

Zufallszahlen und Monte-Carlo-Methode: Grundlagen des Simulationsverfahrens im Hinblick auf Strahlenschutz und Dosimetrie

Die in diesem Beitrag zusammengefassten Informationen können zur Beantwortung folgender Fragen beitragen:

- Was ist die Monte-Carlo-Methode?
- Was sind die Ingredienzien für eine Monte-Carlo-Simulation eines Strahlentransportproblems?
- Wie ist die prinzipielle Vorgehensweise bei der Simulation des Transports eines Teilchens in Materie?
- Welches sind die gebräuchlichsten Monte-Carlo-Codes zur Anwendung im Strahlenschutz und in der Dosimetrie?

Was ist die Monte-Carlo-Methode?

Bei Monte-Carlo-Simulationen werden mit Hilfe der Wahrscheinlichkeitstheorie analytisch nicht oder nur aufwendig lösbare Probleme numerisch behandelt. Dieses stochastische Verfahren basiert auf einer großen Anzahl von Zufallsexperimenten, welche z. B. die komplexen Streuprozesse beim Teilchentransport in Materie abbilden. Mathematische Grundlage ist insbesondere das Gesetz der großen Zahlen. Dies bedeutet, dass sich die relative Häufigkeit eines Zufallsergebnisses in der Regel um die theoretische Wahr-

scheinlichkeit eines Zufallsergebnisses einstellt, wenn das zugehörige Zufallsexperiment immer häufiger unter denselben Bedingungen wiederholt wird.

Werfen einer Münze

Ein häufig genanntes Beispiel ist das Werfen einer Münze. Die theoretische Wahrscheinlichkeit, dass eine Münze beim Werfen Kopf oder Zahl zeigt, beträgt 50 %. Beim ersten Wurf lautet das experimentelle Ergebnis jedoch 100 % Kopf oder Zahl. Je häufiger die Münze geworfen wird, desto mehr wird sich das experimentelle Ergebnis für Kopf oder Zahl um die theoretische Wahrscheinlichkeit von 50 % stabilisieren.

Die Zufallsexperimente können entweder real wie etwa durch das Werfen einer Münze oder Würfeln durchge-

führt werden oder durch Erzeugung von geeigneten Zufallszahlen.

Namensgebung Monte-Carlo-Methode

Die bekannte Namensgebung Monte-Carlo-Methode stammt aus der Zeit der 1940er- und 1950er-Jahre, als mit der praktischen Verfügbarkeit der ersten Computer basierend auf computergenerierten Zufallszahlen eine ganze Reihe von grundlegenden Algorithmen entwickelt wurde. Im Rahmen des Manhattan-Projektes wurden für Lösungen komplexer Probleme forciert Simulationen stochastischer Prozesse eingesetzt. Dabei wurde für das damals geheime Projekt der Codename „Monte Carlo“ in Anlehnung an den für Spielcasinos bekannten Stadtteil Monacos geprägt.

Berechnung von π

Beispiel: die Berechnung von π durch die zufällige „Beregnung“ eines Quadrats auf dem Einheitskreis. Für die Fläche F_K des Einheitskreises (Radius 1) gilt $F_K = \pi$ und für die Fläche F_Q des Quadrats um diesen Einheitskreis ist $F_Q = 4$. Der Anteil r der Regentropfen im Einheitskreis ist durch $r = F_K/F_Q = \pi/4$ gegeben. Mit der Anzahl der zufälligen Regentropfen im Quadrat (N_Q) bzw. Kreis (N_K) kann π durch $4 \cdot N_K/N_Q$ angenähert werden. Bei der Bestimmung von π werden die Regentropfen durch eine vorgewählte Anzahl von Zufallspunkten im Quadrat, also durch Zufallszahlen für die Abszisse und Ordinate „ausgewürfelt“. Abbildung 1 zeigt die Verteilung für 100 bzw. 1.000 Regentropfen im Quadrat um den Einheitskreis, Abbildung 2 die Stabilisie-

Große Anzahl von Zufallsexperimenten

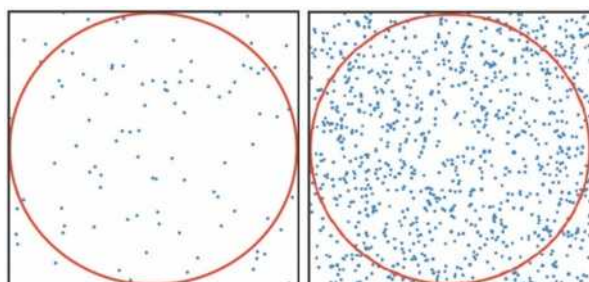
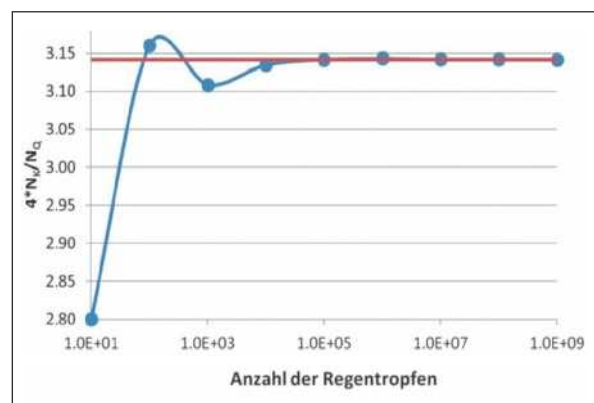


Abb. 1: „Beregnung“ eines Quadrats auf dem rot markierten Einheitskreis mit 100 (links) bzw. 1.000 (rechts) Regentropfen

Abb. 2: Mit zunehmender Regentropfenanzahl (blaue Simulationspunkte $4 \cdot N_K/N_Q$) stabilisieren sich die Werte um π (rote Gerade).



zung des Wertes bei zunehmender Regentropfenanzahl. Die Anzahl N der Zufallsexperimente sollte relativ groß sein, damit das Ergebnis den theoretischen Wert möglichst genau wiedergibt. Im gezeigten Beispiel würde N mindestens 10^5 Regentropfen betragen.

In welchen Fällen wird die Monte-Carlo-Technik eingesetzt?

Ein physikalisches System kann sowohl stochastisch (wie oben genannt) als auch deterministisch, d. h. direkt mit mathematischen Formeln, abgebildet oder mittels Systemen von Differenzen- oder Differenzialgleichungen modelliert werden.

Beim Strahlen- bzw. Teilchentransport verwenden deterministische Codes mathematisch exakte Methoden, um

die Transportgleichung für mittlere Teilchenverhalten zu lösen. Ein deterministischer Ansatz kann für weniger komplexe Probleme vor-

teilhaft sein. Man denke z. B. an die exponentielle Abschwächung von Photonen in einer Bleischicht, beschrieben durch den Massenschwächungskoeffizienten. Wegen der hohen Rechenzeiten deterministischer Transportcodes ist mit diesen Methoden

die Berechnung komplexer Transportprobleme, wie z. B. in einem Reaktorkern, in ausreichend feiner Diskretisierung der Transportgleichung im Allge-

meinen nicht möglich. Daher wird insbesondere in solchen Fällen die Monte-Carlo-Technik eingesetzt, auf die im Weiteren detaillierter eingegangen wird. Dabei wird keine Transportgleichung gelöst, sondern es werden Einzelteilchen simuliert und deren spezifische Aspekte ihres durchschnittlichen Verhaltens ausgezählt („Tallying“). Dabei sind relativ viele Simulationen von Einzelteilchen erforderlich, um das durchschnittliche Verhalten des physikalischen Systems im

Hinblick auf den zentralen Grenzwertsatz zu stabilisieren.

Obwohl Varianten der später als Monte Carlo bezeichneten Methode schon seit Jahrhunderten bekannt sind, wurde sie erst in den letzten Jahrzehnten zu einem mächtigen Werkzeug für Strahlungstransport und Dosimetrie. Dies ist darauf zurückzuführen, dass die dafür benötigten Datenbanken mit den benötigten physikalischen Informationen (z. B. Wirkungsquerschnitte) und leistungsfähige Computer erst dann zur Verfügung standen.

Was sind die Ingredienzien für die Monte-Carlo-Simulation eines Strahlentransportproblems?

Für die Monte-Carlo-Simulation eines Strahlentransportproblems wird Folgendes benötigt: ein Zufallszahlengenerator, ein Stichprobenverfahren zur Probenahme der interessierenden Parameter aus einer Wahrscheinlichkeitsverteilung, das Akkumulieren/Speichern der Ergebnisse („Scoring“) und das Tallying der interessierenden Parameter, eine Abschätzung des statistischen Fehlers (Varianz), welche eine Funktion der Anzahl N ist. Weiterhin werden Geometriebeschreibungen des Strahlentransportproblems mit den verwendeten Materialien und

die zugehörigen physikalischen Daten benötigt. Letzteres wird von vielen Monte-Carlo-Programmen in Form von Datenbanken und Auswahlmöglichkei-

ten verschiedener physikalischer Modelle zur Verfügung gestellt.

Wie ist die prinzipielle Vorgehensweise bei der Simulation des Transports eines Teilchens in Materie?

Abbildung 3 zeigt als einfaches Beispiel bezüglich geometrischer Modellierungen ein simplifiziertes abgebranntes Kernbrennstoffpellet, umgeben von zwei Wasserschichten verschiedener Dicke. Dies ist sowohl als mathema-

tisches Modell, basierend auf Zylindern, als auch als Voxelmodell, d. h. bestehend aus kleinen Quadern, dargestellt. Diese Vorgehensweise lässt sich auf komplexe Geometrien, wie z. B. den menschlichen Körper oder einen Reaktorkern, mit dem entsprechenden Mehraufwand ausweiten.

Im Beispiel des Pellets ist der Brennstoff die Quelle, von der Teilchen nach festgelegten Quellenparametern emittiert werden. Das emittierte Teilchen legt eine gewisse Strecke zurück, bevor in einem bestimmten Abstand eine Wechselwirkung stattfindet. Die Art der Wechselwirkung und die möglichen resultierenden Sekundärteilchen werden durch die Wechselwirkungsquerschnitte an diesem Punkt bestimmt.

Bei den Simulationen wird ein Strahlenfeld durch die Gesamtheit der Teilchen-Lebensgeschichten, sogenannten „Histories“, definiert. Die Histories werden ausgehend von den Werten für die Startbedingungen im Laufe der Simulation aus den Wahrscheinlichkeitsverteilungen der zugrunde liegenden physikalischen Gesetze generiert. Dies beinhaltet u. a. Wechselwirkungsart, Energie, Impuls, Weglänge bzw. den Abstand zwischen den Wechselwirkungen, Energie(verlust), Streuwinkel und Teilchenerzeugung.

Dieser Prozess wird fortgesetzt, bis die zuvor definierten Randbedingungen, wie vollständiger Verlust der Energie des Primärteilchens, erfüllt werden, und wiederholt, bis die Anzahl der gewünschten Primärteilchentransporte N erreicht wird. Abbildung 4 illustriert einen möglichen Ausschnitt aus einer Teilchen-Lebensgeschichte:

Ein einfallendes Teilchen, z. B. ein Photon, kann gestreut werden. Dabei kann ein Sekundärteilchen entstehen,

Komplexe Geometrien

Hohe Rechenzeiten

Einzelteilchen simuliert

Strahlenfeld durch „Histories“ definiert

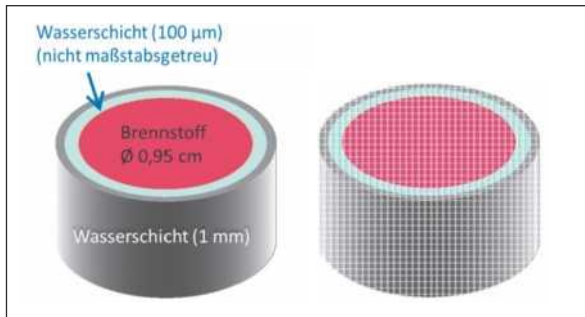


Abb. 3: Querschnitte vereinfachter Pelletmodelle umgeben von 2 Wasserschichten, links mathematisches Modell, rechts entsprechendes Voxelmodell

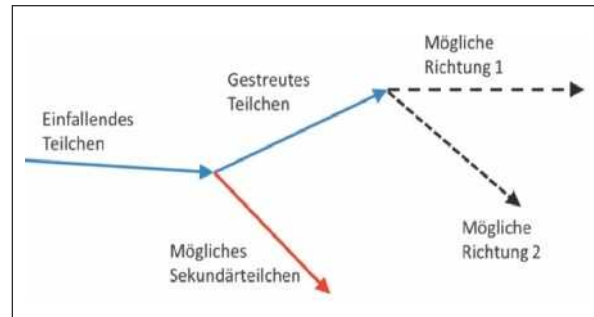


Abb. 4: Illustration des Transports eines Teilchens in Materie mit möglicher Sekundärteilchenproduktion und nachfolgend 2 möglichen Teilchentrajektorien

im Falle eines Photons z. B. ein Compton-Elektron. Danach kann das Teilchen weiteren Wechselwirkungen unterliegen und dabei verschiedene Trajektorien annehmen. Die Teilchen-History ist beendet, wenn das Teilchen und die Sekundärteilchen

die Randbedingungen des Prozesses erreicht haben. Beim Transport des nächsten Teilchens werden die verschiedenen Wechselwirkungen neu „ausgewürfelt“, sodass sich im Allgemeinen eine andere History ergibt.

Bestimmung der für den Strahlenschutz und die Dosimetrie wichtigen Größen

Die durch eine große Anzahl von Teilchentransporten erhaltenen Histories beinhalten die Informationen für die interessierende Strahlentransportgröße,

Anzeige



MIRION
TECHNOLOGIES

Ihr Partner im Strahlenschutz.
Konsequent seit über 30 Jahren.
Immer genauer. Immer effektiver. Immer besser.

NEU:

Jetzt auch mit Alpha-/ Beta-Separation.



1984 H13100



1988 H13110



1999 RTM110



2015 HandFoot-Fibre™ XL

Entwicklung der Hand-Fuß-Kleidermonitore von Herfurth | RADOS | Mirion.

Mirion Technologies (RADOS) GmbH

Ruhrstraße 49 Tel. 040 85193-0
22761 Hamburg Fax 040 85193-256

www.mirion.com

Monte-Carlo-Codes (alphabetisch)

- AMOS (Allgemeine Monte-Carlo-Simulation), Monte Carlo Radiation Transport Program: https://asp.tu-dresden.de/eng/AMOS_Allgemein.html
- COG10, Multiparticle Monte Carlo Code System for Shielding and Criticality Use: www.oecd-nea.org/tools/abstract/detail/ccc-0724, <http://cog.llnl.gov>
- EGS (Electron Gamma Shower)-Familie: EGS5: <http://rcwww.kek.jp/research/egs/egs5.html>
- EGSNRC: www.nrc-cnrc.gc.ca/eng/solutions/advisory/egsnrc_index.html
- FLUKA (FLUktuierende KAskade): www.fluka.org/fluka.php
- GEANT4 (GEometry ANd Tracking): <http://geant4.web.cern.ch/geant4>
- MCNP-Familie MCNP6/MCNP5/MCNPX (General-purpose Monte Carlo N-Particle Transport Code): <https://mcnp.lanl.gov>
- MONK/MCBEND, Software Packages for Nuclear Criticality and Reactor Physics/Radiation Shielding and Dosimetry Applications: www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0306454914003855
- MORSE, Multigroup Neutron Transport and Gamma Transport for Complex Geometry Shields by Monte Carlo: www.oecd-nea.org/tools/abstract/detail/ccc-0127/
- PENELOPE2011/2014 (PENetration and ENergy LOss of Positrons and Electrons): www.oecd-nea.org/tools/abstract/detail/nea-1525; www.oecd-nea.org/globalsearch/download.php?doc=79007
- PHITS (Particle and Heavy Ion Transport Code System): <http://phits.jaea.go.jp>
- SHIELD, Monte Carlo Code for Simulating Interaction of High Energy Hadrons with Complex Macroscopic Targets: www.oecd-nea.org/tools/abstract/detail/iaea1287
- TART2012, 3D Coupled Neutron-Photon Combinatorial Geometry, Time Dependent, Monte Carlo Transport Code: www.oecd-nea.org/tools/abstract/detail/ccc-0638
- TRIPOLI-4 (TRIdimensionnel POLIcinétique), 3D General Purpose Continuous Energy Monte Carlo Transport Code: www.oecd-nea.org/tools/abstract/detail/nea-1716
- VIM5, Continuous energy Criticality, Reactor Physics, and Shielding Code: www.vim.anl.gov

z. B. die deponierte Energie. Um aus den Histories die gewünschten Ergebnisse durch Auszählung (Tallies) zu erlangen, werden bei der Modellierung bestimmte Zellen oder Oberflächen definiert, an denen die interessierende Größe ermittelt werden soll. Im oben genannten Pellet-Beispiel kann die 100 µm dicke Wasserschicht zur Auszählung kurzreichweitiger α -Teilchen, die nachfolgende 1 mm Wasserschicht für die Information über Teilchen mit größerer Reichweite eingesetzt werden. Die dabei ermittelten grundlegenden Größen, wie Fluenz, Energieverteilung und deponierte Energie in einem Volumen erlauben es wiederum, die für den Strahlenschutz und die Dosimetrie wichtigen Größen wie Luftkerma K , Energiedosis D , Ortsdosis $H^*(10)$, Tiefen-Personendosis $H_p(10)$ und Richtungsäquivalentdosis $H'(0,07)$ zu bestimmen. Dazu werden im Allge-

meinen teilchen-, winkel- und energieabhängige Konversionskoeffizienten verwendet, die in der einschlägigen Literatur, z. B. ICRP 116, zu finden sind oder bereits in den Strahlentransportprogrammen integriert sind.

Welches sind die gebräuchlichsten Monte-Carlo-Codes zur Anwendung im Strahlenschutz und in der Dosimetrie?

Die gebräuchlichsten Monte-Carlo-Codes zur Anwendung im Strahlenschutz und in der Dosimetrie sowie weitere Referenzen sind im oben stehenden Kasten zusammengefasst. Über die zugehörigen Webseiten (Stand: 8.5.2015), wie z. B. naheliegend die Wikipedia-Internetseite zur Monte-Carlo-Simulation, ist ein Zugriff zu detaillierteren und weiterführenden Angaben als in dieser Kurzfassung möglich.

Frank Becker 

Der etwas andere Kommentar, heute zum Thema: Monte-Carlo-Methoden I

Toll schon, was da geht,
dank MC-Kalkulationen,
doch muss das Gerechne am End'
sich auch lohnen!
Immerhin gilt's, 15 Codes für das Spiel,
(von Amos bis VIM, also ziemlich viel)
Jetons gleich zu setzen auf richtige
Positionen.

Rupprecht Maushart, Straubenhardt