

# 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

2003.7.28 改訂

# 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

# 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  $-2^{144} \sim 10^{43}$ .
- 32-bit の計算機ならば、どの計算機にも適用できる
- KEKから配布しているSample User Codeに組み込まれている

# 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。

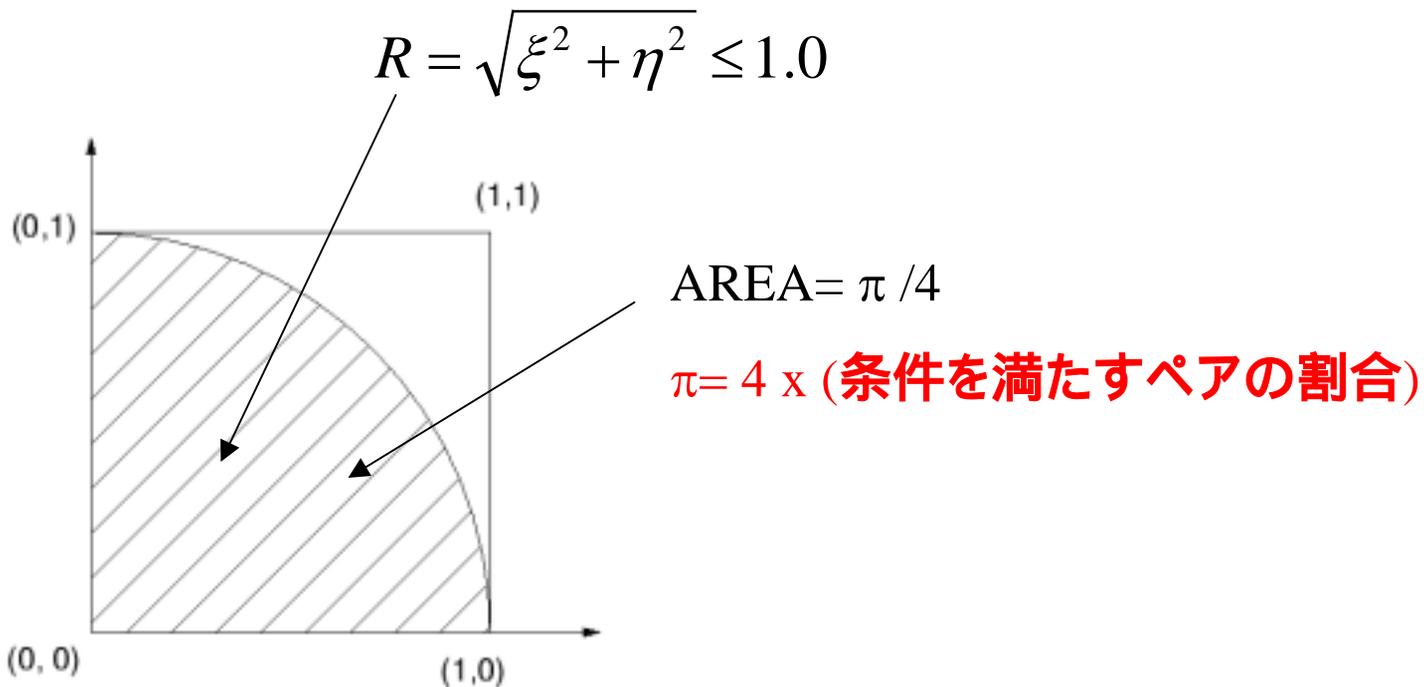
n	$R_n$	$R_n * 5$	$R_{n+1} = \text{mod}(R_n * a, m)$
0	$R_0 = 3$	15	$R_1 = 15 - \text{INT}(15/16) * 16 = 15$
1			
2			
3			

$\text{mod}(R_n * a, m)$ :  $R_n * a$ 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

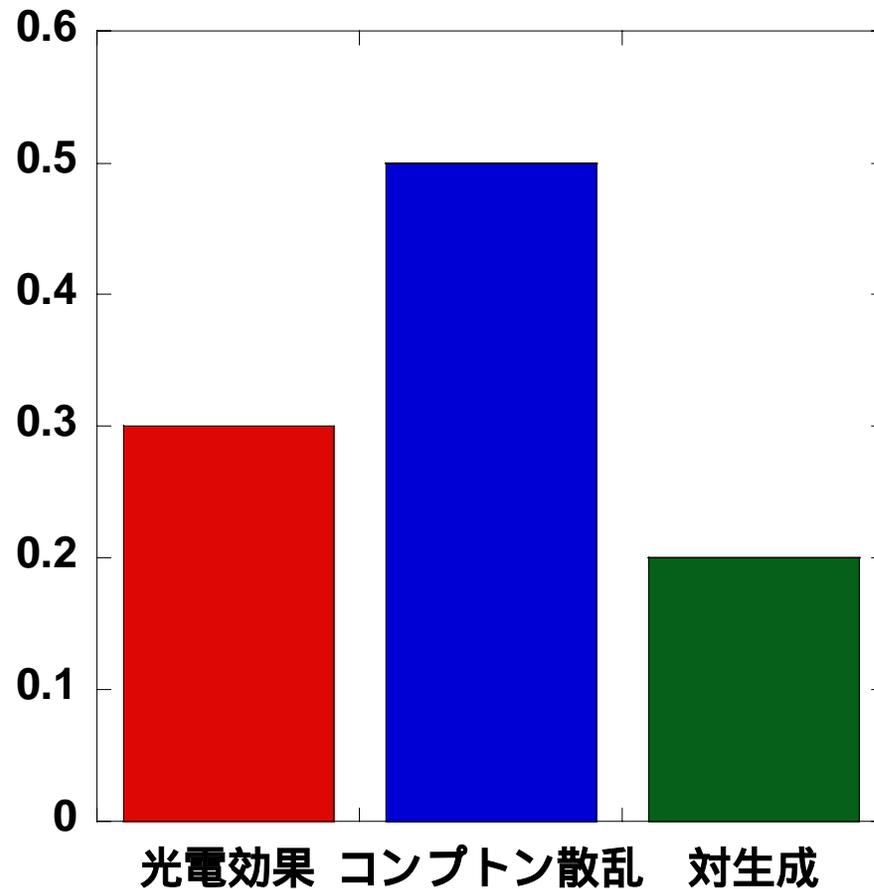
# 乱数を使った $\pi$ の計算

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

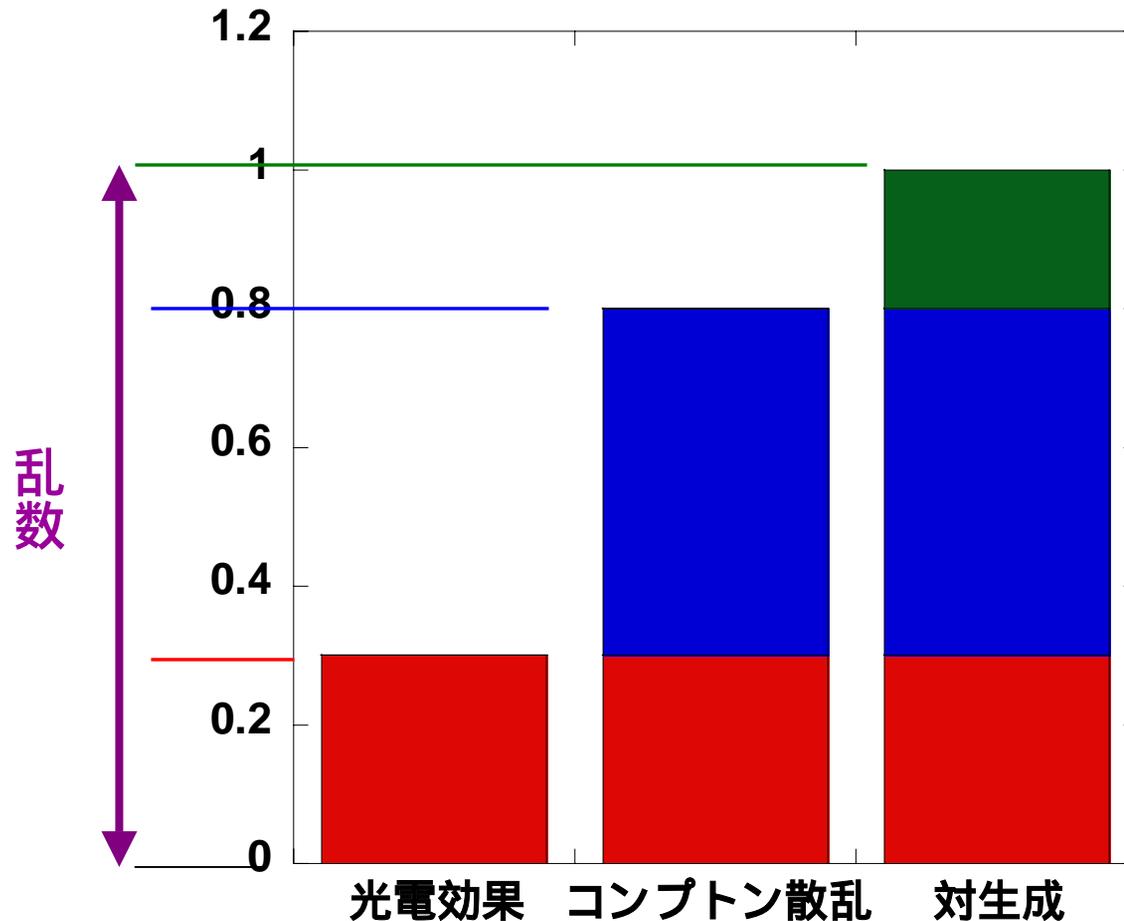


# 離散型サンプリングの導入(1)

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)



「**積み木作戦**」または「**累積分布関数**」

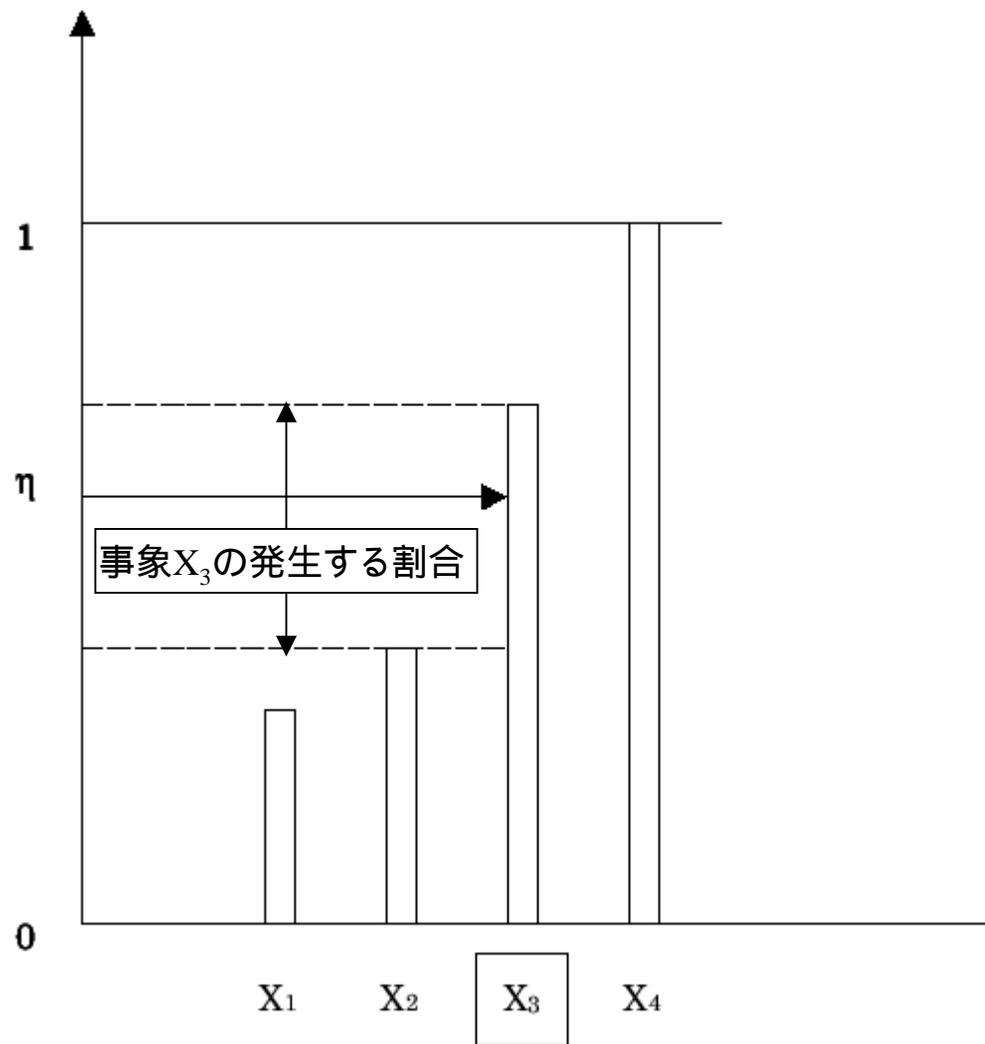
# 離散型確率過程のサンプリング

- $x_1, x_2, \dots, x_n$  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)

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

- $\eta$  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 光子の反応の種類決定

- 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: $F(x)$ )

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

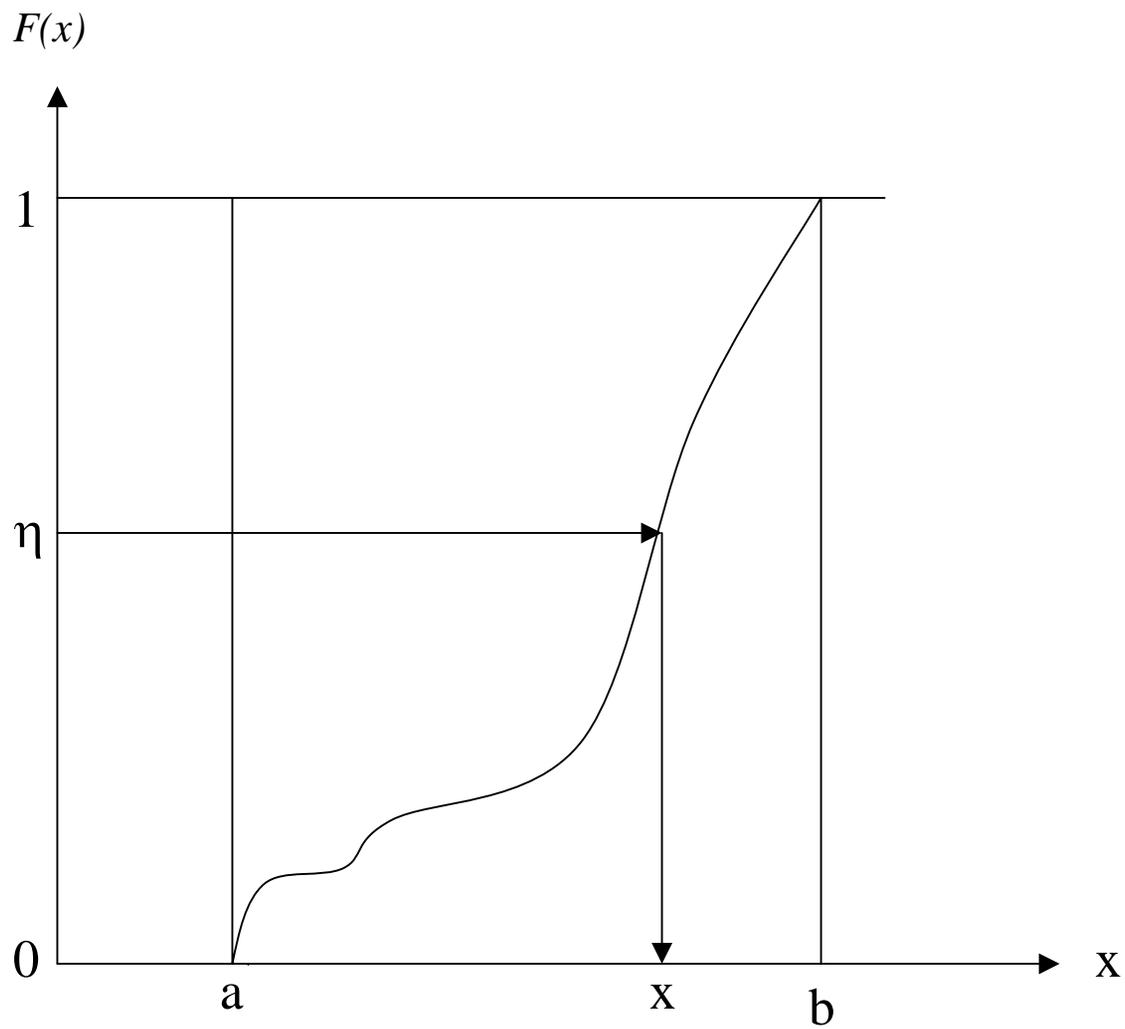
- $\eta$ を0から1の間の一様な乱数とすると、

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

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 $\Sigma_t$ とする時、 $l$ と $l+dl$ の間で最初に衝突が起きる確率

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

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

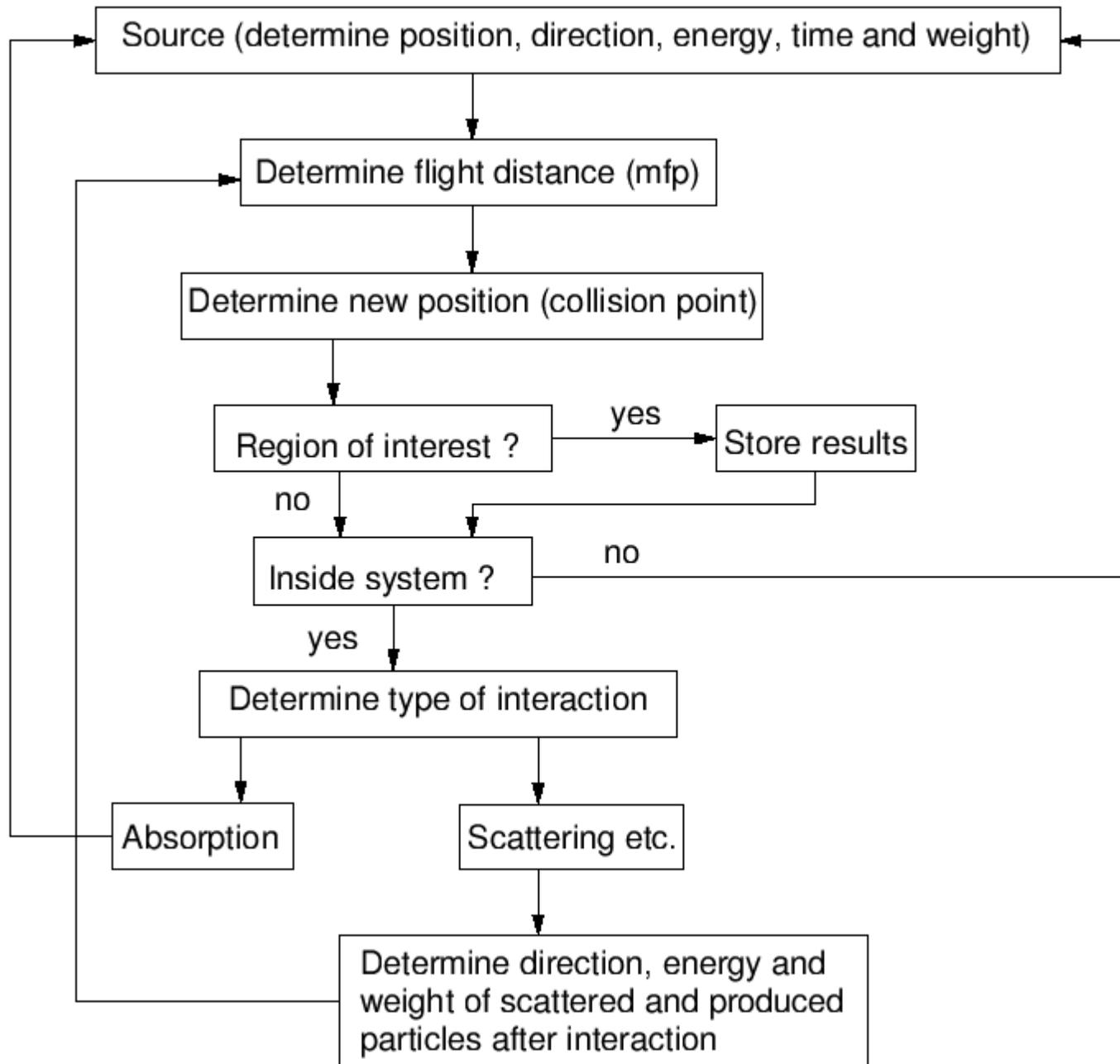
$$l = -\frac{1}{\Sigma_t} \ln(1 - \eta) = -\lambda \ln(1 - \eta)$$

**$l$ : 飛行距離**

**$\lambda$ : 平均自由行程(mean free path)**

**$\eta$ : 乱数** ( $1-\eta$  と  $\eta$  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

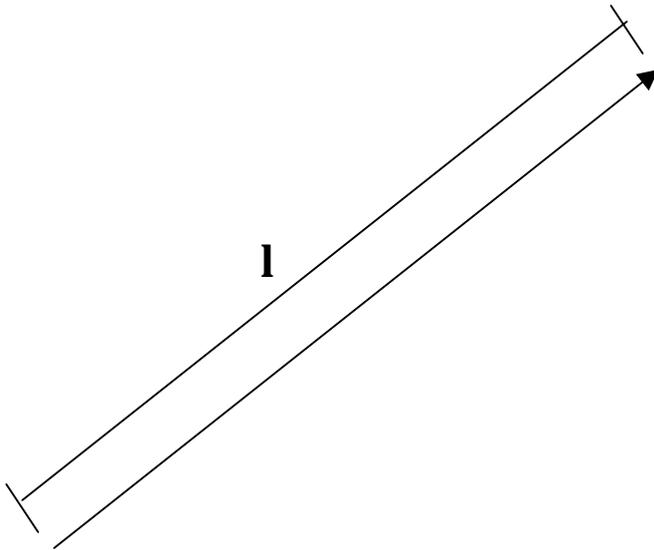
$E_0, X_0, Y_0, Z_0, U_0, V_0, W_0$

## 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

$$E_0, X_0, Y_0, Z_0, U_0, V_0, W_0$$

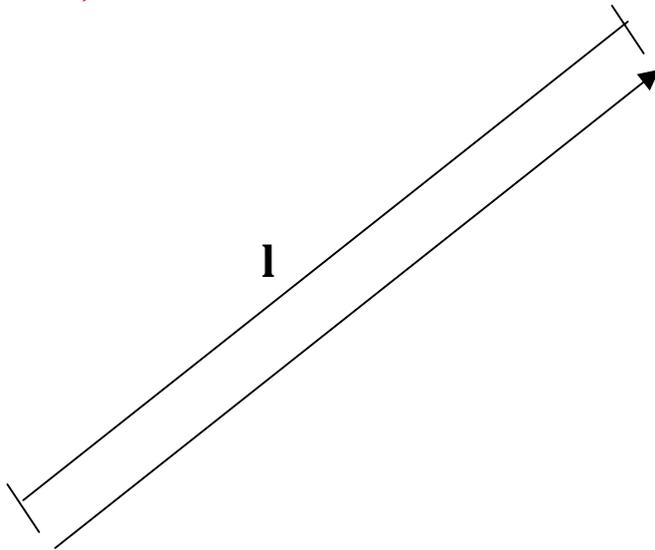
## 反応の種類の設定

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

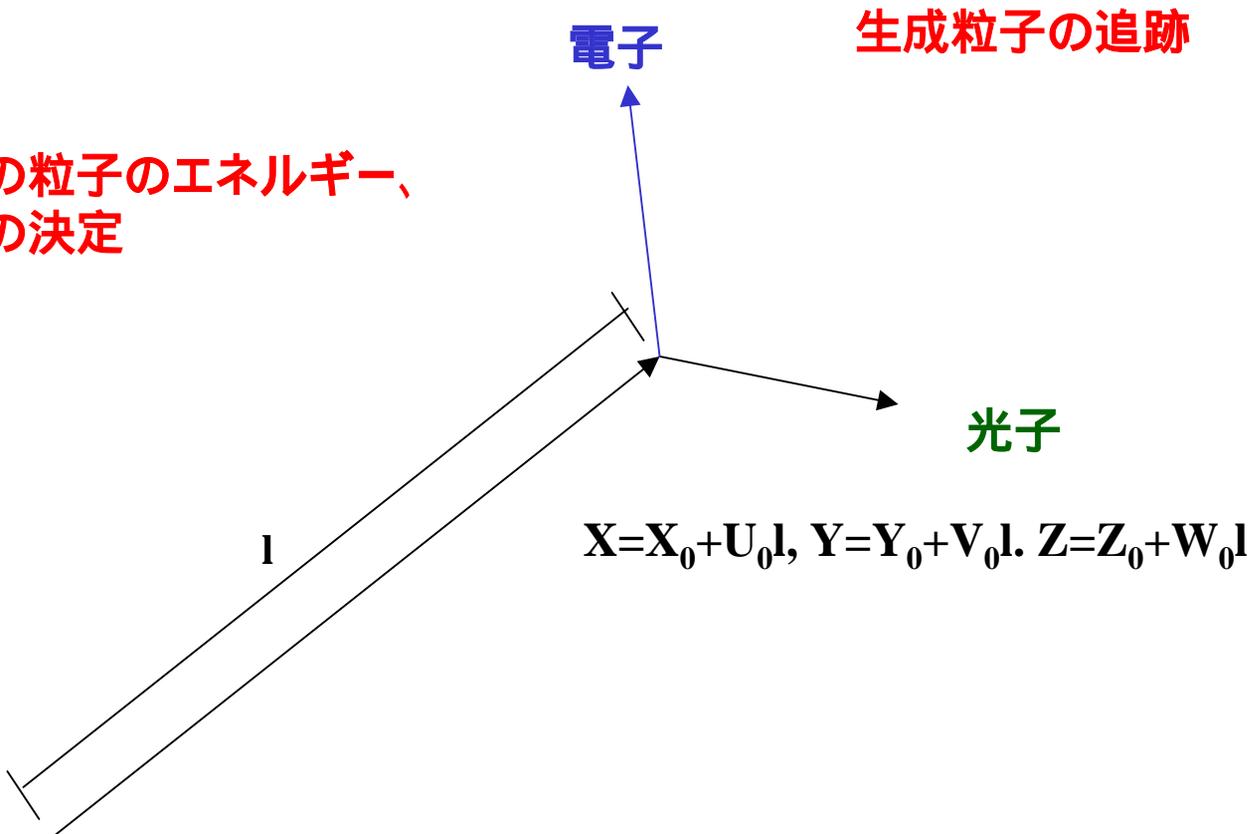


$$X=X_0+U_0l, Y=Y_0+V_0l, Z=Z_0+W_0l$$

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

$$E_0, X_0, Y_0, Z_0, U_0, V_0, W_0$$

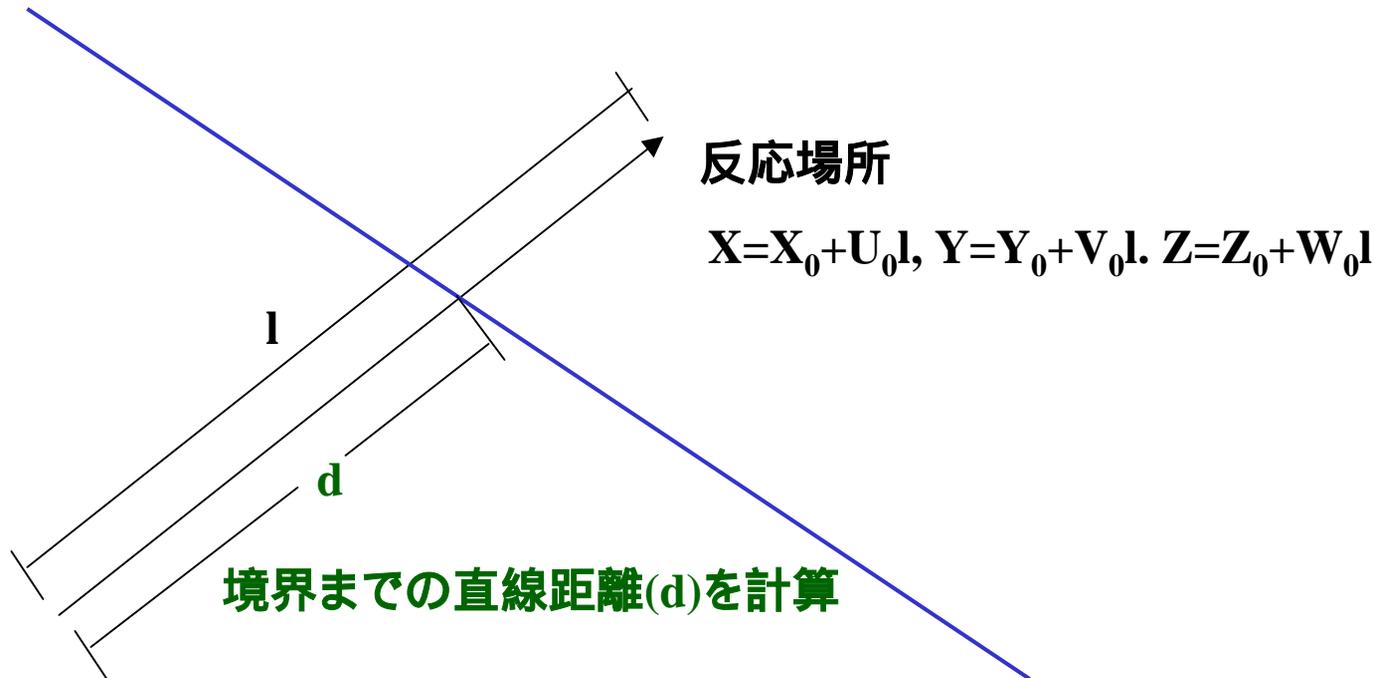
$d > l$ : 反応場所まで移動

$d \leq l$ : 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

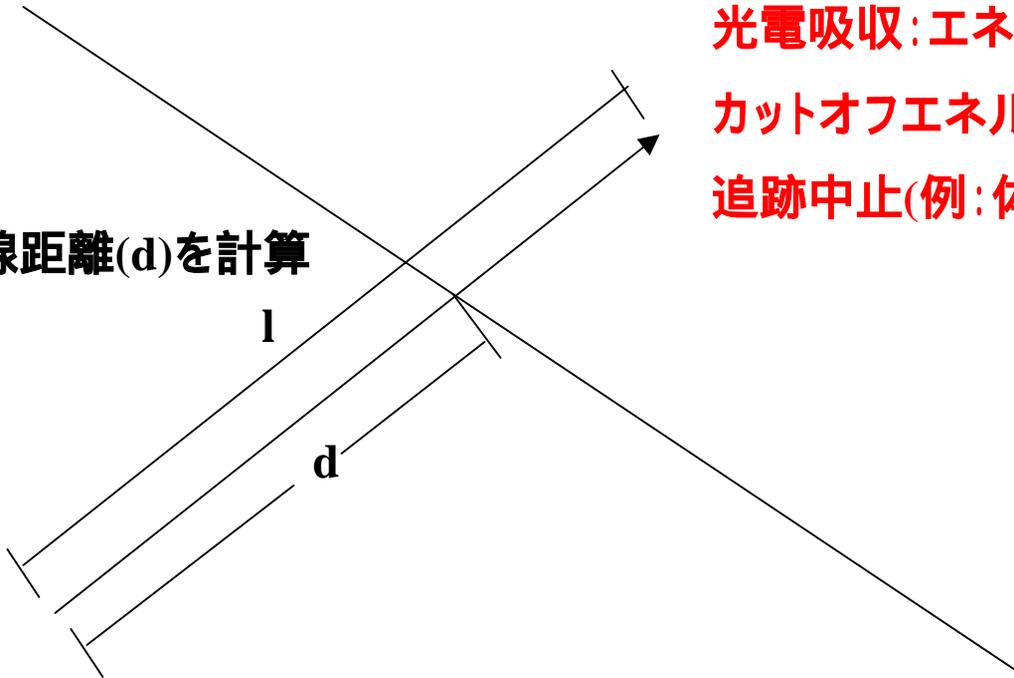
光電吸収: エネルギー付与

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



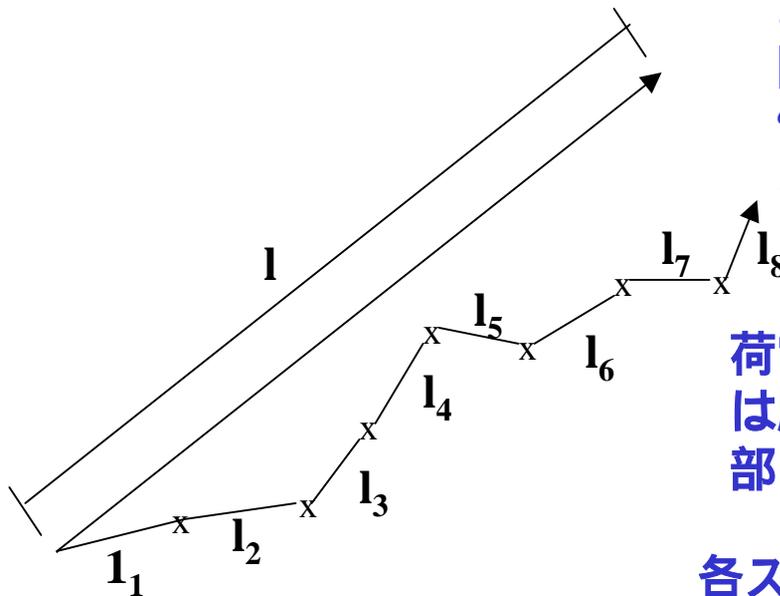
初期条件: エネルギー、位置、方向

$E_0, X_0, Y_0, Z_0, U_0, V_0, W_0$

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

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



## 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( $dE/dx$ )

電子あるいは陽電子

初期条件: エネルギー、位置、方向

$E_0, X_0, Y_0, Z_0, U_0, V_0, W_0$

# 電卓による光子の輸送計算 (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:0.2336 --  $\lambda = -20.0 \times \ln(0.2336) = 29.08$
  - 29.08(cm) < 50.0(cm)
  - 次の乱数:0.20830 (<0.5) -- 光電吸収
- 例2
  - 次の乱数:0.90602 --  $\lambda = -20.0 \times \ln(0.90602) = 1.974$
  - 1.974(cm) < 50.0(cm)
  - 次の乱数:0.71624 (>0.5) -- コンプトン散乱
  - 次の乱数:0.99585 --  $\lambda = -20.0 \times \ln(0.99585) = 0.0832$
  - 0.0832(cm) < 50.0-1.974(cm)





# 電卓による光子の輸送計算 (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。
- 例1
  - 最初の乱数:0.32891 --  $\lambda = -20.0 \times \ln(0.32891) = 22.24$
  - 22.24(cm) < 40.0(cm)
  - 次の乱数0.6116 (>0.5) -- コンプトン散乱
  - 次に乱数:0.2336 --  $\lambda = -20.0 \times \ln(0.2336) = 29.08$
  - 29.08(cm) > 40.0 - 22.24(cm)
  - AとBの境界まで移動 (40.0cm)
  - 次の乱数:0.28083 --  $\lambda = -3.0 \times \ln(0.28083) = 3.81$
  - 6.19(cm) < 10.0(cm)

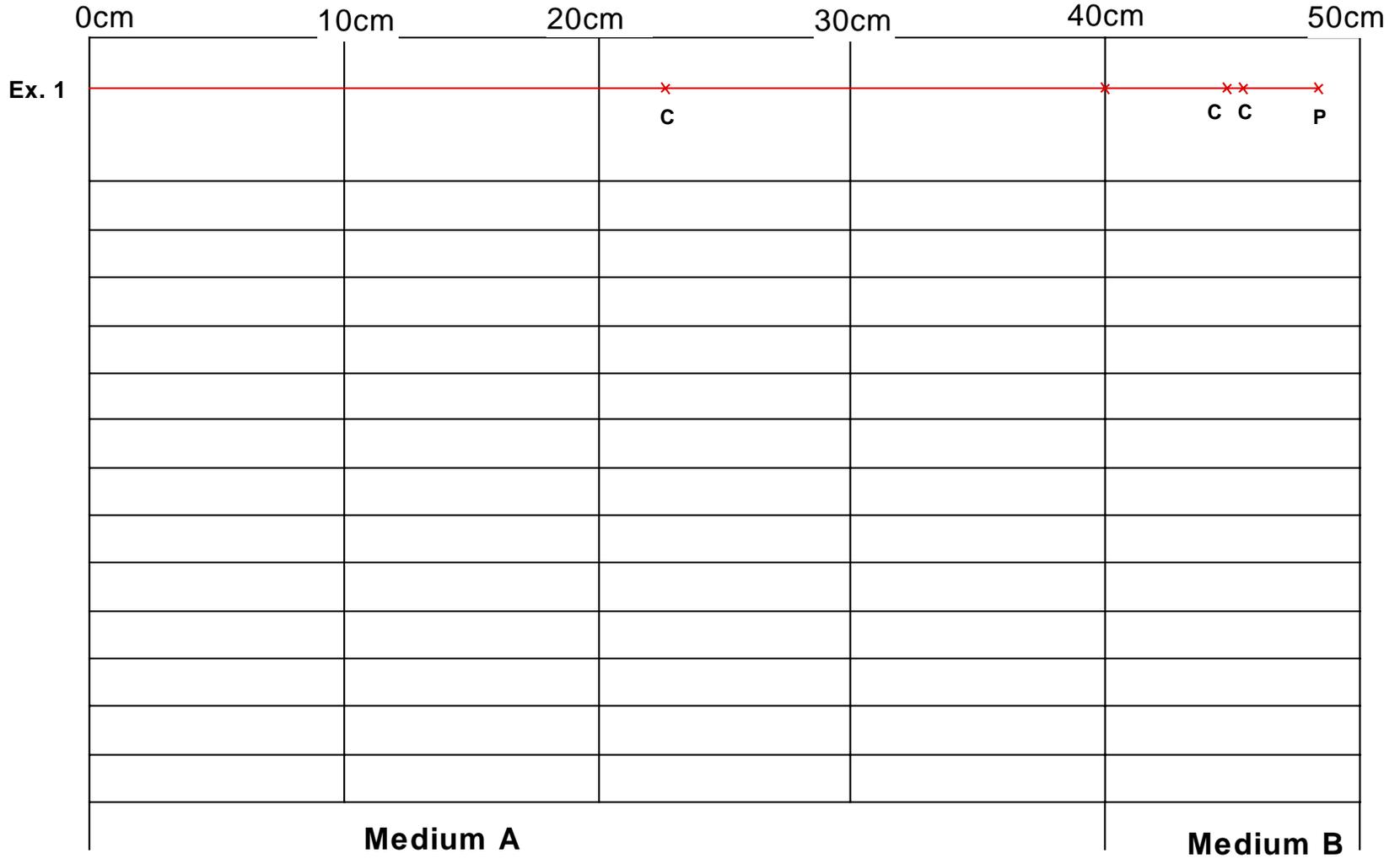
### Medium A

No.	d(cm)	Random number	l(cm)	d>l	d≤l	Random number	Photo.	Compt
Exp.1	40.0	0.32891	22.24	*		0.616		*
	17.76	0.2336	29.08		*			

### Medium B

	d(cm)	Random number	l(cm)	d>l	d≤l	Random number	Photo.	Compt
	10.0	0.28083	3.81	*		0.906		*
	6.19	0.7162	1.00	*		0.99585		*
	5.19	0.6002	1.53	*		0.18307	*	

Fig. 2 Trajectories in double layers.



# 複雑だがより実際に近い光子の追跡

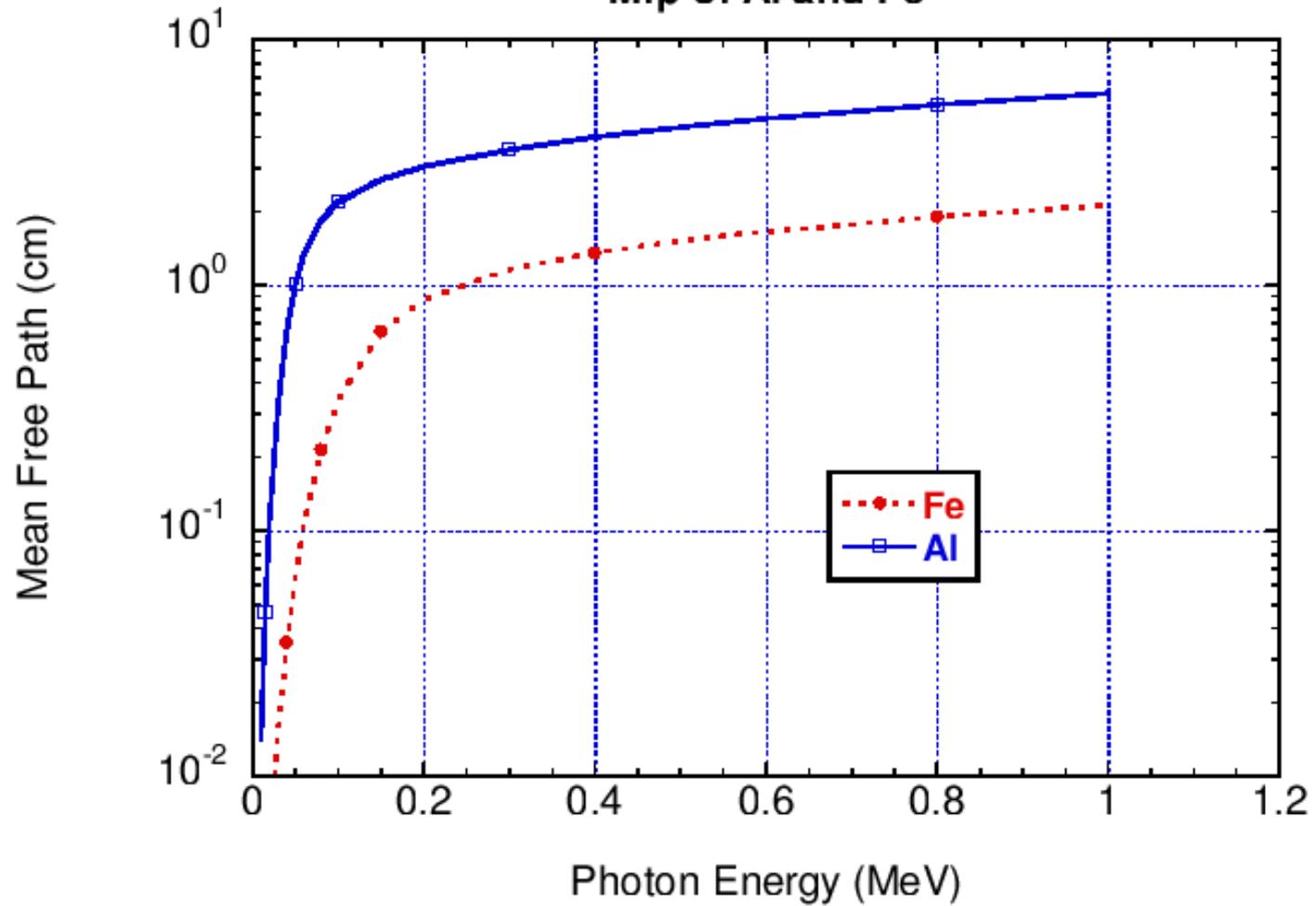
- 10cmのアルミ板について、以下の仮定の下で光子の飛跡を追跡する。
- 入射光子のエネルギーは、0.5MeVとする。
- 光子のエネルギーに関係なくコンプトン散乱において、光子の散乱角は45度単位とし、散乱の確率は同じとする。
- 散乱後の光子のエネルギーは、次式で計算する。

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

# 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

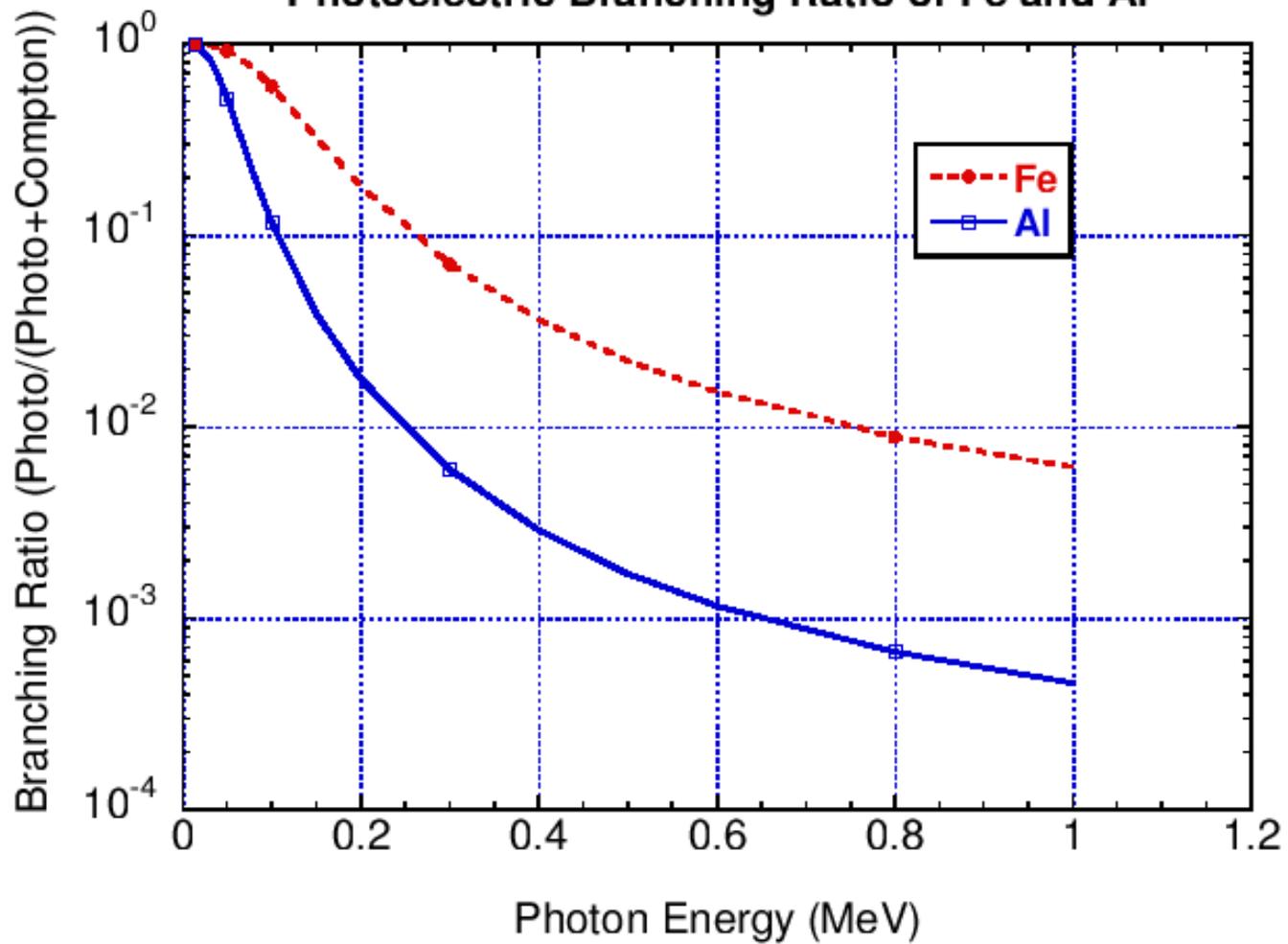


Fig. 3

