
Python-Beleg zum Modul Dosimetrie

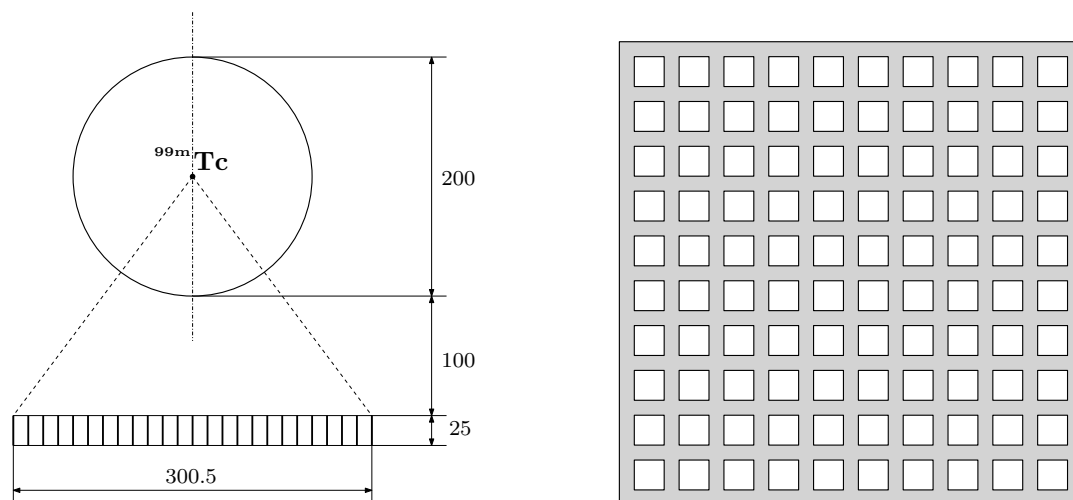
PD Dr. Steffen Löck
Prof. Dr. Wolfgang Enhardt

Sommersemester 2015
Abgabe bis 12.10.2015

Die folgende Aufgabe ist Bestandteil der Prüfung zum Modul Dosimetrie (30 %). Bitte erstellen Sie das entsprechende Programm sowie die geforderte Dokumentation, und geben Sie beides in elektronischer Form (per E-Mail) ab.

Aufgabenstellung

In der Mitte eines kugelförmigen Wasserphantoms befinde sich eine punktförmige ^{99m}Tc -Quelle (isotrope Emission von γ -Quanten, 140.5 keV). Zentriert unterhalb der Kugel befinde sich ein quadratischer Bleikollimator einer Gamma-Kamera. Die Maße (in mm) sind in der Prinzipskizze links gegeben. Der Kollimator enthalte gleichabständige quadratische Löcher (siehe Prinzipskizze rechts) mit 2.5 mm Kantenlänge; die Septendicke sei 0.5 mm.



Nichtmaßstäbliche Prinzipskizze zu Gesamtanordnung und Kollimatoroberseite, Maße in mm.

Simulieren Sie die Situation mittels Monte-Carlo-Methode. Gehen Sie davon aus, dass es im Wasser ausreicht, Photoeffekt und Comptonstreuung zu betrachten, und dass es in Blei ausreicht, den Photoeffekt zu betrachten. Verwenden Sie die Wirkungsquerschnitte aus der NIST-Datenbank

<http://www.nist.gov/physlab/data/xcom/index.cfm> (siehe beiliegende .txt Dateien).

Ermitteln Sie den jeweils auf die Gesamtzahl (mindestens $N = 1000000$) der emittierten Photonen bezogenen

- (a) Anteil der initial in den vom Kollimator ausgeschnittenen Raumwinkel emittierten Photonen (gestricheltes Segment in Skizze links),
- (b) Anteil der die Kugel verlassenden Photonen,
- (c) Anteil der den Kollimator treffenden Photonen,
- (d) Anteil der den Kollimator durchlaufenden Photonen.

Stellen Sie die Verteilung der Photonen auf einer kollimatorparallelen quadratischen Fläche 1 cm unter des Kollimators (Größe wie Kollimatoroberseite) in geeigneter Weise dar. Berechnen Sie das Energiespektrum in der Mitte dieser Fläche (Kreis mit 40 mm Radius) und außerhalb dieses Bereichs. Stellen Sie diese Spektren geeignet dar.

Bitte erstellen Sie ein Textdokument, welches Ergebnisse und Energiespektren enthält.

Erläuterungen

Wechselwirkungen in Wasser

Ein Blick in die NIST-Datenbank zeigt zunächst, dass für die fraglichen Energien Compton-Streuung bzw. Photoeffekt die dominanten Querschnitte stellen; daher kann man in guter Näherung die kohärente Streuung vernachlässigen.

Beachten Sie, dass in der Datenbank die Massenschwächungskoeffizienten $\frac{\Sigma}{\rho}$ tabelliert sind. Die Wirkungsquerschnittsdichte ergibt sich also mittels $\Sigma = \left(\frac{\Sigma}{\rho}\right) \cdot \rho$, wobei ρ die Massendichte ist. Wir bezeichnen die beiden Wirkungsquerschnittsdichten (Photoeffekt und Comptonstreuung) mit Σ_p und Σ_c .

Die freie Weglänge eines Photons ist exponentialverteilt mit Parameter $\Sigma := \Sigma_p + \Sigma_c$. Zufällige Weglängen lassen sich also aus einer gleichmäßig auf $[0, 1]$ verteilten Zufallsvariablen X über die Transformation $Y = -\frac{1}{\Sigma} \ln X$ erzeugen.

Der Reaktionstyp ist eine Zufallsgröße mit zwei möglichen Realisierungen (Photoeffekt und Comptonstreuung). Die Wahrscheinlichkeiten sind gegeben über die Wirkungsquerschnitte, nämlich $p_p = \frac{\Sigma_p}{\Sigma}$ und $p_c = \frac{\Sigma_c}{\Sigma} = 1 - p_p$.

Die Winkelverteilung bei der Comptonstreuung ist (bis auf Normierung) gegeben durch die Klein-Nishina-Formel

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\mu) = \frac{r_e^2}{2} \cdot \frac{1}{[1 + \gamma(1 - \mu)]^2} \cdot \left(1 + \mu^2 + \frac{\gamma^2(1 - \mu)^2}{1 + \gamma(1 - \mu)}\right). \quad (1)$$

Dabei ist $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ der differentielle Wirkungsquerschnitt, $\mu := \cos \vartheta$ mit dem Streuwinkel ϑ , r_e der klassische Elektronenradius und $\gamma := \frac{E}{m_e c^2}$ mit E als Energie des einfallenden Photons.

Beachten Sie, dass bei den Streuprozessen der Streuwinkel bezüglich der aktuellen Flugrichtung gemessen wird. Es ist also zweckmäßig, zunächst einen zufälligen Winkel bzw. ein zufälliges μ zu bestimmen (z. B. mittels Verwerfungsmethode), welcher auf ein an der Flugachse orientiertes Koordinatensystem mit Ursprung am Streuzentrum bezogen ist. Auch ein azimuthaler Winkel ist auszulösen (Gleichverteilung auf $[0, 2\pi)$). Mittels geeigneter Koordinatentransformation erhalten Sie eine auf das globale Koordinatensystem bezogene Flugrichtung, mit der Sie weiterrechnen können.

Alternativ ist es möglich, die Koordinatentransformation erst nach Bestimmung des nächsten Wechselwirkungsortes durchzuführen. In diesem Fall muss man die Koordinaten des neuen Orts anstelle der Richtungen transformieren.

Bei der Comptonstreuung findet ein Energieübertrag auf das Hüllenelektron statt. Die Energie des gestreuten Photons erhält man mittels

$$\tilde{E} = \frac{E}{1 + \gamma(1 - \mu)}. \quad (2)$$

Beachten Sie, dass die Wirkungsquerschnitte (und damit sowohl freie Weglänge als auch Reaktionstyp) von der Energie des einfallenden Photons abhängig sind. Für jede Wechselwirkung muss also der aktuelle Wirkungsquerschnitt aus der Tabelle der NIST-Datenbank interpoliert werden.

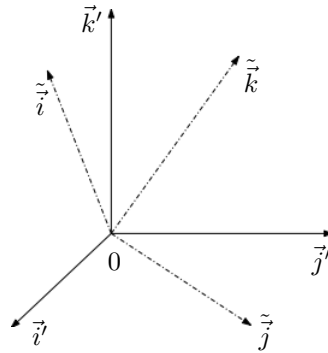
Transformation der Koordinaten bei der Compton-Streuung

Seien x, y, z die Koordinaten eines globalen Koordinatensystems K , z. B. mit x -Achse senkrecht zur Kollimatorfläche, den anderen beiden Achsen parallel zu den Kollimatorrändern und mit Ursprung am Ort der Quelle.

Die aktuelle Flugrichtung sei bezüglich K gegeben durch den normierten Vektor $\vec{x}_F = (x_F, y_F, z_F)$. Wir definieren ein neues Koordinatensystem $\tilde{K} = \{\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}\}$, indem wir \vec{x}_F als Einheitsvektor in \tilde{x} -Richtung und einen beliebigen zu \vec{x}_F senkrechten normierten Vektor als Einheitsvektor in \tilde{y} -Richtung wählen. Der passende \tilde{z} -Einheitsvektor ergibt sich dann im Sinne eines Rechtssystems.

Es sei desweiteren K' das in das Streuzentrum verschobene Koordinatensystem K . Der Flugrichtungsvektor bleibt bezüglich dessen unverändert, d. h. $\vec{x}_F' = (x_F, y_F, z_F)$, und \tilde{K} geht aus K' durch eine geeignete Drehung um das Streuzentrum hervor. Die Verschiebung von K ins Streuzentrum ist sinnvoll, da wir lediglich die neuen Flugrichtungen transformieren wollen, deren Koordinaten unter Verschiebung invariant sind.

Wir bezeichnen die Einheitsvektoren von K' in Reihenfolge der Koordinaten mit $\vec{i}', \vec{j}', \vec{k}'$ und die von \tilde{K} mit $\tilde{i}, \tilde{j}, \tilde{k}$ – jeweils ausgedrückt in K' -Koordinaten.



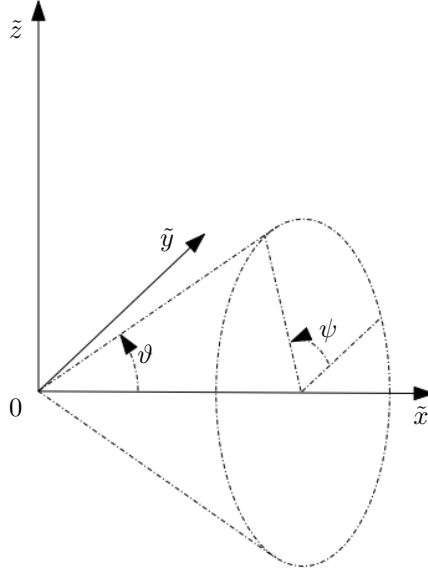
Damit erhält man für den Wechsel von \tilde{K} zu K' eine Transformation vom Typ $\vec{x}' = \mathbf{R}\tilde{\vec{x}}$, wobei \mathbf{R} eine orthogonale Matrix mit $\det \mathbf{R} = 1$ ist. (Die inverse Transformation (K' zu \tilde{K}) ist also gegeben durch $\tilde{\vec{x}} = \mathbf{R}^{-1}\vec{x}' = \mathbf{R}^T\vec{x}'$.) Es gilt die Darstellung

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} x_F & \tilde{j}_1 & \tilde{k}_1 \\ y_F & \tilde{j}_2 & \tilde{k}_2 \\ z_F & \tilde{j}_3 & \tilde{k}_3 \end{pmatrix}; \quad (3)$$

setzen Sie dazu einfach die Einheitsvektoren $\tilde{i}, \tilde{j}, \tilde{k}$ in \tilde{K} -Koordinaten ein, d. h. $(1, 0, 0)$, $(0, 1, 0)$ und $(0, 0, 1)$ (warum ist das ausreichend?).

Es verbleiben also noch zwei Fragen zu behandeln: die Gewinnung der neuen Flugrichtung \tilde{x}_{neu} bezüglich \tilde{K} aus dem Streuwinkeln ϑ (zur \tilde{x} -Achse) und dem azimuthalen Winkel ψ sowie die Erzeugung der Einheitsvektoren \tilde{j} und \tilde{k} aus $\tilde{i} = (x_F, y_F, z_F)$.

Zum ersten Punkt betrachten wir folgende Skizze



und erhalten über den Bezug zu Kugelkoordinaten den bereits normierten neuen Flugrichtungsvektor \tilde{x}_{neu} gemäß

$$\begin{aligned}\tilde{x}_{\text{neu}} &= \cos \vartheta = \mu \\ \tilde{y}_{\text{neu}} &= \sin \vartheta \cos \psi = \sqrt{1 - \mu^2} \cos \psi \\ \tilde{z}_{\text{neu}} &= \sin \vartheta \sin \psi = \sqrt{1 - \mu^2} \sin \psi.\end{aligned}\tag{4}$$

Im zweiten Punkt ist es zunächst notwendig, zu gegebenem $\tilde{i} = (x_F, y_F, z_F)$ einen senkrechten normierten Vektor \tilde{j} zu erzeugen. Die Wahl ist dabei beliebig, d. h. es sind nur die Bedingungen $\tilde{i} \cdot \tilde{j} = 0$ und $|\tilde{j}| = 1$ zu beachten. Man kann einen solchen Vektor (Darstellung in K') beispielsweise gewinnen durch

$$\tilde{j} = \begin{cases} \frac{(\frac{1}{x_F}, -\frac{1}{y_F}, 0)}{\sqrt{\frac{1}{x_F^2} + \frac{1}{y_F^2}}}, & \text{falls } x_F \neq 0 \text{ und } y_F \neq 0; \\ (1, 0, 0), & \text{falls } x_F = 0 \text{ und } y_F \neq 0; \\ (0, 1, 0), & \text{falls } y_F = 0. \end{cases}\tag{5}$$

Der dritte Basisvektor von \tilde{K} (Darstellung in K') ergibt sich dann über

$$\tilde{k} = \tilde{i} \times \tilde{j} = \begin{vmatrix} \tilde{i} & \tilde{j} & \tilde{k}' \\ x_F & y_F & z_F \\ \tilde{j}_1 & \tilde{j}_2 & \tilde{j}_3 \end{vmatrix} = \begin{pmatrix} y_F \tilde{j}_3 - z_F \tilde{j}_2 \\ z_F \tilde{j}_1 - x_F \tilde{j}_3 \\ x_F \tilde{j}_2 - y_F \tilde{j}_1 \end{pmatrix}.\tag{6}$$

Zusammenstellung des Vorgehens bei einer einzelnen Wechselwirkung im Phantom

Es sei $\vec{x}_{\text{ww},k}$ der k -te Wechselwirkungsort des Photons im Phantom, die aktuelle Flugrichtung sei $\vec{x}_{\text{F},k-1} = (x_{\text{F},k-1}, y_{\text{F},k-1}, z_{\text{F},k-1})$.

1. Lose die Wechselwirkungsart anhand der Wirkungsquerschnitte für die aktuelle Energie E . Interpoliere dafür linear anhand des NIST-Datensatzes unter Beachtung der Sprünge an den Bindungsenergien für die einzelnen Schalen.
2. Beim Vorliegen eines Photoeffekts beende die Berechnung der Trajektorie. (Für die weiteren Anweisungen liegt also Compton-Streuung vor.)
3. Lege ein lokales Koordinatensystem \tilde{K} gemäß (5) und (6) fest und erzeuge die Drehmatrix \mathbf{R} gemäß (3).
4. Lose die Größe $\mu = \cos \vartheta$ gemäß (1) und den Winkel ψ aus einer Gleichverteilung auf $[0, 2\pi)$.
5. Berechne die kartesischen Koordinaten $\tilde{x}_{\text{F},k}, \tilde{y}_{\text{F},k}, \tilde{z}_{\text{F},k}$ der neuen Flugrichtung bezüglich \tilde{K} mittels (4).
6. Transformiere den Flugrichtungsvektor mittels $\vec{x}'_{\text{F},k} = \mathbf{R} \vec{\tilde{x}}_{\text{F},k}$ in K' -Koordinaten. Aufgrund der Verschiebungsinvarianz von Richtungen ist dies gleichzeitig auch die Darstellung $\vec{x}_{\text{F},k}$ des neuen Flugrichtungsvektors im globalen Koordinatensystem K .
7. Lose eine neue freie Weglänge λ_k und bestimme den neuen potentiellen Wechselwirkungsort $\vec{x}_{\text{ww},k+1} = \vec{x}_{\text{ww},k} + \lambda_k \vec{x}_{\text{F},k}$. Liegt dieser innerhalb des Phantoms, beginne wieder bei 1.

Wechselwirkungen in Blei

Im Bleikollimator ist es ausreichend, Photoabsorption zu betrachten. Damit reduziert sich die Aufgabe auf die Bestimmung des Weges in Blei und dessen Vergleich mit der (zufälligen) freien Weglänge. Die Bestimmung dieses Weges ist im wesentlichen eine Aufgabe elementarer analytischer Geometrie. Ein möglicher Ansatz wäre, die Innenflächen der Löcher wie auch die “Boden-“ und “Deckelfläche“ des Kollimators in der Form $x = \text{const.}$, $y = \text{const.}$ bzw. $z = \text{const.}$ darzustellen. Für die Durchstoßpunkte der Photonen berechnet man dann die zugehörigen Parameter λ zur Flugbahndarstellung $\lambda \mapsto \vec{x}_0 + \lambda \vec{x}_F$ des Photons.

Wir wünschen Ihnen viel Freude und Erfolg!