Método de Monte Carlo em simulações de transporte de partículas na matéria

Maurício Moralles

Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares (IPEN/CNEN)

Técnicas Experimentais em Física de Partículas Elementares (IFUSP - 2018)

Simulações do transporte de partículas na matéria

- O Método de Monte Carlo
- O pacote GEANT4
- Prática com o GEANT4

Conceitos

(1) Métodos numéricos:

- Métodos para resolver problemas complicados com o uso de algoritmos algébricos

- Por exemplo:
  - Integrais
  - Equações diferenciais
  - Raízes de equações

Conceitos

(2a) Aleatório:
Adjetivo que caracteriza eventos ou fenômenos que, quando observados diversas vezes, produzem resultados diferentes;

(2b) Estocástico:
Adjetivo que caracteriza processos sujeitos às leis do acaso;

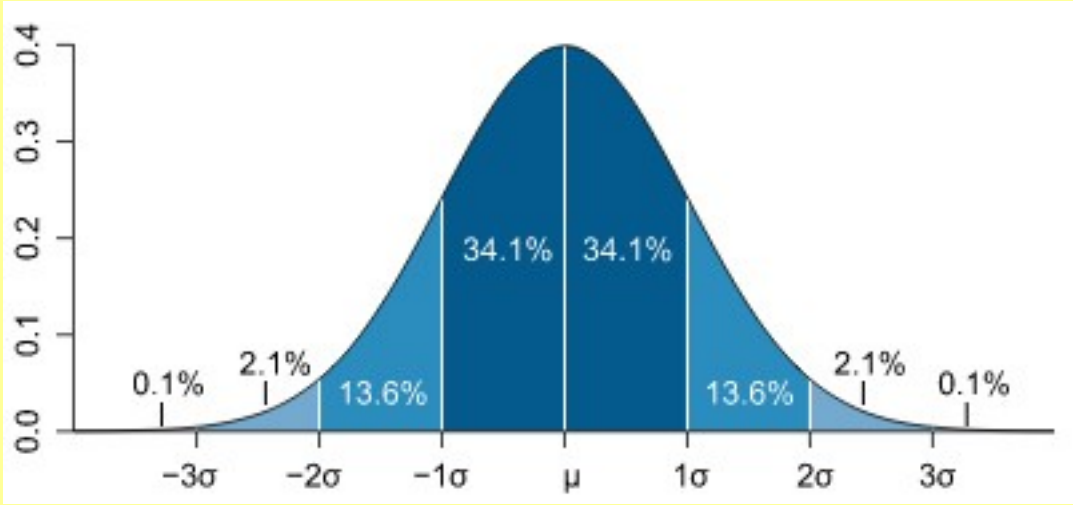
Conceitos

(3) Métodos de Monte Carlo:

Métodos numéricos estocásticos nos quais a solução é obtida por amostragem, com algoritmos que usam variáveis aleatórias

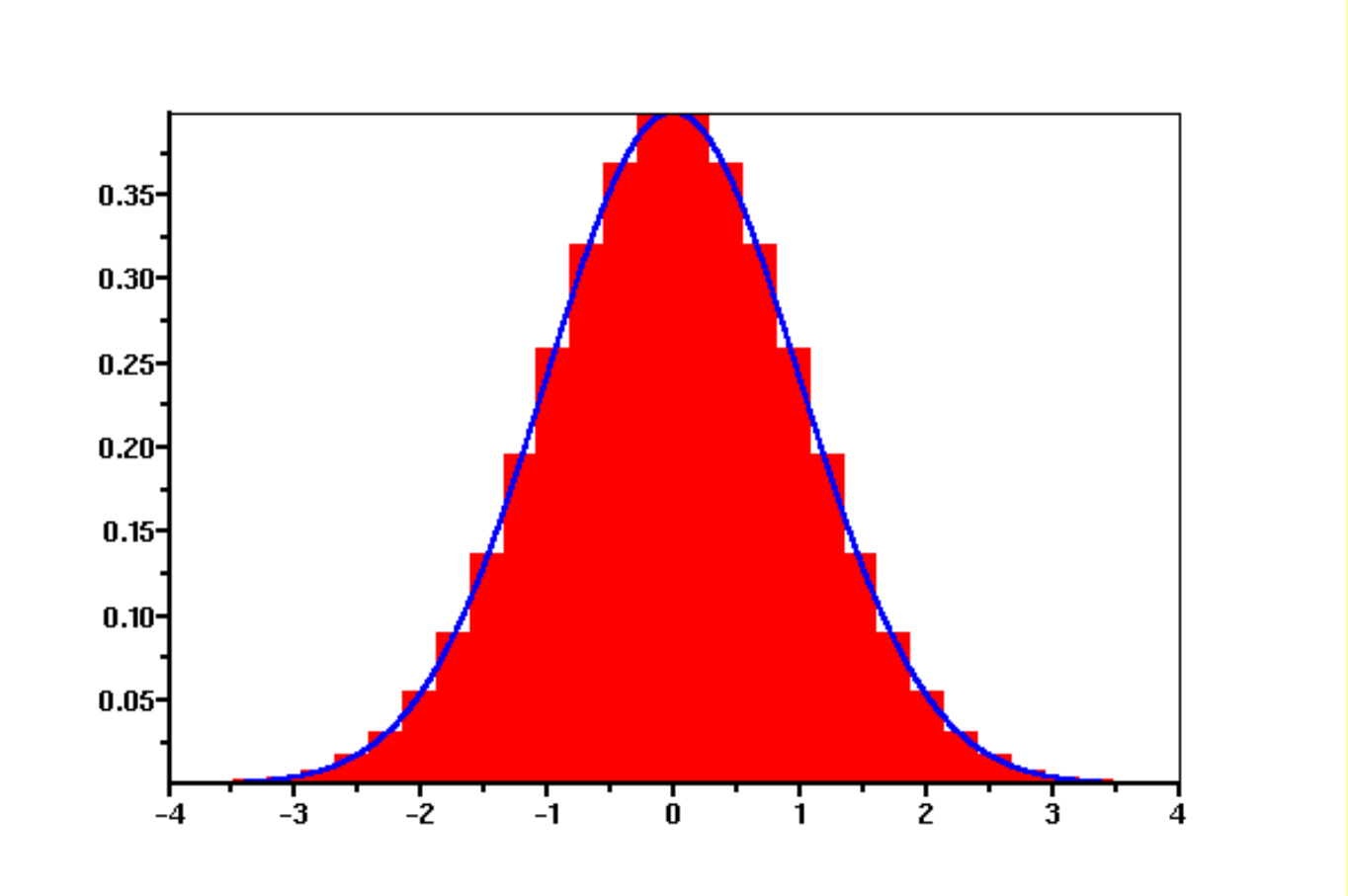
Exemplo: integral da gaussiana

$$\frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}}\int_{-a}^{+a}\exp\left(\frac{-x^2}{2\sigma^2}\right)dx = \left\{\begin{array}{ll} 0{,}6827 & se\ a=\sigma \\ 0{,}9545 & se\ a=2\sigma \\ 0{,}9973 & se\ a=3\sigma \end{array}\right\}$$



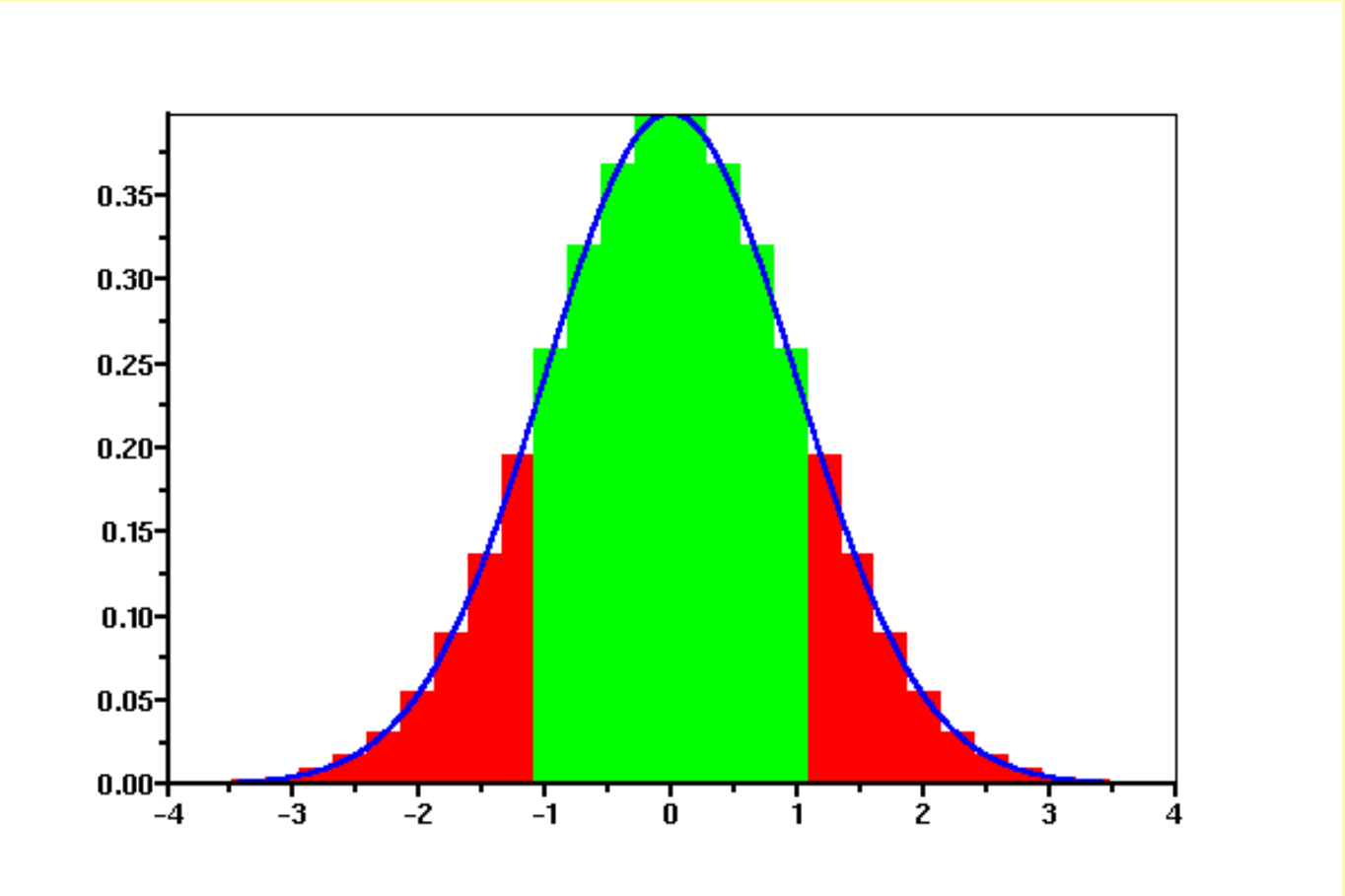
É calculada por métodos numéricos

Exemplo: integral da gaussiana



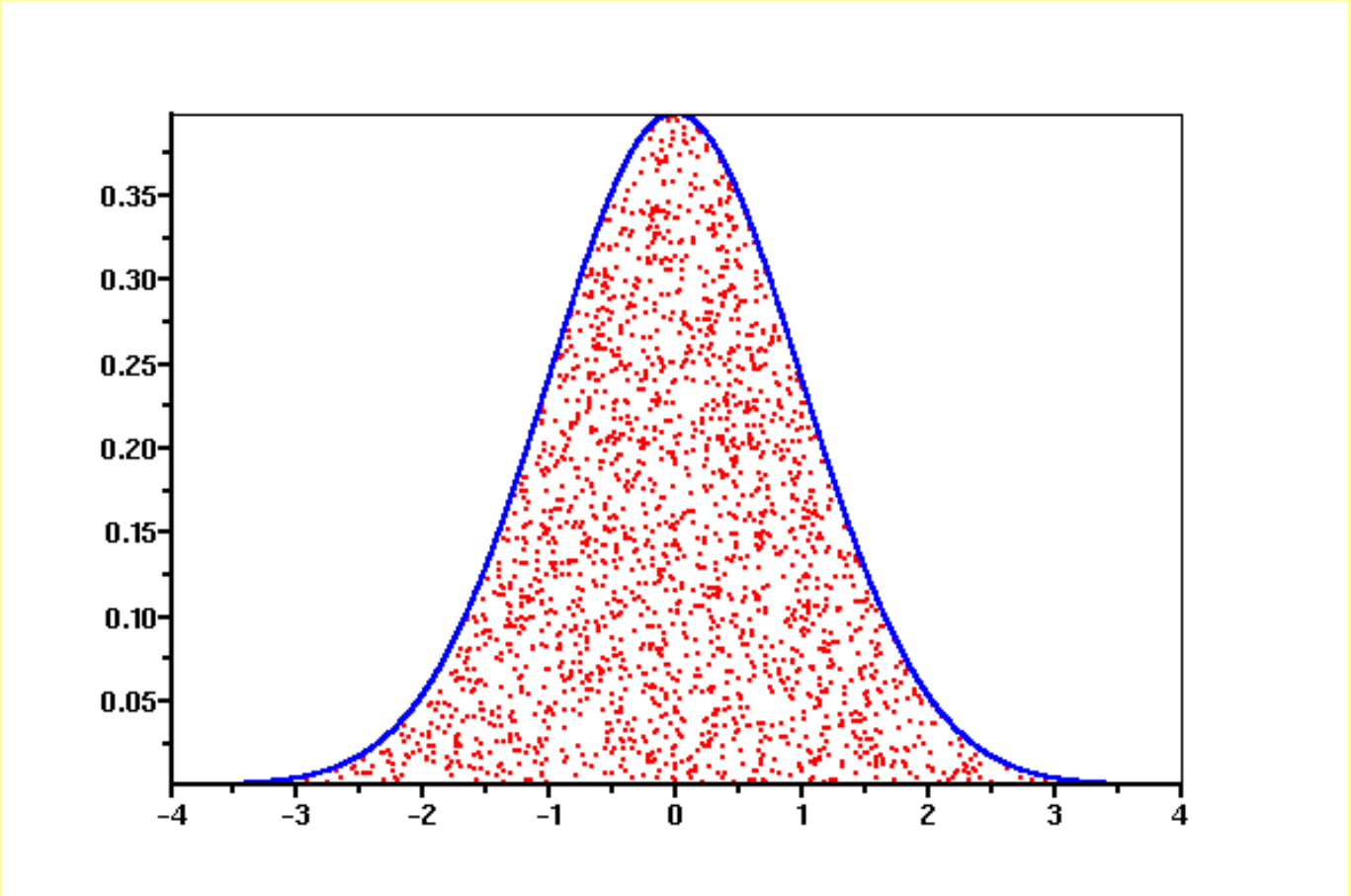
Método numérico determinístico: aproximação por retângulos usando 30 intervalos

Exemplo: integral da gaussiana



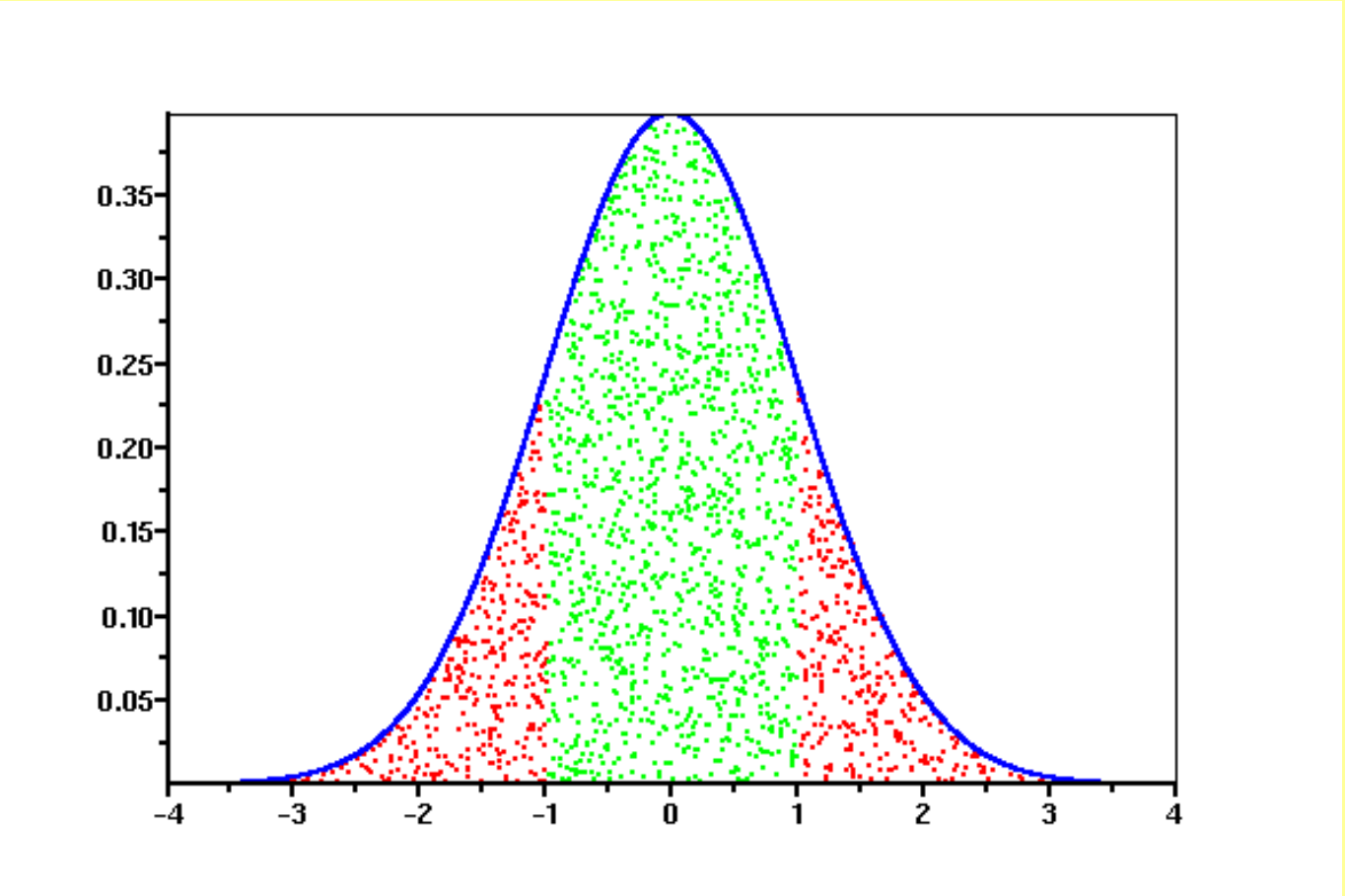
$$\sum_{-1}^{+1} g(x)\Delta x = 0{,}7154\,; \quad exato: 0{,}6827$$

Exemplo: integral da gaussiana



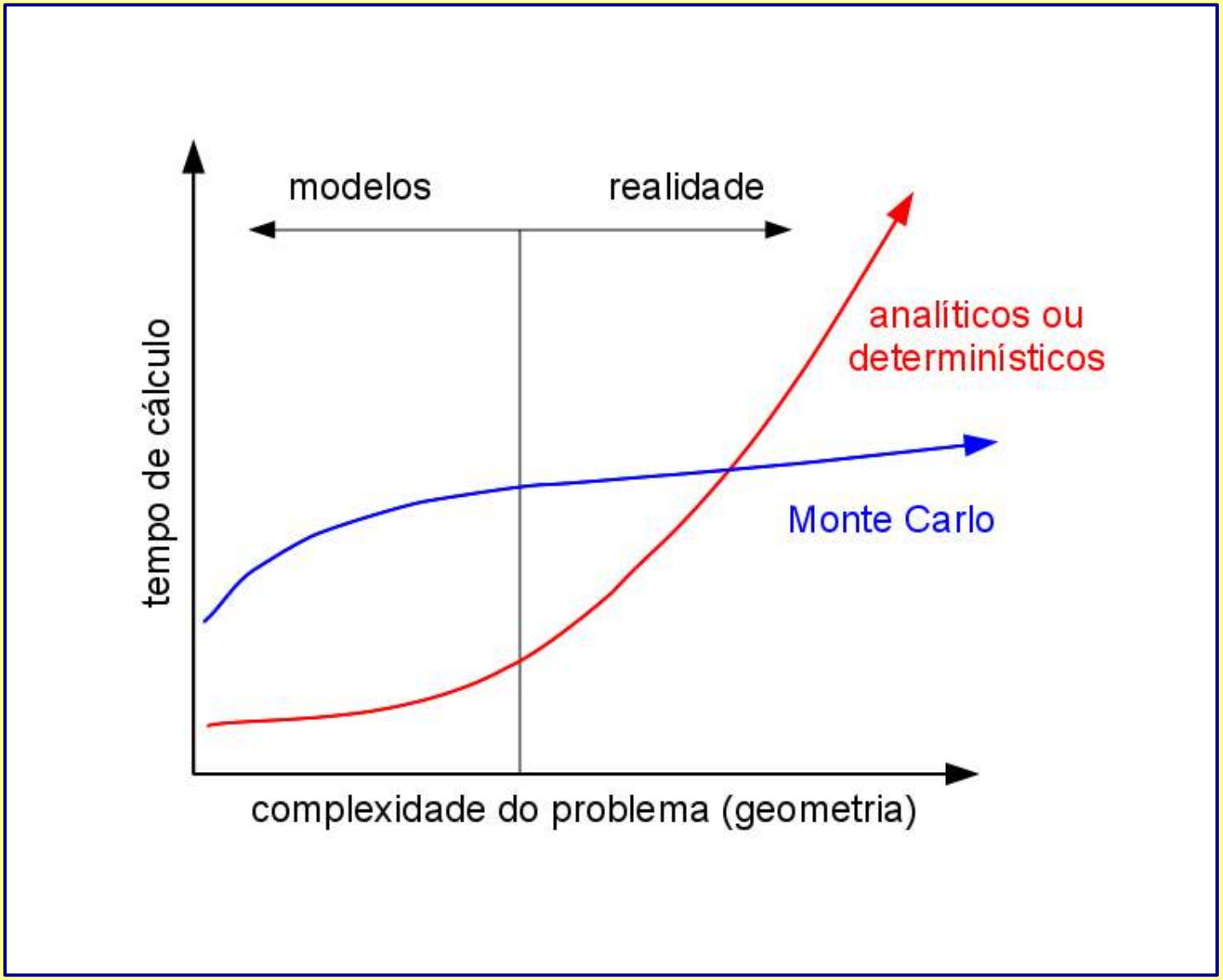
Método numérico estocástico (Monte Carlo):
usando 2000 pontos

Exemplo: integral da gaussiana



$$\frac{pontos\ verdes}{todos\ os\ pontos} = 0{,}6975\,; \quad exato = 0{,}6827$$

Monte Carlo × Determinístico



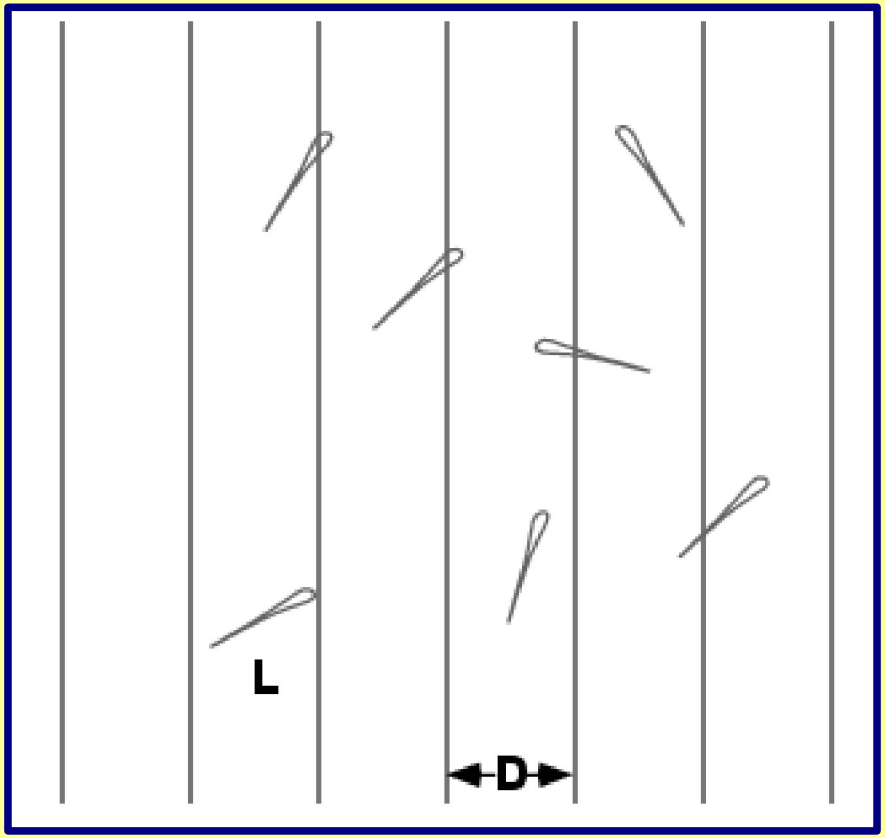
adaptado de Alex F. Bielajew (Univ. Michigan)

História

Comte de Buffon (1777)

Primeiro documento que descreve o uso de sorteio aleatório para a resolução de uma integral

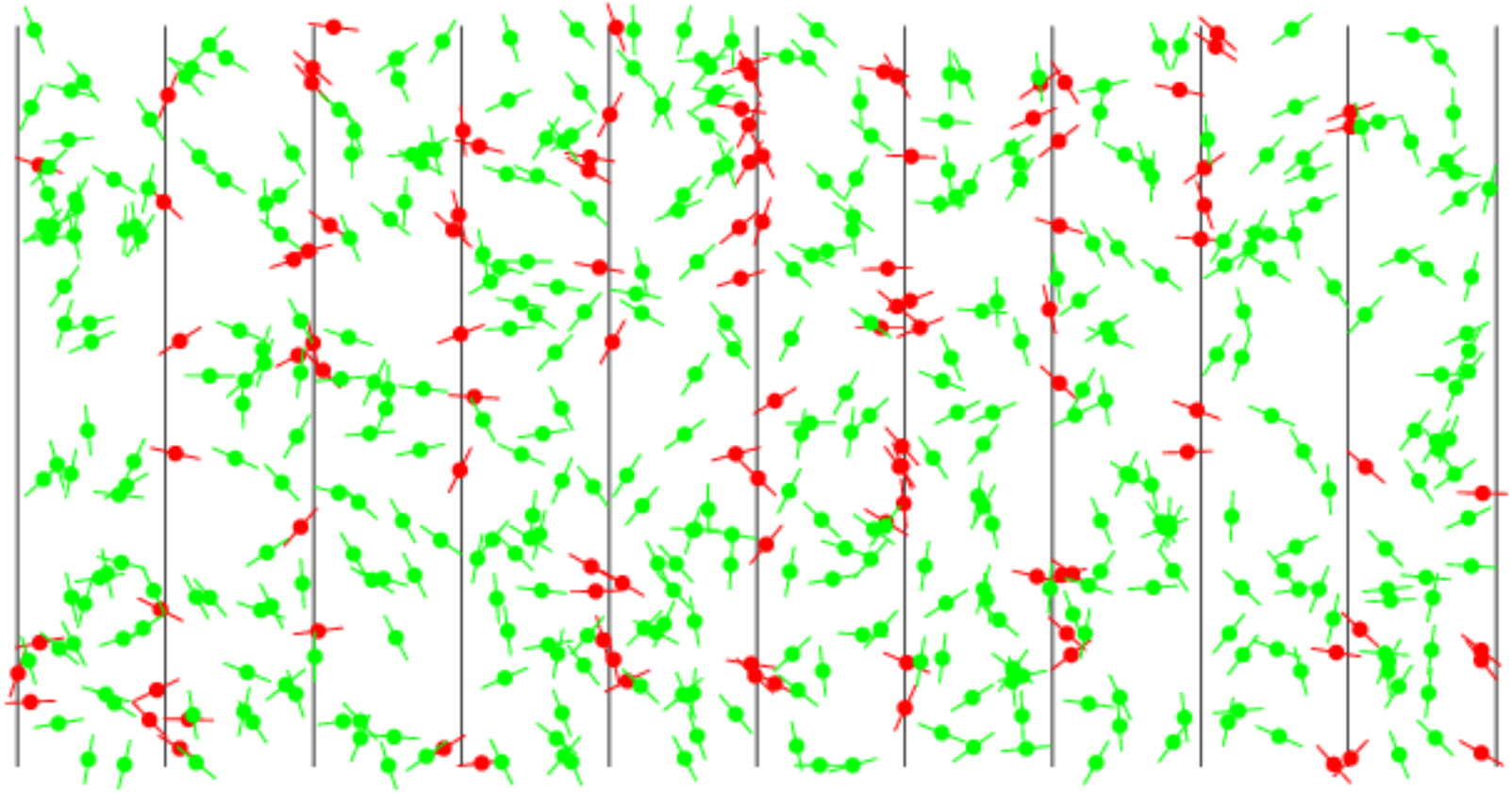
Agulhas de comprimento L jogadas aleatoriamente sobre uma folha com linhas paralelas separadas pela distância D



número total de agulhas: N_T

número de agulhas que cruzam linhas: N_C

$$\pi = \frac{2L}{D}\,\frac{N_C}{N_T}$$



The above figure shows the result of 500 tosses of a needle of length parameter $x = 1/3$, where needles crossing a line are shown in red and those missing are shown in green. 107 of the tosses cross a line, giving $\hat{\pi} = 3.116 \pm 0.073$.

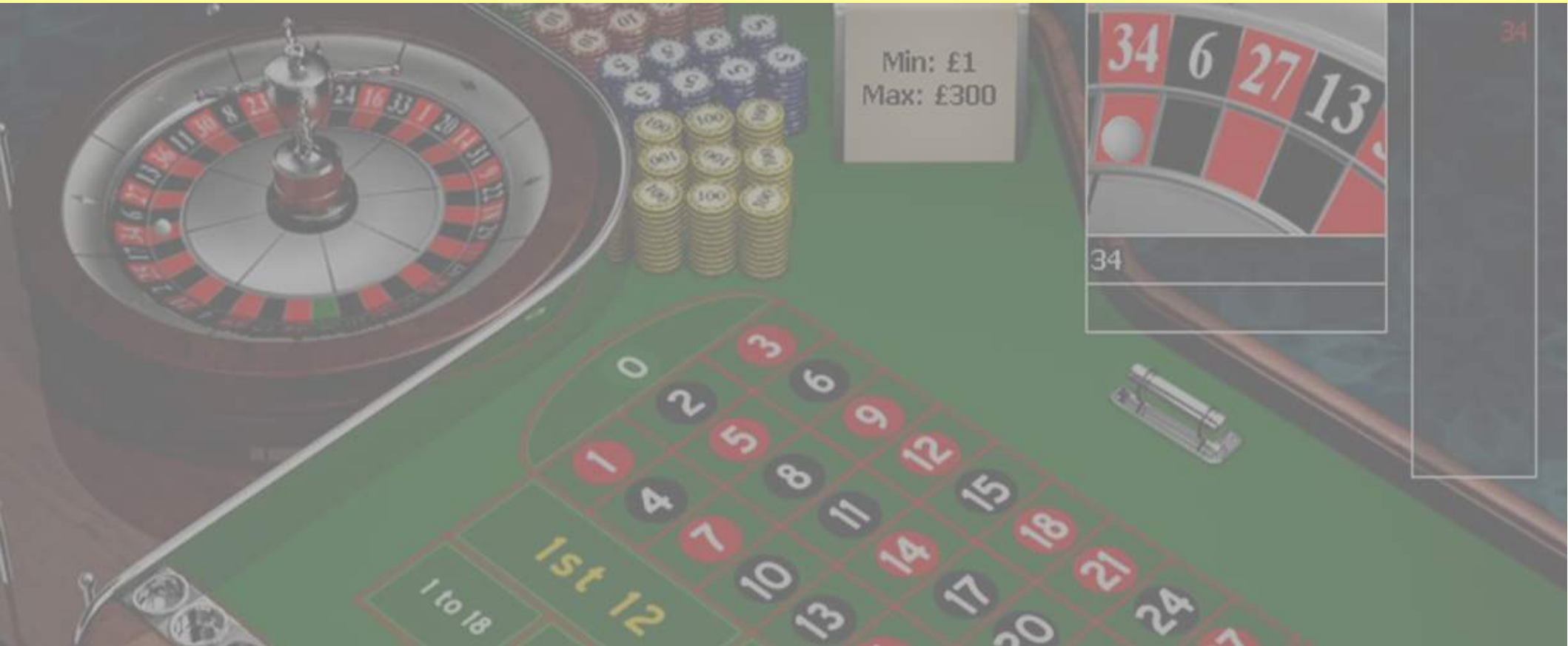
http://mathworld.wolfram.com/BuffonsNeedleProblem.html

Monte Carlo

➔ Monte Carlo é a capital de Mônaco, famosa por seus cassinos;

➔ Los Alamos (1946) von Neumann, Ulam, Metropolis e Frankel calcularam difusão de nêutrons usando cálculos por amostragem;

➔ Em 1949 o termo “Monte Carlo” surge no artigo de N. Metropolis, S. Ulam, J. Am. Stat. Assoc., 44, 335.



A essência dos métodos de Monte Carlo:

• Modelagem das partes do problema e definição das grandezas relevantes;

• Determinação das probabilidades de ocorrência das variáveis relevantes;

• Geração de valores aleatórios para as variáveis de acordo com suas probabilidades (regras de amostragem);

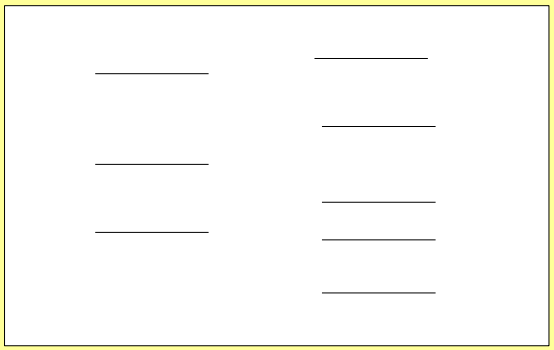
A essência dos métodos de Monte Carlo:

- Registro dos resultados acumulados (em inglês: “*scoring*” ou *“tallying”*);

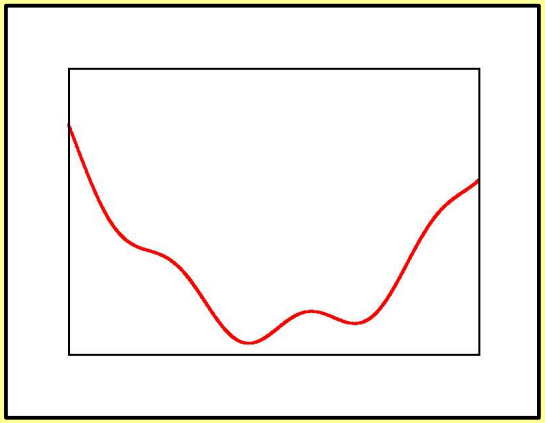
- Estimativa do erro estatístico (variância).

Tipos de variáveis

Discretas



Contínuas



Variáveis discretas

O resultado do evento “rolar um dado” pode ser:

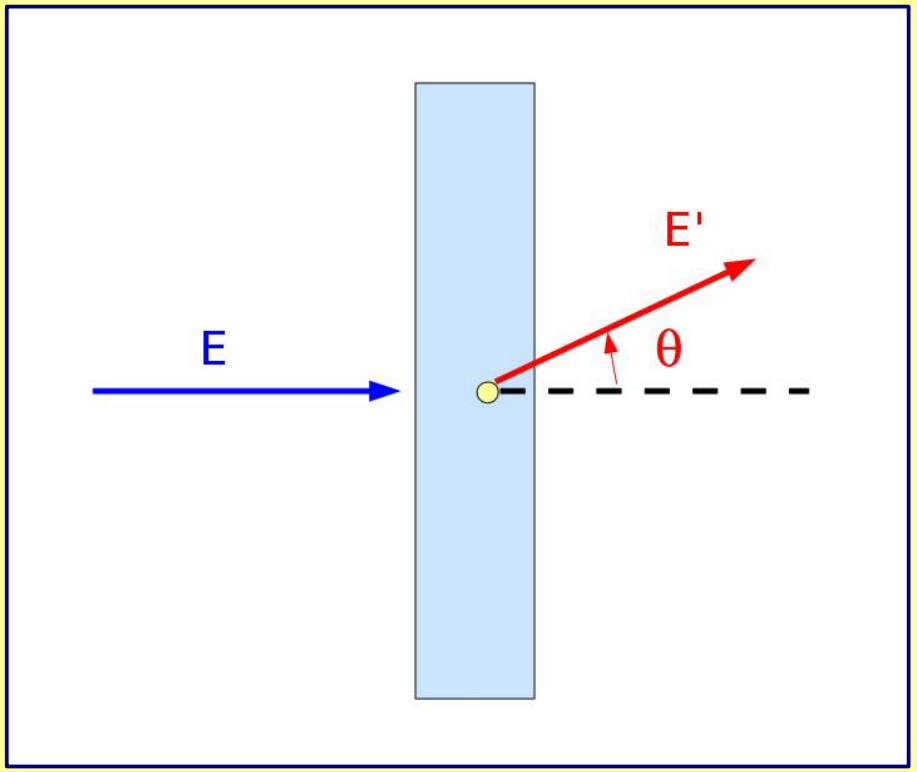
1, 2, 3, 4, 5 ou 6

O resultado da observação de um núcleo radioativo durante um intervalo de tempo pode ser:

decaiu ou não decaiu

Variáveis contínuas

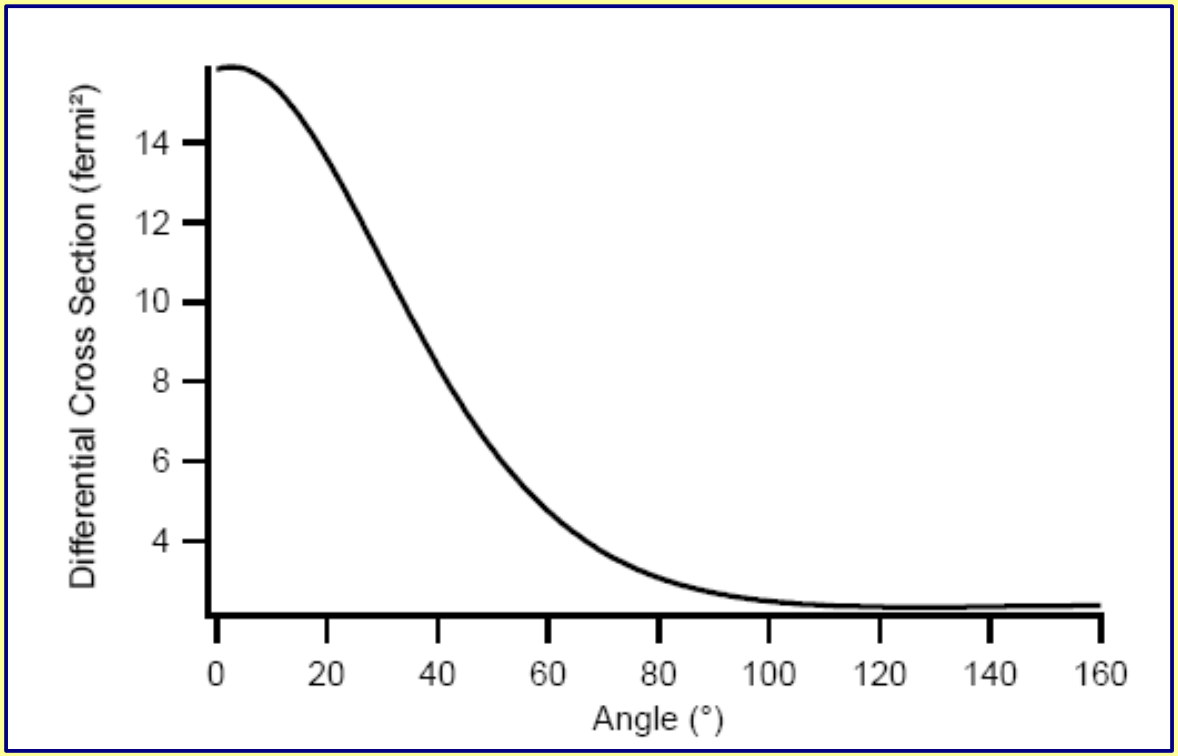
Um fóton de energia E que sofre espalhamento Compton num material e resulta num fóton de energia E' desviado num ângulo θ



Espalhamento Compton (Klein-Nishina)

$$\frac{d\sigma}{d\theta} = \frac{r_e^2}{2}\left(F(E,\theta) - F(E,\theta)^2 \sin^2(\theta) + F(E,\theta)^3\right)$$

onde $$F(E,\theta) = \left(1 + \frac{E}{m_0 c^2}[1-\cos\theta]\right)^{-1}$$



Probabilidade

Seja uma variável discreta X que pode assumir k valores x_1, x_2, x_3, ... x_k.

A probabilidade p_i da variável assumir um valor x_i é obtida a partir do número N_i de ocorrências deste valor, quando se faz um número N de observações:

$$p_i = \frac{N_i}{N}$$

Probabilidade

As probabilidades de ocorrência de um evento podem ser definidas:

- Através de observações
- Usando um modelo

Probabilidade: exemplo

Um dado foi lançado 100 vezes.
O número de ocorrência de cada face está mostrado na tabela:

face i	N_i	p_i
1	14	0,14
2	17	0,17
3	25	0,25
4	13	0,13
5	17	0,17
6	14	0,14

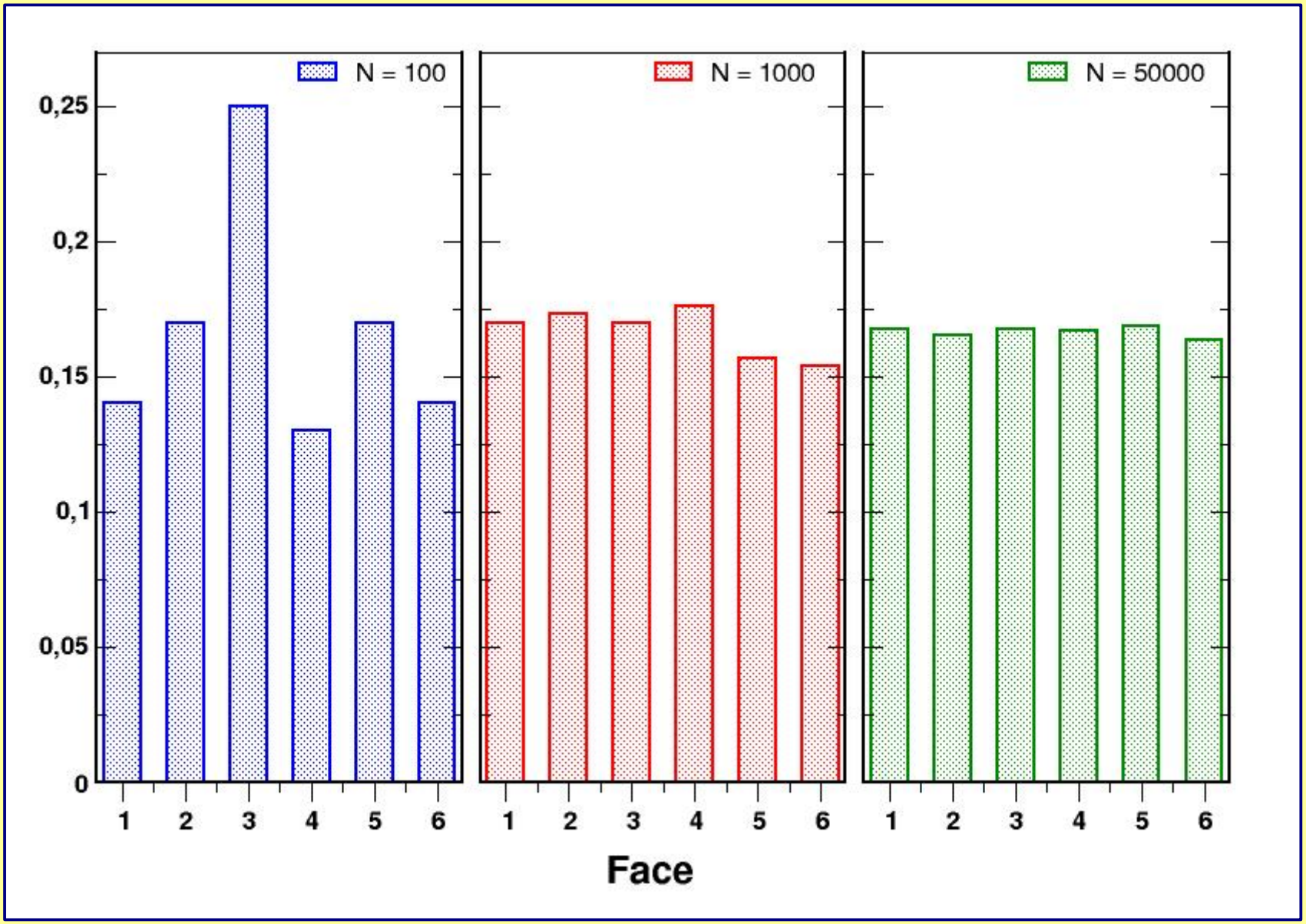
Após 1000 lançamentos:

face i	N_i	p_i
1	170	0,170
2	173	0,173
3	170	0,170
4	176	0,176
5	157	0,157
6	154	0,154

Após 50000 lançamentos:

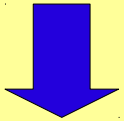
face i	N_i	p_i
1	8376	0,16752
2	8260	0,16520
3	8390	0,16780
4	8355	0,16710
5	8423	0,16846
6	8196	0,16392

Gráficos das probabilidades

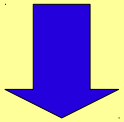


Probabilidades

Quanto maior o número de observações



Menor o desvio relativo



Mais precisa é a determinação das probabilidades

Probabilidades

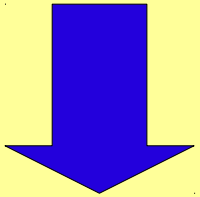
Pode-se criar um modelo ou usar uma teoria que descreva as probabilidades observadas.

No caso dos dados não tendenciosos:

$$p_1 = p_2 = p_3 = p_4 = p_5 = p_6 = \frac{1}{6} = 0{,}16666...$$

Probabilidade

Se a variável for contínua, os resultados das observações são colocados na forma de histograma



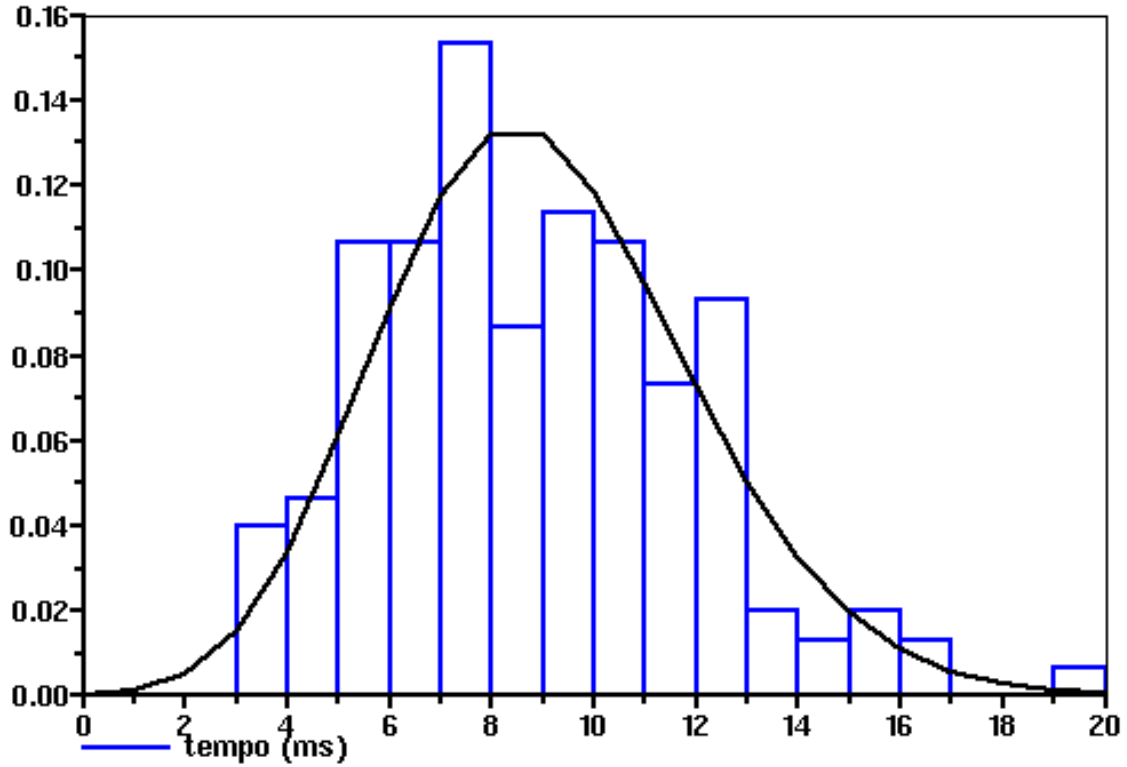
Aplica-se a mesma metodologia mostrada para o caso discreto, como o jogo de dados

Probabilidade: variável contínua

A tabela abaixo mostra medições de 150 valores para o tempo (ms) entre duas contagens sucessivas de um detector Geiger.

8	20	8	16	15	6	11	7	11	4
16	10	13	5	8	8	8	13	8	9
4	8	9	7	8	8	11	14	5	6
11	9	7	12	7	4	9	10	10	16
5	7	11	6	11	10	7	13	6	10
13	13	6	6	10	11	7	8	10	8
17	6	12	12	10	10	5	11	11	12
13	5	8	14	5	9	13	11	10	11
12	12	8	6	7	9	9	10	7	14
17	12	10	13	15	9	13	9	8	12
6	4	4	13	9	8	6	4	9	11
10	6	12	6	13	10	8	7	11	8
13	8	6	8	13	8	6	10	8	6
10	6	11	5	13	7	7	11	7	7
8	11	7	10	8	12	9	12	9	7

Histograma + modelo



$$p(t) = \frac{\lambda^t}{t!} e^{-\lambda}$$

$$\lambda = 9$$

Probabilidade: variáveis discretas

Uma condição necessária é que dentro de todas as possíveis ocorrências, uma delas deve ocorrer, ou seja a probabilidade de que “algo aconteça” é 1.

Para variáveis discretas:

$$\sum_{i=1}^{k} p_i = 1$$

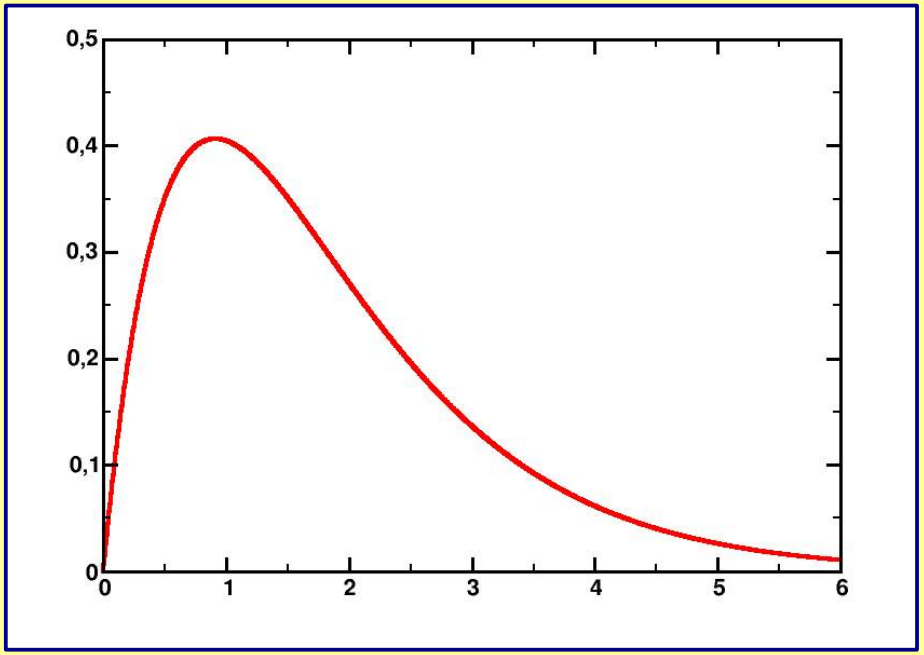
Variáveis contínuas

Para variáveis contínuas as probabilidades são descritas por uma função chamada

função densidade de probabilidade

que obedece à seguinte condição

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\,dx = 1$$



Estatística

Os resultados de cálculos de Monte Carlo são tratados de maneira semelhante a resultados de experimentos:

- O valor médio, <x>, representa a grandeza calculada

- O desvio padrão da média, σ_M, representa seu erro estatístico

Valor médio

Variável discreta: $$\langle x \rangle = \sum_{i=1}^{k} x_i \, p_i$$

Variável contínua: $$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x \, f(x) \, dx$$

Variância e desvio padrão

O desvio padrão é a raiz quadrada da variância $\sigma = \sqrt{\sigma^2}$

A variância pode ser calculada por

$$\sigma^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$$

Já vimos como se calcula $\langle x \rangle$

É necessário calcular também $\langle x^2 \rangle$

Valor quadrático médio

Variável discreta: $$\langle x^2 \rangle = \sum_{i=1}^{k} x_i^2 \, p_i$$

Variável contínua: $$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 \, f(x) \, dx$$

O desvio padrão da média

No caso de uma simulação realizada com N eventos, o erro estatístico do valor médio calculado é

$$\sigma_M = \frac{\sigma}{\sqrt{N-1}} = \sqrt{\frac{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}{N-1}}$$

Resultados das simulações

Portanto, ao se realizar uma simulação, além de se armazenarem os valores das grandezas calculadas, armazenam-se também seus valores quadráticos

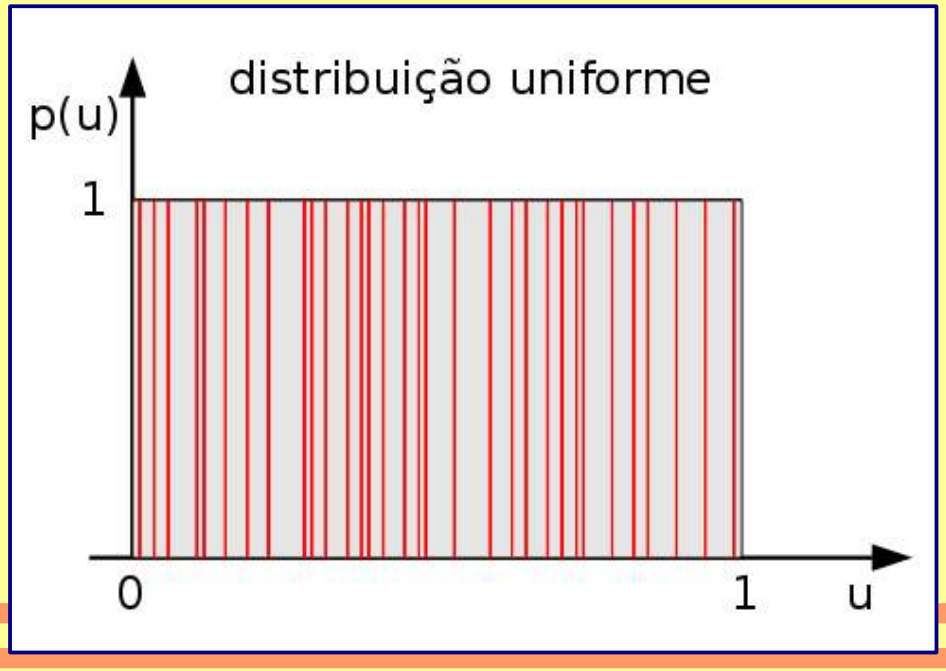
Ao final tem-se o resultado $\langle x \rangle \pm \sigma_M$

onde $\sigma_M = \sqrt{\frac{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}{N-1}}$

Geração de números aleatórios

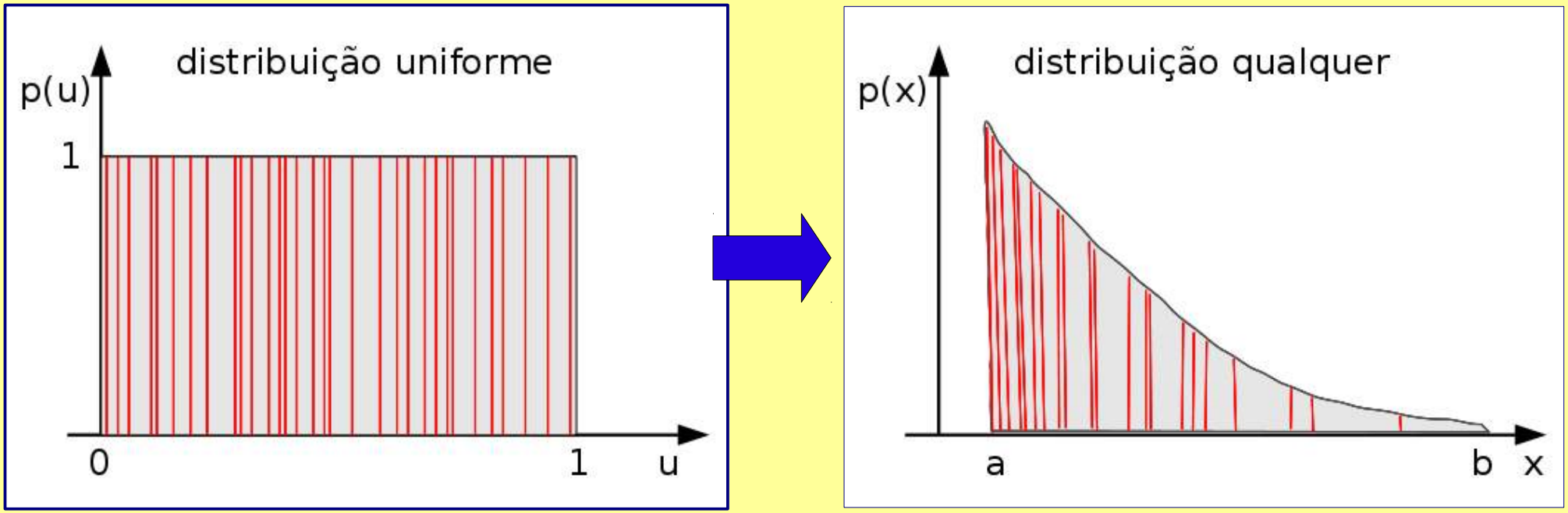
O gerador de números aleatórios é o "coração" dos métodos de Monte Carlo

Normalmente são usados algoritmos matemáticos para gerar números com distribuição uniforme entre 0 e 1



Geração de números aleatórios

Usando técnicas de amostragem é possível obter números aleatórios com outras distribuições



Geradores de números aleatórios

Há geradores baseados em processos físicos. Geram números verdadeiramente aleatórios; a sequência não se repete

Mecânicos: jogar dados, moedas

Eletrônicos: ruído num semicondutor

Fonte Radioativa: *Genuine random numbers, generated by radioactive decay* (*www.fourmilab.ch/hotbits)*

Geradores matemáticos

Os geradores baseados em algoritmos matemáticos produzem sequências pseudoaleatórias

- Utilizam um valor inicial chamado de semente

- Se a mesma semente for utilizada, a mesma sequência será gerada

Geradores matemáticos

Há diversos geradores matemáticos, mas é necessário escolhê-los com cuidado, pois podem apresentar alguns “defeitos” como

- Período curto
- Distribuição não-uniforme
- Sequências com correlações entre números próximos

Cuidados

- Ao utilizar um programa pronto: procure informações sobre o(s) gerador(es) de aleatórios interno(s)

- Ao desenvolver seu próprio programa: escolha um gerador que tenha referências sobre a escolha de seus parâmetros, suas limitações, e que tenha sido testado

Técnicas de amostragem

- São poucos os problemas para os quais a solução mais eficiente usa apenas aleatórios distribuídos uniformemente

- Na maioria dos casos, as soluções eficientes e rápidas são obtidas com aleatórios gerados conforme as funções densidade de probabilidade definidas pelas características do problema a ser simulado

Técnicas de amostragem

- Existem alguns métodos de transformações de distribuições (técnicas de amostragem) com regras práticas

- Método da rejeição

- Método da probabilidade acumulada

Técnicas de amostragem

O assunto será abordado de maneira progressiva:

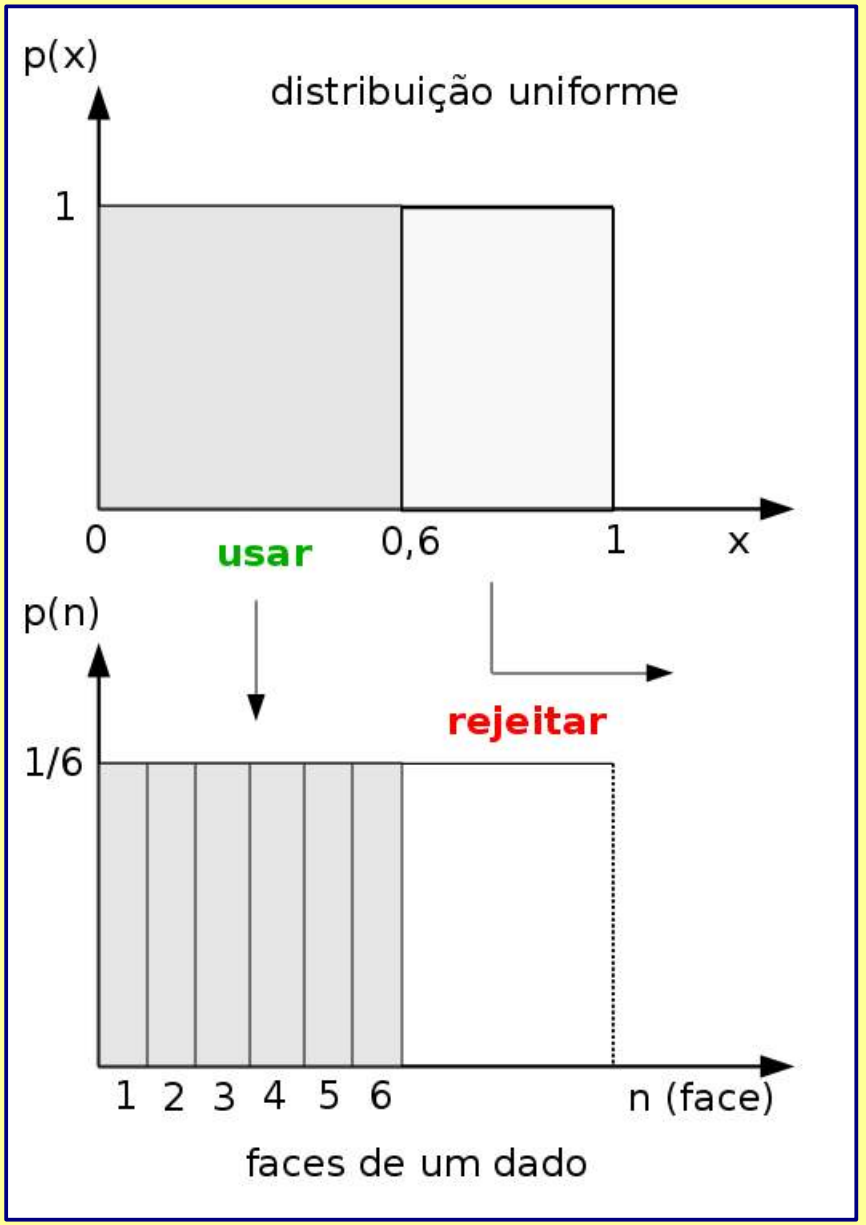
- Variáveis discretas
  - Método da rejeição
  - Método da probabilidade acumulada
- Variáveis contínuas
  - Função distribuição acumulada

Simular lançamento de dado

- Vamos supor que queremos simular o lançamento de dados a partir de um gerador de 0 a 1 uniforme

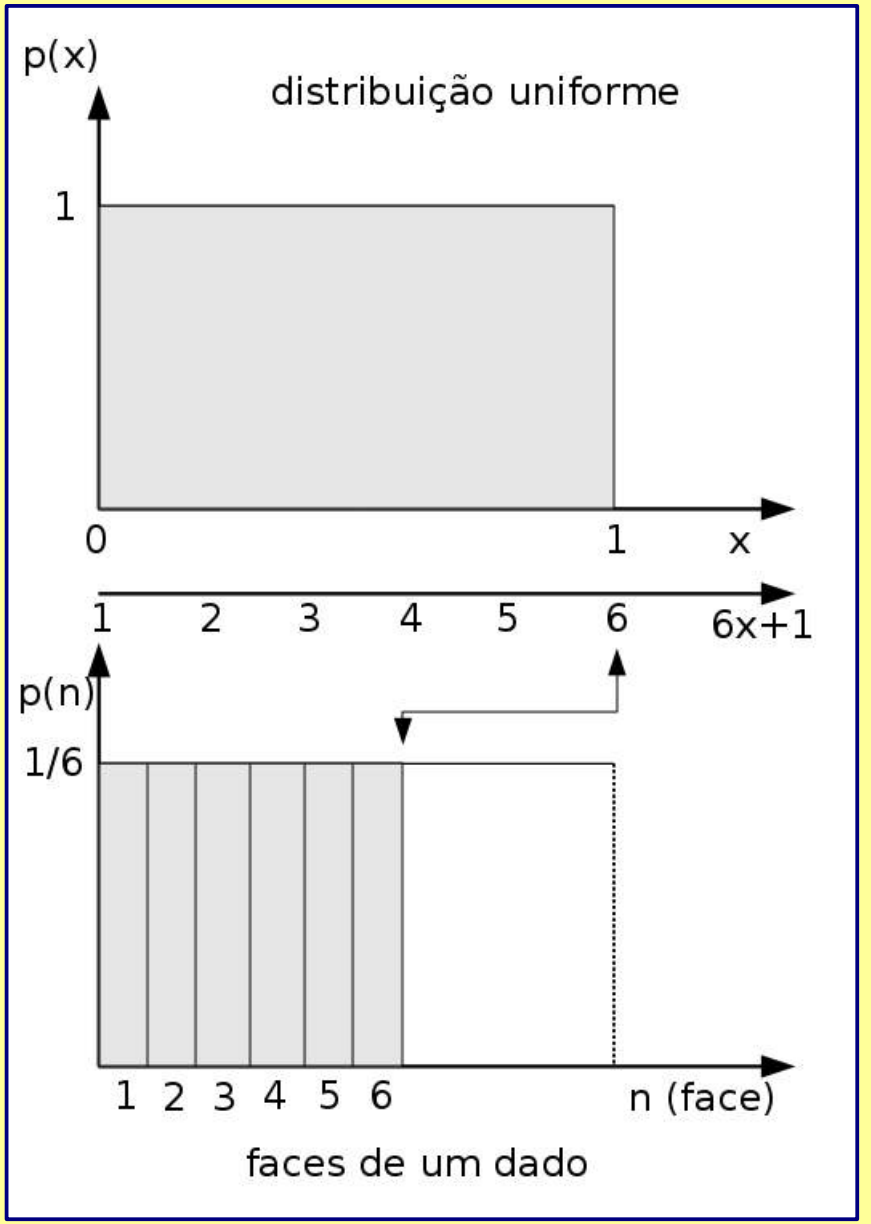
Método de rejeição

1. Gero um valor x, $0 \leq x \leq 1$
2. se $0.0 \leq x < 0.1 \Rightarrow n = 1$
3. se $0.1 \leq x < 0.2 \Rightarrow n = 2$
4. se $0.2 \leq x < 0.3 \Rightarrow n = 3$
5. se $0.3 \leq x < 0.4 \Rightarrow n = 4$
6. se $0.4 \leq x < 0.5 \Rightarrow n = 5$
7. se $0.5 \leq x < 0.6 \Rightarrow n = 6$
8. A eficiência deste método é 60%, pois 40% dos aleatórios gerados são rejeitados



Uma alternativa

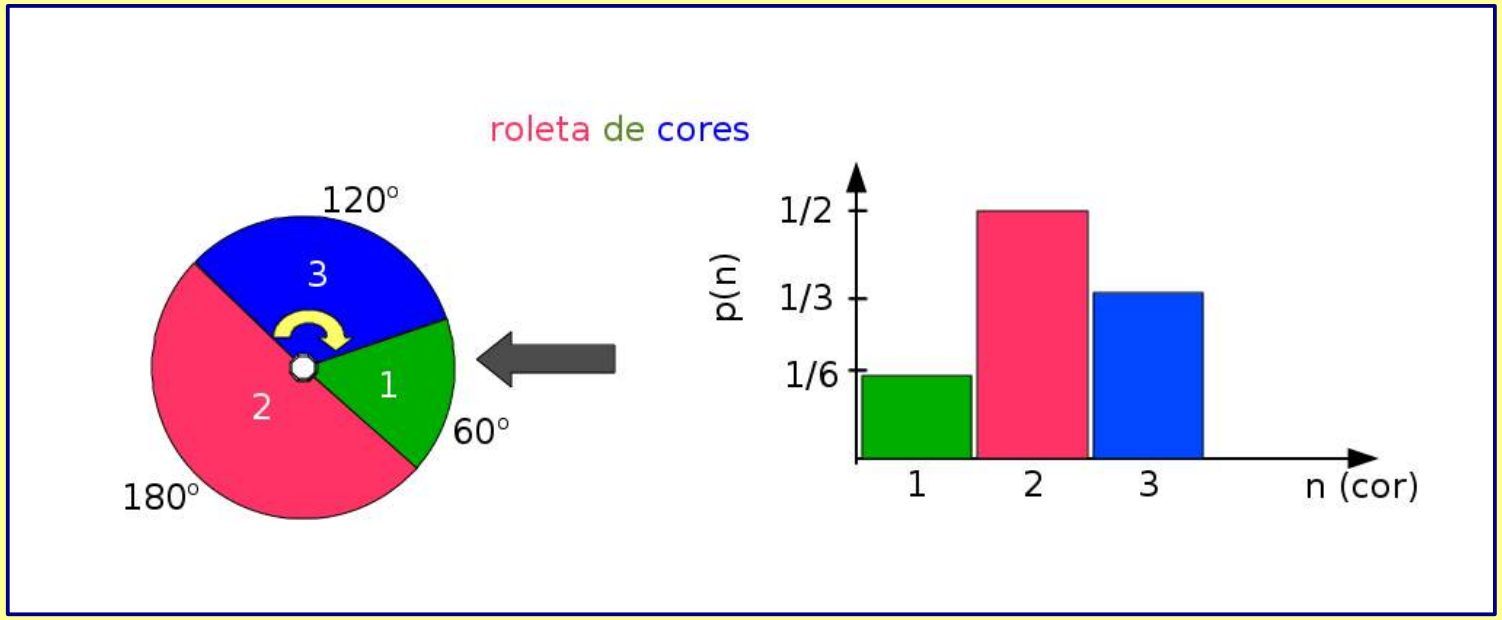
1. Gero um valor x, $0 < x < 1$
2. Multiplico x por $6 \Rightarrow x' = 6x$
3. $\Rightarrow 0 < x' < 6$ (real)
4. Extraio a parte inteira de x' e somo 1 para obter n:
5. $n = \text{int}(x') + 1$
6. $\Rightarrow 1 \leq n \leq 6$ (inteiro)
7. Todos os aleatórios são usados



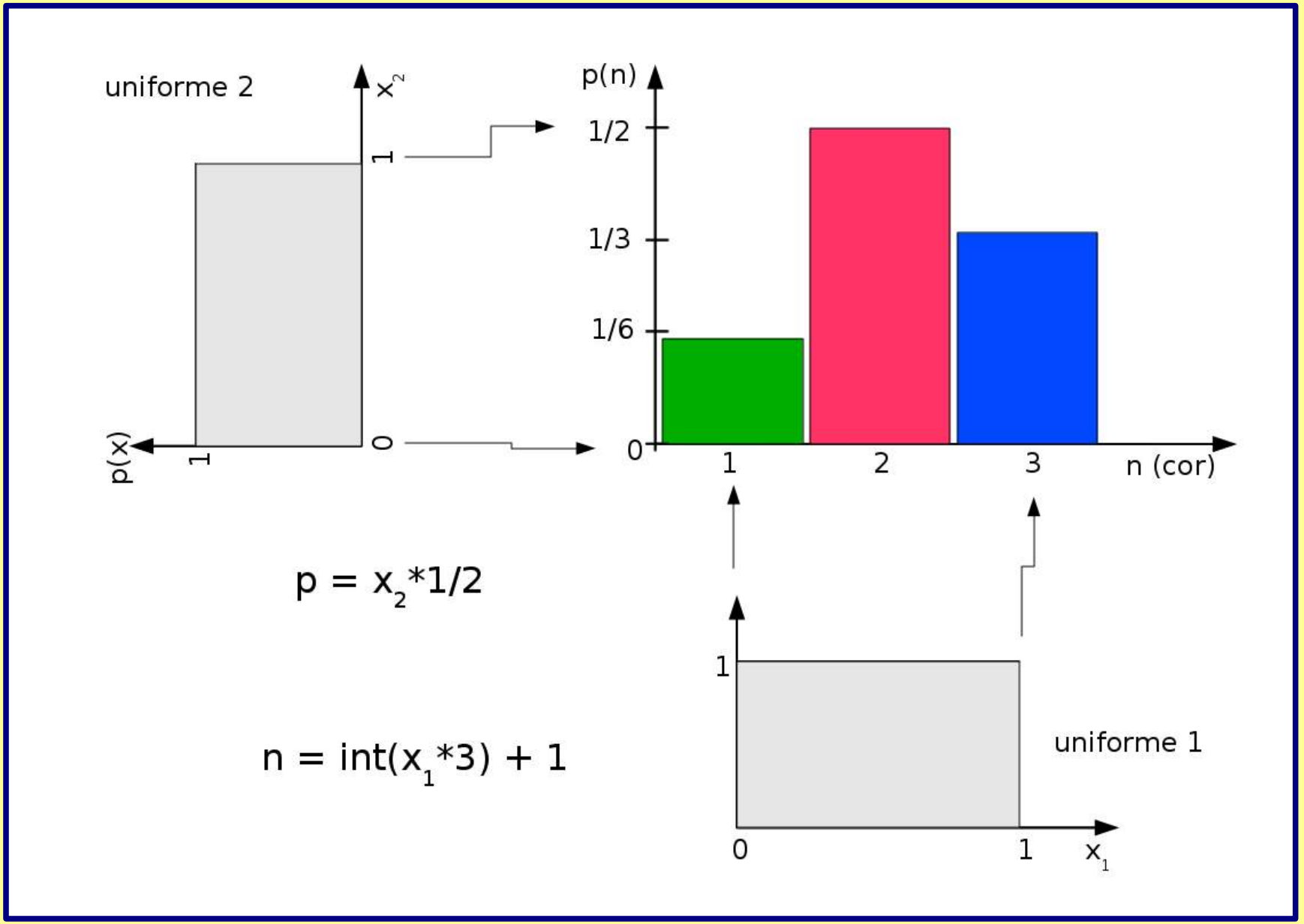
Probabilidades diferentes

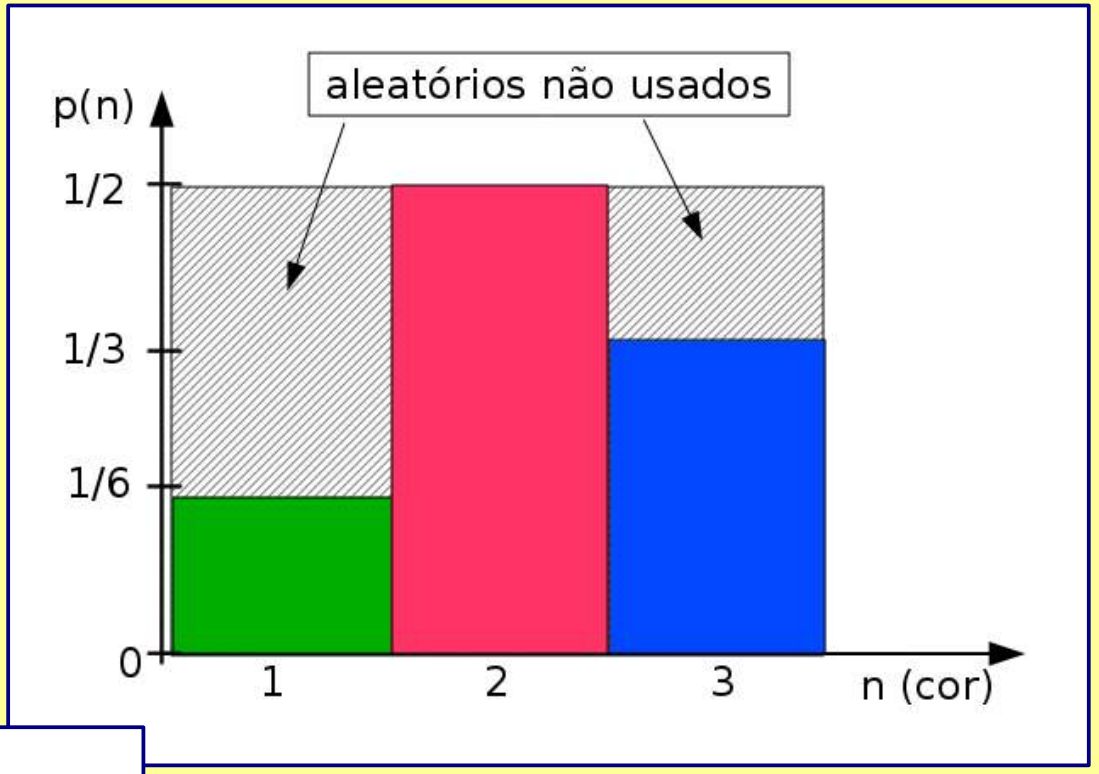
No caso do dado as probabilidades são iguais (1/6) para as diferentes faces

Para um caso discreto, com probabilidades diferentes, como numa roleta de cores



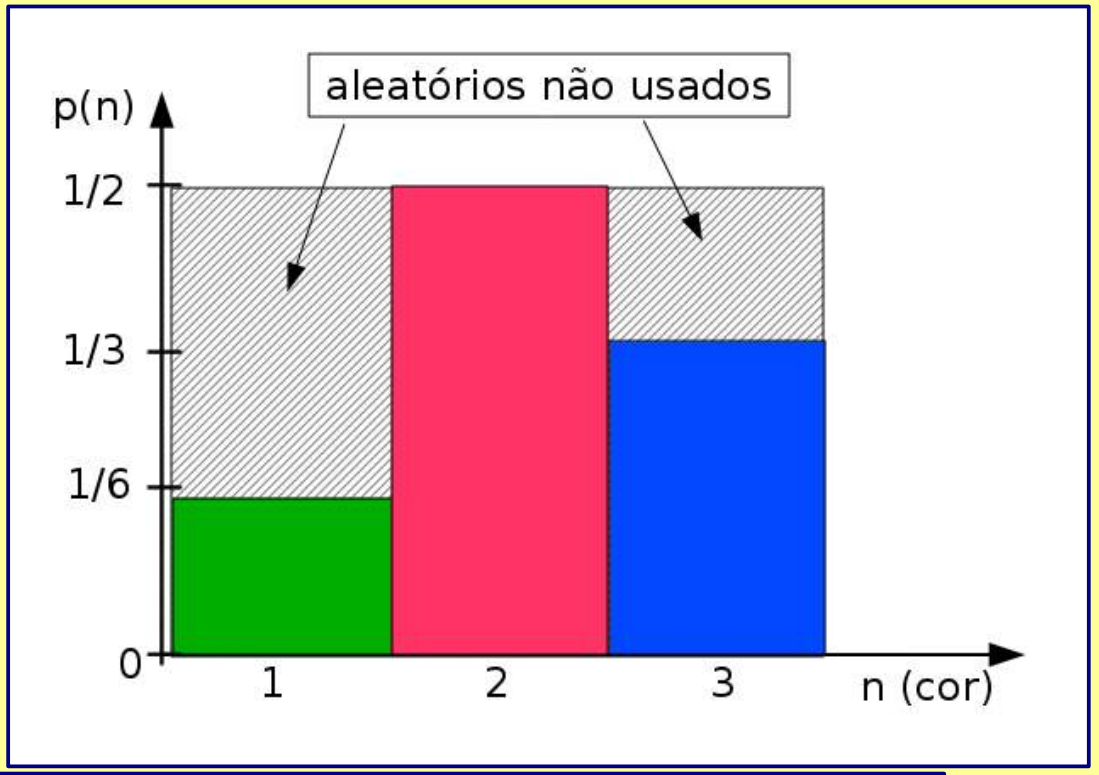
Roleta de cores: rejeição





1. Gera-se um valor inteiro $1 \leq n \leq 3$
2. Gera-se um valor real $0 \leq p \leq 1/2$
3. se $n = 1$ e $p \leq 1/6$ aceito: verde
4. se $n = 1$ e $p > 1/6$ rejeito
5. se $n = 2$ e $p \leq 1/2$ (sempre): vermelho
6. se $n = 3$ e $p \leq 1/3$ aceito: azul
7. se $n = 3$ e $p > 1/3$ rejeito

Eficiência



1. Valores gerados são proporcionais à área total:
   $A_{total} = 3 \times \frac{1}{2}$
2. Valores aproveitados são proporcionais às áreas coloridas:
   $A_{cor} = 1 \times \frac{1}{6} + 1 \times \frac{1}{2} + 1 \times \frac{1}{3} = \frac{1+3+2}{6} = 1$
3. Eficiência: $\epsilon = \frac{A_{cor}}{A_{total}} = \frac{1}{\frac{3}{2}}$
4. $\Rightarrow \epsilon = \frac{2}{3} = 0,67 = 67\%$

Probabilidade acumulada

Para gerar os eventos da roleta de cores sem desperdiçar aleatórios uniformes, associa-se um valor de

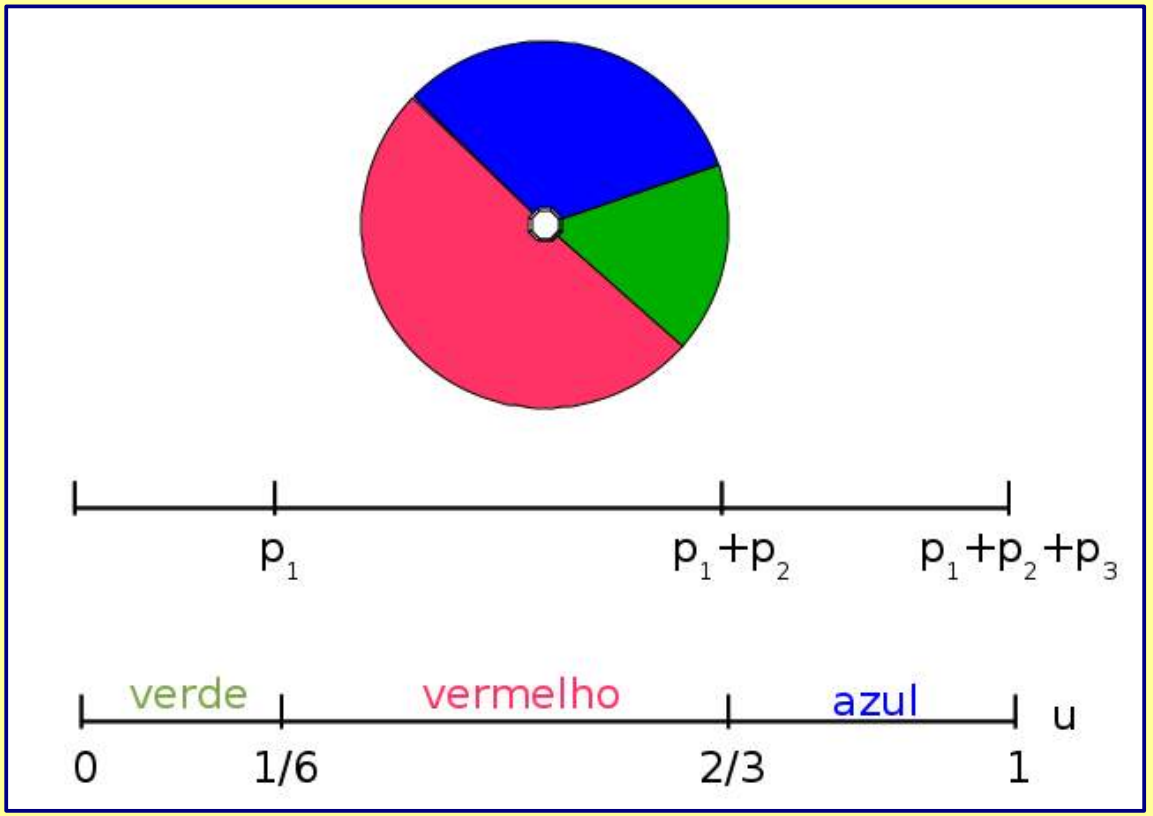
probabilidade acumulada

a cada evento possível:

verde, vermelho ou azul

Probabilidade acumulada

- Gera-se um aleatório entre 0 e 1
- Analisa-se em qual intervalo ele se encontra
- O evento correspondente ao intervalo é a resposta



Probabilidade acumulada: definição

Seja a variável X, a função de distribuição acumulada é definida por

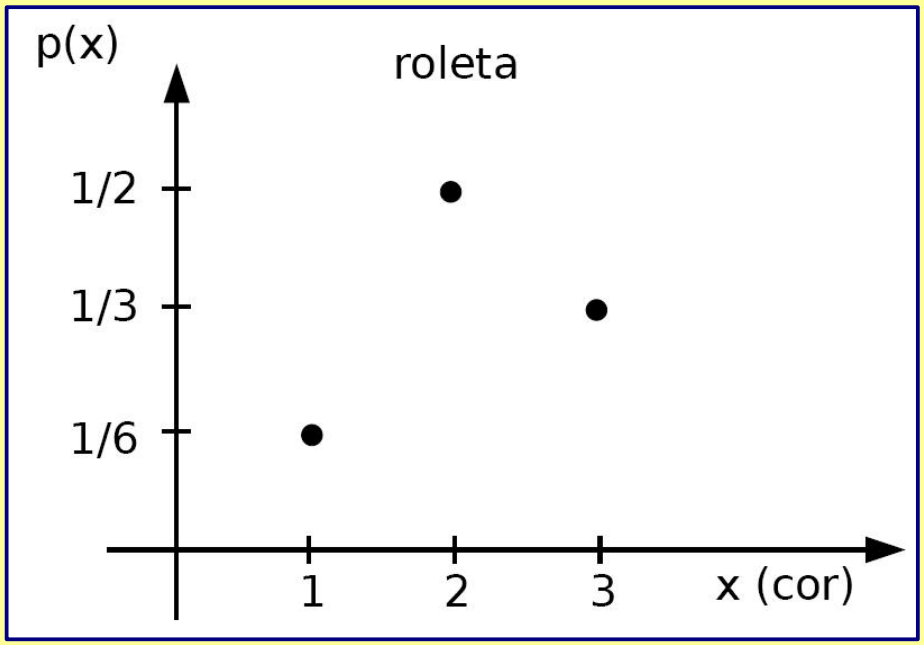
$$F(x) = P(X \leq x)$$

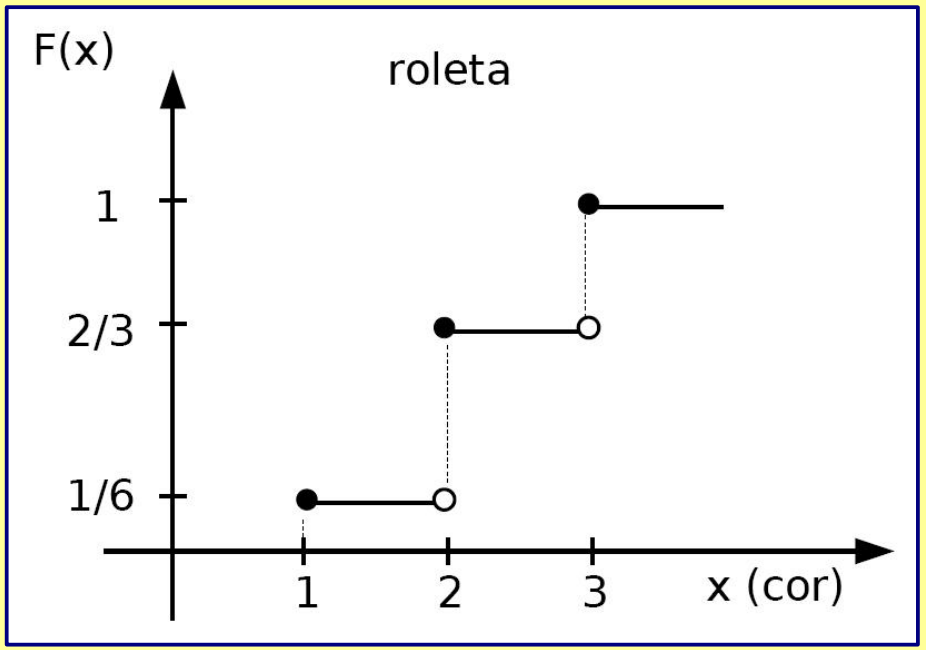
Para uma distribuição discreta

$$F(x_j) = \sum_{i \leq j} p(x_i)$$

Probabilidade acumulada da roleta

No caso da roleta $$F(x_j) = \sum_{i \leq j} p(x_i)$$



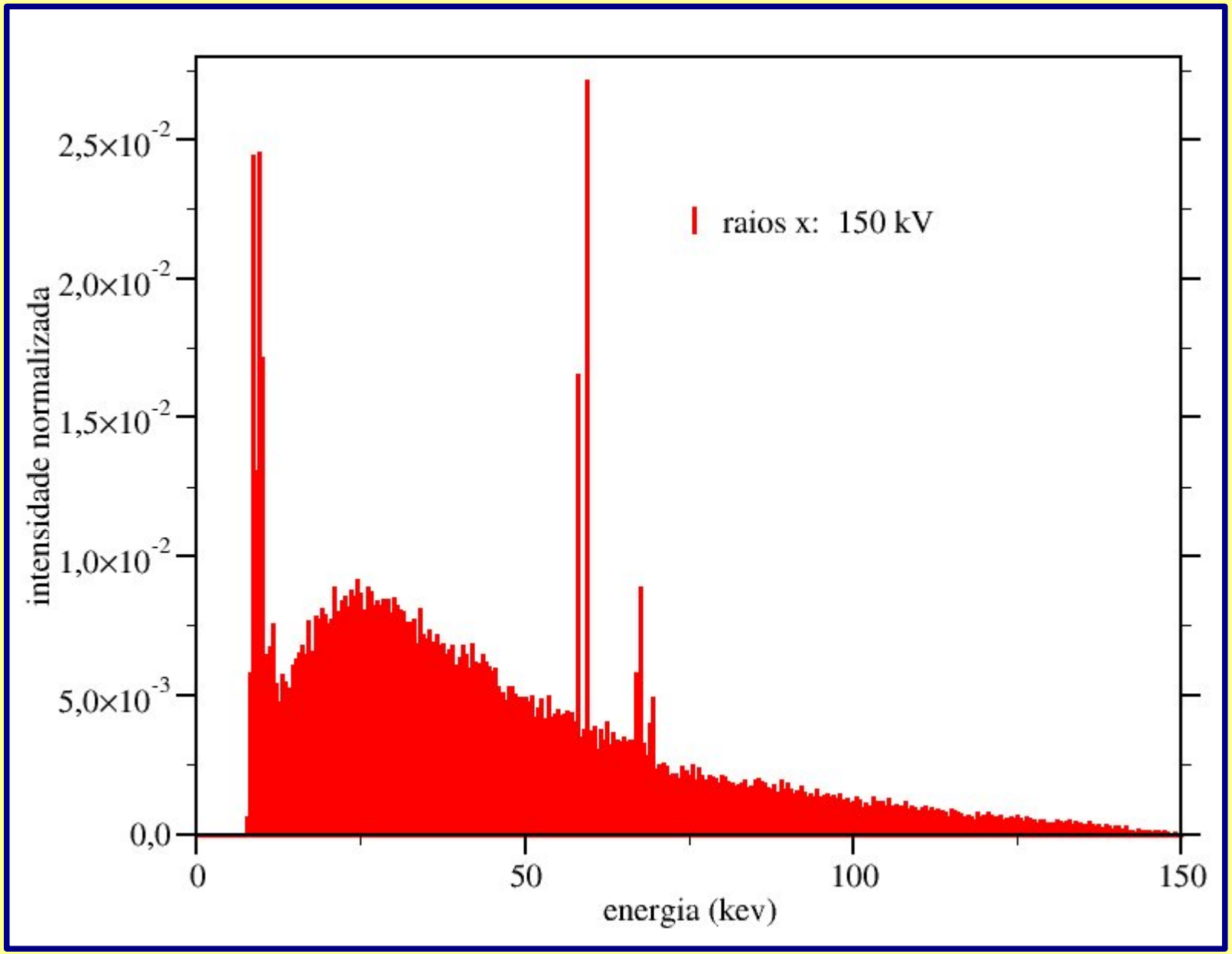


Exemplo de aplicação

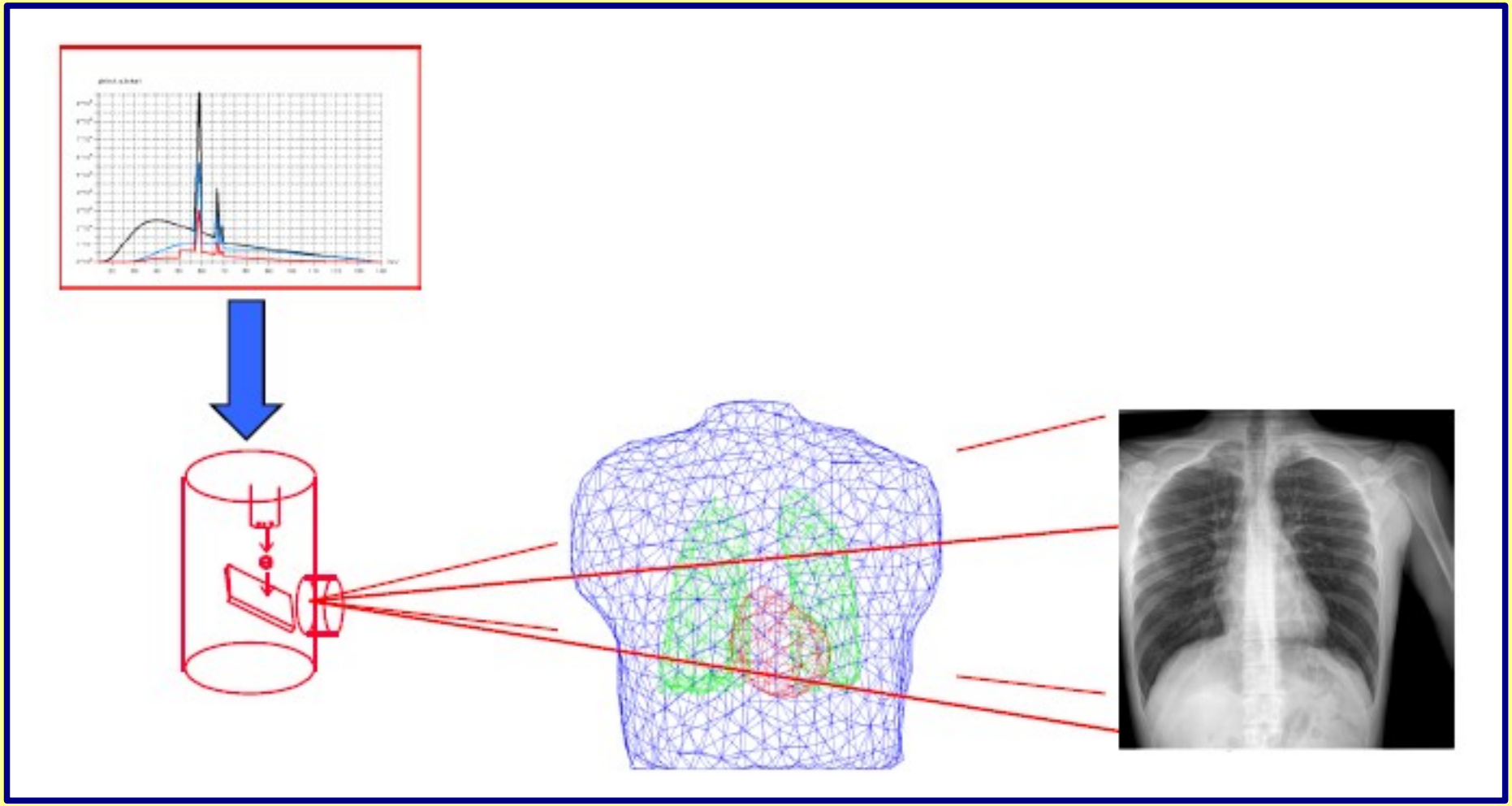
- Simulação de um feixe de fótons emitidos por uma fonte de raios x, como um tubo usado para diagnóstico.

- Um espectro de energia medido ou calculado pode ser usado para dar a distribuição de energia dos fótons.

Espectro de raios x com 300 canais, Energia máxima de 150 keV; 0,5 keV/canal



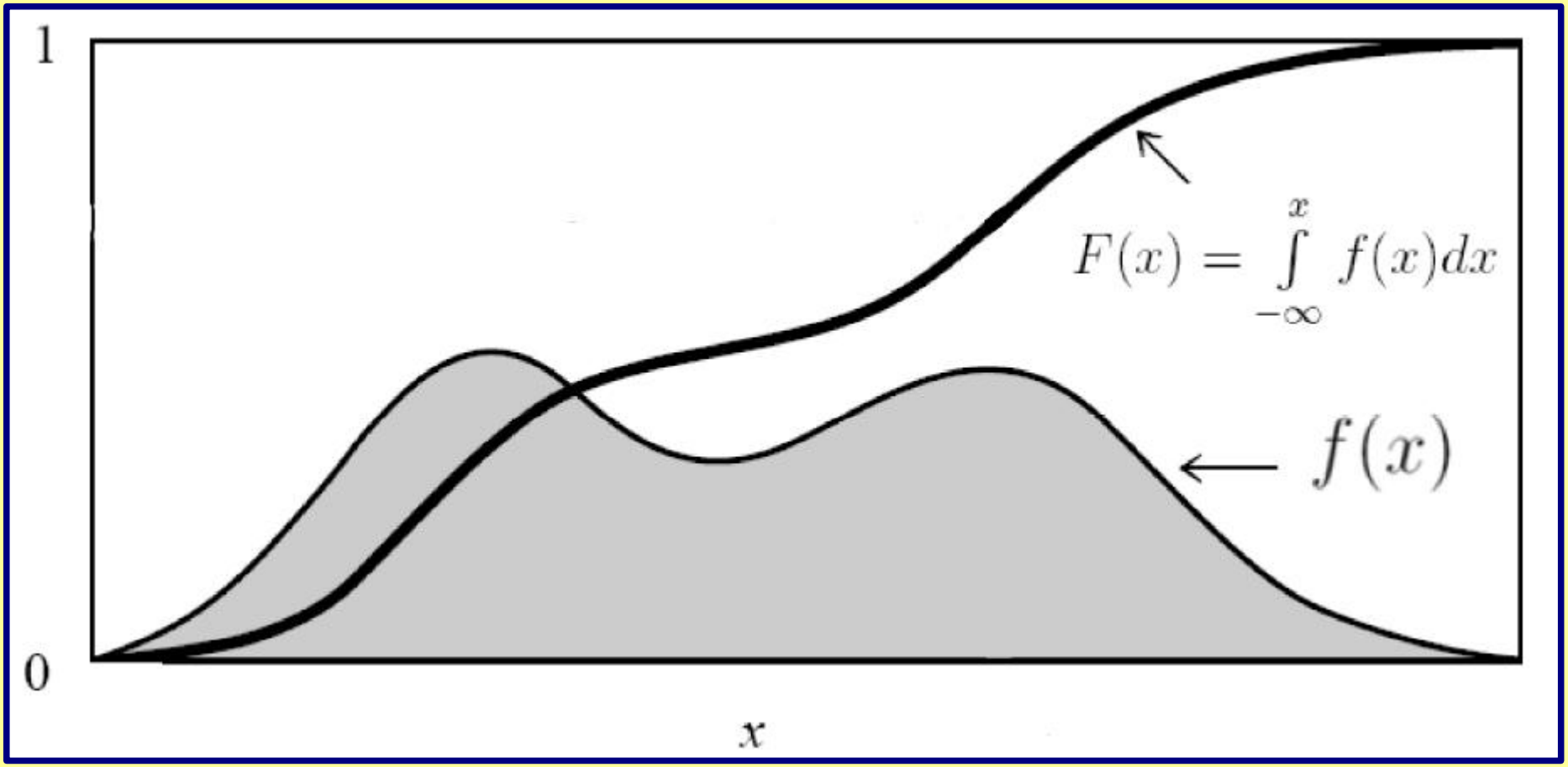
Exemplo de aplicação



adaptado de Jean-Louis Amans, CEA, France, 2001

Funções contínuas

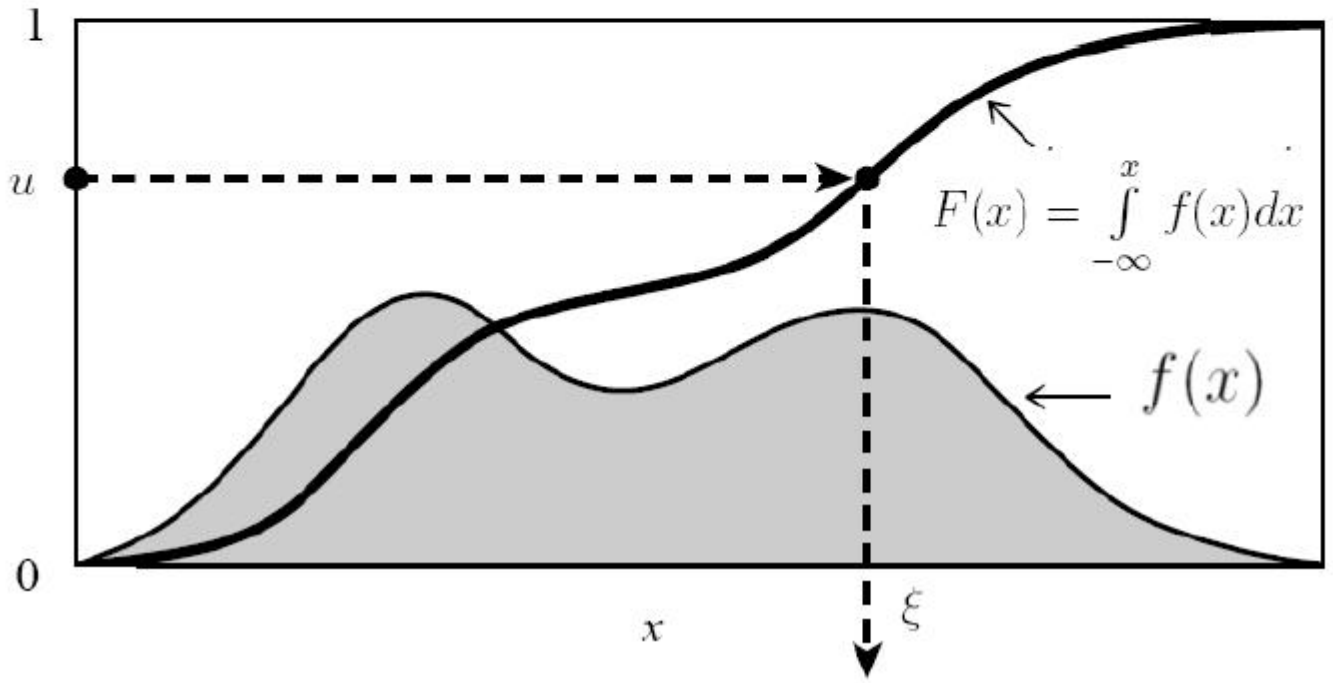
Para densidades de probabilidade contínuas, de maneira análoga ao caso discreto, utiliza-se a função distribuição acumulada



Gerar um aleatório ξ com distribuição *f(x)*

1. Gere um aleatório com distribuição uniforme u
2. Transforme-o no aleatório ξ que obedeça à equação

$$F(\xi) = \int_{-\infty}^{\xi} f(x)dx = u$$

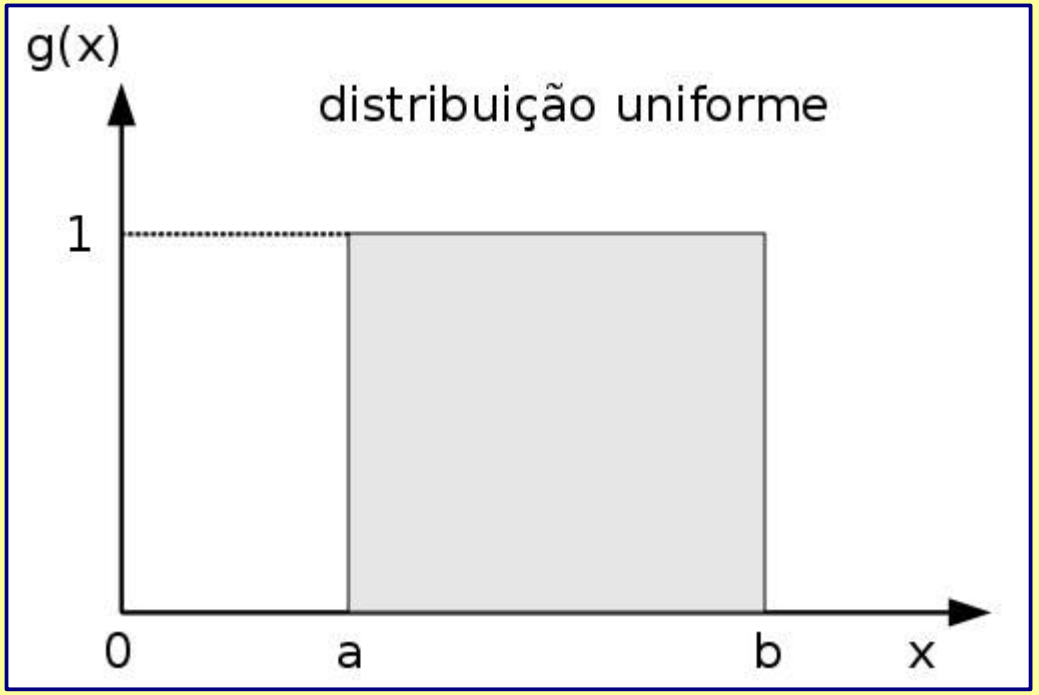


Adaptado de *Numerical Recipes*, Cambridge University Press, http://*www.nr.com*

Exemplo 1: [0,1] → [a,b]

Geração de aleatórios uniformemente distribuidos num intervalo $[a,b]$

$$g(x)=\left\{\begin{array}{c} 0 \ se \ x<a \\ 1 \ se \ a\leq x\leq b \\ 0 \ se \ x>b \end{array}\right\}$$



A função densidade de probabilidade é normalizada:

$$f(x) = N \cdot g(x); \quad \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\,dx = 1$$

$$\int_a^b N\,dx = 1 \Rightarrow N(b-a) = 1 \Rightarrow N = \frac{1}{b-a}$$

portanto

$$f(x) = \begin{cases} 0 \ se \ x < a \\ \dfrac{1}{b-a} \ se \ a \le x \le b \\ 0 \ se \ x > b \end{cases}$$

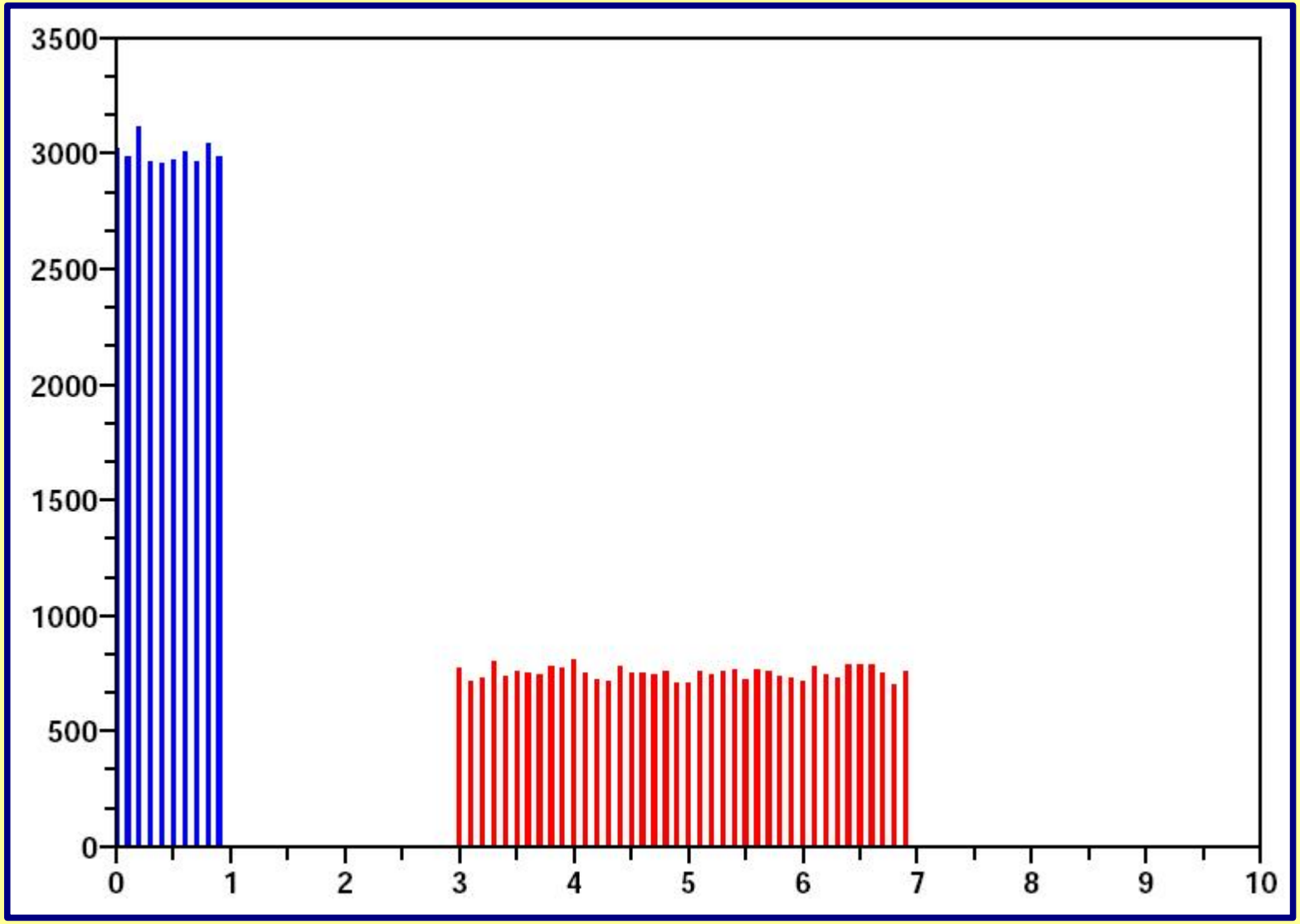
Para sortear valores de ξ, resolvemos a equação:

$$\int_a^{\xi} f(x)\,dx = \int_a^{\xi} \frac{dx}{b-a} = u$$

cujo resultado é $\dfrac{\xi - a}{b-a} = u$

e portanto $\xi = a + u(b-a)$

Exemplo 1: [0,1] → [3,7]



Exemplo 2: exponencial

Representa vários fenômenos físicos, como

- Decaimento de uma fonte radioativa
- Passagem de raios X, gamas e nêutrons num material

A função densidade de probabilidade normalizada:

$$f(x) = \lambda e^{-\lambda x}$$

Para sortear valores de ξ:

$$\int_0^{\xi} f(x)dx = \int_0^{\xi} \lambda e^{-\lambda x} dx = u$$

cujo resultado é $\left[-e^{-\lambda x}\right]_0^{\xi} = 1 - e^{-\lambda \xi} = u$

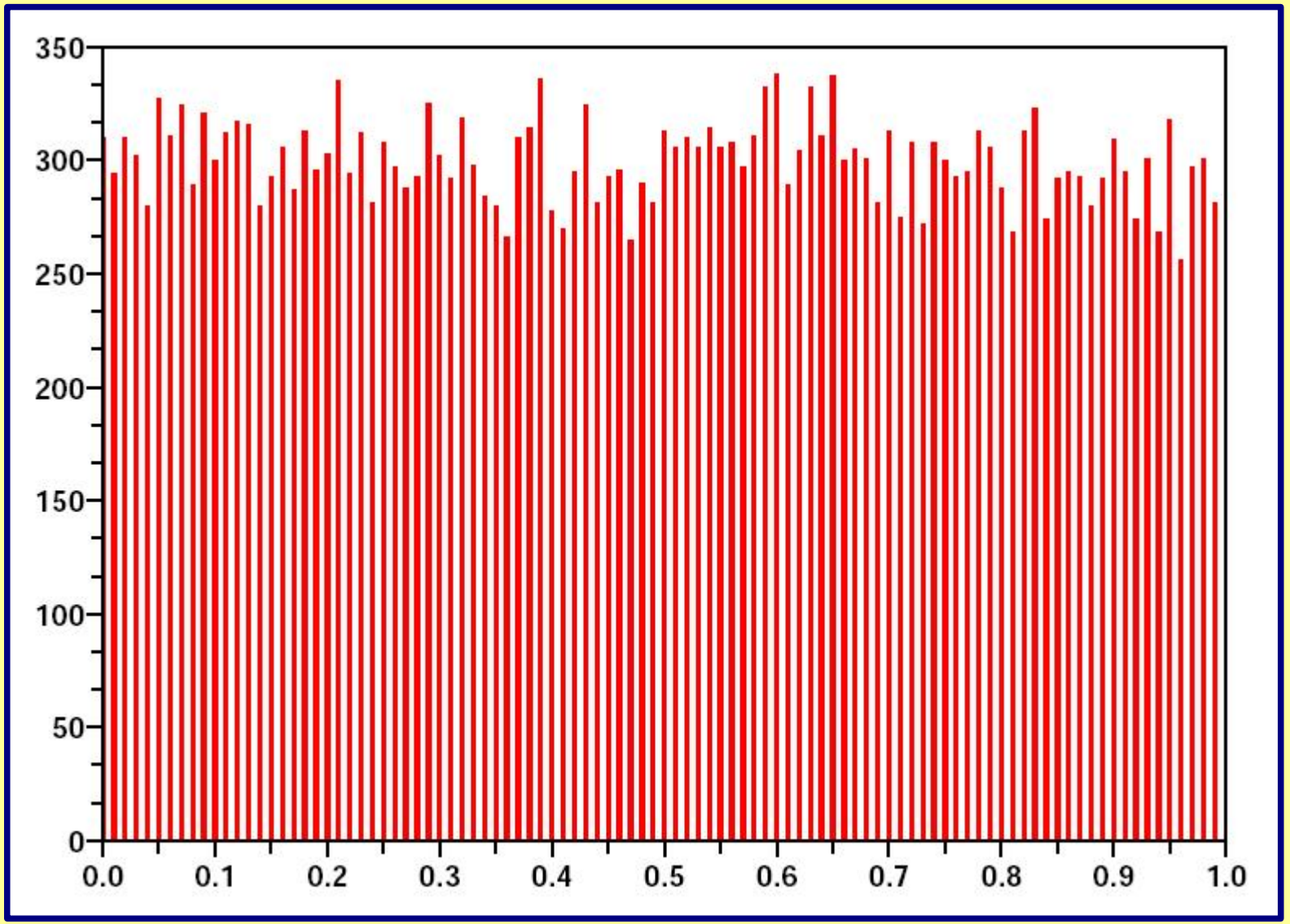
$$\Rightarrow \quad e^{-\lambda \xi} = 1 - u$$

Mas 1-u tem a mesma distribuição de u

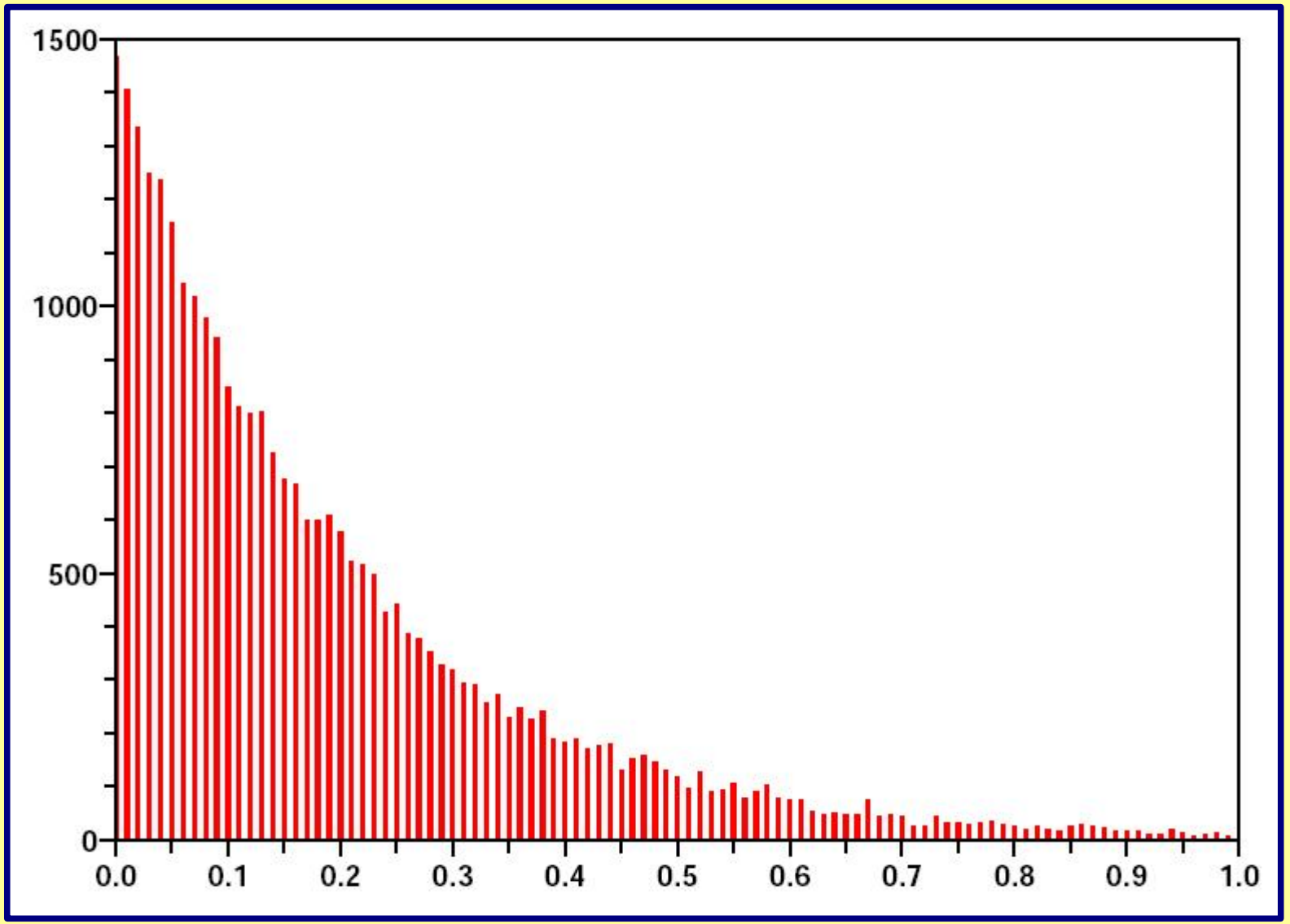
e podemos escrever $e^{-\lambda \xi} = u$

e portanto $\xi = -\frac{1}{\lambda} \ln(u)$

A distribuição original



A distribuição exponencial



3.1.2 Determination of the Interaction Point

The mean free path, λ, of a particle for a given process depends on the medium and cannot be used directly to sample the probability of an interaction in a heterogeneous detector. The number of mean free paths which a particle travels is:

$$n_\lambda = \int_{x_1}^{x_2} \frac{dx}{\lambda(x)}, \tag{3.1}$$

which is independent of the material traversed. If n_r is a random variable denoting the number of mean free paths from a given point to the point of interaction, it can be shown that n_r has the distribution function:

$$P(n_r < n_\lambda) = 1 - e^{-n_\lambda} \tag{3.2}$$

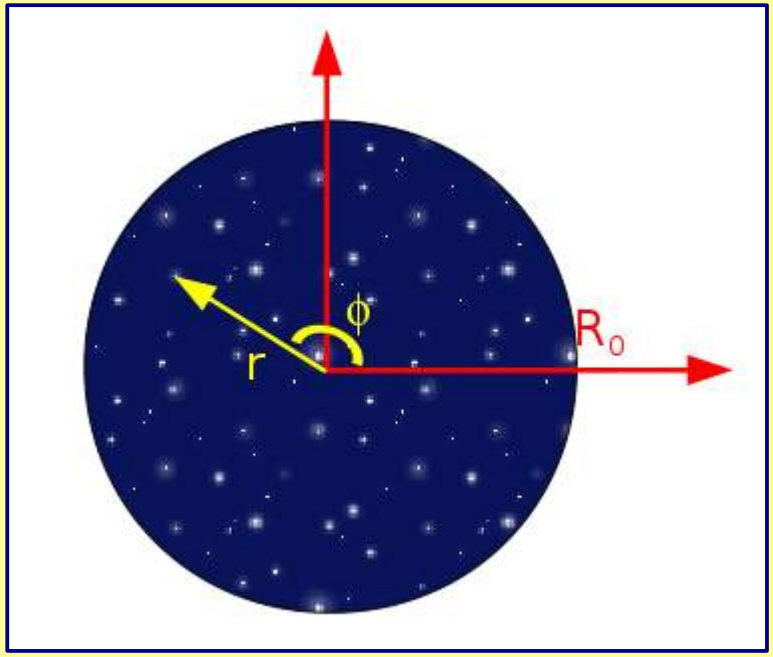
The total number of mean free paths the particle travels before reaching the interaction point, n_λ, is sampled at the beginning of the trajectory as:

$$n_\lambda = -\log(\eta) \tag{3.3}$$

where η is a random number uniformly distributed in the range $(0, 1)$. n_λ is

Alguns casos frequentes

1) Feixe paralelo colimado circularmente

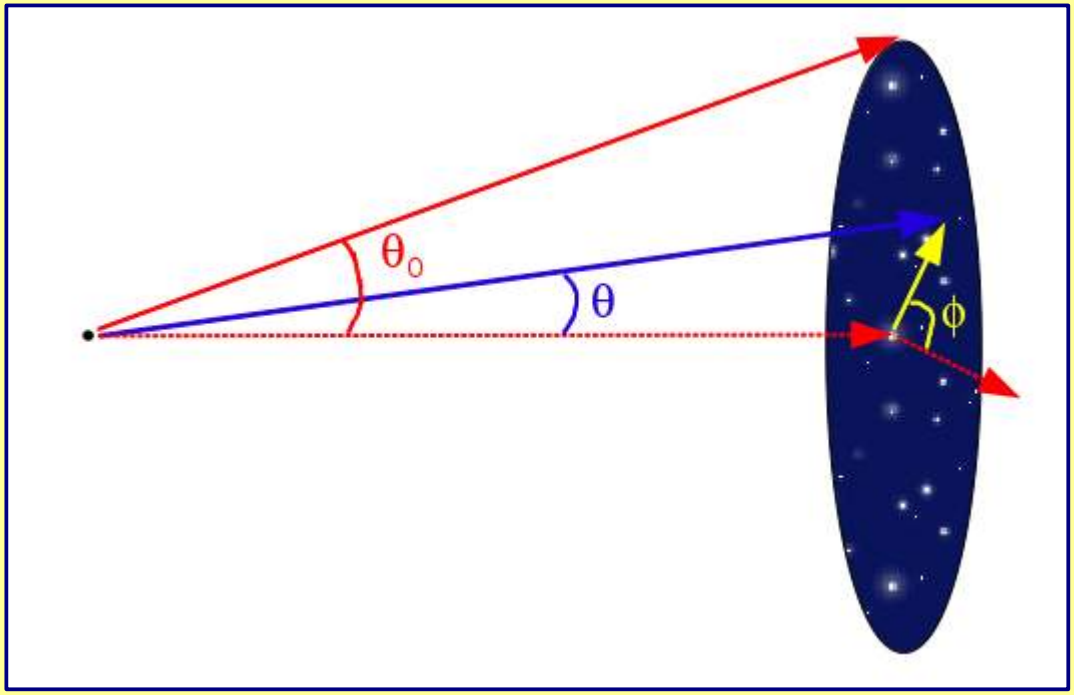


$$r = R_0 \sqrt{u_1}$$

$$\phi = 2\pi u_2$$

Alguns casos frequentes

2) Fonte pontual colimada a um círculo

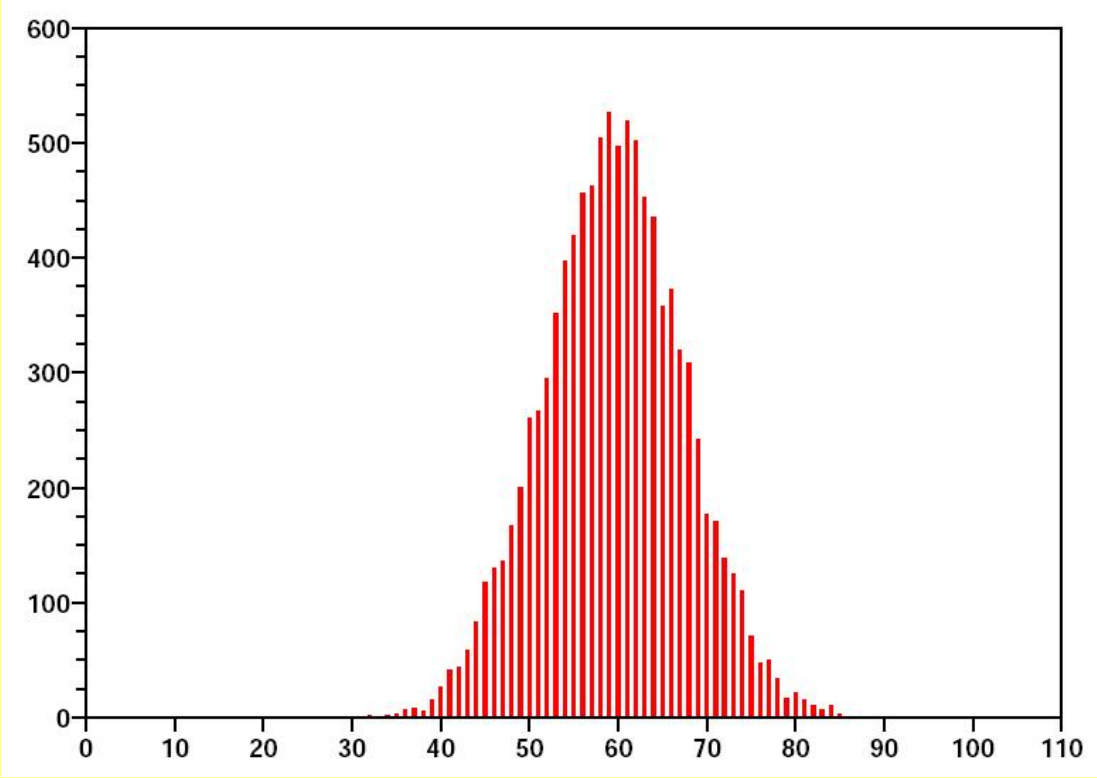


$$\cos\theta = 1 - u_1(1 - \cos\theta_o) \qquad \phi = 2\pi u_2$$

Alguns casos frequentes

3) Distribuição Normal (Gaussiana)

Geram-se 2 aleatórios por vez:



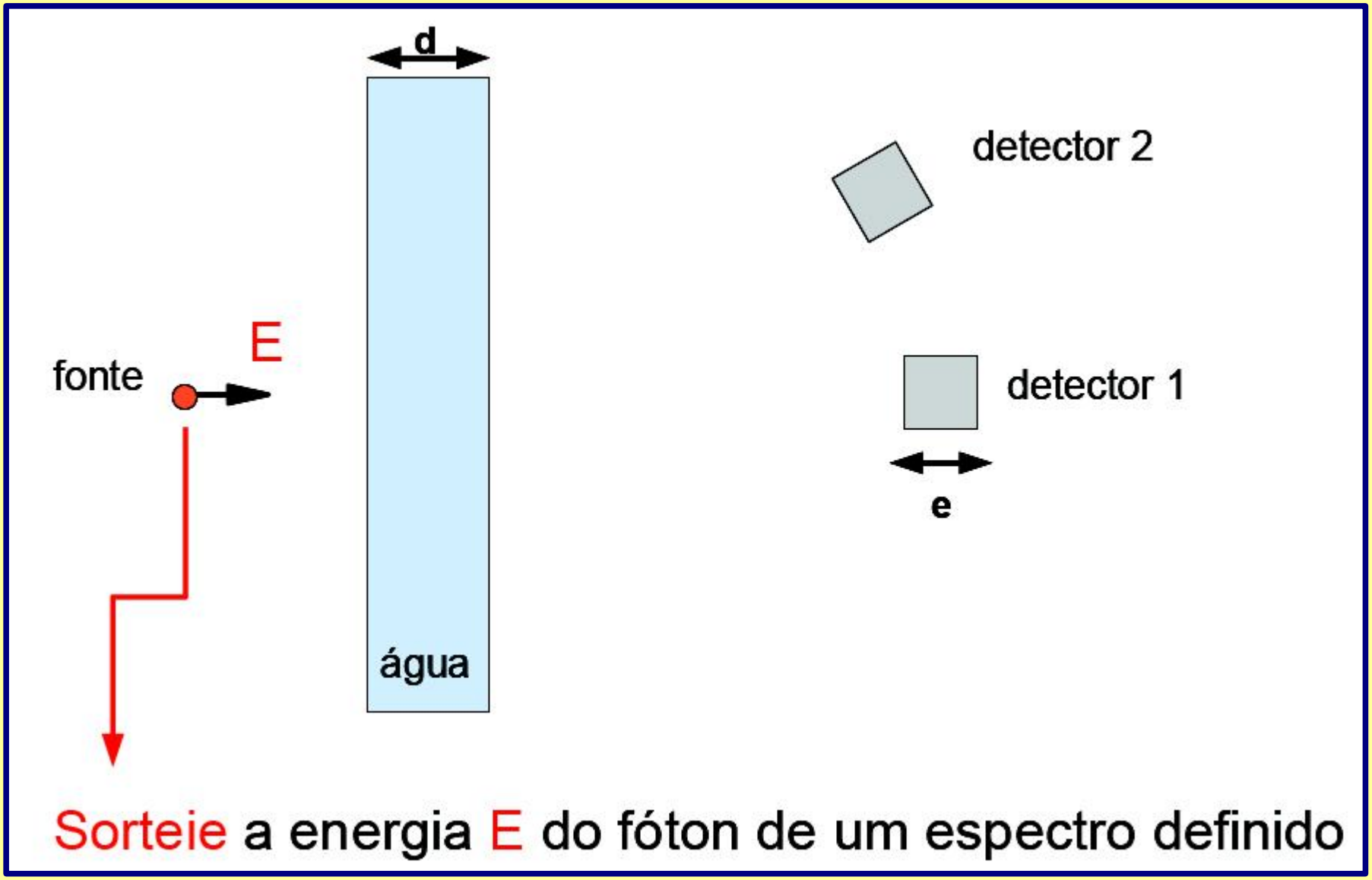
$$\phi = 2\pi u_1$$

$$r = \sqrt{-2\ln(u_2)}$$

$$\xi_1 = r\cos\phi$$

$$\xi_2 = r\,sen\,\phi$$

Transporte de radiação: exemplo



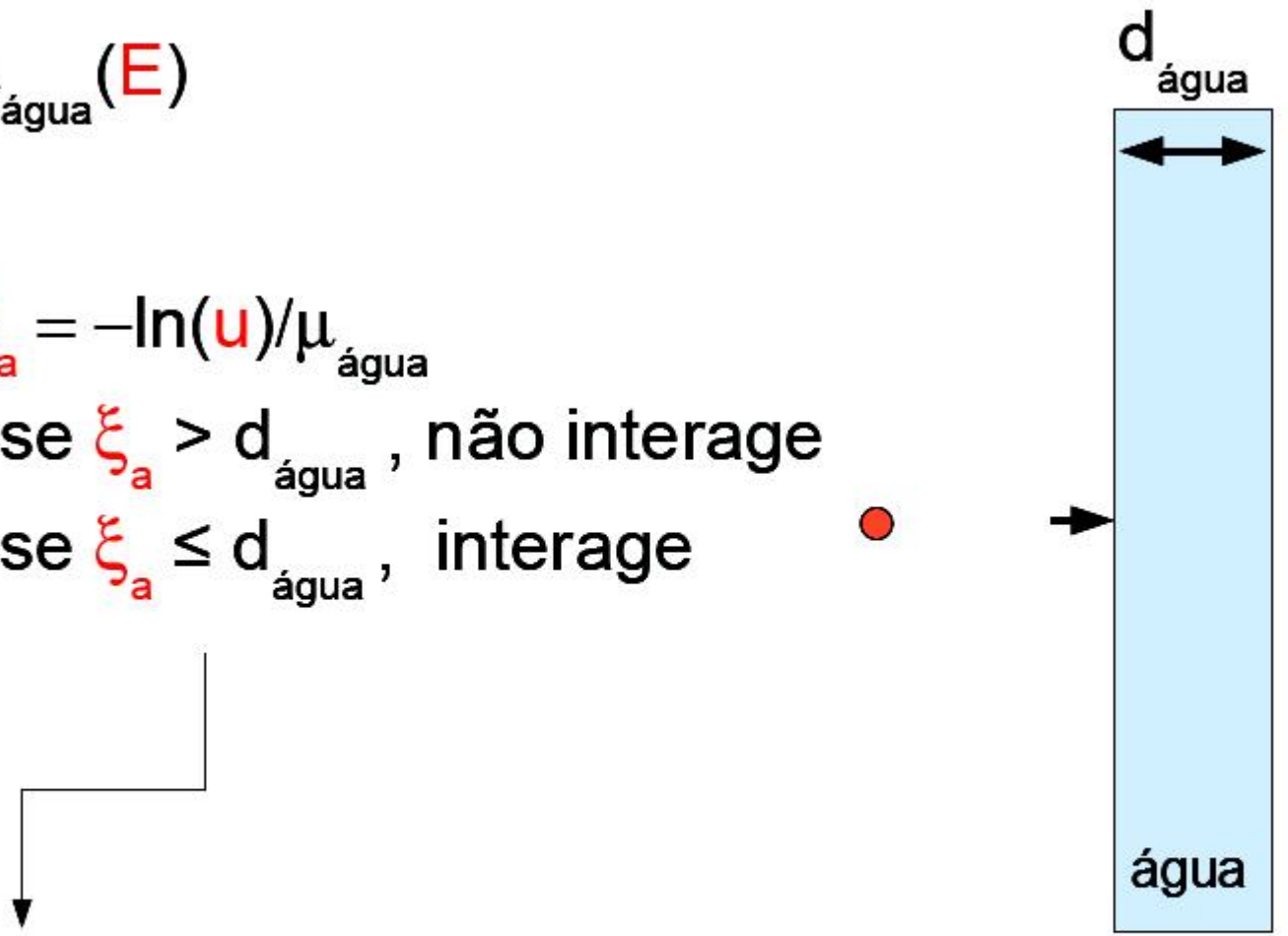
Transporte de radiação: exemplo

$\mu_{água}(E)$

$\xi_a = -\ln(u)/\mu_{água}$

se $\xi_a > d_{água}$, não interage

se $\xi_a \leq d_{água}$, interage



Sorteie se o fóton interage ou não na camada de água

Transporte de radiação: exemplo

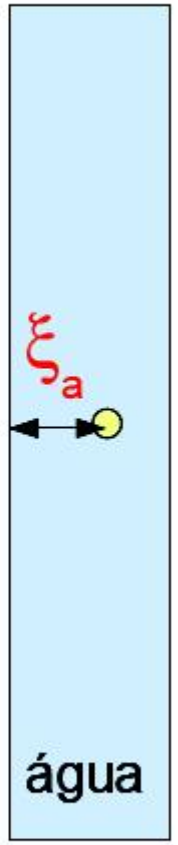
$$\mu_{\text{água}}(E) = \mu_{\text{água,R}}(E) + \mu_{\text{água,C}}(E) + \mu_{\text{água,F}}(E)$$

$$p_R = \mu_{\text{água,R}}(E)/\mu_{\text{água}}(E)$$

$$p_C = \mu_{\text{água,C}}(E)/\mu_{\text{água}}(E)$$

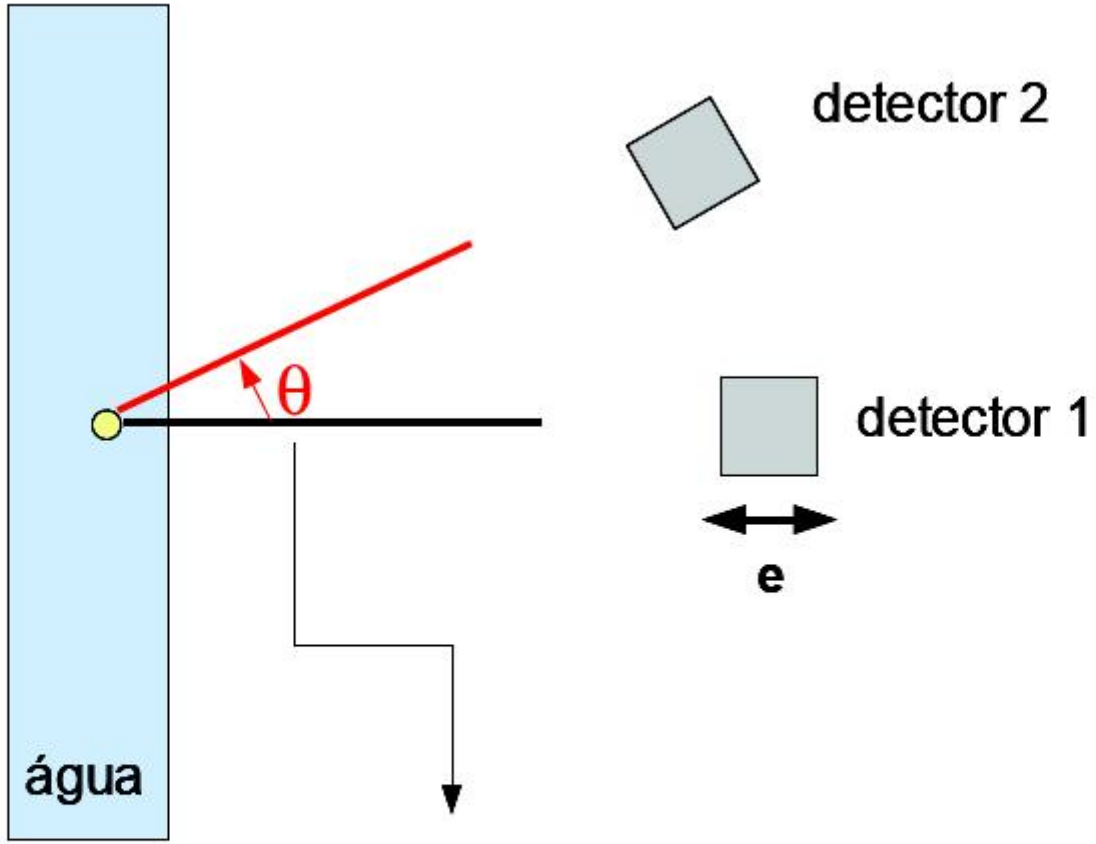
$$p_F = \mu_{\text{água,F}}(E)/\mu_{\text{água}}(E)$$

ξ_{pr} ->



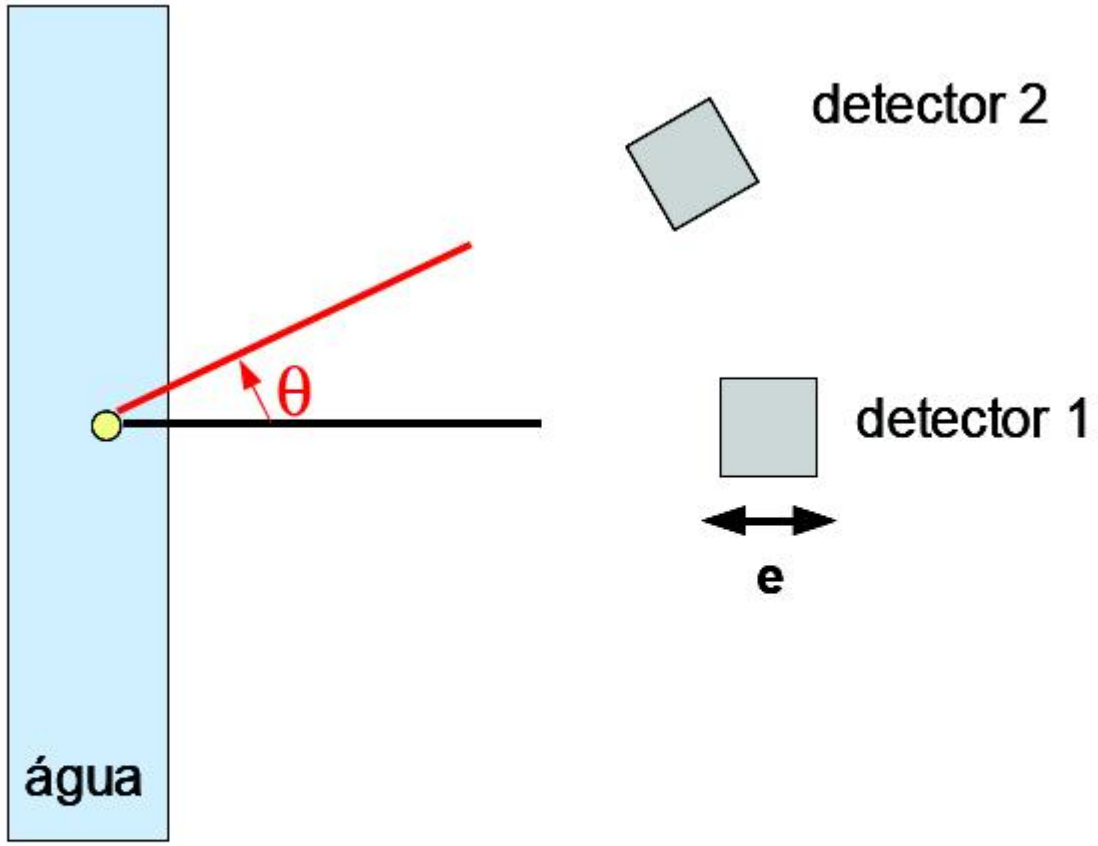
se o fóton interage, sorteie o processo:
Rayleigh, Compton ou fotoelétrico

Transporte de radiação: exemplo



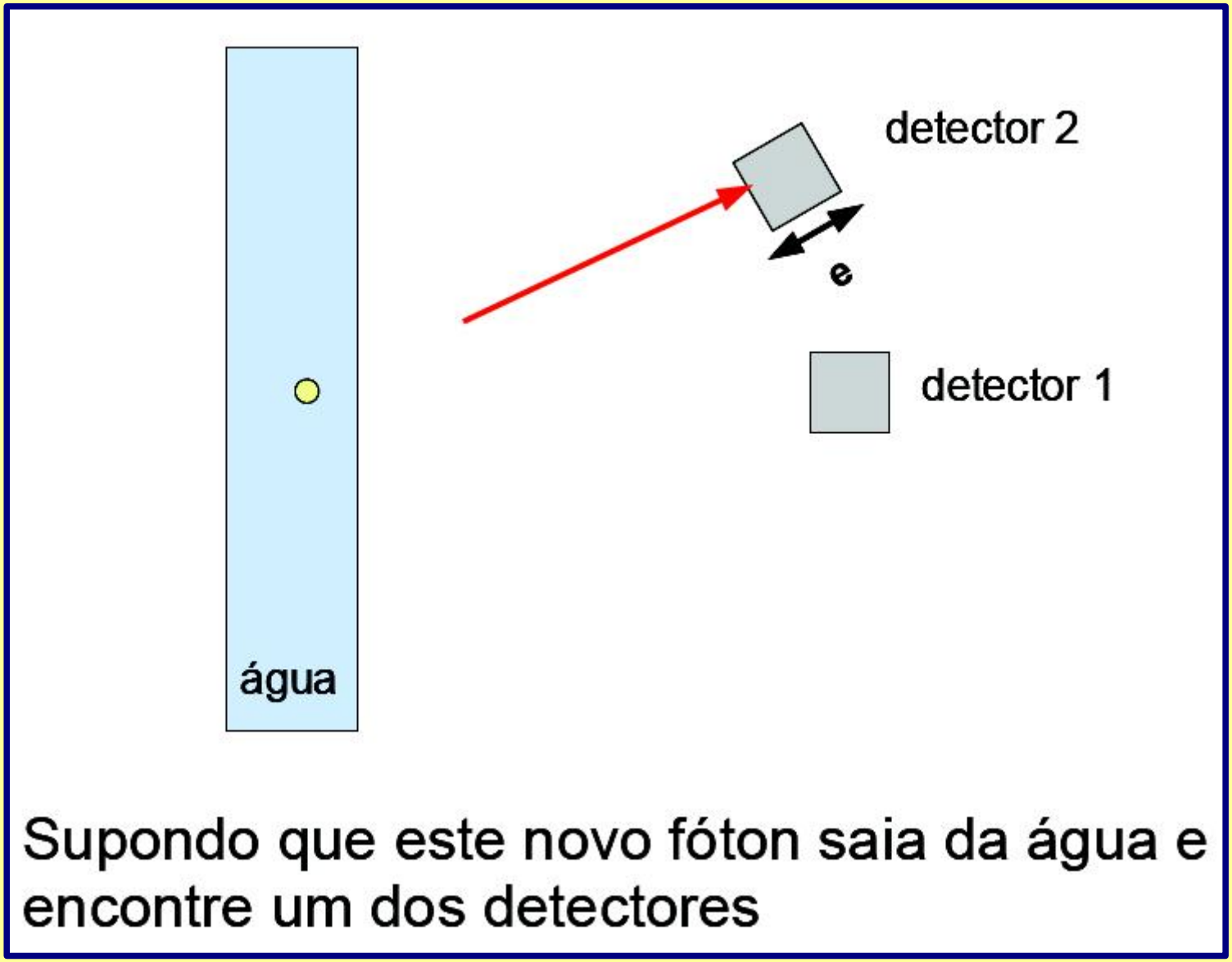
Se for Compton, sorteie o ângulo θ e calcule a energia, conforme expressões para este tipo de espalhamento.
Sorteie o ângulo $\phi = 2\pi u$.

Transporte de radiação: exemplo



O novo fóton tem energia E', e a energia E-E' é depositada na água

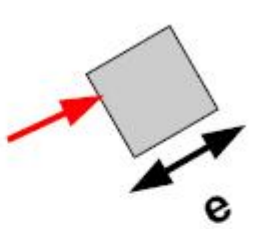
Transporte de radiação: exemplo



Supondo que este novo fóton saia da água e encontre um dos detectores

Transporte de radiação: exemplo

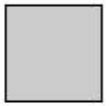
$\mu_{Ge}(E')$



$\xi_{Ge} = -\ln(u)/\mu_{Ge}$

se $\xi_{Ge} > d_{Ge}$, não interage

se $\xi_{Ge} \leq d_{Ge}$, interage



Repita o procedimento feito para a água, usando agora os dados do detector de germânio e a energia E'