

モンテカルロ法による 粒子輸送計算

平山 英夫、波戸 芳仁

KEK, 高エネルギー加速器研究機構

2005.8.8

モンテカルロ法

- 乱数を使用して問題を解く手法を“モンテカルロ法”という。
 - “モンテカルロ”という名称は、J. von Neumann と S. M. Ulamがつけたものである。
- 従って、乱数は、モンテカルロ法にとって最も重要なものである。

乱数の発生方法

- サイコロやルーレット等を使用する– 非常に遅い
- 乱数表を使用する
 - 統計的な性質が良く調べられている
 - 乱数表全体を計算機のデータとして持つ必要がある
 - 現時点では、非常に早い乱数発生法ではない
- 放射性同位元素の崩壊の様な物理現象を利用した乱数を使用する
 - 数値化が容易でない、安定性と再現性の点で問題がある。

疑似乱数

- 最初にたね乱数, R_0 , を適当に選び、 $R_{n+1}=f(R_n)$ の形の漸化式(普通は合同式)によって順次乱数を作り出す方法。
- 疑似乱数は、 m を法とする剰余である。
- 最大でも m 個の異なった整数しか存在しない。従って、疑似乱数は有限の周期がある。
- 良い疑似乱数の条件
 - 速く発生できる
 - 周期が長い
 - 再現性がある
 - 統計的特性が良い
 - 発生した疑似乱数を m で割ることにより、0 から 1 の疑似乱数を作ることができる

線形合同法による疑似乱数

- D. H. Lehmer が提唱した線形合同法が最も広く使われている。 $R_{n+1} = \text{mod}(aR_n + b, m)$
 - $\text{mod}(aR_n + b, m)$ は、 $aR_n + b$ を m で割ったときの余り
- a , b 及び m は、正の整数で m は、コンパイラーで使用可能な整数の最大値である。

Name	a	b	m
RANDU	65539	0	2^{31}
SLAC RAN1	69069	0	2^{31}
SLAC RAN6	663608491	0	2^{31}

電卓を使った疑似乱数の発生

- $R_0=3, a=5, b=0, m=16$ として、10個の乱数を発生する。
- ある段階で同じ乱数が発生する事確かめる。
- 上記の場合の周期は、いくつになるか？
- R_0 を変えた場合、どうなるか調べる。

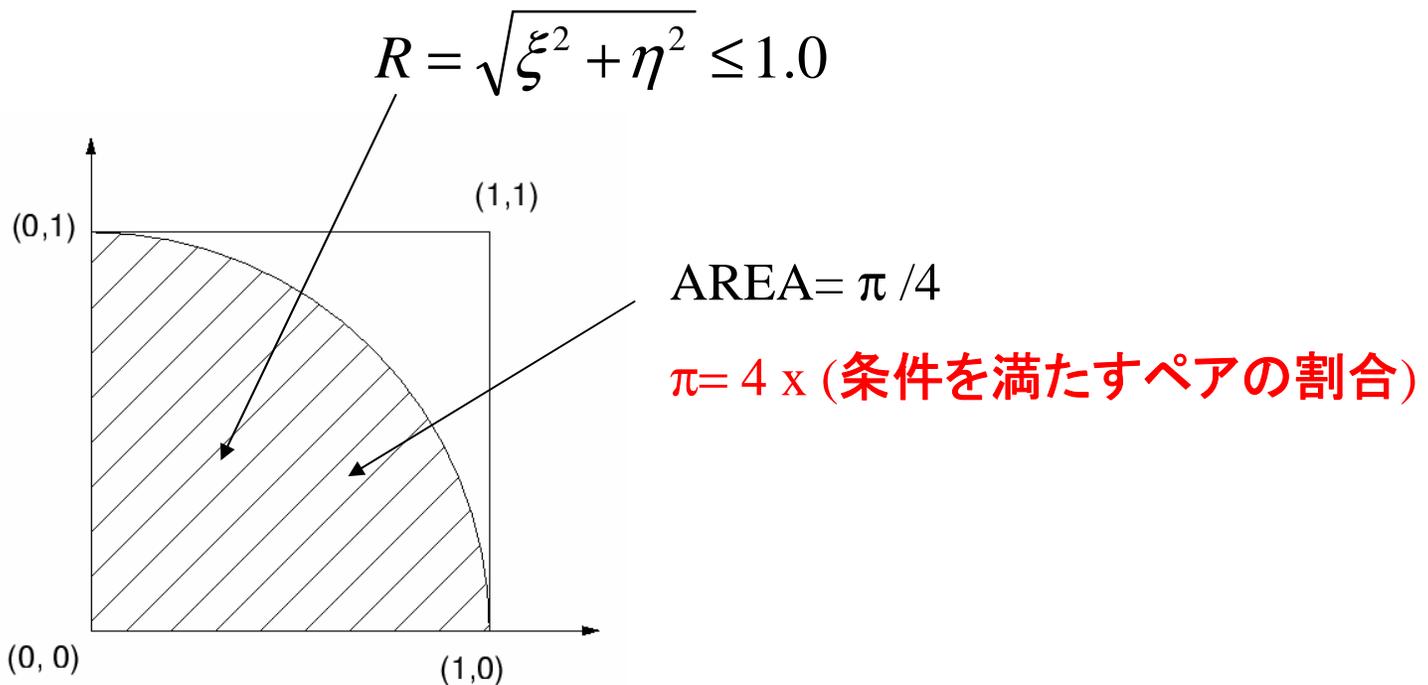
n	R_n	$R_n * 5$	$R_{n+1} = \text{mod}(R_n * a, m)$
0	$R_0 = 3$	15	$R_1 = 15 - \text{INT}(15/16) * 16 = 15$
1			
2			
3			

$\text{mod}(R_n * a, m)$: $R_n * a$ を m で割ったときの余り

$\text{INT}(15/16)$: $15/16$ を整数にした値、切り捨てなので0となる

乱数を使った π の計算

- Table 2 (SLAC RAN6を使って作成したもの)の任意の場所から順番(左から、右に)に2つの乱数 (ξ, η) を選ぶ。
- 次の条件を満たすペアの数を数える。

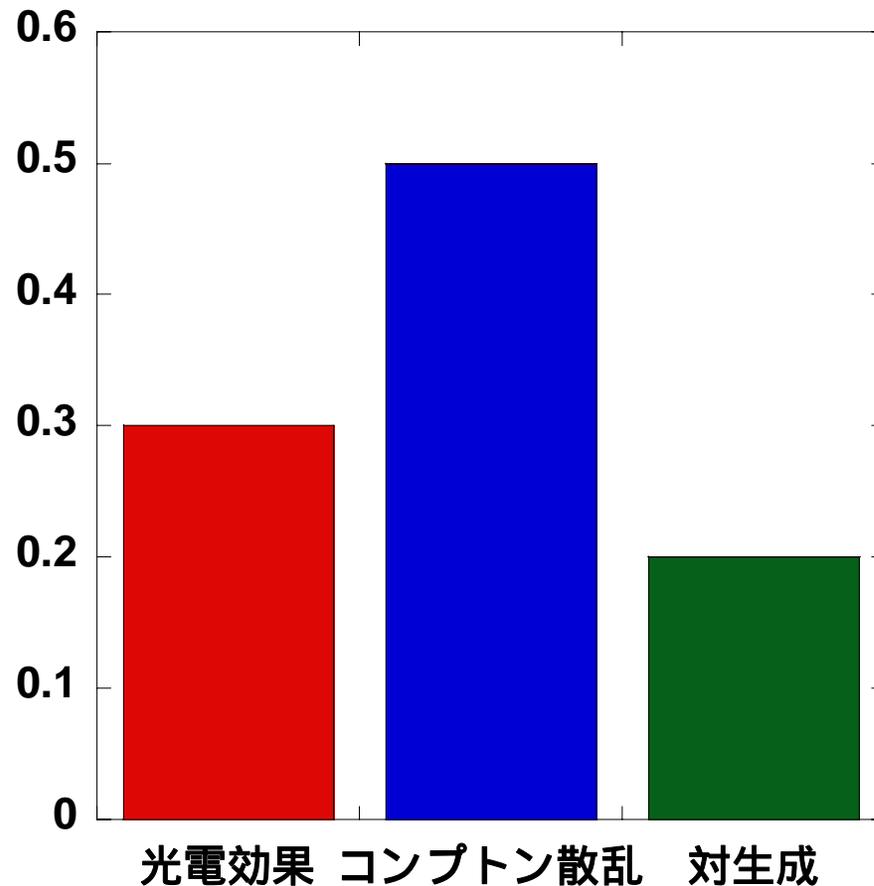


他の方式の乱数

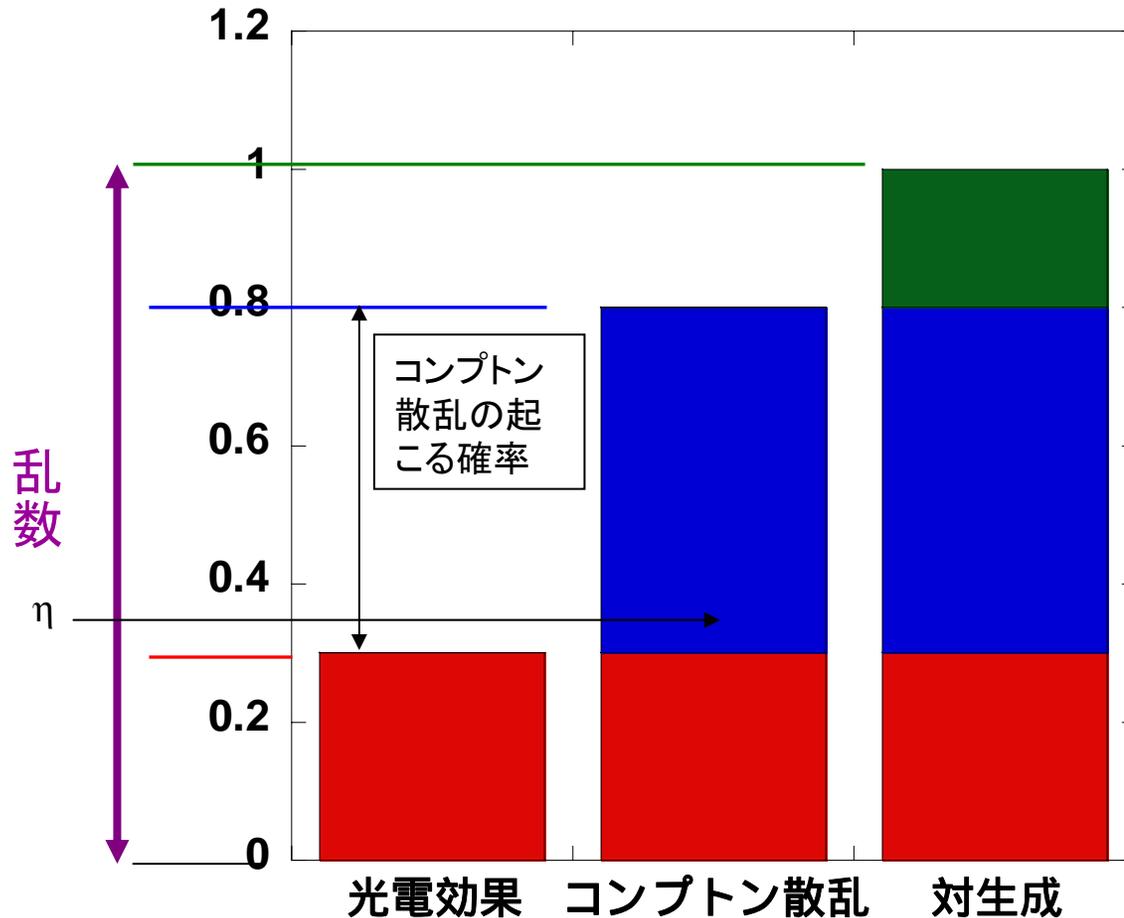
- Marasaglia-Zaman 乱数
 - G. Masaglia and A. Zaman, “A New Class of Random Number Generator”, *Annals of Applied Probability* 1(1991)462-480.
 - 周期が非常に長い $-2^{144} \sim 10^{43}$
 - 乱数の制御が若干複雑
 - 32-bit の計算機ならば、どの計算機にも適用できる
- RANLUX 乱数
 - F. James, “A Fortran implementation of the high-quality pseudorandom number generators”, *Comp. Phys Comm* **79** (1994) 111-114.
 - 周期は 10^{171}
 - 1-231のシードにより、オーバーラップすることのない独立した乱数を発生することができる
 - egs5の乱数発生方法として採用

離散型サンプリングの導入(1)

例題) 光電効果:30%、コンプトン散乱:50%、対生成:20%を
乱数をもちいてサンプリングせよ。



離散型サンプリングの導入(2)



「累積分布関数」または「積み上げ計算」

離散型確率過程のサンプリング

- x_1, x_2, \dots, x_n を確率 p_1, p_2, \dots, p_n を持つ n 個の独立背反物理事象とする。(例えば、光子の反応における、光電吸収、コンプトン散乱、電子対生成とそれぞれの発生確率)

$$F(x_n) = \sum_{i=1}^n p_i = 1 \quad \text{累積分布関数}$$

- η を 0 から 1 の間の一様な乱数とすると、以下の条件の時、事象 x_i が起きることになる。

$$F(x_i) = \sum_{j=1}^i p_j \leq \eta < F(x_{i+1}) = \sum_{j=1}^{i+1} p_j$$

離散型確率過程の例

光子の反応の種類の設定

- 光子の反応における光電吸収、コンプトン散乱、電子対生成とそれぞれの発生確率を P_{photo} , P_{Compt} , P_{pair} とする。

$$P_{photo} + P_{Compt} + P_{pair} = 1$$

- $\eta \leq P_{photo}$, の時は、**光電吸収**
- $P_{photo} \leq \eta < P_{photo} + P_{Compt}$, の時は、**コンプトン散乱**
- $P_{photo} + P_{Compt} \leq \eta$, の時は、**電子対生成**

サンプリング法 (連続型確率過程)

- ある物理現象が x と $x+dx$ で発生する確率を $f(x)dx$ とする。 $[a \leq x \leq b]$
 $f(x)$ を確率密度関数(PDF)という。

$$\left(\int_a^b f(x)dx = 1\right)$$

- 累積分布関数(CDF: $F(x)$)

$$F(x) = \int_a^x f(x_i)dx_i$$

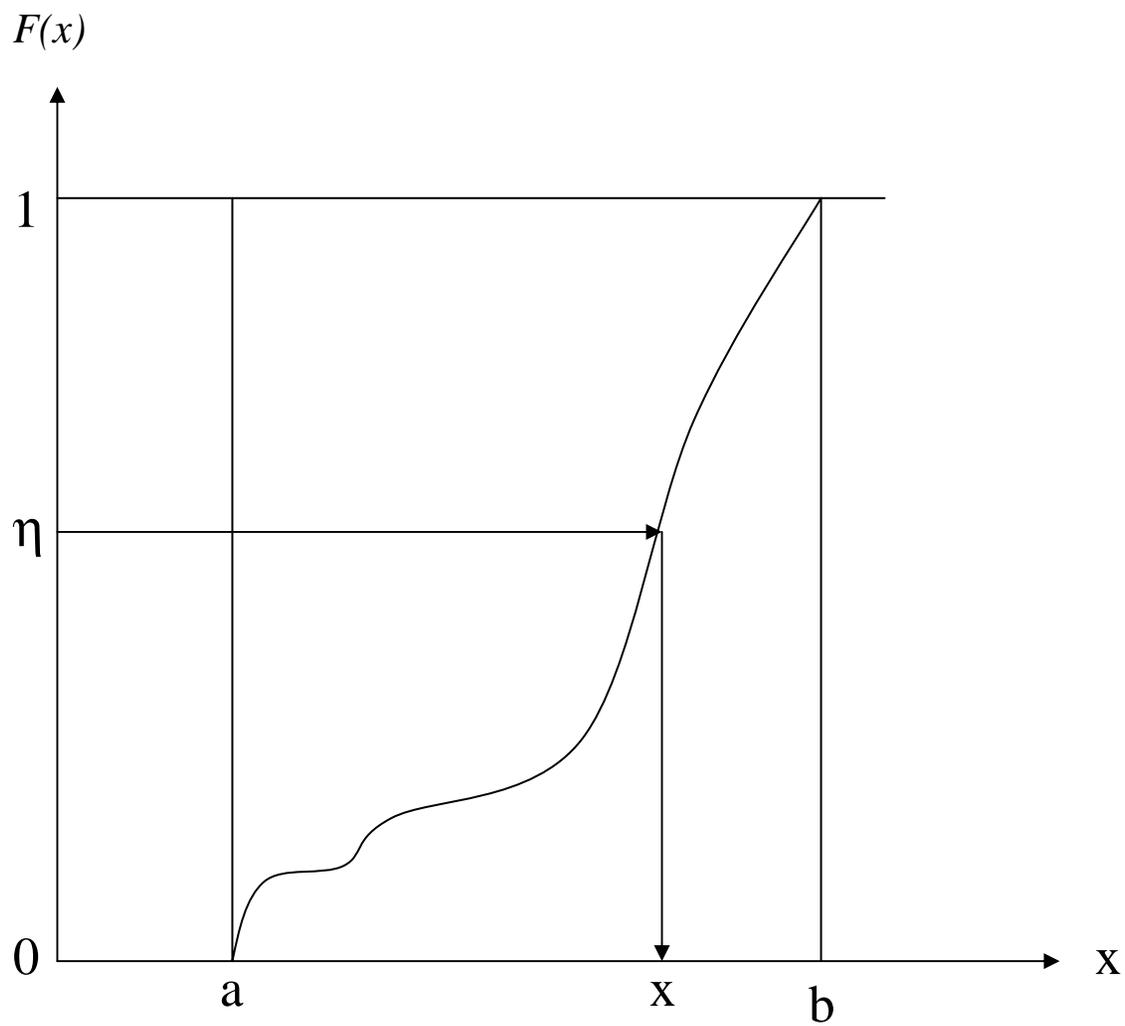
- η を0から1の間の一様な乱数とすると、

$$\eta = F(x) = \int_a^x f(x_i)dx_i$$

と関係づける事ができる。上式から x は

$$x = F^{-1}(\eta)$$

- この式を解析的に解くことが可能な場合には、 x を直接計算して決めが可能であり、“**直接サンプリング法**”と呼ぶ。



直接サンプリング法の例-飛行距離の決定

- 1個の入射粒子が単位距離あたりに衝突する確率を Σ_t とする時、 l と $l+dl$ の間で最初に衝突が起きる確率

$$p(l)dl = e^{-\Sigma_t l} \Sigma_t dl$$

$$\eta = P(l) = \int_0^l p(l_1) dl_1 = 1 - e^{-\Sigma_t l}$$

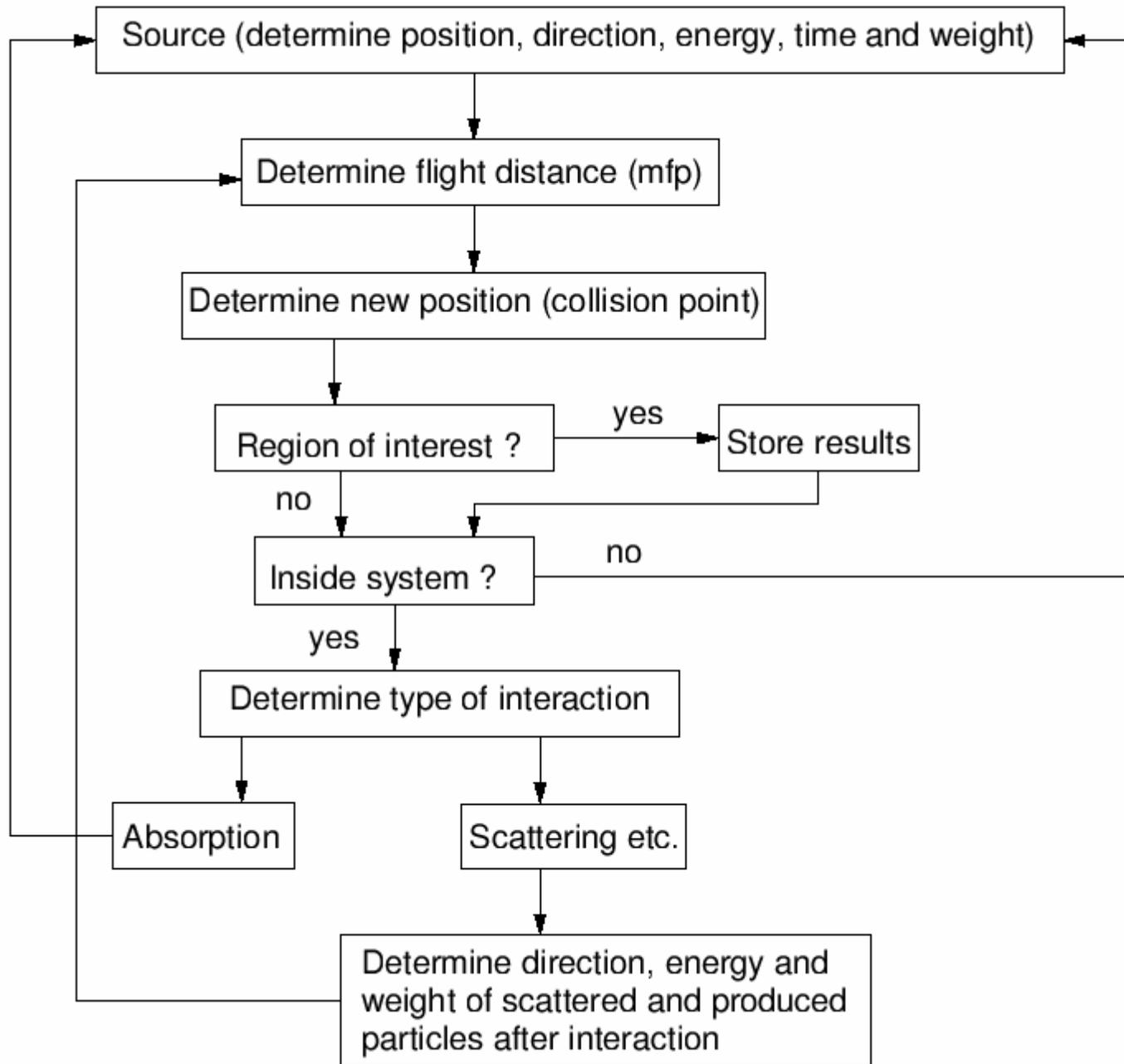
$$l = -\frac{1}{\Sigma_t} \ln(1 - \eta) = -\lambda \ln(1 - \eta)$$

l : 飛行距離

λ : 平均自由行程(mean free path)

η : 乱数 ($1-\eta$ と η は等価)

$$l = -\lambda \ln(\eta)$$



無限体系

光子

初期条件: エネルギー、位置、方向

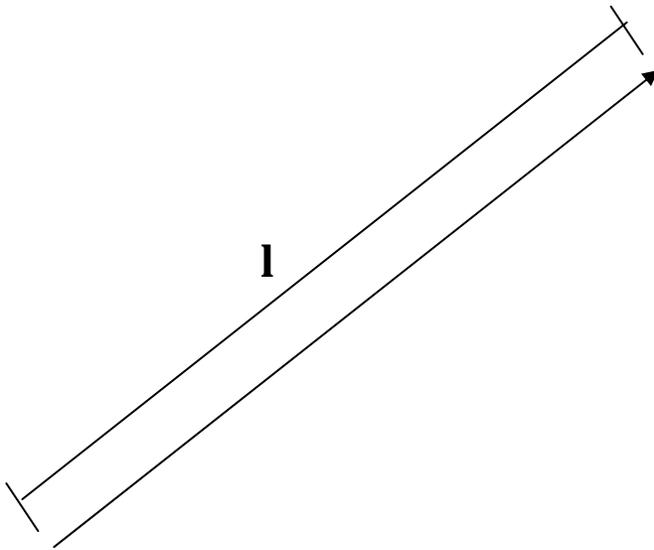
$e_0, x_0, y_0, z_0, u_0, v_0, w_0$

反応点までの距離 l の決定

$$l = -\ln(\delta)/\mu$$

移動後の座標

$$x = x_0 + u_0 l, \quad y = y_0 + v_0 l, \quad z = z_0 + w_0 l$$



初期条件: エネルギー、位置、方向

$$e_0, x_0, y_0, z_0, u_0, v_0, w_0$$

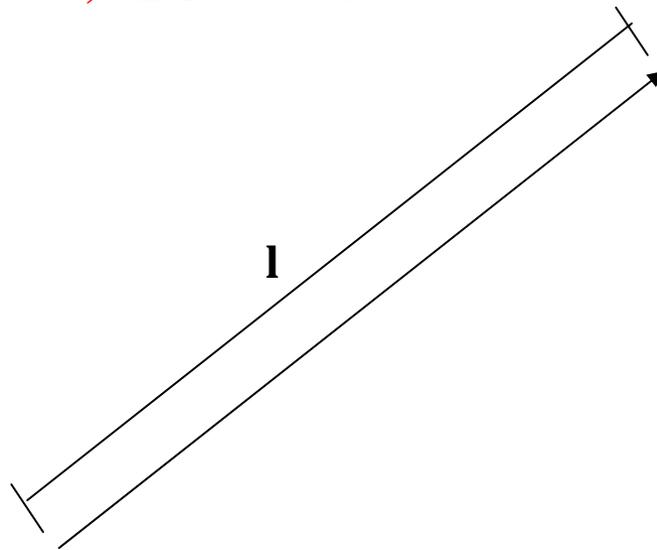
反応の種類の設定

光電吸収: a , コンプトン散乱: b , 電子対生成: c

$\delta \leq a/(a+b+c)$: 光電吸収

$a/(a+b+c) < \delta \leq (a+c)/(a+b+c)$: コンプトン散乱

$\delta > (a+c)/(a+b+c)$: 電子対生成

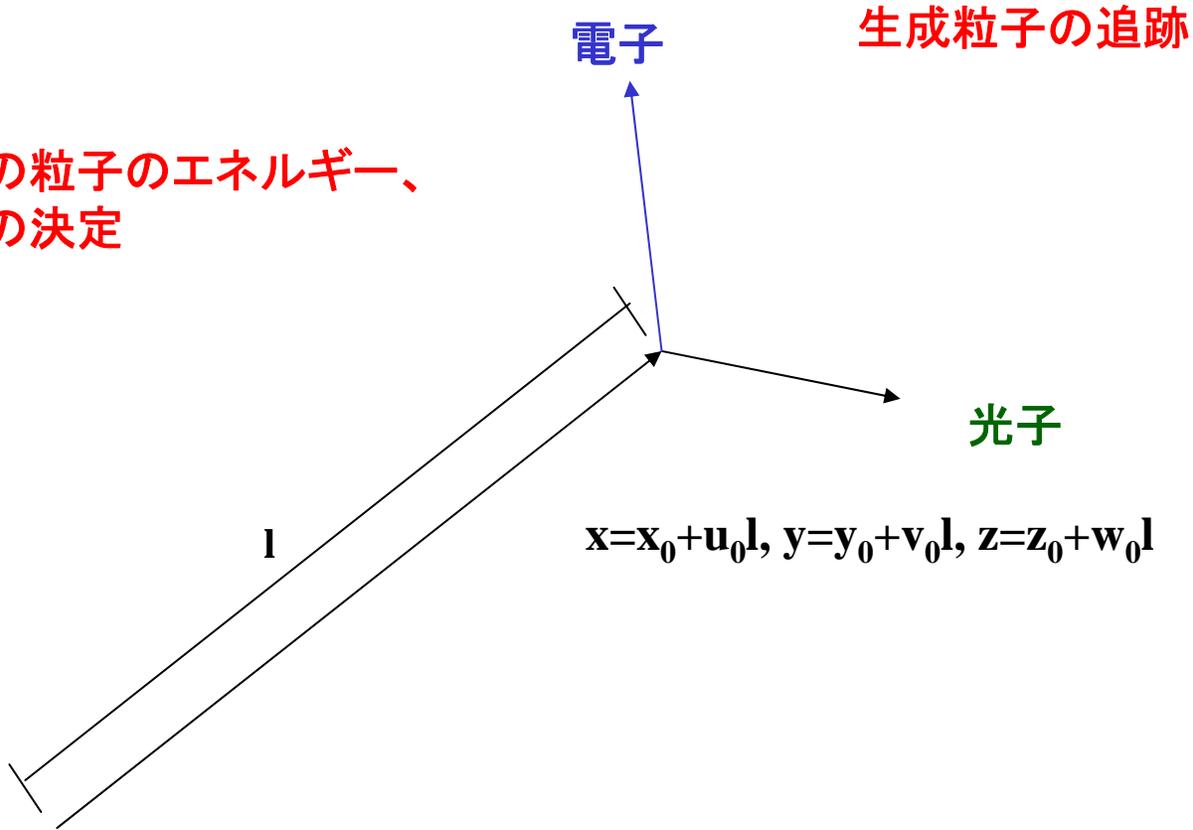


$$x = x_0 + u_0 l, \quad y = y_0 + v_0 l, \quad z = z_0 + w_0 l$$

初期条件: エネルギー、位置、方向

$$e_0, x_0, y_0, z_0, u_0, v_0, w_0$$

個々の粒子のエネルギー、
方向の決定



初期条件: エネルギー、位置、方向

$$e_0, x_0, y_0, z_0, u_0, v_0, w_0$$

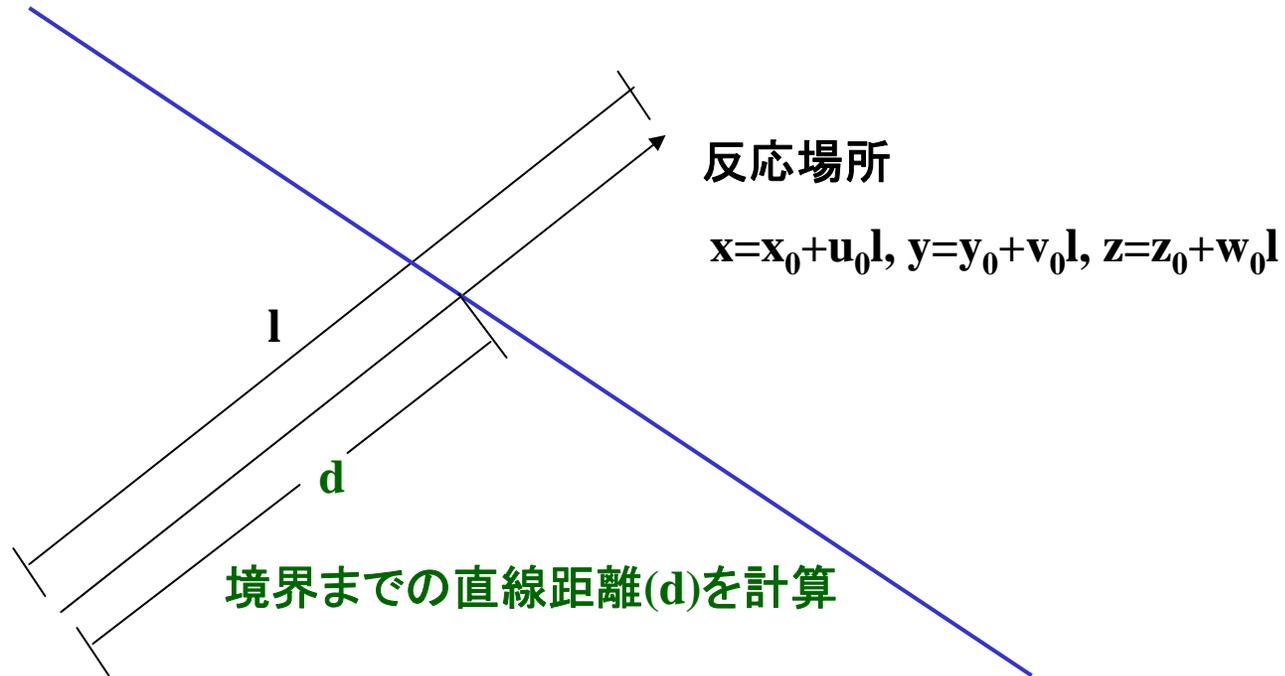
$d > l$: 反応場所まで移動

$d \leq l$: 距離 d だけ移動

同じ物質の場合: 反応場所までの距離 $= l - d$

物質が異なる場合: 改めて反応場所を決定

リージョン境界



初期条件: エネルギー、位置、方向

$$e_0, x_0, y_0, z_0, u_0, v_0, w_0$$

情報の採取

粒子が移動: エネルギー付与

飛程長

境界を横切る

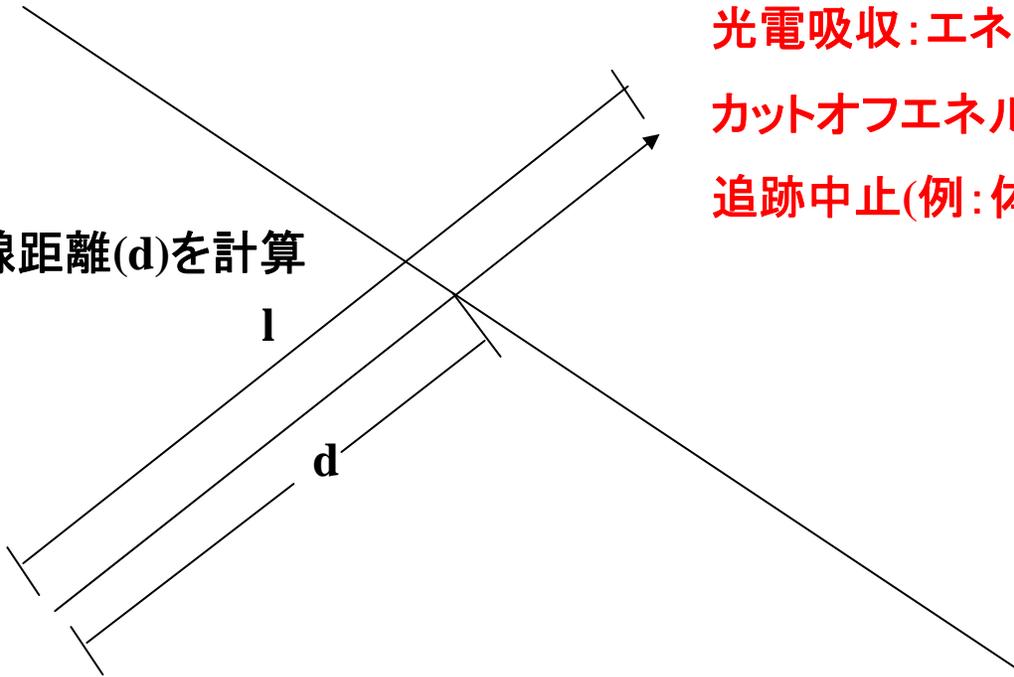
光電吸収: エネルギー付与

カットオフエネルギー以下

追跡中止(例: 体系外)

リージョン境界

境界までの直線距離(d)を計算



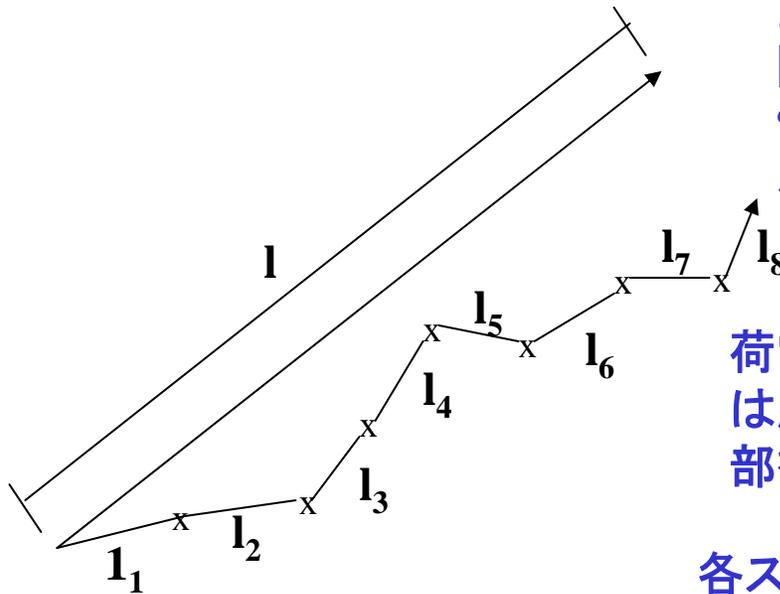
初期条件: エネルギー、位置、方向

$e_0, x_0, y_0, z_0, u_0, v_0, w_0$

電子や陽電子は、物質中で多数回の弾性散乱をするので、この弾性散乱を光子と同じように扱うことは難しい。

反応点までの距離の決定

$$l = -\ln(\delta) / \Sigma$$



電子あるいは陽電子

初期条件: エネルギー、位置、方向

$$e_0, x_0, y_0, z_0, u_0, v_0, w_0$$

Condensed History Technique

反応場所までの距離を多くの細かいステップに分割し、各ステップにおける多数回の弾性散乱による実際の飛程、方向や位置の変化を“多重散乱モデルを使って評価する

荷電粒子は、移動に伴い電離あるいは励起により、そのエネルギーの一部を失う

各ステップでのエネルギー付与

真の飛程 \times 阻止能(dE/dx)

手計算による光子の輸送計算

- 添付の乱数 (SLAC RAN6で求めたもの)
 - 任意の場所から始めて良いが、その後は順番に(左から右。右端に来たら、次の行へ)表の乱数を使用する
 - 計算結果の有効数字は3桁

手計算による光子の輸送計算1 (Fig.1)

- 図1のように、厚さ50 cmの物質Aがあるとする。
 - 0.5 MeVの光子が物質Aの左側から垂直に入射すると仮定する。
 - 平均自由行程は20 cmとする。
 - 光電吸収とコンプトン散乱の比は、1:1とする。
 - コンプトン散乱後、光子はエネルギーも方向も変わらないとする。
- 例1
 - 最初の乱数:0.234 -- $\lambda = -20.0 \times \ln(0.234) = 29.0$
 - $29.0(\text{cm}) < 50.0(\text{cm})$
 - 次の乱数:0.208 (<0.5) -- 光電吸収
- 例2
 - 次の乱数:0.906 -- $\lambda = -20.0 \times \ln(0.906) = 1.97$
 - $1.97(\text{cm}) < 50.0(\text{cm})$
 - 次の乱数:0.716 (>0.5) -- コンプトン散乱
 - 次の乱数:0.996 -- $\lambda = -20.0 \times \ln(0.996) = 0.0802$
 - $0.0802(\text{cm}) < 50.0 - 1.97(\text{cm})$

手計算による光子の輸送計算2 (Fig.2)

- 図2のように、厚さ40cmの物質Aの後ろに厚さ10cmの物質Bがあるとする。
 - 0.5MeVの光子が物質Aの左側から垂直に入射すると仮定する。
 - 物質Aの平均自由行程、光電吸収とコンプトン比は先と同じとする。
 - 物質Bの平均自由行程は3cmとする。
 - 物質Bの光電吸収とコンプトン散乱の比は、3:1とする。
 - 先と同様、コンプトン散乱後、光子はエネルギーも方向も変わらないとする。

計算例

- 添付の乱数を使用した例
 - 最初の乱数:0.329 -- $\lambda = -20.0 \times \ln(0.329) = 22.2$
 - $22.2(\text{cm}) < 40.0(\text{cm})$
 - 次の乱数0.612 (>0.5) -- コンプトン散乱
 - 次に乱数:0.234 -- $\lambda = -20.0 \times \ln(0.234) = 29.0$
 - $29.0(\text{cm}) > 40.0 - 22.2(\text{cm})$
 - AとBの境界まで移動 (40.0cm)
 - 次の乱数:0.281 -- $\lambda = -3.0 \times \ln(0.281) = 3.80$
 - $6.20(\text{cm}) < 10.0(\text{cm})$

Medium A

No.	d(cm)	Random number	l(cm)	d>l	d≤l	Random number	Photo.	Compt
Exp.1	40.0	0.329	22.2	*		0.612		*
	17.8	0.234	29.0		*			

Medium B

	d(cm)	Random number	l(cm)	d>l	d≤l	Random number	Photo.	Compt
	10.0	0.281	3.80	*		0.906		*
	6.20	0.716	1.00	*		0.996		*
	5.20	0.600	1.53	*		0.183	*	

Fig. 2 Trajectories in double layers.



複雑だがより実際に近い光子の追跡

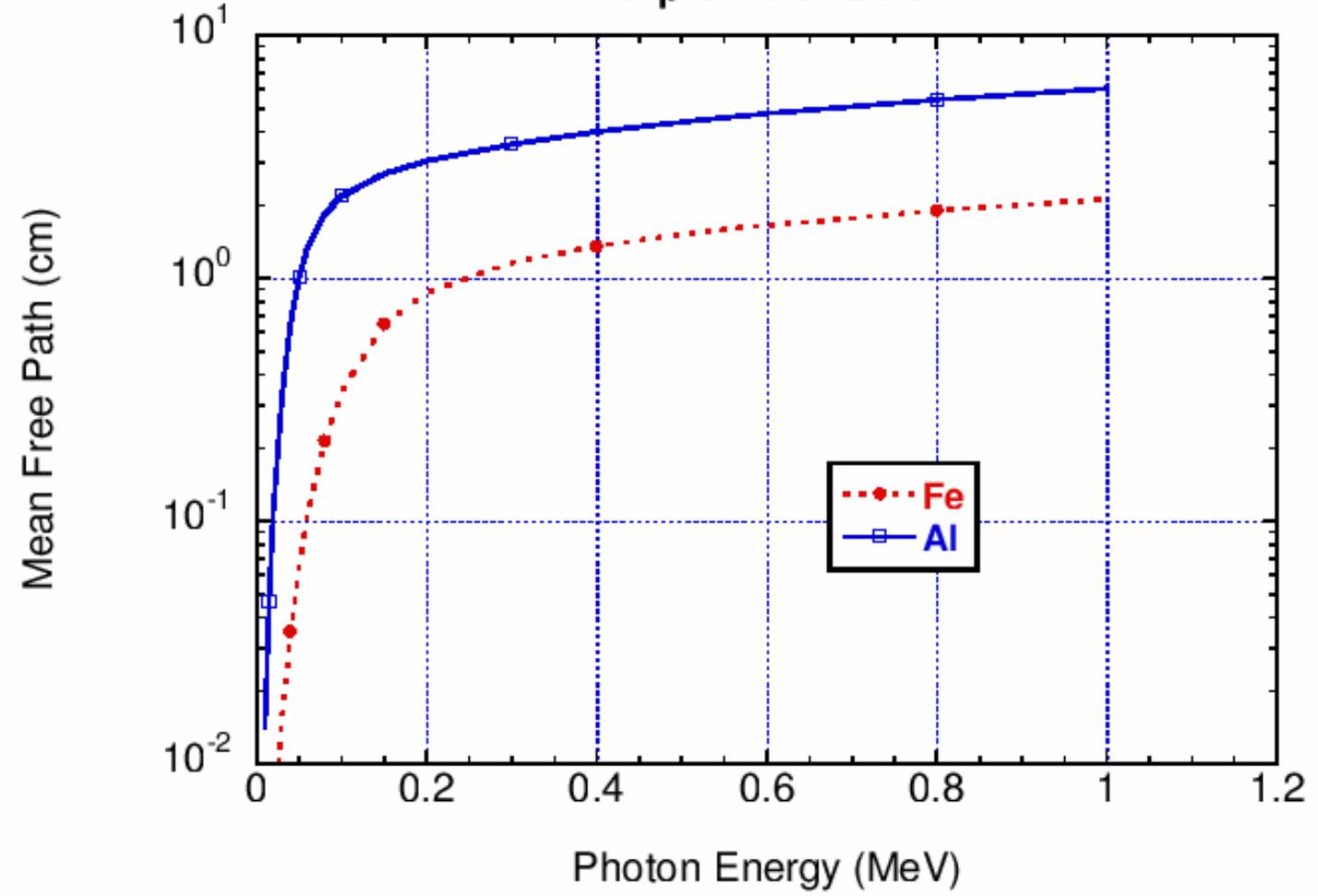
- 10cmのアルミ板について、以下の仮定の下で光子の飛跡を追跡する。
- 入射光子のエネルギーは、0.5MeVとする。
- 光子のエネルギーに関係なくコンプトン散乱において、光子の散乱角は90度単位とし、散乱の確率は同じとする。
- 散乱後の光子のエネルギーは、次式で計算する。

$$E = \frac{E_0}{1 + \left(\frac{E_0}{0.511} \right) (1 - \cos \theta)}$$

複雑だがより実際に近い光子の追跡

- 散乱の方位角は、0度と180度が1:1の確率で起きるとする。(コンプトン散乱は、X-Z平面で生じる事になる。粒子の進行方向に対して、左側を0度とする。)
- mfp 及び反応の分岐比(branching ratio)は、図4と5から読みとる。
- 光子のカットオフエネルギーは、0.05MeVとする。

Mfp of Al and Fe



Photoelectric Branching Ratio of Fe and Al

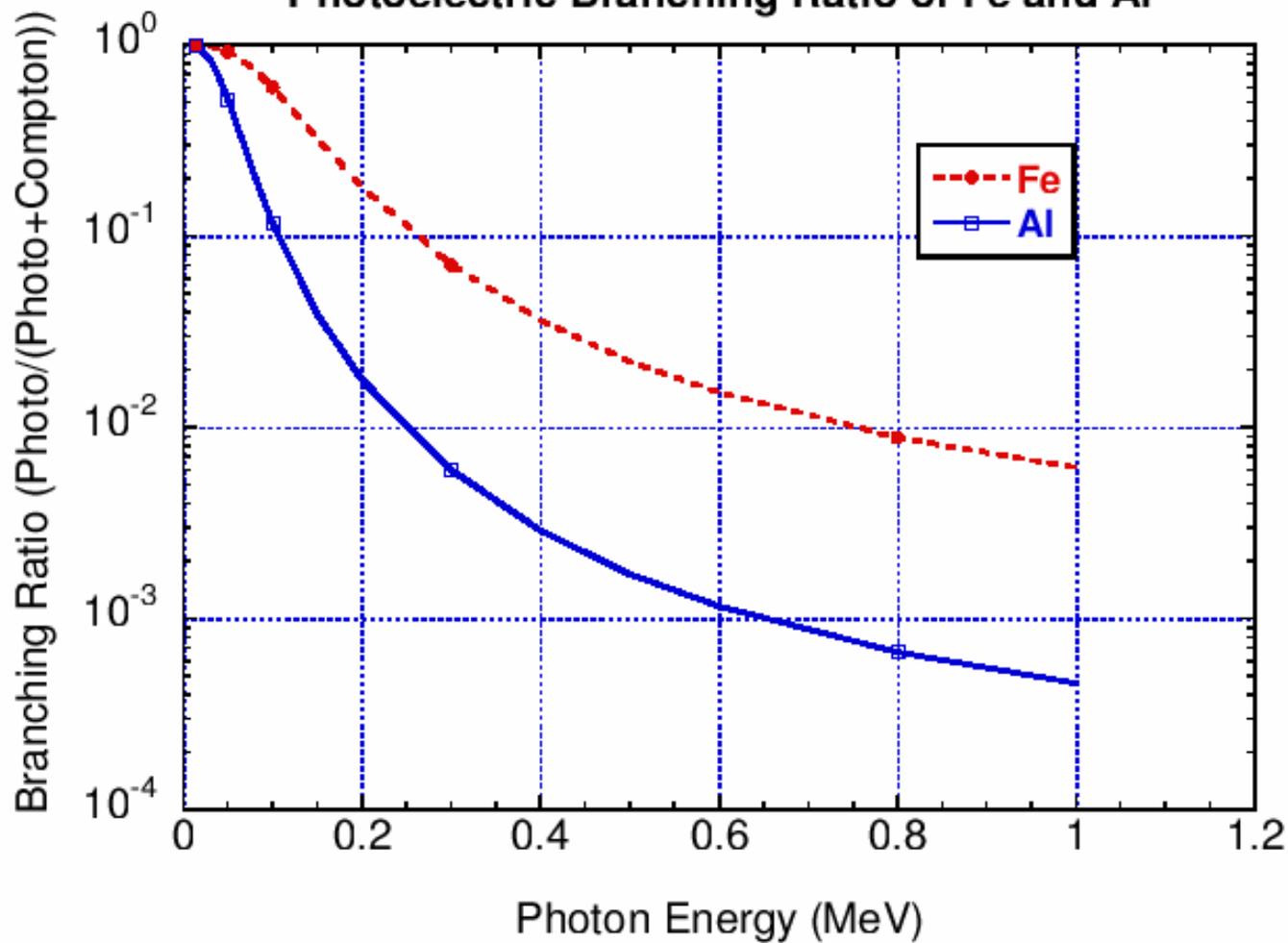


Fig. 3

