

光子と物質の相互作用に関するモンテカルロ・シミュレーションのプログラミング

上原, 周三
九州大学医療技術短期大学部一般教育助教授

<https://doi.org/10.15017/136>

出版情報：九州大学医療技術短期大学部紀要. 11, pp.1-16, 1984-03-01. 九州大学医療技術短期大学部
バージョン：
権利関係：

光子と物質の相互作用に関するモンテカルロ

・ シミュレーションのプログラミング

上原 周三*

A Programming of Monte Carlo Simulation for the Interaction of Photons with Matter

SHUZO UEHARA

I 緒言

モンテカルロ法は、乱数を取扱う技法の総称である。確率的事象に対して、とりわけ有力な方法であり、粒子の輸送現象の解析にしばしば用いられる。この方法を用い、実験条件を模擬して計算機によって実験を行なうことを、モンテカルロ・シミュレーションという。

光子についてのモンテカルロ計算は、これまでも多数なされている。^{4,5,6,8,11,13}この方法の特長は

- ① 実験的に求めることが不可能な現象や、複雑な実験システムの場合でも、容易に結果を予測することができる。
- ② 光子と物質の相互作用の結果生じるあらゆる現象に対して、多方面に応用できる。
- ③ 特定分野の専門的知識がなくても、ごく基本的な事柄だけから、解を得ることができる。たとえば線量分布計算がその例である。などを挙げることができる。

一方欠点は、統計的ゆらぎを避けることができないので、多数回の試行を繰り返すことになり、そのため演算時間が長くなる点である。しかし、大型計算機が容易に利用できるようになった現在、これは大きな問題ではなくなった。

放射線治療や診断の物理的側面は、放射線とりわけ光子と物質の相互作用そのものであり、

この方法の良い対象である。¹⁵これらに関連する現象について、モンテカルロ・シミュレーションのFORTRANプログラムを作成した。大筋のフローチャートは、文献の多くに示されているが、細部は明らかにされていないので、アルゴリズムや手法を独自に開発しなければならなかった。プログラミングの段階で工夫を要した点、処理方法、サブルーチンなどの技術的問題をⅢで述べる。すでに5種類の異なる課題について、完結したプログラムを作成しているが、これらの詳細と計算結果は別稿に譲る。本稿ではⅣにおいて、若干の留意点を述べるにとどめる。

II TSS 端末

一般に、長い演算時間を要するモンテカルロ法は、高速で記憶容量の大きい大型計算機によって計算される。

九大大型計算機センター・FACOM M200およびM382のTSS (Time Sharing System) 利用によって、プログラム開発・演算を行なった。ホストコンピュータ (大型) に300ボー (ビット/秒) の交換回線を接続し、音響カプラ、RS232Cインターフェイスを介して、TSS 端末にはパソコンMZ80Bを用いた。システム図をFig. 1に示す。端末の送受信制御のためのアセンブラプログラム¹⁷は、フロッピーディスクを用いたファイル転送こそ未完成だけれども、スクリーンエディット機能、プリンタ

* 九州大学医療技術短期大学部一般教育助教授

制御機能を備えており、MZ80Bはインテリジェント端末として働く。これとTSSコマンド⁷⁾

の活用によって、大型計算機の有効利用と作業能率の大幅な向上が実現できた。

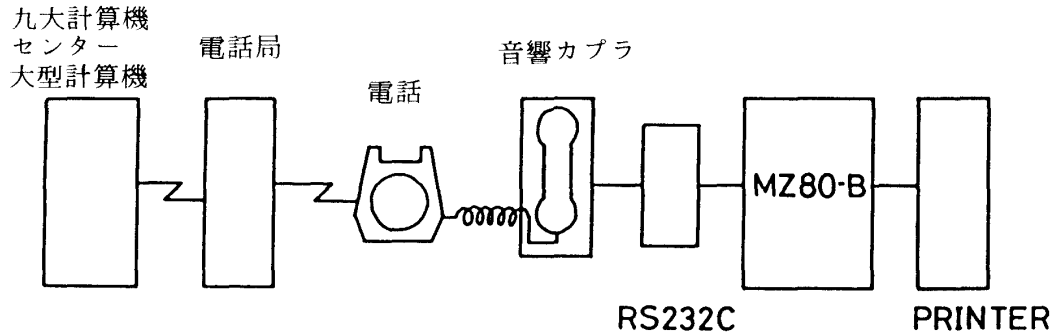


Fig. 1 TSS 端末システム

Ⅲ 共通に用いられるルーチン及び手法

Ⅲ.1 乱数

モンテカルロ法では、質のよい乱数が要求される。[0, 1] の一様乱数には、FACOM 科学計算ライブラリ SSL II より RANU2 を利用した。このサブルーチンの出力は一般に N 個の要素からなる 1 次元配列として得られるが、N = 1 と与えておけば、CALL するごとに配列と同じ順序で 1 個ずつ発生させることができる。ここで作成したプログラムにおいて、RANU2 が呼び出される回数は、1 光子ヒストリーにつき 20 - 30 回に及ぶ。

RANN2 は正規分布をなす乱数を発生させるサブルーチンであり、検出器のレスポンスを求める計算において、検出器分解能が有限の場合のサンプリングに使用される。

なお、これらのサブルーチンにおける初期パラメタ IX, N は、RANN2 が RANU2 を基に導出されるので、共通に用いられる。

Ⅲ.2 座標系と初期条件

通常、3次元カーチアン座標系 (x, y, z) を設定し、これを物質固定系と称する。原点は実験条件に応じて、たとえば線源の位置、ファントムの中心、あるいは検出器の表面などに置く。いったん、座標系を決定すれば、実験条件に対応させて、寸法、位置などを入力する。cgs 単位が一般的であるが、エネルギーは keV 単位が便利である。

光子の進行方向の、各座標軸の正方向につい

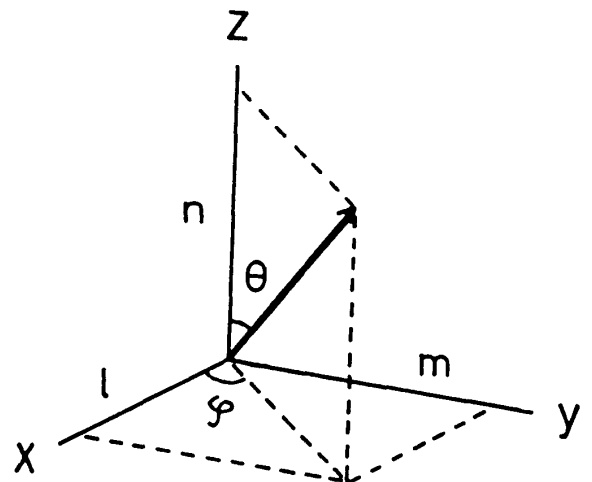


Fig. 2 座標系と光子の進行方向

での方向余弦を (l, m, n) とする。Fig. 2 に示すように、光子の進行方向と z 軸のなす極角 θ 、xy 面への射影の方位角 φ とおけば

$$\begin{aligned} l &= \sin \theta \cdot \cos \varphi \\ m &= \sin \theta \cdot \sin \varphi \\ n &= \cos \theta \end{aligned} \quad (1)$$

である。光子が等方的に放出される場合の、方向余弦のサンプリング法について、以下に示す。

方向余弦の z 成分は

$$n = 2\xi - 1, \quad (2)$$

また、方位角は、

$$\varphi = \pi (2\eta - 1) \quad (2')$$

となる。(1), (2), (2)' 式より (l, m, n) は乱数 ξ, η によって表わされ、サンプリングされたことになる。

ここで、一様な強度分布を持つ、半径 a の円

上 原 周 三

形線源が (x , y) 面にある場合を考える。出発時の進行方向は、上記のとおりである。一方、出発地点は、円内の各点を一様にサンプリングする¹⁾ことによって得られる。ξ, ηを新たな乱数とすれば

$$\begin{aligned} x &= a \sqrt{\xi} \cos \pi (2 \eta - 1) \\ y &= a \sqrt{\xi} \sin \pi (2 \eta - 1) \end{aligned} \quad (3)$$

となり、a = 0 ならば点線源を表わす。ヒストリーを始めるときは、この例のように出発地点と進行方向の初期値を与えておかなければならない。

III.3 自由行程

1. 境界がない場合

光子が物質中を進むとき、反応を起こす点までの飛行距離を自由行程といい、乱数ξを用いて

$$R = - \ln \xi / \sigma_{tot} \quad (4)$$

で与えられる。³⁾

σ_{tot} は物質の全反応断面積を cm⁻¹ 単位であらわした線吸収係数で、したがって R は cm 単位で得られる。全断面積は光電効果 σ_{photo}、インコヒーレント散乱 σ_{incoh}、コヒーレント散乱 σ_{coh} および電子対生成 σ_{pair} の和：

$$\sigma_{tot} = \sigma_{photo} + \sigma_{incoh} + \sigma_{coh} + \sigma_{pair} \quad (5)$$

である。

1 keV - 8 MeV の範囲のエネルギーにおける断面積のデータは Storm, Israel¹⁸⁾ によるテーブルを用いた。このデータは、別の用途にも使用することが多い基礎データなので、随時読み出せるよう、元素記号を冠したデータセットにファイルした。

テーブル中のエネルギーの中間の値、E に対する断面積 σ は、両対数内挿により求めた。すなわち、テーブルのエネルギーを EX_{i-1} と E X_i、その中間のエネルギーを E とすれば

$$r = (\log E - \log EX_{i-1}) / (\log EX_i - \log EX_{i-1})$$

$$\sigma = 10^{(\log \sigma_{i-1} + r \cdot (\log \sigma_i - \log \sigma_{i-1}))}$$

(6)

となる。

ところで Storm, Israel のデータは Barn / Atom 単位で与えられている。(4) 式の計算のために、これを cm⁻¹ 単位に変換する必要があった。

一般に物質が分子の場合について、単位の変換法を述べる。1モルの質量を M (g), 密度を ρ (g / cm³), 化学式の j 番目の元素の原子数を f^j とすれば、その元素についての換算定数 K は

$$K^j = 0.6023 \cdot \rho \cdot f^j / M \quad (7)$$

であり、B / A 単位で表わされている断面積にこれを掛ければ、cm⁻¹ 単位に変換することができる。いくつかの物質についての換算定数を Table 1 に示す。

Table 1 種々の物質の換算定数 ; K

matter	ρ (g/cm ³)	M (g)	K
Ge	5.4	72.59	0.04481
Na I	3.67	149.89	Na 0.01475 I 0.01475
water (H ₂ O)	1.0	18.02	H 0.06687 O 0.03343
lucite (C ₅ H ₈ O ₂)	1.18	100.12	C 0.03549 H 0.05679 O 0.01420

相互作用の型および元素の種類をそれぞれ i, j で指定すれば、分子の全断面積 σ_{tot}^{mol} (cm⁻¹) は

$$\sigma_{tot}^{mol} (cm^{-1}) = \sum_j \sum_i K^j \cdot \sigma_i^j (B/A) \quad (8)$$

によって得られる。(8) 式において j = 1 の場合、左辺は単原子物質の線吸収係数になる。

2. 境界がある場合

Fig. 3 のように、物質 I における自由行程が長く、境界を越えて異なる物質 II に入る場合には、(4) 式はそのまま適用できない。そこで、光子の進路と境界面の交点を求め、そこを基点に、あらためて II における自由行程を (4) 式によってサンプリングする。ただし、エネルギーと方向は、I における値を保持している。

光子と物質の相互作用に関するモンテカルロ・シミュレーションのプログラミング

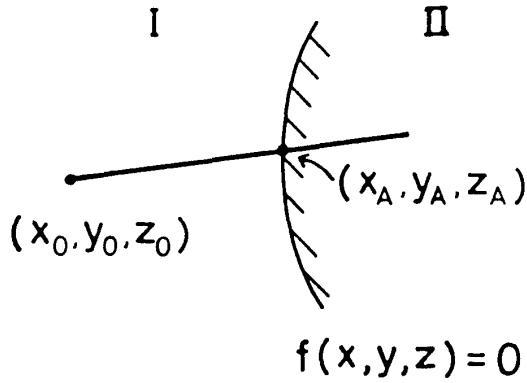


Fig. 3 異なる物質間での自由行程

明瞭な境界がある場合、境界面の一般形は x, y, z の 2 次関数

$$f(x, y, z) = 0 \quad (9)$$

で表わされる。一方、 (x_0, y_0, z_0) を出発した光子が、行程 R 進んだときの位置は

$$\begin{aligned} x &= x_0 + R \cdot l \\ y &= y_0 + R \cdot m \\ z &= z_0 + R \cdot n \end{aligned} \quad (10)$$

である。

(9), (10) 式より R を消去して解けば、入射点 (x_A, y_A, z_A) が求まる。いくつかの具体例を次に示す。

a) 傾きのない平面 (Fig. 4 a)

$$\begin{aligned} z_A &= z_1 \\ x_A &= x_0 + \frac{1}{n} (z_A - z_0) \\ y_A &= y_0 + \frac{m}{n} (z_A - z_0) \end{aligned} \quad (11)$$

b) 傾いた厚さ d の平板 (Fig. 4 b)

板の上面との交点は

$$z_A = \frac{nd + 2 \sin \alpha (lz_0 - nx_0)}{2 (l \sin \alpha - n \cos \alpha)} \quad (12)$$

x_A, y_A は (11) 式と同様である。

c) 3 次元曲面 (Fig. 4 c)

z についての一般解は

$$z_{\pm} = \frac{B \pm \sqrt{B^2 - AC}}{A} \quad (13)$$

の 2 交点になる。ただし、 $B^2 - AC < 0$ の場合には交わらず、I での進行を続ける。単純な境界面については、解析的な解があり、 A, B, C は次の通りである。

c - 1) 円柱 ($x^2 + z^2 = a^2, -\infty < y < \infty$)

$$A = l^2 + n^2$$

$$B = l^2 z_0 - l n x_0 \quad (14)$$

$$C = (l z_0)^2 - 2 l n x_0 z_0 + n^2 (x_0^2 - a^2) \\ c - 2) \text{円柱} (x^2 + z^2 = a^2, -\frac{h}{2} \leq y \leq \frac{h}{2})$$

(14) 式と同じだが、高さが有限なので交わらないことがある。また、底面から入射する場合の交点は

$$\begin{aligned} y_A &= \pm h / 2 \\ x_A &= x_0 + \frac{1}{m} (y_A - y_0) \\ z_A &= z_0 + \frac{n}{m} (y_A - y_0) \end{aligned} \quad (15)$$

となる。

c - 3) 球 ($x^2 + y^2 + z^2 = a^2$)

$$A = 1$$

$$B = (l^2 + m^2) z_0 - n (l x_0 + m y_0)$$

$$C = (l^2 + m^2) z_0^2 - 2 n z_0 (l x_0 + m y_0) \\ + n^2 (x_0^2 + y_0^2 - a^2) \quad (16)$$

c - 4) 放物面 ($x^2/a^2 + y^2/b^2 = 2z$)

$$A = l^2 b^2 + m^2 a^2$$

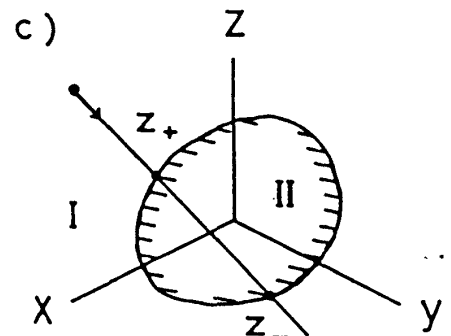
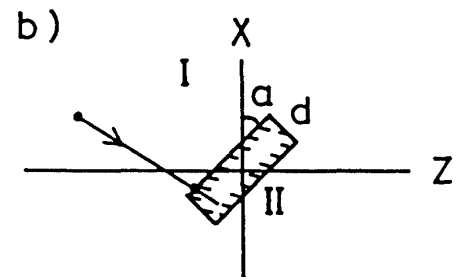
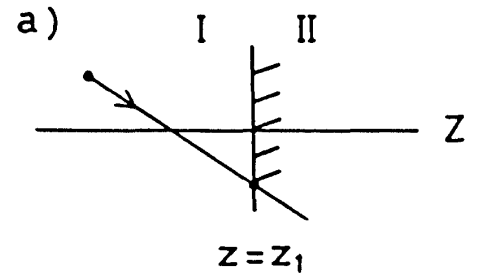


Fig. 4 光子と境界面上の交点

上原 周三

$$B = l^2 b^2 z_0 + m^2 a^2 z_0 + n^2 a^2 b^2 - l n b^2 x_0 - m n a^2 y_0 \quad (17)$$

$$C = b^2 (l z_0 - n x_0)^2 + a^2 (m z_0 - n y_0)^2$$

物質Ⅱから逃げ出す場合も、同じ解になる。ただし、(13)式のように2交点が存在する場合に、どちらを採用するかは、進行方向も考慮して決めなければならない。すなわち、 $z_+ \geq z_-$ だから、図から明らかなように

Ⅰ→Ⅱの場合

$$\begin{aligned} \text{もし } n > 0 \text{ ならば } z_A &= z_- \\ n < 0 \text{ ならば } z_A &= z_+, \end{aligned}$$

Ⅱ→Ⅰの場合

$$\begin{aligned} \text{もし } n > 0 \text{ ならば } z_A &= z_+ \\ n < 0 \text{ ならば } z_A &= z_- \end{aligned}$$

となる。これから、(11)式と同様にして、 x_A 、 y_A も求めることができる。ここではたまたま、 z について解いたが、 x あるいは y の解でもかまわない。

人体の臓器は、近似的に上記のいずれかの曲面で模擬することができる。組織(Ⅰ)中に臓器(Ⅱ)が存在し、それにX線を照射するような場合のシミュレーションにおいて、ここで得られた結果は有用であった。

Ⅲ.4 実験室系から物質固定系への座標回転

散乱の理論は、入射方向を z 軸にとって散乱角を与える。これを実験室系(ターゲット静止系)と呼ぶ。一般に入射光子の方向は、反応のたびに異なり、そのつど実験室系は変わる。し

たがって、光子ヒストリーを追うには、実験室系での散乱角を、最初に設定した物質固定系で観測した角度に変換しなければならない。

物質固定系(x, y, z)で (θ, ϕ) 、または (l_0, m_0, n_0) 方向に入射した光子がP点において反応し、実験室系(x', y', z')で (ψ, ρ) に散乱される様子をFig. 5に示す。問題は (ψ, ρ) を、 (l_0, m_0, n_0) を用いて(x, y, z)系から見た方向 (l, m, n) に変換することにある。図から明らかなように、この変換はまず、 y' 軸のまわりに θ 回転し、次に新しい z 軸のまわりに ϕ 回転することによって得られるので、結局これらの回転の重ね合わせになる。

こうして、新しい方向余弦は

$$\begin{aligned} l &= l_0 \cos \phi + \frac{1}{s_0} (l_0 n_0 \sin \phi \cos \rho - m_0 \sin \phi \sin \rho) \\ m &= m_0 \cos \phi + \frac{1}{s_0} (m_0 n_0 \sin \phi \cos \rho + l_0 \sin \phi \sin \rho) \\ n &= n_0 \cos \phi - s_0 \sin \phi \cos \rho \end{aligned} \quad (18)$$

となる。ここで $s_0 = \sqrt{1 - n_0^2}$ である。

もし $s_0 \approx 0$ ならば

$$\begin{aligned} l &= \sin \phi \cos \rho \\ m &= \sin \phi \sin \rho \\ n &= n_0 \cos \phi \end{aligned} \quad (18)'$$

となる。

これらの変換式は、サブルーチンKINEMAに用いられる。KINEMAは各相互作用サブルーチンの中でCALLされる。後述Ⅲ.6の方法によって (ψ, ρ) をサンプリングして、KINEMAの入力とする。KINEMAは新しい (l, m, n) を計算してメインルーチンに連れ帰り、今度はこれらが次の反応の入射方向 (l_0, m_0, n_0) になる。

Ⅲ.5 反応の型の決定

(x_0, y_0, z_0) から出発し、行程R進行して(10)式で表わされる位置で反応を起こす。反応地点 (x, y, z) が、もし物質の外部ならば次の光子の試行に移り、内部にあれば反応の型を選択する。どの反応が起こるかは、全断面積に対するそれぞれの断面積の比、および乱数によって決まる。

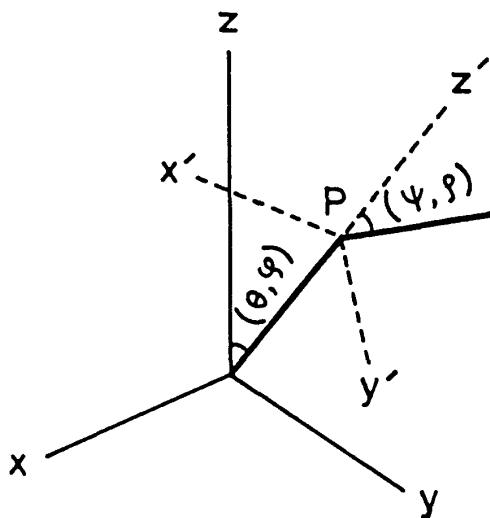


Fig. 5 実験室系と物質固定系の関係

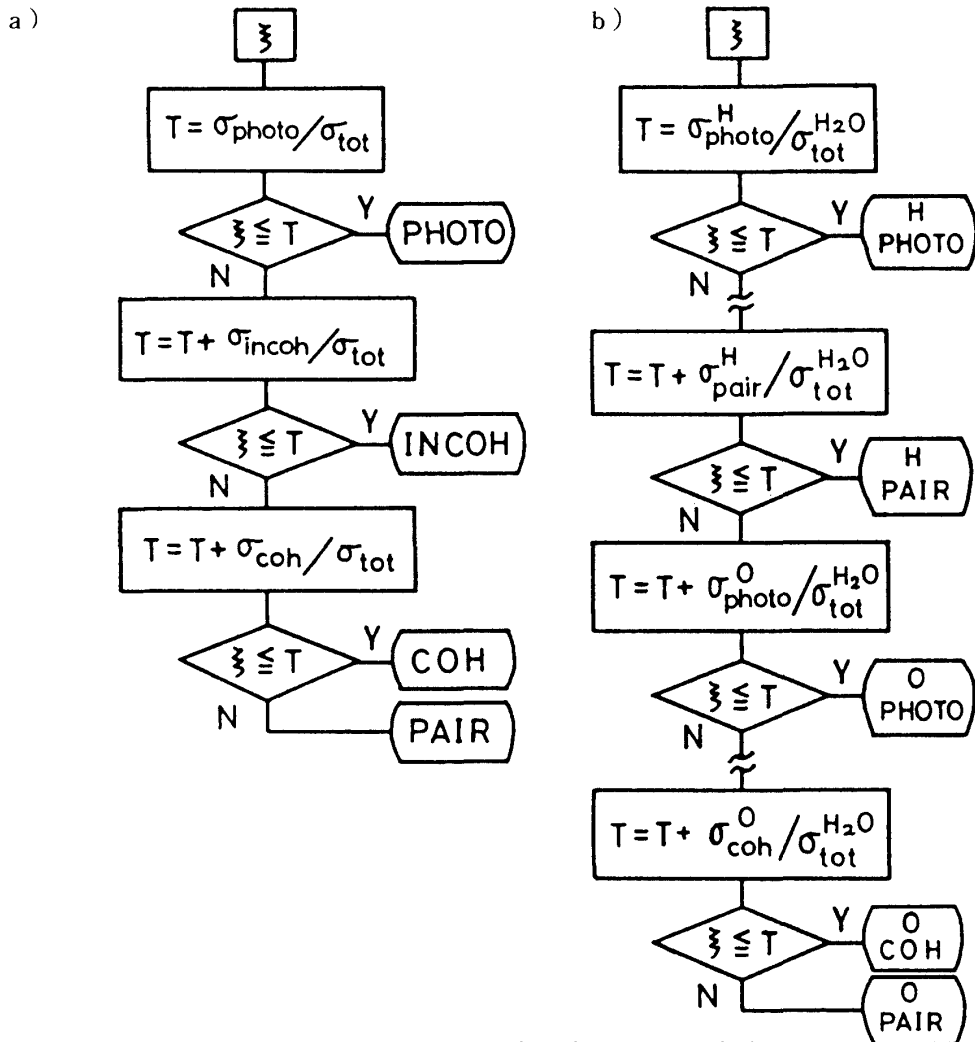


Fig. 6 反応の型の決定方法。a) 単原子物質, b) 分子 (H₂Oの場合)

単原子物質の場合の選択方法を Fig. 6 a) に示す。図において、反応の順序は順不同である。選ばれた反応のサブルーチンへ飛んで、反応後のエネルギー E' および (l, m, n) を連れてメインプログラムへ戻る。 E' が、追跡の終了を意味するカットオフエネルギー E_c より小さければ、光子はヒストリーを終える。もし E' が E_c より大きければ、 E' に対する自由行程のサンプリング、相互作用の選択、という具合に繰返されることになり、これを多重過程と呼ぶ。

物質が分子ならば、Ⅲ.3の方法によって分子の全断面積を求め、Fig. 6 a)と同様の判定をすべての構成元素ごとに、直列に付け加えていけばよい。H₂Oを例にとり Fig. 6 b)に示す。

Ⅲ.6 相互作用のサブルーチン

各相互作用サブルーチンは、求めたい物理量によって多少の違いはあるが、基本的にはどの

ような対象にも共通である。

1. 光電効果

ここでは、K殻の光電効果だけを考慮した。フローチャートを Fig. 7 に示す。まず、入射エネルギー E が、エッジエネルギー e_k より小さい場合には、すべての光子エネルギーが電子に与えられるとした。また、原子番号の小さい元素に関しては、 e_k が小さくしたがって K X線エネルギーも小さいので、光子エネルギー E はすべて吸収されることになり、結局同じ形式にまとめることができる。反応後の光子エネルギーを E' 、光電子が得る運動エネルギーを E_e とすれば

$$\begin{aligned} E' &= 0 \\ E_e &= E \end{aligned} \tag{19}$$

となる。

上原 周 三

次に $E > e_K$ のとき，起こりうる過程は，オージェ電子放出か，あるいはK電子とK X線の同時放出である。いずれが起こるかは，原子の蛍光収率 ω_K ¹²⁾ と乱数の大小によって決まる。オージェ過程ならば (19) 式と同じになる。

一方，K X線の場合には， $K\alpha$ と $K\beta$ に分け $K\alpha$ の強度比¹⁸⁾ を ratio とおく。

$$\text{ratio} = I_{K\alpha} / (I_{K\alpha} + I_{K\beta}) \quad (20)$$

これを乱数と比較して， $\xi \leq \text{ratio}$ ならば， $K\alpha$ 放出になる。K X線放出の場合の E' ， E_e は

$$\begin{aligned} E' &= E_{K\alpha} \quad \text{または} \quad E_{K\beta} \\ E_e &= E - E_{K\alpha} \quad \text{または} \quad E - E_{K\beta} \end{aligned} \quad (21)$$

となる。なお K X線の角分布は等方的なので，放出方向は (2)，(2)' 式と同じである。これら E' ， (θ, φ) を連れてメインプログラムに戻り，自由行程のサンプリングからあとのルーチンを繰り返すことになる。

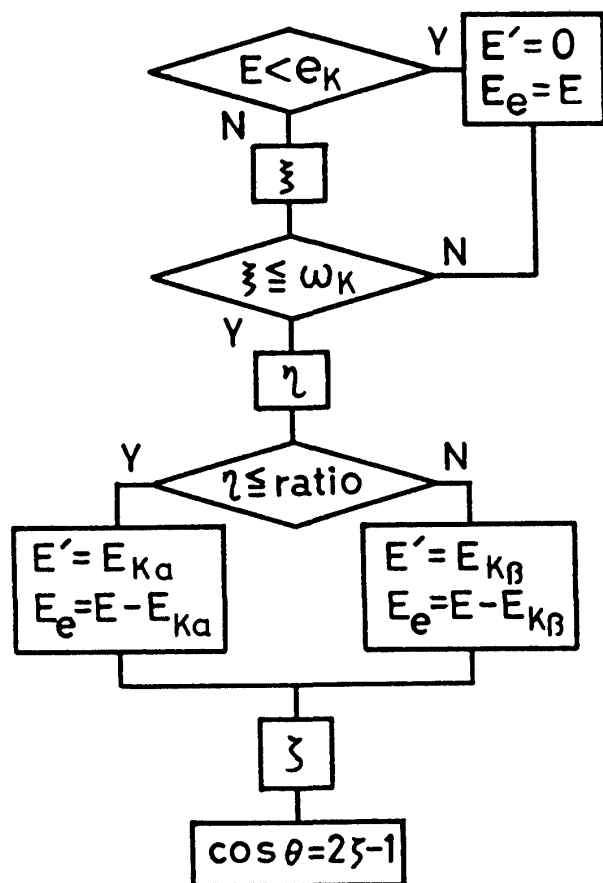


Fig. 7 光電効果サブルーチン

2. インコヒーレント散乱

以下に示す散乱公式の表記法は，文献3に拠った。1個の静止した自由電子に対するコンプトン散乱の，散乱角 θ における微分断面積は，Klein-Nishina の式

$$K(\alpha, \theta) = \pi r_0^2 \left(\frac{\alpha'}{\alpha}\right)^2 \left(\frac{\alpha'}{\alpha} + \frac{\alpha}{\alpha'} + \cos^2 \theta - 1\right) \quad (22)$$

であらわされる。ここで

$$\begin{aligned} \alpha &= E / 511 \\ \alpha' &= \alpha / (1 + \alpha(1 - \cos \theta)) = E' / 511 \\ r_0 &= 2.81794 \times 10^{-13} \text{ cm} \end{aligned} \quad (23)$$

である。(22) 式は，低エネルギーの極限では Thomson の断面積 (27) 式) に移行する。

実際には，軌道電子は束縛されており，原子構造を考慮に入れる必要がある。その場合，散乱はインコヒーレント散乱とコヒーレント散乱に分けられる。多数の自由電子による散乱は，非干渉性なのでインコヒーレント散乱と呼ばれ，この微分断面積は，原子番号 Z の原子について

$$\sigma_{\text{incoh}}(Z, \alpha, \theta) = S(Z, \nu) K(\alpha, \theta) \quad (24)$$

になる。ここで ν は原子への運動量移行を表わすパラメタであり， E を keV 単位にとれば

$$\nu = \frac{E}{12.4} \sin \frac{\theta}{2} \text{ \AA}^{-1} \quad (25)$$

と書ける。Scattering Factor $S(Z, \nu)$ は，光子から運動量を受け取った軌道電子が，原子を励起あるいは電離する確率をあらわす。 $S(Z, \nu)$ は，前方の $K(\alpha, \theta)$ を小さくする効果がある。

θ を求めれば (23) 式より E' が決まり，したがって反跳電子の運動エネルギー E_e は

$$E_e = E - E' \quad (26)$$

より求められる。 θ はコンプトン散乱に対する Kahn の方法²⁰⁾ によってサンプリングし，次に佐藤・加藤¹⁶⁾ と同様の方法により， $S(Z, \nu)$ の効果を取り入れた。Fig. 8 にフローチャートを示す。Hubbellら⁹⁾ のテーブルより， $0 \leq \nu \leq 50$ の範囲で $S(Z, \nu) / Z$ データを作成し

光子と物質の相互作用に関するモンテカルロ・シミュレーションのプログラミング

た。中間の v に対しては、直線近似の内挿によって求めた。高エネルギー光子については $v > 50$ となるが、そのときは最大値 $S(Z, 50) / Z = 1$ を代用した。20 keV における酸素原

子についての微分断面積の、サンプリングによる値と (24) 式より求めた理論値は良く一致した。(Fig. 9)

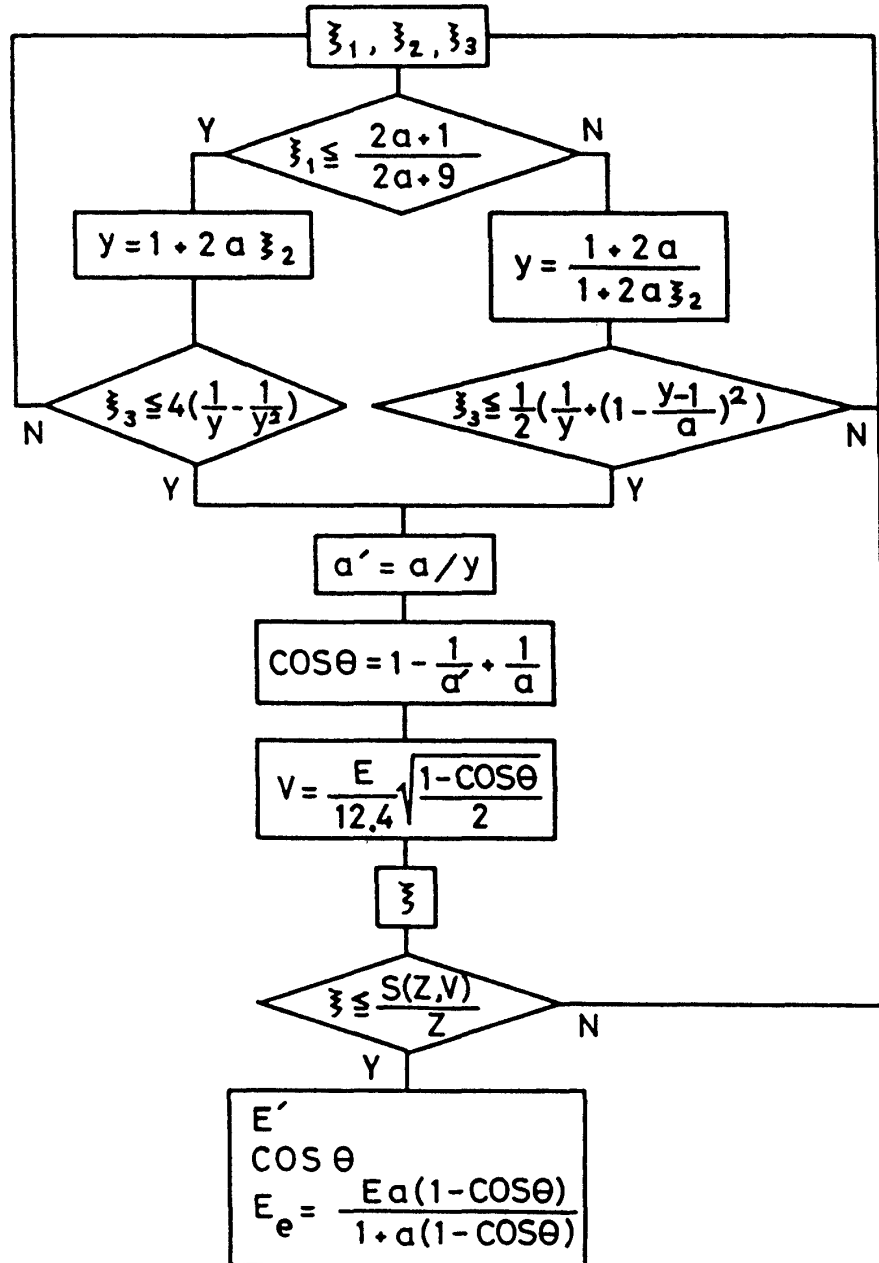


Fig. 8 インコヒーレント散乱サブルーチン

3. コヒーレント散乱

コヒーレント散乱は、電子が束縛されているとき、低エネルギーで主要な反応である。この過程では、光子はエネルギーを失わず、束縛電

子との衝突によって散乱角のみ変化する。すべての電子が似たように振る舞うので、別々の電子で散乱されても、散乱光子は干渉性を持つことになる。

上原 周三

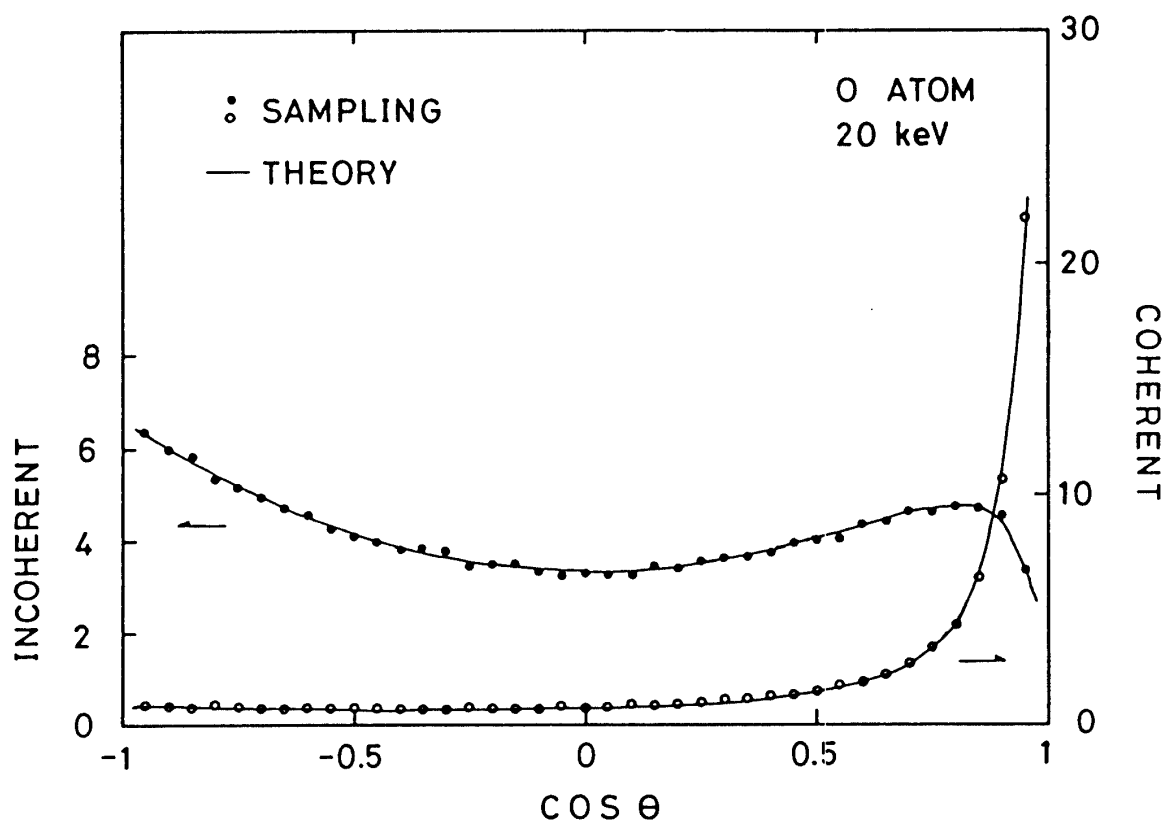


Fig. 9 サンプリングによる断面積と理論値の比較

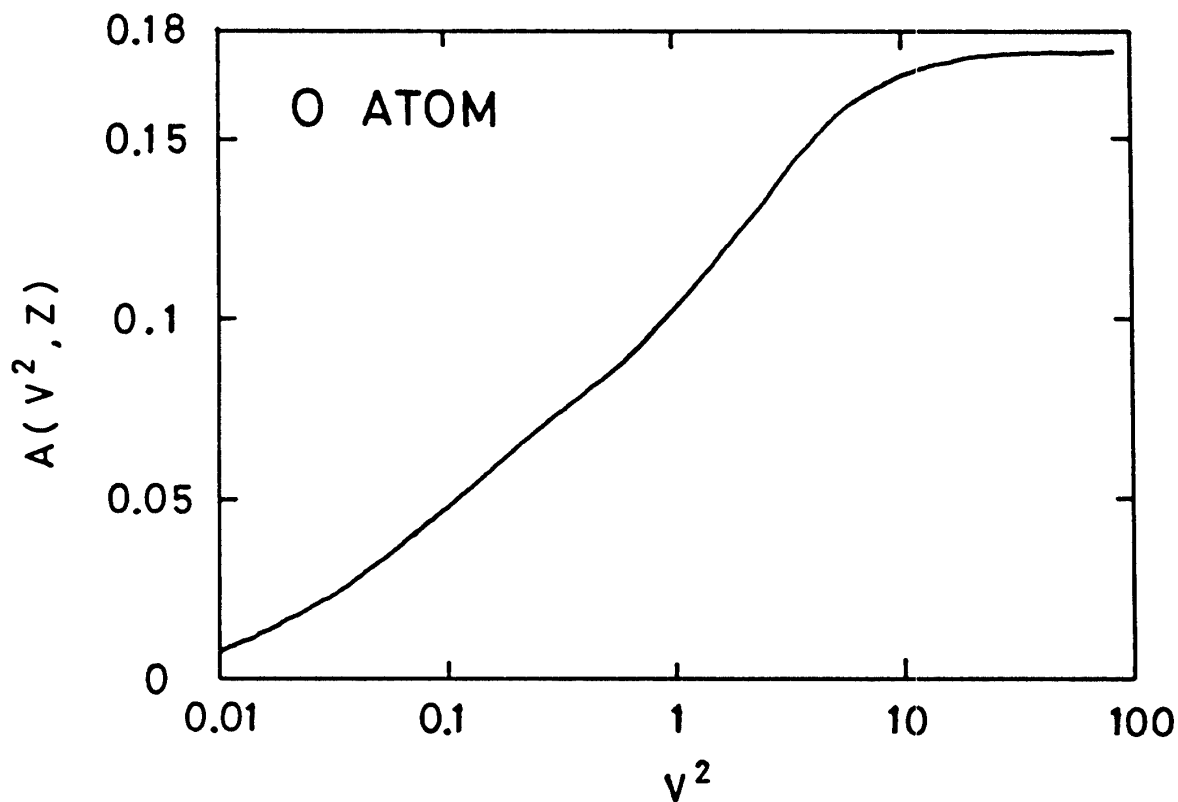


Fig. 10 Atomic Form Factor の積分分布関数

微分断面積は，Thomson 散乱の断面積

$$T(\theta) = \pi r_0^2 (1 + \cos^2 \theta) \quad (27)$$

を用いて

$$\sigma_{\text{coh}}(Z, \alpha, \theta) = F^2(Z, \nu) T(\theta) \quad (28)$$

で表わされる。

$F(Z, \nu)$ は Atomic Form Factor と呼ばれ，軌道電子が，反跳運動量 ν を受けとる確率を表わす。 $F^2(Z, \nu) / Z^2$ は一般に，後方 Thomson 断面積を小さくする効果を持つ。

散乱角のサンプリングは Carter, Cashwell の棄却法³⁾ によった。あらかじめ Hubbell ら⁹⁾ による $F(Z, \nu)$ データを用いて，積分分布関数

$$A(Z, \nu^2) = \int_0^{\nu^2} F^2(Z, \nu) Z^{-2} d\nu^2 \quad (29)$$

を数値計算し， ν^2 に対する $A(Z, \nu^2)$ のデータテーブルを作成する。Fig. 10 に酸素原子についての $A(Z, \nu^2)$ の例を示す。 $A(Z, \nu^2)$ は原子番号が大きくなるに伴ない，増加するが大体 $\nu^2 \sim 100$ ぐらいで飽和するので， $\nu^2 > 100$ に対しては一定値 $A(Z, 100)$ で近似した。

任意の E に対する ν^2 の上限は，(25) 式より

$$\nu_{\text{max}}^2 = (E / 12.4)^2 \quad (30)$$

で与えられる。テーブルより， ν_{max}^2 に対応する $A(Z, \nu_{\text{max}}^2)$ を読みとり，これに乱数 ξ を掛けて $A^*(Z, \nu^2)$ とする。次に，今度は逆に， $A^*(Z, \nu^2)$ に対応する ν^{*2} を読みとる。一方 (25)，(30) 式より

$$\cos \theta = 1 - 2 \frac{\nu^{*2}}{\nu_{\text{max}}^2} \quad (31)$$

であり，読みとった ν^{*2} を (31) 式に代入すれば θ をサンプリングできる。さらにこの θ に対し，乱数 η が

$$\eta \leq \frac{1}{2} (1 + \cos^2 \theta) \quad (32)$$

ならば散乱角として採用し，そうでなければ最初の乱数発生からやり直す。

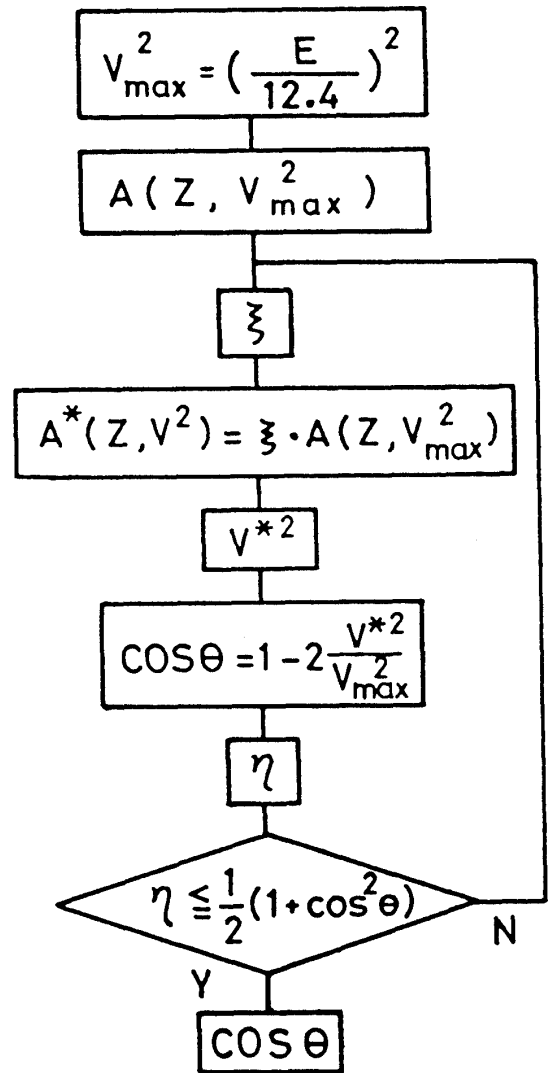


Fig. 11 コヒーレント散乱サブルーチン

θ および $E' = E$ をもってメインに帰る。反応した電子は，運動エネルギーを貰わないので $E_e = 0$ である。フローチャートを Fig. 11 に，20 keV における酸素原子についての，サンプリングによる微分断面積と，(28) 式による理論値との比較を Fig. 9 に示す。

4. 電子対生成

$E \geq 2 \text{ MeV}$ では，電子対生成が重要な過程になってくる。この反応のしきい値は，陰陽電子対の静止質量の2倍，つまり 1022 keV である。したがって，入射エネルギーのうち，1022 keV は対生成に費やされ，残りが電子対の運動エネルギーの和になる。それが2個の電子に等分配されると近似すれば，各電子の運動エネ

ルギー E_e は

$$E_e = \frac{1}{2} (E - 1022) \quad (33)$$

で表わされる。

生成された陽電子は、物質中では、わずかな距離進んでやがて電子と結合する。その時、電子対の質量 = 1022 keV が消滅し、2本の消滅 γ 線が生ずる。それらは共に 511 keV をもって、互いに逆方向に放出されるが、角分布は等方的である。

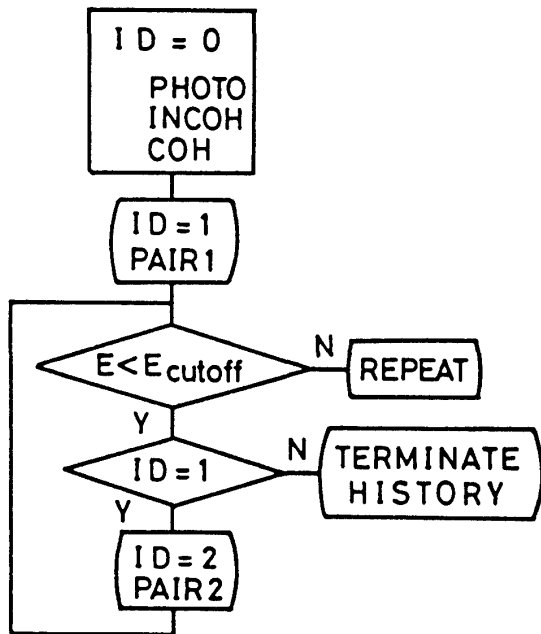


Fig. 12 消滅 γ 線の識別法

便宜上、消滅 γ 線に番号を付けた。第一光子は、他の相互作用における二次光子と同様に扱える。一方、第二光子については、第一光子と出発位置が同じで方向は逆向きであるから、第二光子のヒストリーを追跡するためには、対生成地点と第一光子の放出方向を記憶しておかねばならない。番号を識別するパラメータ ID を導入し、第一光子の追跡が終了すれば、第二光子サブルーチンに飛ぶようにする。メインプログラムにおけるこの処理方法を Fig. 12 に示す。サブルーチンは、Fig. 13 に示されているとおり、分離して PAIR1, PAIR2 と名付けた。

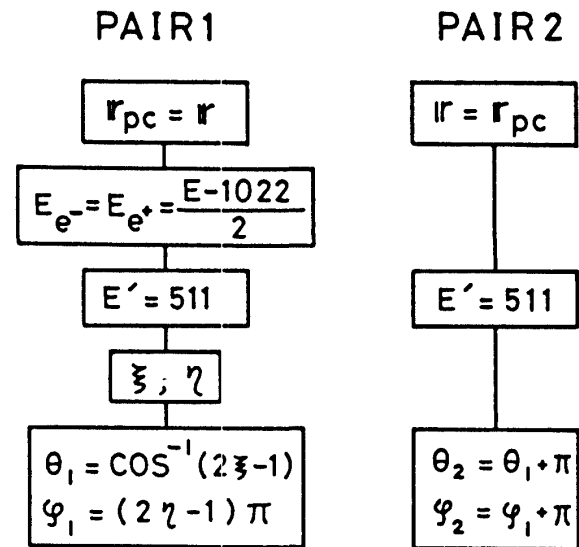


Fig. 13 電子対生成サブルーチン

III.7 二次電子によるエネルギー付与

各相互作用の結果、得られた二次電子の運動エネルギー E_e は、エネルギー損失や線量分布を求めるとき、重要になる。もし E_e が小さくて、物質中での飛程が 1mm 以下程度に短いならば、エネルギーはイベント発生地点に局所的に付与されると近似してよい。しかし、入射光子が数 MeV になると E_e も大きくなり、例えば水中における飛程は数 cm に及ぶので、電子に対する物質の阻止能を考慮に入れたエネルギー付与を計算し、分布を求めなければならない。電子の物質中での振舞は、厳密にはモンテカルロ法で追跡すべきであるが、ここでは単純に決定論的方法によった。 E_e は光電効果、インコヒーレント散乱および対生成において、それぞれ (19)・(21), (26), (33) 式に求められている。また、放出方向は Gaggero⁸⁾ に倣い、それぞれ以下の値を用いた。

1) 光電子

入射光子の方向となす極角を β とすれば、平均値 $\bar{\beta}$ は光子エネルギー E (keV) の関数になる。文献 8 に図示されている $\cos \bar{\beta}$ を、SSL II の LESQ 1 によって多項式近似すれば

$$\cos \bar{\beta} = \sum_{i=0}^5 C_i E^i \quad (34)$$

となる。ここで

光子と物質の相互作用に関するモンテカルロ・シミュレーションのプログラミング

$$\begin{aligned} C_0 &= 8.6823 \text{ E-1} & C_1 &= 2.5933 \text{ E-3} \\ C_2 &= -3.2779 \text{ E-6} & C_3 &= 1.9971 \text{ E-9} \quad (35) \\ C_4 &= -5.7750 \text{ E-13} & C_5 &= 6.3570 \text{ E-17} \end{aligned}$$

である。

2) インコヒーレント散乱の反跳電子

Ⅲ. 6.2 で求めた散乱光子の散乱角 θ と, $\alpha = E / 511$ を用いて

$$\cos \beta = \frac{(1 - \cos \theta)(1 + \alpha)^2}{\sqrt{2 + 2\alpha(1 - \cos \theta) + \alpha^2(1 - \cos \theta)}} \quad (36)$$

3) 電子対生成の陰陽電子

入射光子の方向となす極角を β とすれば, Bethe-Ashkin により

$$\beta = 1022 / (E - 1022) \quad (37)$$

一方, 方位角方向については, いずれも等方的と考えてよい。ただし, 対生成の陰陽電子対は π だけ差がある。

電子は直進する, と仮定すれば, 光子と同様に KINEMA を用いて, これらの方向を物質固定系での進行方向 (l_e, m_e, n_e) に変換でき

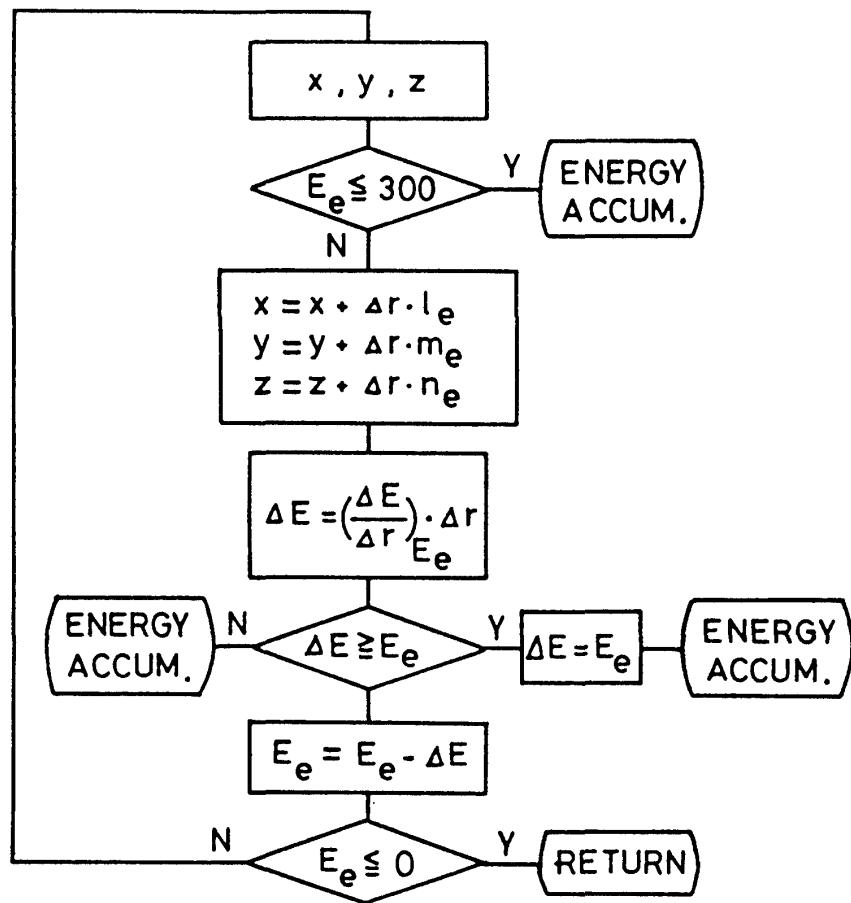


Fig. 14 二次電子によるエネルギー付与サブルーチン

る。次に, 出発点 (x_0, y_0, z_0) から進行方向に沿って微小な行程 Δr 進めると,

$$\begin{aligned} x_e &= x_0 + \Delta r \cdot l_e \\ y_e &= y_0 + \Delta r \cdot m_e \\ z_e &= z_0 + \Delta r \cdot n_e \end{aligned} \quad (38)$$

に到達する。その間のエネルギー付与 ΔE は

$$\Delta E = (\Delta E / \Delta r)_{E_e} \cdot \Delta r \quad (39)$$

となる。ここで $(\Delta E / \Delta r)_{E_e}$ は, エネルギー E_e の電子に対する物質の阻止能を表わす。また, エネルギーは, 初めの E_e より ΔE だけ下がって

$$E'_e = E_e - \Delta E \quad (40)$$

上 原 周 三

になる。

行程をさらに進め、そのたびに(38),(39)式を得て、エネルギー付与積算サブルーチンACDOSへ飛ぶ。 $E'_e \approx 300 \text{ keV}$ ならば、水中での飛程は1mm以下になり、無視できる。結局 $E'_e \leq 300 \text{ keV}$ に下がるまで、同じ過程をくり返す。最終的な行程は、最初の E_e に対する飛程に等しくなる。阻止能はPages¹⁴⁾らによるデータを用いた。フローチャートをFig. 14に示す。

IV プログラムの具体例

IV.1. 検出器レスポンス

光子を検出器で測定するとき、得られる出力を検出器レスポンスといい、入射エネルギーや計測の幾何学的条件、検出器素材・形状などに依存する。高純度Ge, Ge(Li), NaIの各光子検出器のレスポンスをシミュレートした。これらの物質における電子の飛程は短かいので、エネルギーは局所的に付与される。エネルギー付与を E_d で表わせば、 $E_d = E_e$ となる。

検出器中で多重過程の起こる時間は、検出器・増幅器系の電荷収集時間より、はるかに短かいので、入射光子1個によって生じた数回のエネルギー付与は、その光子が消滅するまで積算されて、1個のパルスが形成される。計算上では、 E_c 以下になるまでヒストリーを繰り返して、 E_d を積算することに対応する。こうして得られた積算値 E_d を波高 E_d のパルスとみなして、マルチチャンネル波高分析器と同じように波高分析を行なう。すなわち、 E_d をあらかじめ設定したエネルギーチャンネルに振り分け、該当するチャンネルにカウント1を加える。波高分析したあと、次の光子の試行を始めるが、その都度 $E_d = 0$ にリセットしておくのが肝要である。

Ge 検出器には不感部があり、これは低エネルギー光子のスペクトルにかなりの影響を与える。不感部におけるイベントは、有感部と変わりなく起こるが、エネルギー付与は加算してはならない。この不感部の処理は、各サブルーチンの中に組み込んだ。また低エネルギー光子に対しては、入射窓による減衰を無視できない。ベリリウムの薄い板でできた入射窓中でのヒス

トリーも厳密に追跡した。こうして全検出効率、全エネルギー吸収ピーク効率、エスケープピーク等のレスポンスを得ることができた。

IV.2. γ 線小線源線量分布

放射線治療に用いられる γ 線小線源のうち、セシウム管について線量分布をシミュレートした。白金製の管に密封されたセシウム線源を、水槽の中心に置いた。662 keV γ 線の、白金中での減衰は無視できないので、白金におけるヒストリーもIII.3に述べた手法を用いて、厳密に追跡した。管内部で消滅してしまう光子もあるし、散乱によってエネルギーが小さくなって水中に放出される光子もある。

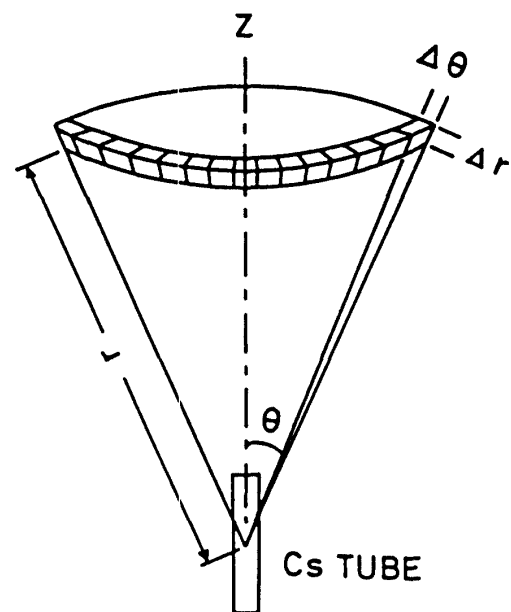


Fig. 15 極座標における体積要素

次に、ファントムの各位置におけるエネルギー付与を積算して、分布を求める。積算の効率を上げるため、管軸(z軸)に関する対称性に着目して、体積要素としてFig. 15のようなz軸のまわりの円形殻を考える。動径r、極角 θ とすれば体積要素 v は

$$v(r, \theta) = 2\pi r^2 \sin \theta \cdot \Delta r \cdot \Delta \theta \quad (41)$$

となる。ここで Δr 、 $\Delta \theta$ はチャンネル分割の間隔である。

光子と物質の相互作用に関するモンテカルロ・シミュレーションのプログラミング

二次電子の水中での飛程は、最大2mmになるが、簡単のため局所的付与とした。エネルギー付与地点 (x , y , z) を極座標で表わすと、

$$R = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \tag{42}$$

$$\Theta = \cos^{-1} \frac{z}{R}$$

になる。R, Θ を該当する (r , θ) チャネルに振り分け、そのチャネルでのエネルギー付与を積算する。ある体積要素における積算エネルギーを E_d (keV) , 線源強度を I (mCi) , 試行回数を N とすれば、線量率 D (rad/hour) は

$$D(r, \theta) = 2.1312 \cdot I \cdot E_d / \left(\frac{100}{85} \cdot N \cdot \nu(r, \theta) \right) \tag{43}$$

によって得られる。分母の 100/85 は、内部転換の割合を考慮に入れた因子である。(r , θ) を矩形分布表示に変換すれば、解析的計算値²⁾との比較が容易にできる。

N.3. 電子リニアックによる高エネルギーX線の線量分布

線量を計算するためには、入射X線のスペクトルがわかっていなければならない。電子の制動放射X線スペクトルは近似的に

$$I(h\nu) = \text{const} \cdot \left\{ 4 \left(1 - \frac{h\nu}{E_1} \right) - 3 \frac{h\nu}{E_1} \right. \\ \left. \times \ln \left(\frac{E_1}{h\nu} \right) \right\} \tag{44}$$

を利用した。¹⁹⁾ (Heitler - Wyard の式)
ここで $I(h\nu)$ は、X線エネルギー $h\nu$ に対する相対強度、 E_1 はリニアックで加速された電子エネルギーを表わす。簡単化のため、フィルタはないとすれば (44) 式がそのまま使える。 E_1 は 6 MeV 程度であるから、スペクトルは高エネルギー光子成分を含み、したがって二次電子の E_e も大きい。この場合には、水中における電子の飛程は最大3cmになり、局所的付与とすることはできない。

このため III.7 の方法にしたがって、飛程に沿った各位置におけるエネルギー付与を計算した。外照射であるから、カーテシアン系 (x , y ,

z) が便利である。水ファントムを3次元メッシュに分割し、体積要素は立方体とした。前節と同様、各メッシュにおける積算線量を求める。深部線量曲線はもちろんのこと、ファントム中に小さい金属片が放置されている場合の線量分布の変化も見い出された。

N.4. 散乱線

散乱線のシミュレーションにおいては、物質から逃げ出す光子に注目し、散乱線 (直接線も含む) が逃げ出す際のエネルギー E' と、散乱角度 θ の2次元スペクトルを求める。エネルギーについては N.1 と同様、 E' をエネルギーチャネルに振り分け、次にその E' について散乱角分布を求める。一次光子が偏極していなければ、z 軸に関して対称なので、 ϕ については一様であり、散乱方向は θ だけの関数になる。散乱方向の範囲、 0° から 180° までを間隔 $\Delta\theta$ で分割して角度チャネルを設定しておく。 θ 方向の散乱強度は、 θ を該当する角度チャネルに振り分け、カウントすることによって得られる。この操作は Fig. 16 に示す斜線部、つまり球面上の立体角 $2\pi \sin\theta \Delta\theta$ への入射光子を、すべてカウントすることに対応している。こうして2次元スペクトル $PH(E', \theta)$ を求めることができる。また

$$QH(E', \theta) = \frac{PH(E', \theta)}{2\pi \sin\theta \Delta\theta} \tag{45}$$

より、単位立体角当りのスペクトル $QH(E', \theta)$ が得られる。

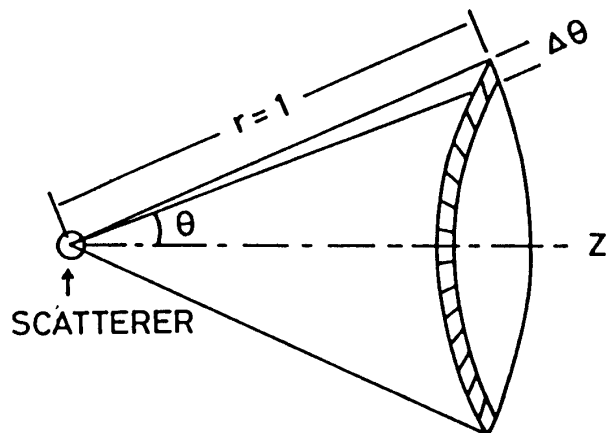


Fig. 16 散乱角 θ における立体角

上 原 周 三

散乱体が小さく、角度チャンネルの間隔に比べてエスケープ地点のばらつきが無視できる場合は、上記の方法でよい。しかし、ある特定の場所に検出器を置いて散乱線を測定する場合、散乱体の形状が大きいと、いろいろの方向をもった散乱線を含むことになるので、 θ だけでは決まらず、エスケープ地点も考慮に入れた、別のアルゴリズムが必要になる。

IV 5. X線写真

X線直接撮影系をシミュレートし、X線写真像を得るプログラムである。像を形成するフィルム黒化度は照射量(R)の関数であるから、フィルム面への照射量を求めればよい。フィルム面を細かいメッシュに分割し、像の分解能を上げる。

被写体を透過した光子が、フィルム面のどの位置に到達するかが重要である。あるメッシュへ到達した光子のエネルギーを波高分析して、3次元スペクトル $PH(x, y, E')$ を得る。これから、照射量とスペクトルを関係付ける光子フルエンス/Rデータ¹⁰⁾を用いて、メッシュ毎の照射量が計算できる。

試行回数に制限があるので、得られる照射量の絶対値は、フィルムの黒化に必要な 100 m R 程度よりはるかに小さい。フィルムの特性に合わせて、照射量の最大値を 100 m R 程度に規格化し、相対的照射量に対する黒化度を算出すれば、像が形成される。

V 要約

光子と物質の相互作用について、モンテカルロ・プログラムを開発した。重要と考えられる基本的事項や、相互作用のサブルーチンなどの詳細を述べ、フローチャートを図示した。これらを結合して、放射線物理・医学において興味あるいくつかの例に応用し、プログラム作成と計算を行なった。予備的な計算結果は、プログラムの正確さを証明している。複雑な現象や、実験的には観測困難なデータも、計算機実験によって、予測できるようになった。これらの他にも、核医学、X線CT、ポジトロンCT、放射線防護など、10 MeV 以下の領域の光子にま

つわるあらゆる現象に対して、ここで開発した方法やサブルーチンは有効であり、対象に応じてプログラムを部分的に変更するだけで適用可能になる。

ただひとつ、残された不備な点は、高エネルギー二次電子による制動放射の取扱いである。すなわち、電子が物質中を進むとき、主にイオン化によってエネルギーを失なうが、数 MeV 以上の高エネルギー領域では、制動放射によって失なう割合が増加する。したがって、二次電子ルーチンの中に、連続エネルギー光子の処理を追加しなければならないことになる。この点については、エネルギーと個数をサンプリングするための Zerby の方法²⁰⁾を用いて、現在改良中である。

光子だけでなく、中性子や荷電粒子もモンテカルロ法で取扱える対象である。これらの粒子は、反応のチャンネルが多数であり、一層複雑なヒストリーをたどるので、プログラミングは光子ほど簡単ではないし、要する演算時間も長くなる。しかし、マイクロドシメトリや、粒子線治療・診断についての精密な検討に、モンテカルロ法は役立つであろうし、そのためのプログラム開発は意義がある。

文 献

- (1) Booth, T.: Lecture Note on the Monte Carlo Method. Univ. of New Mexico, Los Alamos, 1980.
- (2) Breitman, K. E.: Dose-Rate Tables for Clinical ¹³⁷Cs Sources Sheathed in Platinum. British Journal of Radiology, 47: 657-664, 1974.
- (3) Carter, L. L. and Cashwell, E. D.: Particle-Transport Simulation with the Monte Carlo Method. Energy Research and Development Administration, Oak Ridge, 1977.
- (4) Chan, H. P. and Doi, K.: The Validity of Monte Carlo Simulation in Studies of Scattered Radiation in Diagnostic Radiology. Phys. Med.

光子と物質の相互作用に関するモンテカルロ・シミュレーションのプログラミング

- Biol., 28 : 109 - 129 , 1983.
- (5) Chen, C. S. et al.: Monte Carlo Simulation Studies of Detectors Used in the Measurement of Diagnostic X-Ray Spectra. Med. Phys., 7 : 627 - 635, 1980.
- (6) Ellett, W. H. : Specific Absorbed Fractions for Photon Point Sources within a Scattering Medium. Phys. Med. Biol., 14 : 615 - 626, 1969.
- (7) 富士通 : FACOM OS IV/F4, TSS コマンド文法書. 1982.
- (8) Gaggero, G. : Monte Carlo Calculations for the Photofractions and Energy Loss Spectra of Ge(Li) Semiconductor Detectors. Nucl. Instr. and Meth., 94 : 481 - 492, 1971.
- (9) Hubbell, J. H. et al. : Atomic Form Factors, Incoherent Scattering Functions, and Photon Scattering Cross Sections. J. Phys. Chem. Ref. Data, 4 : 471 - 538, 1975.
- (10) Johns, H. E. and Cunningham, J. R. : The Physics of Radiology. Charles C Thomas Publisher, Illinois, 1974.
- (11) Koblinger, L. and Zarand, P. : Monte Carlo Calculations on Chest X-Ray Examinations for the Determination of the Absorbed Dose and Image Quality. Phys. Med. Biol., 18 : 518 - 531, 1973.
- (12) Lederer, C. M., Hollander, J. M. and Perlman, I. : Table of Isotopes. John Wiley & Sons, New York, 1968.
- (13) 中森伸行, 金森仁志 : モンテカルロ法による多重散乱線を考慮した X 線スペクトルの計算 (I) 水ファントムへの単色 X 線入射. 日本放射線技術学会雑誌, 36 : 1 - 9 , 1980.
- (14) Pages, L. et al. : Energy Loss, Range, and Bremsstrahlung Yield for 10 keV to 100 MeV Electrons in Various Elements and Chemical Compounds. Atomic Data, 4 : 1 - 127 , 1972.
- (15) Raeside, D. E. : Monte Carlo Principles and Applications. Phys. Med. Biol., 21 : 181 - 197, 1976.
- (16) 佐藤健児, 加藤二久 : 結合エネルギーの効果とコヒーレント散乱について. 日本医学放射線学会物理部会誌, 2 : 31 - 47 , 1982 .
- (17) 佐藤巳之吉, 上原周三 : 投稿予定.
- (18) Storm, E. and Israel, H. I. : Photon Cross Sections from 1 keV to 100 MeV for Elements Z=1 to Z=100. Nuclear Data Tables, A 7 : 565 - 681 , 1970.
- (19) 山崎文男 : 放射線. 共立出版. 1973.
- (20) Zerby, C. D. : A Monte Carlo Calculation of the Response of Gamma-Ray Scintillation Counters. In Methods in Computational Physics, Vol. 1, ed, Alder, B., Fernbach, S and Rotenberg, M., 89 - 134. Academic Press, New York, 1963.