما در کل جسم، برنامه مورد نظر دارای زمان شبیه‌سازی طولانی‌تری نسبت به سایر روش‌های عددی مانند تفاضل محدود و احجام محدود خواهد داشت. اما مزیتی که این روش دارد قابلیت به دست آوردن دمای هر نود به طور مستقل از سایر نودها و بدون اینکه ماتریسی حل شود می‌باشد. در شرایطی که بخواهیم دمای نقاط خاصی را به دست آوریم و نیازی نداشته باشیم که توزیع دما در کل جسم را به دست آوریم این روش می‌تواند گزینه مناسبی باشد. پیاده‌سازی این روش برای هندسه‌های پیچیده به دلیل مشکل بودن دستیابی به ضرایب احتمالاتی مناسب نمی‌باشد، زیرا احتمالاً نودهایی در نزدیکی مرز قرار خواهند گرفت که نه می‌توان مثل نود میانی با آن‌ها رفتار کرد و نه مثل نودهای روی مرز. چون مشی که این گونه نودها در آن قرار دارند، بخشی در جسم و بخشی در خارج از جسم قرار خواهد گرفت (مثلاً نود نشان داده شده در شکل ۴-۱۳).



شکل ۴-۱۳- سخت بودن استفاده از روش FRW در هندسه‌های پیچیده

۴-۳-۲- حالت دوم SFRW

این روش به لحاظ طول گام مانند حالت قبل است (یعنی طول گام‌های ذره ثابت است و تفاوت این حالت با حالت قبلی در این است که نیازی نیست جسم را نودبندی کنیم و جهت حرکت ذره را محدود کنیم. ذره با طول گام‌های ثابت ولی با هر جهت دلخواه می‌تواند حرکت کند. مزیت اصلی این روش قابلیت به کارگیری آن در هندسه‌های پیچیده می‌باشد. شکلی با هندسه دلخواه مانند شکل ۴-۱۴ که با سیالی با دما و ضریب انتقال حرارت جابجایی (h) معلوم در تماس است در نظر بگیرید. می‌خواهیم دمای نقطه‌ای با مختصات (x, y) در جسم را به دست آوریم. به ذره می‌گوییم با گامی به اندازه مشخص (r_w) ولی جهتی تصادفی (w_i) حرکت خود را آغاز کند.



شکل ۴-۱۴- نحوه حرکت ذره فرضی در جسمی با هندسه دلخواه تا خروج از جسم در روش *SFRW*

ذره در هر مکان که قرار دارد دایره‌ای با شعاع (r_w) (که همان طول گام است) و به مرکز مکان ذره تعریف می‌کنیم و ذره را در جهتی تصادفی و به اندازه (r_w) حرکت می‌دهیم. ذره آنقدر به حرکت خود ادامه می‌دهد تا به اندازه کافی به نزدیکی مرز برسد به فاصله r_{min} از مرز برسد) تا بتوان معادلات حاکم در مرز را برای آن در نظر گرفت. معادلات حاکم در مرز در واقع همانند روابطی هستند که برای نودهای روی مرز با توجه به شرایط مرزی حاکم، در روش *FRW* به دست آمد. برای تولید جهت تصادفی می‌توانیم عددی تصادفی در بازه $[0, 1]$ تولید کرده و در ۲ ضرب کنیم $(wi = 2\pi * \text{random number})$. مکان بعدی ذره به صورت زیر خواهد بود:

$$\begin{aligned} x_{i+1} &= x_i + r_w \cos(wi) & y_{i+1} &= y_i + r_w \sin(wi) \end{aligned} \quad (4.21)$$

برای در نظر گرفتن اثر چشمه حرارتی، مانند روش FRW دقت داشته باشید به ازای هر بار که ذره گام برمی دارد، عبارت $\frac{r_w^2}{4k} \dot{q}$ جمع می شود، یعنی داریم:

جمع کننده اثر چشمه حرارتی $\rightarrow S(m) = 0$

$$S(m+1) = S(m) + \frac{r_w^2}{4k} \dot{q}$$

$$S(m+1) = S(m)$$

فرض کنید اندازه گام ذره r_w است و اگر ذره به اندازه r_{min} به مرز نزدیک شد بتوانیم معادلات حاکم در مرز را برای ذره در نظر بگیریم، به صورت زیر:

$$T(x_i, y_i) = \frac{1}{1+Bi} \left(T(x_{i+1}, y_{i+1}) + BiT_\infty + \frac{r_w^2}{2k} \dot{q} \right) \quad (4.22)$$

که در رابطه فوق ضرایب احتمالاتی به صورت زیر خواهند بود:

$$P_{x-} = \frac{1}{1+Bi} \quad P_{x+} = \frac{Bi}{1+Bi} \quad Bi = \frac{hr_w}{k} \quad (4.23)$$

ذره با احتمال P_{x-} به داخل جسم با زاویه ای تصادفی و با گامی به اندازه r_w باز خواهد گشت و با احتمال P_{x+} از جسم عبور کرده و وارد سیال شده و جذب می شود. دقت کنید که در این حالت فقط می خواهیم عبور کردن و یا بازگشتن ذره به داخل جسم را تعیین کنیم لذا نیازی به P_{y+} و P_{y-} نخواهیم داشت. اضافه شدن عبارت شامل چشمه، برای نودی که در ناحیه فرضی قرار دارد به صورت زیر خواهد بود:

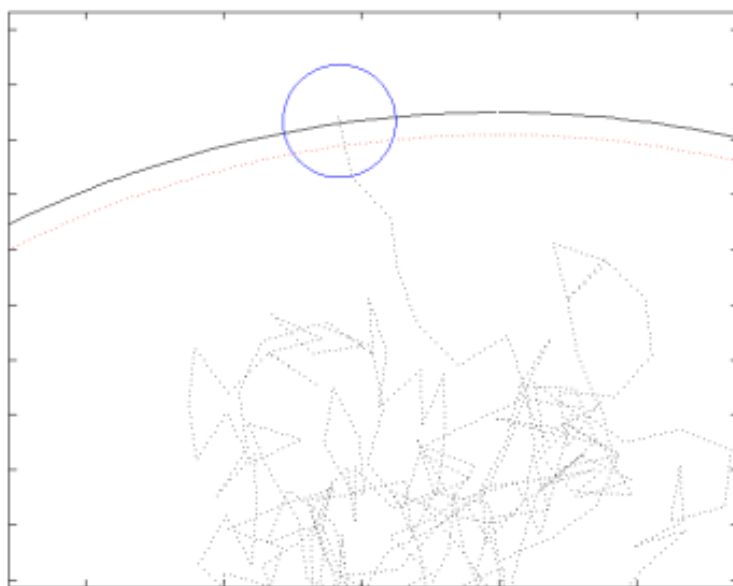
جمع کننده اثر چشمه حرارتی $\rightarrow S(m) = 0$

$$S(m+1) = S(m) + \frac{r_w^2}{2(1+Bi)k} \dot{q}$$

$$S(m+1) = S(m)$$

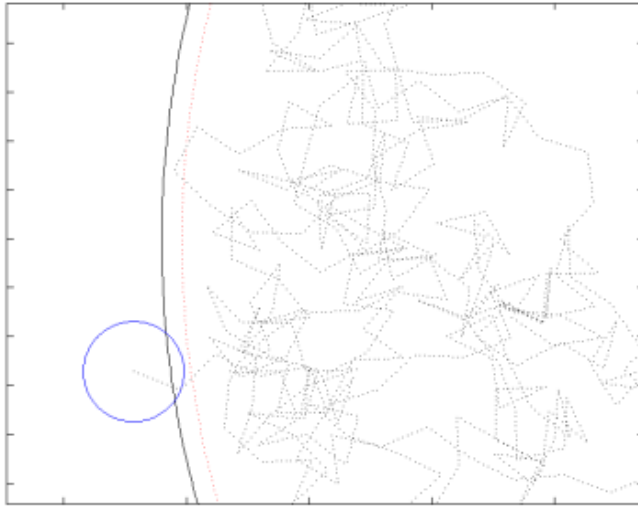
لازم به ذکر است که نسبت بین Γ_w و Γ_{\min} در نحوه خروج ذره از جسم و یا بازگشتن ذره به جسم تعیین کننده است. اگر بزرگ تر از Γ_{\min} باشد، در حالت پیش خواهد آمد:

(۱) ممکن است ذره در حین حرکت بدون ورود به ناحیه فرضی از مرز خارج شود (شکل ۴-۱۵).



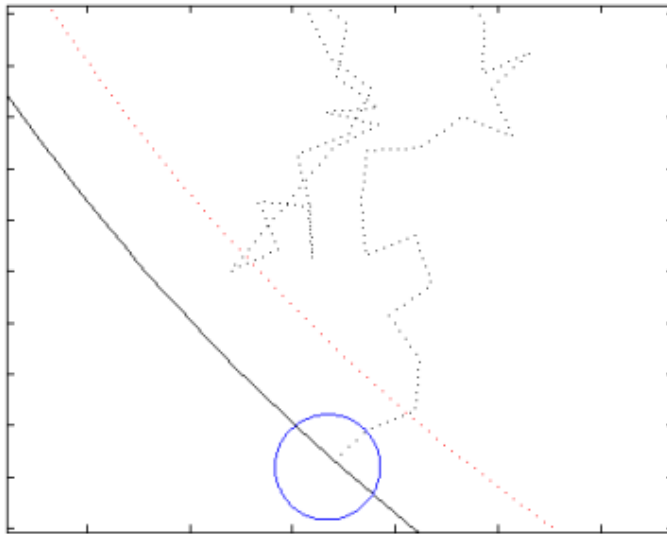
شکل ۴-۱۵، $\Gamma_{\min} < \Gamma_w$ ، خروج ذره از محدوده جسم بدون ورود به ناحیه فرضی

(۲) ممکن است ذره ابتدا وارد ناحیه فرضی شود و با احتمال P_{x-} به داخل جسم بازگشته و با احتمال P_{x+} عبور کند (شکل ۴-۱۶).



شکل ۴-۱۶- $\Gamma_w < \Gamma_{\min}$ ، ذره با ورود به ناحیه فرضی با احتمال P_{x-} به جسم بازمی‌گردد و با احتمال P_{x+} از جسم خارج می‌شود

اگر Γ_w کم‌تر از Γ_{\min} باشد، تنها یک حالت پیش خواهد آمد، ذره قطعه وارد ناحیه فرضی خواهد شد و با احتمال P_{x-} به داخل جسم بازگشته و با احتمال P_{x+} عبور می‌کند (شکل ۴-۱۷).



شکل ۴-۱۷- $\Gamma_w < \Gamma_{\min}$ ذره قبل از خروج از جسم حتماً وارد ناحیه فرضی خواهد شد

بدین ترتیب با پایان یافتن حرکت ذره و در واقع جذب شدن ذره در سیال، دما را به صورت زیر یادداشت می‌کنیم:

$$T(m) = 0 \rightarrow \text{جمع کننده دما}$$

$$T(m+1) = T(m) + T_{\infty} + S(m)$$

$$T(m+1) = T(m)$$

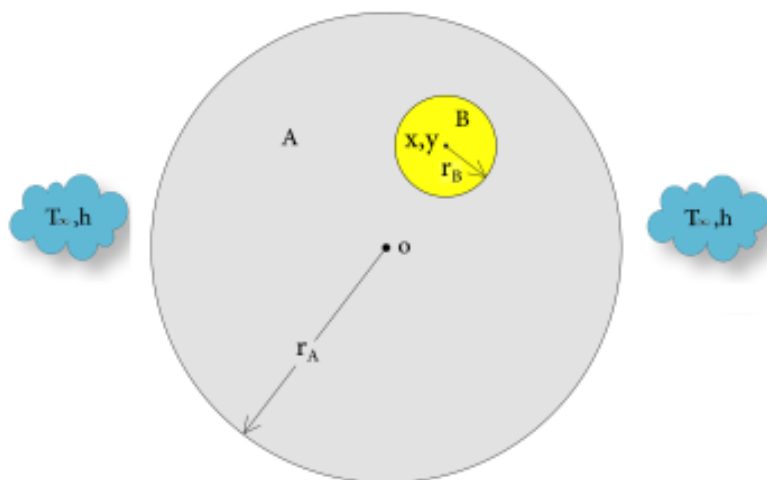
با توجه به توضیحات بالا وقتی ذره وارد سیال شد، جذب شده و حرکت آن پایان می‌یابد. با جذب شدن ذره اول، ذره بعدی را دوباره از همان نقطه (x,y) آزاد می‌کنیم تا حرکت کرده و بالاخره جذب شود. اگر تعداد ذراتی که از نقطه (x,y) آزاد می‌شوند N باشد، آنگاه دمای نقطه (x,y) از رابطه زیر به دست خواهد آمد:

$$T(x, y) = \frac{1}{N} T(m)$$

با افزایش V جواب به دست آمده برای $T(x,y)$ به جواب واقعی نزدیک‌تر خواهد شد.

این روش نیز مانند روش FRW دمای هر نقطه را به طور مستقل از سایر نقاط به دست می‌دهد و به لحاظ زمان شبیه‌سازی سریع‌تر از آن می‌باشد. برای به دست آوردن توزیع دما با این روش، ابتدا باید مختصات نقاط را به برنامه بدهیم تا ذره شروع حرکت خود را از این نقاط در نظر بگیرد. مزیت بسیار خوب این روش قابلیت به کارگیری آن در هندسه‌های پیچیده می‌باشد که حتی روش‌های عددی قبلی نیز در حل مسائلی با هندسه‌های پیچیده با مشکل روبرو می‌شوند. برای اینکه کارایی این روش را در هندسه‌های پیچیده‌تر بینیم مثالی در ادامه ارائه می‌کنیم.

مثال ۳: جسمی مانند شکل ۴-۱۸ در نظر بگیرید که دارای توزیع غیریکنواخت چشمه تولید حرارت می‌باشد. با فرض اینکه فقط در ناحیه B چشمه انرژی داریم، می‌خواهیم دمای مرکز این ناحیه را با روش SFRW به دست آوریم.



شکل ۴-۱۸- توزیع غیریکنواخت چشمه حرارت در قرص

$$r_A = 1\text{cm} \quad r_B = 0.2\text{cm} \quad \dot{q}_B = 3 \times 10^8 \frac{\text{W}}{\text{cm}^3} \quad k_A = 14 \frac{\text{W}}{\text{m}\cdot\text{C}} \quad k_B = 3.6 \frac{\text{W}}{\text{m}\cdot\text{C}}$$

$$x = 0.35\text{cm} \quad y = 0.45\text{cm} \quad h = 34000 \frac{\text{W}}{\text{m}^2\text{C}} \quad T_\infty = 200\text{C}$$

دمای مرکز ناحیه B را به ازای تعداد ذرات r_w مختلف در جدول ۴-۴ مشاهده می‌کنیم ($r_{\min} = 0.05r_A$):

جدول ۴-۴- دمای مرکز ناحیه B با روش SFRW به ازای تعداد ذرات مختلف

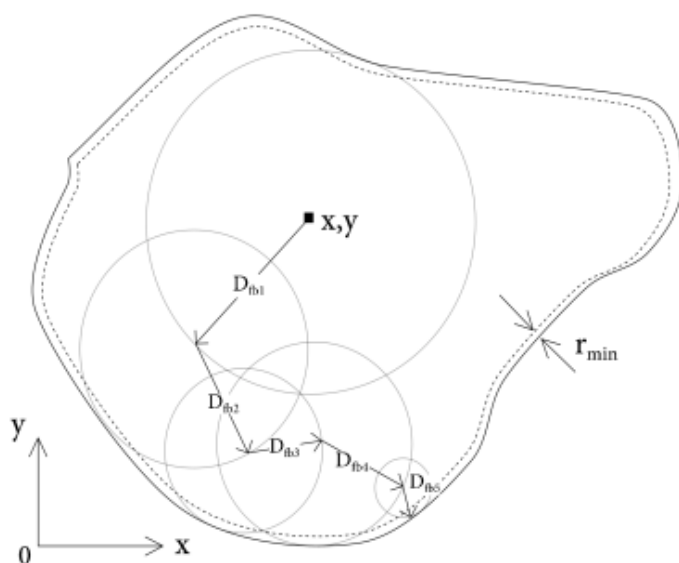
N	$T_{x,y} (\text{C})$		
	$r_{w1} = 0.05r_A$	$r_{w1} = 0.025r_A$	$r_{w1} = 0.01r_A$
۵۰۰	۴۹۷	۴۲۳	۴۸۱
۱۰۰۰	۴۷۶	۵۰۱	۴۶۹
۲۰۰۰	۴۸۳	۴۷۲	۴۷۳

اگر این مسأله را بخواهیم با روش‌های عددی رایج حل کنیم شاید به سادگی میسر نباشد. چون معادلاتی که باید برای هر نود بنویسیم کاملاً به مکان نودها وابسته می‌باشند و با تغییر تعداد نودها، تمامی نودهای نزدیک ناحیه B باید چک شوند که آیا در داخل ناحیه B قرار دارند یا خیر؟ در چه

فاصله‌ای از مرز ناحیه B قرار دارند؟ ولی در این روش کافی ست مختصات نقطه را به برنامه بدهیم و دما را به دست آوریم.

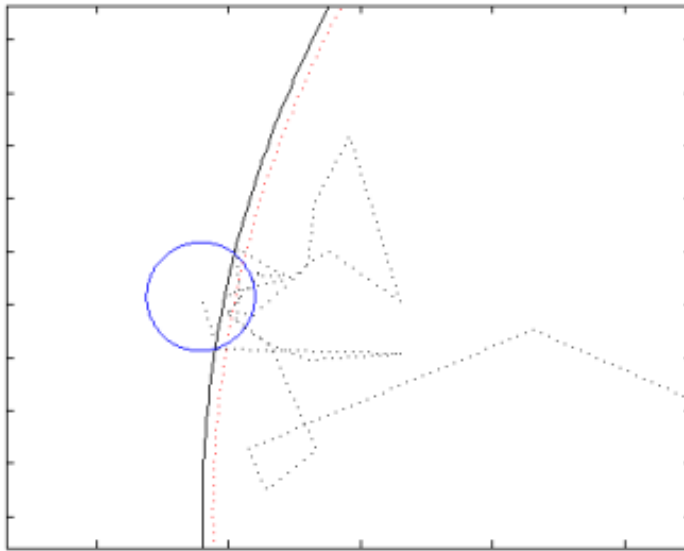
۴-۳-۳- حالت سوم FFRW

در این حالت نیز نیازی نیست فضا را نودبندی کنیم و برای ذره نه اندازه گام ثابت است و نه جهت حرکت محدود می‌باشد. تفاوت این حالت با حالت قبل در اندازه گام ذره است. در این حالت ذره نزدیک‌ترین فاصله خود را از مرز اندازه می‌گیرد (D_{fb}) و با گامی به اندازه آن و در جهتی کاملاً تصادفی حرکت می‌کند. این کار آنقدر ادامه می‌یابد تا ذره به اندازه کافی به مرز نزدیک شود تا بتوان معادلات حاکم در مرز را برای آن در نظر گرفت. مزیت اصلی این روش کوتاهی زمان شبیه‌سازی برنامه مربوطه است. شکلی با هندسه دلخواه مانند شکل ۴-۱۹ که با سیالی با دما و ضریب انتقال حرارت جابجایی (h) معلوم در تماس است در نظر بگیرید. می‌خواهیم دمای نقطه‌ای با مختصات (x,y) در جسم را به دست آوریم.



شکل ۴-۱۹- نحوه حرکت ذره فرضی در جسمی با هندسه دلخواه تا خروج از جسم در روش FFRW

در این حالت ذره قبل از خروج از جسم و وارد شدن به سیال قطعه وارد ناحیه فرضی خواهد شد و ادامه حرکت ذره همانند قبل توسط روابط حاکم در مرز تعیین خواهد شد.



شکل ۴-۲۰- در روش FFRI ذره قبل از خروج از جسم حتماً به ناحیه فرضی وارد خواهد شد

در هر بار حرکت ذره مکان بعدی آن به صورت زیر خواهد بود (سه زاویه تصادفی می‌باشد):

$$x_{i+1} = x_i + D_{fbi} \cos(wi) \quad y_{i+1} = y_i + D_{fbi} \sin(wi) \quad (4.24)$$

برای اینکه اثر چشمه حرارتی را در نظر بگیریم دقت داشته باشید به ازای هر بار که ذره گام

برمی‌دارد، عبارت $\frac{D_{fbi}^2}{4k} \dot{q}$ جمع می‌شود، یعنی داریم:

جمع کننده اثر حرارتی $S(m) = 0 \rightarrow$

$$S(m+1) = S(m) + \frac{D_{fbi}^2}{4k} \dot{q}$$

$$S(m+1) = S(m)$$

وقتی ذره وارد ناحیه فرضی شد معادلات حاکم در مرز را برای ذره به صورت زیر در نظر می‌گیریم:

$$T(x_i, y_i) = \frac{1}{1 + Bi} \left(T(x_{i+1}, y_{i+1}) + BiT_\infty + \frac{D_{fbi}^2}{2k} \dot{q} \right)$$

(4.25)

در رابطه فوق ضرایب احتمالاتی به صورت زیر خواهند بود:

$$P_{x-} = \frac{1}{1+Bi} \quad P_{x+} = \frac{Bi}{1+Bi} \quad Bi = \frac{hr_w}{k}$$

(4.26)

که در آن D_r شعاعی است که ذره با گامی به اندازی آن و با زاویه‌ای تصادفی به داخل جسم بازمی‌گردد و بهتر است D_r به گونه‌ای انتخاب شود که ذره از مرزی که به نزدیکی آن رسیده است زیاد فاصله نگیرد. بنابراین با توجه به ضرایب احتمالاتی ذره با احتمال P_{x-} به داخل جسم و با زاویه‌ای تصادفی و گامی به اندازه D_r باز خواهد گشت و با احتمال P_{x+} از جسم عبور کرده و وارد سیال شده و جذب می‌شود. دقت کنید در این حالت نیز فقط می‌خواهیم عبور کردن و یا بازگشتن ذره به داخل جسم را تعیین کنیم لذا نیازی به P_{x+} و P_{x-} نخواهیم داشت. بدین ترتیب با پایان یافتن حرکت ذره و در واقع جذب شدن ذره در سیال، دما را به صورت زیر یادداشت می‌کنیم:

$$T(m) = 0 \rightarrow \text{جمع‌کننده دما}$$

$$T(m+1) = T(m) + T_\infty + S(m)$$

$$T(m+1) = T(m)$$

با توجه به توضیحات بالا وقتی ذره وارد سیال شد، جذب شده و حرکت آن پایان می‌یابد. با جذب شدن ذره اول، ذره بعدی را دوباره از همان نقطه (x,y) آزاد می‌کنیم تا حرکت کرده و بالاخره جذب شود. اگر تعداد ذراتی که از نقطه (x,y) آزاد می‌شوند N باشد، آنگاه دمای نقطه (x,y) از رابطه زیر به دست خواهد آمد:

$$T(x,y) = \frac{1}{N} T(m)$$

همان‌طور که اشاره شد این متد بسیار سریع‌تر از دو حالت قبل می‌باشد. مانند حالات قبلی با افزایش N جواب به دست آمده برای $T(x,y)$ به جواب واقعی نزدیک‌تر خواهد شد.

منابع

۱. کمال قره باش، پایان نامه رشته مهندسی هسته‌ای، دانشگاه صنعتی امیرکبیر، سال تحصیلی ۱۳۹۳-۱۳۹۴، "شبیه‌سازی انتقال حرارت گذرا در سوخت هسته‌ای با استفاده از روش مونت کارلو".
2. Joao Seo and Frank Verhaegen, 2013, CRC Press A Taylor & Francis Book, "Monte Carlo technique in radiation therapy", ISBN: 9781466507920.