

3.2 Die Strahlungstransportgleichung

Zur Bestimmung von Strahlungsfeldern in einem Stoff oder der an Stoffe übertragenen Energie ist die Ausbreitung der Strahlung von der Emission aus einer Quelle unter Berücksichtigung der Wechselwirkungsprozesse in dem jeweiligen Medium bis zur Absorption bzw. Herausstreuung aus einem betrachteten Volumenelement zu untersuchen. Dieser gesamte Ausbreitungsprozeß wird als Strahlungstransport bezeichnet. Infolge von Wechselwirkungsvorgängen ist der Transport von Teilchen oder Photonen mit einer ständigen Änderung ihrer Energie und Richtung verbunden. Zur mathematischen Beschreibung sind Angaben über die Wahrscheinlichkeit dw erforderlich, mit der Strahlungsteilchen aus einem Energie- und Richtungsintervall $E' \dots E' + dE'; \Omega' \dots \Omega' + d\Omega'$ infolge von Wechselwirkungen am Ort $\mathbf{r}$ in das betrachtete Intervall $E \dots E + dE; \Omega \dots \Omega + d\Omega$ gelangen. Diese Wahrscheinlichkeit läßt sich mit Hilfe der Wahrscheinlichkeitsdichte p durch

$$dw = p(\mathbf{r}, E, E', \Omega, \Omega') dE' d\Omega' dV \quad (64)$$

ausdrücken, wobei dV ein Volumenelement am Ort $\mathbf{r}$ bezeichnet. Der Strahlungstransport kann durch Aufspaltung von dw in zwei Faktoren

$$dw = dw_1(\mathbf{r}) dw_2(E, E', \Omega, \Omega') \quad (65)$$

modelliert werden. Der erste Faktor stellt die Wahrscheinlichkeit dar, daß am Ort $\mathbf{r}$ eine Wechselwirkung stattfindet (unabhängig von ihrer Art und den Änderungen der Eigenschaften der daran beteiligten Strahlungsteilchen). Unter Verwendung des totalen mikroskopischen Wirkungsquerschnitts σ_t für die Gesamtheit aller auftretenden Wechselwirkungsprozesse gilt hierfür

$$dw_1 = n\sigma_t e^{-n\sigma_t s} ds = \Sigma_t e^{-\Sigma_t s} ds. \quad (66)$$

Dabei bedeuten s die freie Weglänge eines Strahlungsteilchens bis zum Ort der Wechselwirkung und ds das Wegintervall, in dem die Wechselwirkung erfolgt. n stellt die Teilchendichte der Reaktionspartner im betrachteten Stoff dar. Die Größe

$$\Sigma_t = n\sigma_t \quad (67)$$

bezeichnet den totalen makroskopischen Wirkungsquerschnitt, der die Dimension einer reziproken Länge besitzt und mit der mittleren freien Weglänge λ über

$$\lambda = \bar{s} = \Sigma_t \int_0^\infty s' e^{-\Sigma_t s'} ds' = \frac{1}{\Sigma_t} \quad (68)$$

zusammenhängt. Gleichung (66) gilt für den eindimensionalen Fall. Die analoge Beziehung für den dreidimensionalen Fall (Koordinatenursprung bei $\mathbf{r}_0$) lautet

$$dw_1 = \Sigma_t \frac{e^{-\Sigma_t |\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|}}{4\pi |\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|^2} dV. \quad (69)$$

Der zweite Faktor in Gl. (65) stellt die Wahrscheinlichkeit dar, daß infolge der Wechselwirkung eine Änderung der Energie und Richtung von E', Ω' nach E, Ω erfolgt. Zur Bestimmung von dw_2 sind Angaben über die Art der elementaren Wechselwirkungsprozesse erforderlich. Unter Verwendung der zugehörigen differentiellen Wirkungsquerschnitte folgt

$$dw_2 = \frac{\sigma_{E\Omega}(E, E', \Omega, \Omega')}{\sigma(E')} dE' d\Omega'. \quad (70)$$

Mit den Beziehungen (66) bzw. (69) und (70) kann die Wahrscheinlichkeitsdichte p ermittelt werden.

Der Strahlungstransport läßt sich mathematisch durch die Boltzmannsche Transportgleichung beschreiben, deren Lösung für den stationären Fall (d.h. ohne Berücksichtigung von Zeitabhängigkeiten) die Energie- und Richtungsverteilung der Flußdichte $\varphi_{E\Omega}(\mathbf{r}, E, \Omega)$ für jeden interessierenden Ort $\mathbf{r}$ liefert. Die Ableitung der Transportgleichung beruht auf einer Bilanz für die zeitliche Änderung von $\varphi_{E\Omega}(\mathbf{r}, E, \Omega)$ im Volumenelement dV , die durch folgende Prozesse zustandekommen kann:

1. Absorption und Herausstreuung von Strahlungsteilchen aus dem betrachteten Energie- und Richtungsintervall, ausgedrückt durch

$$(d\varphi_{E\Omega})_a = -\Sigma_t(E)\varphi_{E\Omega}(\mathbf{r}, E, \Omega) ds. \quad (71)$$

2. Hineinstreuung von Teilchen aus Energie- und Richtungsintervallen $E' \dots E' + dE'$ bzw. $\Omega' \dots \Omega' + d\Omega'$ in das betrachtete Intervall, ausgedrückt durch

$$(d\varphi_{E\Omega})_e = \int_0^\infty \int_{4\pi} \Sigma_s(E')p(\mathbf{r}, E, E', \Omega, \Omega')\varphi_{E\Omega}(\mathbf{r}, E', \Omega') d\Omega' dE' ds, \quad (72)$$

wobei Σ_s den makroskopischen Streuquerschnitt bedeutet.

3. Erzeugung von Teilchen mit Energien und Richtungen in dem betrachteten Intervall durch Quellen im Strahlungsfeld, ausgedrückt durch

$$(d\varphi_{E\Omega})_s = s_{E\Omega}(\mathbf{r}, E, \Omega) ds, \quad (73)$$

wobei $s_{E\Omega}$ die Energie- und Richtungsverteilung der Quelldichte bedeutet.

In Gl. (71) bis (73) bezeichnet ds den Teilchenweg, der in der Zeit dt im Volumenelement dV zurückgelegt wird. Die gesamte Änderung von $\varphi_{E\Omega}$ im Volumenelement dV ergibt sich aus

$$d\varphi_{E\Omega}(\mathbf{r}, E, \Omega) = \frac{\partial \varphi_{E\Omega}}{\partial \mathbf{r}} d\mathbf{r}, \quad (74)$$

woraus

$$\frac{d\varphi_{E\Omega}}{dt} = v \text{grad} \varphi_{E\Omega}(\mathbf{r}, E, \Omega) = v \Omega \text{grad} \varphi_{E\Omega}(\mathbf{r}, E, \Omega) \quad (75)$$

folgt. Mit $v = ds/dt$ wird hierbei die Teilchengeschwindigkeit bezeichnet. Die Bilanzgleichung

$$\frac{d\varphi_{E\Omega}}{dt} = \left(\frac{d\varphi_{E\Omega}}{dt} \right)_a + \left(\frac{d\varphi_{E\Omega}}{dt} \right)_e + \left(\frac{d\varphi_{E\Omega}}{dt} \right)_s \quad (76)$$

liefert nach Einsetzen von Gl. (71) bis (73) die Boltzmannsche Transportgleichung

$$\begin{aligned} \Omega \text{grad} \varphi_{E\Omega}(\mathbf{r}, E, \Omega) = & -\Sigma_t(E) \varphi_{E\Omega}(\mathbf{r}, E, \Omega) \\ & + \int_0^\infty \int_{4\pi} \Sigma_s(E') p(\mathbf{r}, E, E', \Omega, \Omega') \\ & \times \varphi_{E\Omega}(\mathbf{r}, E', \Omega') d\Omega' dE' + s_{E\Omega}(\mathbf{r}, E, \Omega). \end{aligned} \quad (77)$$

Gleichung (77) stellt eine Integrodifferentialgleichung dar, für die im allgemeinen eine Lösung in geschlossener Form nicht angebar ist (zu Lösungsmethoden siehe Abschnitt 3.3.).

Neben der abgeleiteten differentiellen Form der Transportgleichung wird häufig eine integrale Form verwendet, die durch mathematische Umformung aus Gl. (77) erhalten wird. Zur Abkürzung wird dabei für den stationären Fall ein Zustandsvektor $\mathbf{x}$ in einem 6-dimensionalen Phasenraum A eingeführt, dessen Komponenten durch 3 Ortskoordinaten, 2 Richtungskoordinaten und die Teilchenenergie gebildet werden. Eine Abhängigkeit von $\mathbf{x}$ symbolisiert folglich die Abhängigkeit einer Größe von $\mathbf{r}$, E und Ω . Damit lautet die integrale Form der Transportgleichung

$$\psi(\mathbf{x}) = \int_A K(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \psi(\mathbf{x}') d\mathbf{x}' + \psi_o(\mathbf{x}). \quad (78)$$

Hierbei bezeichnet $\psi(\mathbf{x})$ die Dichtefunktion der Verteilung aller Teilchenzustände unmittelbar nach einer Wechselwirkung und $\psi_o(\mathbf{x})$ die entsprechende Funktion unmittelbar nach der Erzeugung durch eine Quelle im Strahlungsfeld. Die Größe ψ kann unterschiedliche physikalische Bedeutung besitzen. Sie kann die Energie- und Richtungsverteilung der Flußdichte $\varphi_{E\Omega}$ ausdrücken, aber auch für die Stoßdichte oder Bremsdichte stehen (siehe Abschnitt 3.4.2.). Der Integralkern $K(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ in Gl. (78) bezeichnet die Dichtefunktion der Wahrscheinlichkeit, mit der ein Strahlungsteilchen aus dem Zustand $\mathbf{x}'$ infolge Wechselwirkung den Zustand $\mathbf{x}$ erreicht. Auch die integrale Form der Transportgleichung, die eine Fremdholmsche Integralgleichung darstellt, ist im allgemeinen nicht geschlossen lösbar.

3.3 Lösung der Strahlungstransportgleichung

3.3.1 Lösungen für einfache Spezialfälle

Geschlossene analytische Ausdrücke für die Lösung der Strahlungstransportgleichung lassen sich nur für einfache Spezialfälle angeben. Im folgenden werden zwei Beispiele diskutiert, die trotz einschränkender Randbedingungen von großer Bedeutung für praktische Anwendungen sind.

Ein erstes Beispiel betrifft die Schwächung monoenergetischer Photonenstrahlung der Energie E_0 durch eine unendlich ausgedehnte Stoffschicht der Dicke x . Gesucht ist die Flußdichte $\varphi(x)$ für die Photonen, die ohne Wechselwirkung die Stoffschicht passieren und von einem Detektor hinter der Abschirmung registriert werden (siehe Abb. 17). Die Photonen sollen als paralleles Bündel senkrecht auf die Abschirmung auftreffen (quellenseitige Kollimierung) und für $x = 0$ die Flußdichte φ_0 besitzen. Da keine Energie- und Richtungsabhängigkeit vorliegt, in der Abschirmung keine Quellen vorhanden sind und die Aufgabe als eindimensionales Problem behandelt werden kann, vereinfacht sich die Strahlungstransportgleichung (77) zu

$$\frac{d\varphi(x)}{dx} = -\Sigma_t(E_0)\varphi(x). \quad (79)$$

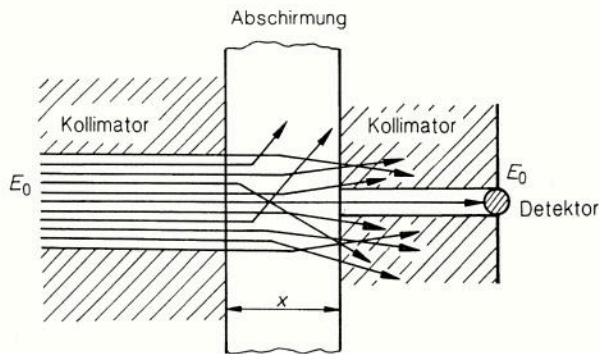


Abb. 17 Durchgang von Photonen durch eine Abschirmung bei quellen- und detektorseitiger Kollimierung

Ist die Schichtdicke x nicht zu groß, so daß Photonen nicht durch mehrfache Wechselwirkung in die ursprüngliche Richtung gestreut werden, liefert die Integration von Gl. (79) als Lösung der Transportgleichung

$$\varphi(x) = \varphi_0 e^{-\Sigma_t(E_0)x}, \quad (80)$$

d.h., es wird das exponentielle Schwächungsgesetz erhalten (siehe auch Abschnitt 3.4.3.). Die formulierten Randbedingungen bedeuten, daß gestreute Photonen am

Detektorort keine Beiträge zur Flußdichte $\varphi(x)$ liefern. Diese Voraussetzung läßt sich experimentell durch die in Abb. 17 dargestellte zusätzliche detektorseitige Kollimierung erfüllen. Nur dann stellt Gl. (80) eine exakte Lösung der Strahlungstransportgleichung dar.

Ein zweites Beispiel bezieht sich auf die Abbremsung von Neutronen in einem unendlich ausgedehnten, nicht absorbierenden und quellenfreien Streumedium. Unter diesen Randbedingungen läßt sich die spektrale Flußdichte $\varphi_E(E)$ der Neutronen bestimmen. Bei der Aufstellung der Transportgleichung ist zu beachten, daß keine Orts- und Richtungsabhängigkeit vorliegt und der totale Wirkungsquerschnitt gleich dem Streuquerschnitt ist. Aus Gl. (77) folgt daher

$$\Sigma_s(E)\varphi_E(E) = \int_0^\infty \Sigma_s(E')p(E,E')\varphi_E(E')dE'. \quad (81)$$

Handelt es sich um das Streumedium Wasserstoff, besitzt die Wahrscheinlichkeitsdichte p die Form

$$p(E,E') = \begin{cases} \frac{1}{E'} \\ 0 \end{cases} \quad \text{für} \quad \begin{cases} E' > E \\ E' < E \end{cases}. \quad (82)$$

Außerdem kann für Wasserstoff der Streuquerschnitt $\Sigma_s(E)$ im Energiebereich von 1 eV bis 1 MeV als annähernd energieunabhängig angenommen werden. Damit ergibt sich

$$\varphi_E(E) = \int_E^\infty \varphi_E(E') \frac{dE'}{E'}. \quad (83)$$

Differentiation nach der unteren Integrationsgrenze E liefert

$$\frac{d\varphi_E(E)}{dE} = -\frac{\varphi_E(E)}{E}. \quad (84)$$

Daraus folgt als Lösung

$$\ln\varphi_E(E) = -\ln E + \ln C \quad (85)$$

beziehungsweise

$$\varphi_E(E) = \frac{C}{E}, \quad (86)$$

wobei C eine Konstante bedeutet. Gleichung (86) stellt das Fermische $1/E$ -Spektrum für intermediäre Neutronen in wasserstoffhaltigen Moderatoren dar (siehe auch Abschnitt 3.4.2.). Auch dieses Ergebnis ist nur bei Einhaltung der oben genannten Randbedingungen eine exakte Lösung der Transportgleichung.

3.3.2 Einfache Näherungslösungen unter Verwendung von Aufbauaktoren

Gleichung (80) beschreibt die Schwächung einer Strahlung durch eine Stoffschicht in sehr einfacher Weise, so daß es wünschenswert ist, die Lösung auch unter abweichenden Randbedingungen anzuwenden und dadurch verursachte Fehler durch Korrekturfaktoren zu kompensieren. In Abb. 18 ist dargestellt, wie z.B. bei fehlender detektorseitiger Kollimierung infolge von Streuprozessen weitere Photonen den Detektor erreichen können. Das führt zu einer Vergrößerung der Detektoranzeige und der daraus abgeleiteten Photonenflußdichte. Zur Berücksichtigung dieser Flußdichteerhöhung werden Aufbauaktoren B (build up-Faktoren) eingeführt. Sie ergeben sich aus

$$B = \frac{\varphi}{\varphi_s} = 1 + \frac{\varphi_u}{\varphi_s}, \quad (87)$$

wobei φ_u und φ_s die Beiträge zur Flußdichte φ am betrachteten Ort durch ungestreute beziehungsweise gestreute Photonen bedeuten. Für die Flußdichte der Photonen am Detektorort (mit Energien $E \leq E_0$) gilt damit

$$\varphi(x) = B(\Sigma_t(x)) \varphi_0 e^{-\Sigma_t(E_0)x}, \quad (88)$$

wobei die Abhängigkeit des Aufbauaktors von Dicke und Material der Abschirmung durch die Abhängigkeit von $\Sigma_t x$ zum Ausdruck kommt. In Abschnitt 3.4.3. wird gezeigt, daß anstelle von Σ_t auch mit dem linearen Schwächungskoeffizienten μ gerechnet werden kann. Aufbauaktoren werden daher in tabellarischen oder grafischen Zusammenstellungen meist in der Form $B(\mu x)$ als Funktion der Photonenenergie angegeben (siehe z.B. [7]). Der Aufbaufaktor hängt weiterhin von den geometrischen Eigenschaften des Strahlungseinfalls und der Gestalt der Abschirmungen ab. Die Benutzung von Aufbauaktoren erfordert große Sorgfalt, da sie sich für verschiedene Strahlungsfeldgrößen zum Teil erheblich unterscheiden. Neben dem in Gl. (88) verwendeten Flußdichteaufbaufaktor wird häufig mit Energieflußdichte- und Dosis-aufbauaktoren gerechnet.

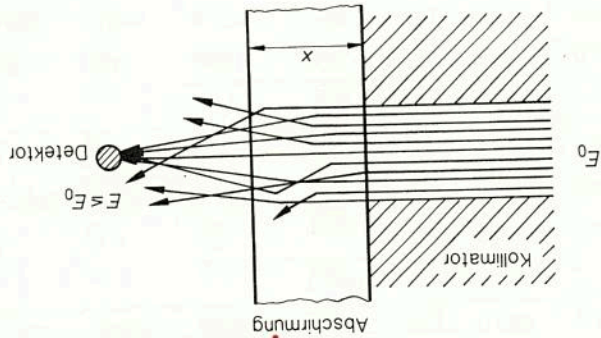


Abb. 18 Durchgang von Photonen durch eine Abschirmung bei quellenseitiger Kollimierung

Letztere können für isotrope punktförmige γ -Quellen in einem unendlich ausgedehnten Medium durch die Beziehung

$$B(\mu x) = A' e^{-\alpha_1 \mu x} + (1 - A') e^{-\alpha_2 \mu x} \quad (89)$$

beschrieben werden. Die Konstanten A' , α_1 und α_2 sind in Tabelle 8 für einige Abschirmmaterialien als Funktion der Photonenenergie angegeben. Für Materialien hoher Ordnungszahl können die so berechneten Dosisaufbaufaktoren näherungsweise auch im Fall von Abschirmungen endlicher Dicke verwendet werden. Besteht eine Abschirmung aus n Schichten verschiedenen Materials, berechnet sich der Aufbaufaktor bei isotroper punktförmiger γ -Quelle nach

$$B = \sum_{i=1}^n B_i \left[\sum_{j=1}^i (\mu_j x_j) \right] - \sum_{i=2}^n B_i \left[\sum_{j=1}^{i-1} (\mu_j x_j) \right], \quad (90)$$

Tabelle 8: Parameter zur Bestimmung von Dosisaufbaufaktoren für isotrope punktförmige γ -Quellen in unendlich ausgedehntem Medium (nach [8])

E (in MeV)	0,5	1	2	3	4	6	8	10
Wasser								
A'	24	11,0	6,4	5,2	4,5	3,6	3,0	2,7
$-\alpha_1$	0,138	0,104	0,076	0,062	0,056	0,050	0,045	0,042
α_2	0,0	0,030	0,092	0,108	0,117	0,124	0,128	0,130
Beton								
A'	12,5	9,9	6,3	4,7	3,9	3,1	2,8	2,6
$-\alpha_1$	0,111	0,088	0,069	0,062	0,059	0,059	0,057	0,050
α_2	0,006	0,029	0,058	0,073	0,079	0,083	0,086	0,084
Eisen								
A'	10	8,0	5,5		3,75	2,9	2,35	2,0
$-\alpha_1$	0,0948	0,0895	0,0788		0,075	0,0825	0,0833	0,095
α_2	0,012	0,04	0,07		0,082	0,075	0,0546	0,0116
Blei								
A'	1,65	2,45	2,60	2,15	1,65	0,96	0,67	0,50
$-\alpha_1$	0,032	0,045	0,071	0,097	0,123	0,175	0,204	0,214
α_2	0,296	0,178	0,103	0,077	0,064	0,059	0,067	0,08

wobei $i = n$ die am weitesten von der Quelle entfernte Schicht kennzeichnet. Für gerichtete monoenergetische γ -Strahlung und unendlich ausgedehntes Medium gelten die in Tabelle 9 zusammengefaßten Dosisaufbautafeln. Auch hier ist im Fall nicht zu kleiner Ordnungszahl eine Anwendung auf Stoffschichten mit endlicher Dicke näherungsweise möglich.

Tabelle 9: Dosisaufbautafeln B für gerichtete monoenergetische γ -Strahlung in unendlich ausgedehntem Medium (nach [8])

Material	E		μx		(in MeV)			
	0,5	1,0	2,0	3,0	4,0	6,0	8,0	10,0
Wasser	2,63	2,26	1,84	1,69	1,58	1,48	1,36	1,22
	4,29	3,39	2,63	2,31	2,13	1,90	1,55	1,44
	9,05	6,27	4,28	3,67	3,32	2,95	2,17	1,95
	20,0	11,5	6,96	5,51	5,26	4,61	3,81	2,89
	35,9	18,0	9,87	7,48	7,41	6,46	5,35	4,07
	74,9	30,8	14,4	10,8	8,54	6,78	5,47	
Eisen	2,07	1,92	1,69	1,58	1,48	1,35	1,27	1,22
	2,94	2,74	2,35	2,13	1,90	1,71	1,55	1,44
	4,87	4,57	3,76	3,32	2,95	2,48	2,17	1,95
	8,31	7,81	6,11	5,26	4,61	3,81	3,27	2,89
	12,4	11,6	8,78	7,41	6,46	5,35	4,58	4,07
	20,6	18,9	13,7	11,4	9,92	8,39	7,33	6,70
Blei	1,24	1,38	1,40	1,36	1,36	1,28	1,19	1,11
	1,39	1,68	1,76	1,71	1,71	1,56	1,40	1,24
	1,63	2,18	2,41	2,42	2,42	2,18	1,87	1,54
	1,87	2,80	3,36	3,55	3,55	3,29	2,97	2,27
	2,08	3,40	4,35	4,82	4,82	4,69	4,18	3,54
		4,20	5,94	7,18	7,18	7,70	9,53	9,08

3.3.3 Numerische Lösungen

Für verschiedene Probleme können unter Voraussetzung starker Vereinfachungen der Transportgleichung analytisch-asymptotische Lösungen erhalten werden. Hierzu gehören z.B. Integraltransformationen, Matrizenrechnungen und asymptotische Reihenentwicklungen. Allgemeinere Problemstellungen erfordern die Anwendung numerischer Methoden zur Lösung der Transportgleichung. Ein Beispiel hierfür ist die *Methode der sukzessiven Streuungen*, bei der eine Entwicklung nach Streuordnungen vorgenommen wird. Dabei werden die Beiträge der ungestreuten, der einfach, zweifach usw. gestreuten Strahlungsteilchen zur Energie- und Richtungsverteilung der Flußdichte am Ort r einzeln berechnet und anschließend addiert. Eine weitere Möglichkeit zur Lösung der Transportgleichung stellt die *Punktkernintegration* dar. Dabei wird ein ausgedehntes Strahlungsfeld durch eine Vielzahl von Punktquellen ersetzt. Durch Superposition der Beiträge aller Punktquellen läßt sich die Flußdichte am Ort r ermitteln. Häufig verwendet wird die *Methode der diskreten Ordinaten*. Hierbei wird der gesamte Energiebereich in Energiegruppen unterteilt. Ebenso erfolgt eine Aufteilung des Raumes der Orts- und Richtungskordinaten in ein Koordinatennetz (diskrete Ordinaten). Für jede so entstandene Netzzelle wird das Integral der Transportgleichung durch Gruppenkonstanten angenähert, wobei der Zusammenhang zwischen Energie und Streuwinkel in jeder Netzzelle zu berücksichtigen ist. Unter Beachtung der Randbedingungen kann somit für jede Zelle eine mittlere Flußdichte bestimmt werden. Die Methode der diskreten Ordinaten liefert im allgemeinen Gleichungssysteme 10^3 ter bis 10^4 ter Ordnung, deren Lösung aufwendige Iterationsverfahren und damit den Einsatz leistungsfähiger Rechner erfordern. International bekannte Programme zur Lösung von Strahlungstransportproblemen mit der Methode der diskreten Ordinaten sind ANISN [9] und DOT [10].

Während die bisher angeführten numerischen Methoden auf Grund des hohen Rechenaufwandes in der Regel nur auf eindimensionale beziehungsweise mit Einschränkungen auf zweidimensionale Probleme anwendbar sind, gestattet die *Monte-Carlo-Methode* auch die Lösung dreidimensionaler Probleme. Diese Methode stellt ein „theoretisches Experiment“ dar, bei dem der Zustand x eines willkürlich ausgewählten Teilchens auf seinem Weg in einem Medium verfolgt wird. Aus einer Vielzahl so berechneter Teilchenwege, die als Lebensgeschichten bezeichnet werden, läßt sich die gesuchte Funktion $\psi(x)$ als Erwartungswert der Verteilungsfunktion der Teilchenzustände in einem vorgegebenen Punkt x im Zustandsraum bestimmen.

Der Verlauf einer Lebensgeschichte wird durch verschiedene Zufallsgrößen X charakterisiert. Die Dichte $p(x)$ der Wahrscheinlichkeit dafür, daß die Zufallsgröße den Wert $X = x$ annimmt, läßt sich aus den bereits beschriebenen physikalischen Gesetzmäßigkeiten des Strahlungstransports ableiten. Dabei müssen die Bedingungen

$$p(x) > 0 \quad \text{und} \quad \int_a^b p(x) dx = 1 \quad (91)$$

erfüllt sein, wobei $[a, b]$ das Intervall kennzeichnet, in dem die Zufallsgröße X liegen kann. Eine konstante Wahrscheinlichkeitsdichte bedeutet, daß die Zufallsgröße X gleichverteilt ist. Trifft dies für das Intervall $[0, 1]$ zu, wird sie als Zufallszahl Z bezeichnet. Eine Zufallszahl nimmt folglich jeden Wert zwischen 0 und 1 mit gleicher Wahrscheinlichkeit an. Im einfachsten Fall könnten Zufallszahlen mittels eines

Würfels oder Rouletts (mit anschließender Normierung auf eins) ermittelt werden. Für die Anwendung der Monte-Carlo-Methode werden sie durch bestimmte Algorithmen (Zufallszahlengeneratoren) mit Rechnern erzeugt.

Die Bestimmung von Zufallsgrößen X aus gegebenen Wahrscheinlichkeitsverteilungen $p(x)$ ist durch Transformation von Zufallszahlen möglich. Dieser Vorgang wird auch als Auslosen oder Erheben einer Stichprobe bezeichnet und erfolgt nach der Beziehung

$$Z = \int_x^a p(x) dx. \quad (92)$$

Je nach dem zufälligen Wert von Z ergibt sich daraus die Zufallsgröße X . Da das Integral in Gl. (92) im Intervall von a bis b den Wert 1 ergibt, folgt (entsprechend Abb. 19) $X = a$ für $Z = 0$ und $X = b$ für $Z = 1$. Wenn sich das Integral über $p(x)$ nicht elementar lösen läßt oder $p(x)$ nur grafisch gegeben ist, kann zum Erheben von Stichproben ein Verfahren nach von Neumann verwendet werden (siehe Abb. 20). Hierzu werden zwei Zufallszahlen Z_1 und Z_2 ausgewählt und damit ein zufälliger Punkt P mit den Koordinaten $x' = a + Z_1(b - a)$ und $y' = Z_2 p_{\max}$ konstruiert. Liegt der Punkt P unterhalb der Kurve $p(x)$, ist die gesuchte Zufallsgröße $X = x'$. Anderenfalls muß der Test mit einem neuen Zahlenpaar wiederholt werden. Oft nehmen Zufallszahlen auch diskrete Werte x_i mit Wahrscheinlichkeiten p_i an. Dann muß analog zu (91)

$$p_i > 0 \quad \text{und} \quad \sum_{i=1}^n p_i = 1 \quad (93)$$

Das Auslosen erfolgt nach dem in Abb. 21 dargestellten Schema. Die Anwendung der Monte-Carlo-Methode zur Lösung der Strahlungs-transportgleichung erfordert zunächst die Ermittlung der auf 1 normierten Wahrscheinlichkeitsdichten $p(x)$ für die Zufallsgrößen X , die die Lebensgeschichte eines Strahlungsteilchens bestimmen. Die zufälligen Werte von X werden dann durch Erheben von Stichproben nach einem der beschriebenen Verfahren bestimmt.

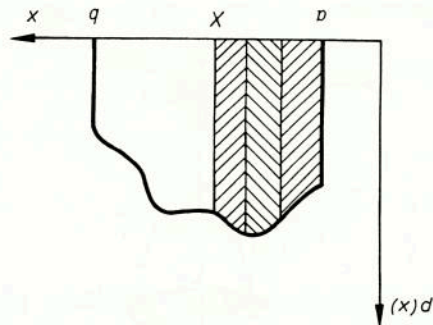


Abb. 19 Zur Bestimmung kontinuierlicher Zufallsgrößen

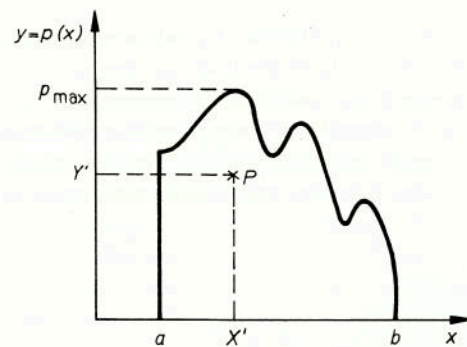


Abb. 20 Zur Bestimmung kontinuierlicher Zufallsgrößen mit dem Verfahren nach von Neumann

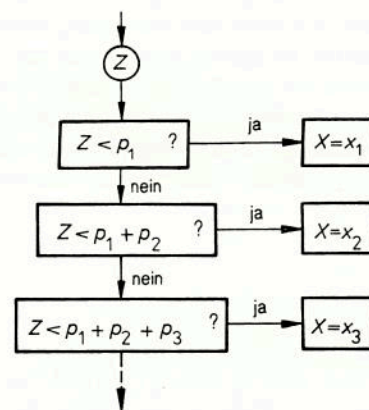


Abb. 21 Zur Bestimmung diskreter Zufallsgrößen

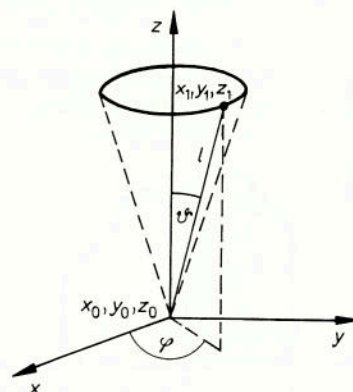


Abb. 22 Zur Berechnung der Lebensgeschichte eines Strahlungsteilchens

Jede Simulation von Strahlungstransportvorgängen beginnt mit der Ermittlung des Anfangszustandes, wobei als Zufallsgrößen der Anfangsort, die Anfangsrichtung und die Anfangsenergie aus den zugehörigen Verteilungsfunktionen zu bestimmen sind. Als Beispiel sei das Auslösen der Richtung aus einer isotropen Richtungsverteilung beschrieben. Mit den in Abb. 22 erklärten Symbolen gilt dafür

$$p(\cos\vartheta) = C_1 \quad (94)$$

und

$$p(\varphi) = C_2, \quad (95)$$

wobei C_1 und C_2 Konstanten bezeichnen. Die Normierung der Wahrscheinlichkeitsdichten, d.h.

$$\int_{-1}^1 p(\cos\vartheta) d(\cos\vartheta) = 1 \quad (96)$$

und

$$\int_{-2\pi}^{2\pi} p(\varphi) d\varphi = 1 \quad (97)$$

liefert $C_1 = 1/2$ und $C_2 = 1/(2\pi)$. Damit folgt mit jeweils einer neuen Zufallszahl Z nach Gl. (92)

$$Z = \frac{1}{2} \int_{\cos\vartheta}^1 d(\cos\vartheta') = \frac{1}{2}(\cos\vartheta + 1) \quad (98)$$

und

$$Z = \frac{1}{2\pi} \int_{\varphi}^{2\pi} d\varphi' = \frac{\varphi}{2\pi}. \quad (99)$$

Die Zufallsgrößen zur Charakterisierung der Stichprobe für die Teilchenrichtung lauten damit

$$\cos\vartheta = 2Z - 1 \quad (100)$$

und

$$\varphi = 2\pi Z. \quad (101)$$

Sind alle Anfangsbedingungen bestimmt, wird die Lebensgeschichte eines Strahlungsteilchens durch Bestimmung des Ortes der ersten Wechselwirkung weiter verfolgt. Dieser hängt von der freien Weglänge l eines Teilchens der Energie E ab, für

die die Wahrscheinlichkeitsdichte in Abschnitt 3.2. bereits angegeben wurde. Das Auslosen erfolgt nach

$$Z = \Sigma_t(E) \int_0^l e^{-\Sigma_t(E)l'} dl' = 1 - e^{-\Sigma_t(E)l}, \quad (102)$$

so daß sich

$$l = -\frac{1}{\Sigma_t(E)} \ln(1-Z) \quad (103)$$

ergibt. Mit den Koordinaten des Anfangsortes x_0, y_0, z_0 folgt damit für den Ort der ersten Wechselwirkung

$$x_1 = x_0 + l \sin \vartheta \cos \varphi, \quad (104)$$

$$y_1 = y_0 + l \sin \vartheta \sin \varphi, \quad (105)$$

$$z_1 = z_0 + l \cos \vartheta. \quad (106)$$

Der weitere Verlauf der Lebensgeschichte wird durch die Art der Wechselwirkung bestimmt. Diese stellt eine diskrete Zufallsgröße dar, wobei die Wahrscheinlichkeit für den i -ten Wechselwirkungsprozeß mit dem zugehörigen Wirkungsquerschnitt σ_i

$$p_i = \frac{\sigma_i}{\sigma_t} \quad (107)$$

beträgt. Gilt

$$Z < \sum_{i'=1}^i \frac{\sigma_{i'}}{\sigma_t} \quad (i = 1, 2, \dots, n), \quad (108)$$

findet der i -te Wechselwirkungsprozeß statt. Handelt es sich um eine Absorption, ist der Teilchenweg beendet, und es muß eine neue Lebensgeschichte mit der Berechnung des Anfangszustandes begonnen werden. Liegt dagegen ein Streuprozeß vor, sind Richtung und Energie des Strahlungsteilchens nach der Streuung zu ermitteln. Die Dichtefunktion für den Kosinus des Streuwinkels ergibt sich aus dem differentiellen Streuquerschnitt zu

$$p(\cos \theta) = [2\pi (d\sigma_s(E, \cos \vartheta)) / d\Omega] / \sigma_s(E). \quad (109)$$

Nach Auslosen eines Wertes für $\cos \theta$ kann damit die neue Energie entweder mit Hilfe des Energie- und Impulserhaltungssatzes oder durch Auslosen aus einer Verteilungsfunktion für die Energie bestimmt werden. Danach ist aus dem Streuwinkel θ die neue Bewegungsrichtung (Koordinaten ϑ, φ) des Teilchens im vorgegebenen Koordinatensystem zu berechnen.

Durch Ort, Energie und Flugrichtung ist der Zustand eines Strahlungsteilchens vollständig bestimmt. Die Monte-Carlo-Rechnung wird weitergeführt, indem der Ort der zweiten Wechselwirkung ermittelt wird. Die beschriebenen Prozeduren werden

solange wiederholt, bis das Teilchen entweder absorbiert wird oder einen Zustand erreicht, der eine weitere Verfolgung seines Weges unnötig macht, z.B. bei Erreichen eines vorgegebenen Detektorortes oder der Grenzfläche einer Abschirmung. Aus einer Vielzahl so berechneter Lebensgeschichten können durch „Einsortieren“ der Teilchen am vorgegebenen Ort in bestimmte Energie- und Richtungsintervalle die Energie- und Richtungsverteilung der Flußdichte oder daraus abgeleitete Größen ermittelt werden.

Die Genauigkeit der Ergebnisse kann dadurch erhöht werden, daß durch Einführung von gewichteten Wahrscheinlichkeitsdichten besonders interessierende Gebiete des Zustandsraumes bei der Rechnung bevorzugt behandelt werden. Dieses Verfahren wird als nicht-analoge Monte-Carlo-Rechnung bezeichnet (ausführlicher hierzu siehe z.B. [11]).

Die Monte-Carlo-Methode ist praktisch ohne einschränkende Randbedingungen anwendbar. Allerdings erfordert sie einen relativ großen Rechenaufwand, da zur Erzielung einer ausreichenden statistischen Sicherheit nicht selten 10^5 bis einige 10^6 Lebensgeschichten berechnet werden müssen. Die Verfügbarkeit leistungsfähiger Rechenanlagen ist daher eine notwendige Voraussetzung. International bekannte Monte-Carlo-Programme zur Lösung von Strahlungstransportproblemen sind z.B. MORSE [12] oder MCNP [13].

3.4 Makroskopische Größen zur Beschreibung der Wechselwirkung von Strahlung mit Stoffschichten

Alle Strahlungstransportprobleme lassen sich bei Kenntnis der makroskopischen Grundprozesse und der Stoffeigenschaften mit Hilfe der Strahlungstransportgleichung prinzipiell lösen. Für viele praktische Fälle ist es jedoch hinreichend und zweckmäßig, die Wechselwirkung von Strahlung mit Stoffschichten durch charakteristische makroskopische Größen zu beschreiben, die ihrerseits durch vorherige Lösung der Transportgleichung ermittelt oder approximiert werden.

3.4.1 Absorption und Streuung geladener Teilchen

Die Energieabgabe eines geladenen Teilchens längs seines Weges innerhalb einer Stoffschicht wird durch den bereits in Abschnitt 3.1.2. eingeführten mittleren Energieverlust je Wegelement, der auch als lineares Bremsvermögen S bezeichnet wird, charakterisiert, wobei für Teilchenenergien $E < 10$ MeV der Energieverlust infolge Ionisationsbremsung dominiert. Da nach Gl. (41) $-dE/dx \sim n_a z^2 Z$ mit $n_a = \rho/(Au)$ gilt, folgt durch Bezug der angegebenen Energie auf die Flächenmasse $d = \rho x$

$$\frac{d}{S} = -\frac{1}{dE} \frac{dE}{dx} \sim \frac{1}{n_a z^2 Z} \frac{dE}{dx} \sim \frac{1}{z^2 Z} \frac{dE}{dx} \quad (110)$$