

Exercício 03: Monte Carlo

Victor Sultanum Calazans Santos 57017*

Este estudo consiste na aplicação de métodos de Monte Carlo para estimar distâncias primárias percorridas, num meio de alumínio, por fótons emitidos num feixe. Simularam-se: i) um feixe monocromático, considerando o coeficiente de atenuação μ_T constante; ii) um feixe policromático, com μ_T ajustado para cada energia.

I. Feixe monocromático

Inicialmente, foi feita uma simulação do percurso primário (isto é, percurso até a primeira interação com o meio) de 10^5 fótons, num feixe monodirecional e monocromático de energia $E = 1$ keV em um bloco de alumínio infinito. A interação com o meio, quando o fóton está com energia da ordem de keV a MeV, pode tomar três formas, cada uma associada a uma constante de atenuação, que são, neste caso:

- coeficiente da absorção por efeito fotoelétrico: $\mu_f = 3.19 \times 10^3 \text{cm}^{-1}$
- coeficiente da dispersão de Rayleigh: $\mu_R = 6.09 \text{cm}^{-1}$
- coeficiente da dispersão de Compton: $\mu_C = 3.83 \times 10^{-2} \text{cm}^{-1}$

A constante de atenuação total é a soma das três, tendo em conta que os processos são independentes:

$$\mu_T = \mu_f + \mu_R + \mu_C$$

Para um feixe monodirecional e monocromático, a atenuação pode ser descrita analiticamente por

$$I = I_0 e^{-\mu_T x}$$

tal que I_0 , o número inicial de fótons no feixe, diminui para I após o feixe atravessar uma espessura x do material em questão. Temos uma função densidade de probabilidade da forma $f(x) = k e^{-\mu_T x}$. Normalizando-a, tem-se o resultado:

$$\int_0^{+\infty} k e^{-\mu_T x} = 1 \Leftrightarrow k = \mu_T$$

Em seguida, foi feita a seguinte transformação:

$$F(x) = \int_0^x f(x') dx' = 1 - e^{-\mu_T x}$$

Já que estamos interessados no percurso dos fótons, podemos reorganizar a expressão anterior, obtendo $x =$

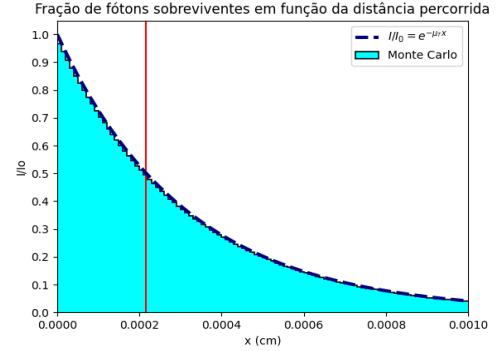


Figura 1. Histograma da fração de fótons que sobrevivem sem interações com o meio até o comprimento x correspondente, para o feixe monocromático. O histograma tem 100 bins, com intervalos de $x = 10^{-5}$ cm. A linha vermelha corresponde ao valor de x para o qual $I/I_0 = 1/2$, que é $x = 2.16493 \times 10^{-4}$ cm. A linha tracejada corresponde à função $I/I_0 = e^{-\mu_T x}$, expressão analítica da atenuação do feixe.

$-\frac{\ln(1-F(x))}{\mu_T}$. No entanto, podemos gerar um valor aleatório para $F(x)$ (foi utilizada a função `drand48()`, com `seed` 123211, em C++), obtendo $F(x) = \varepsilon$ para cada x calculado:

$$x = -\frac{\ln(1-\varepsilon)}{\mu_T}$$

A Figura 1 mostra o histograma resultante da fração I/I_0 de fótons que sobrevivem sem interações até o comprimento x . Como se pode ver, a espessura x do alumínio em que $I/I_0 = 1/2$, representada pelo traço vermelho, corresponde a $x = 2.16493 \times 10^{-4}$ cm. Pela expressão da atenuação dada, $I/I_0 = e^{-\mu_T x}$ (cujo gráfico pode ser visto na figura como uma linha tracejada azul), teria-se, analiticamente, o resultado $x = 2.16871 \times 10^{-4}$ cm. O erro correspondente é de apenas $\Delta x = \frac{|x_{\text{Monte Carlo}} - x_{\text{Analítico}}|}{|x_{\text{Analítico}}|} \times 100\% \approx 0.174\%$. Isto, em conjunto com uma breve análise do gráfico, fez concluir-se que o método de Monte Carlo foi extremamente acurado para o propósito em consideração.

* fc57017@alunos.fc.ul.pt

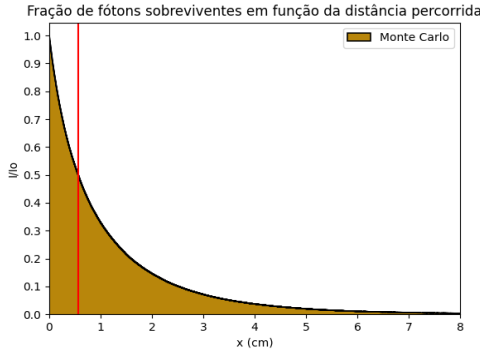


Figura 2. Histograma da fração de fótons que sobrevivem sem interações com o meio até o comprimento x correspondente, para o feixe policromático. Este histograma tem 4000 *bins*, com intervalos de $x = 2 \times 10^{-3}$ cm. A linha vermelha corresponde ao valor de x para o qual $I/I_0 = 1/2$, que é $x = 0.565586$ cm.

II. Feixe policromático

Considerando, em seguida, um exemplo mais próximo da realidade, foi feito o mesmo estudo, contudo para um feixe policromático. Além disso, os coeficientes de atenuação agora dependem da energia do fóton. Todavia, não há expressão analítica para a distribuição de energia dos fótons, nem para o coeficiente de atenuação correspondente. Portanto, para os valores da energia, foi utilizada a tabela fornecida de um feixe policromático, no qual constam energias no intervalo de 11 keV a 110 keV, variando de 1 em 1 keV. A cada energia está associada uma frequência com que um fóton com tal energia ocorre no feixe.

Estas frequências foram normalizadas, e delas se retirou a probabilidade de um fóton do feixe ter a energia do intervalo correspondente. Em seguida, fez-se uma simulação de Monte Carlo de 100000 fótons, mas desta vez tomando em conta a distribuição de energia do feixe e dependência dos coeficientes de atenuação na energia - estes últimos foram obtidos por uma tabela disponibilizada pelo NIST. O elemento em questão é, novamente, o alumínio, não somente por conveniência mas também por efeito de comparação com a secção anterior.

Feita a simulação, obteve-se, para o valor da espessura x do alumínio em que $I/I_0 = 1/2$, o valor $x = 0.565586$ cm.. A Figura 2 mostra o histograma da fração de fótons sobreviventes em função da distância percorrida, para o feixe policromático. Facilmente nota-se um comportamento muito parecido com da simulação anterior, todavia dada a contextualização, certamente tem-se aqui resultados mais realistas. Por último, os dados do feixe

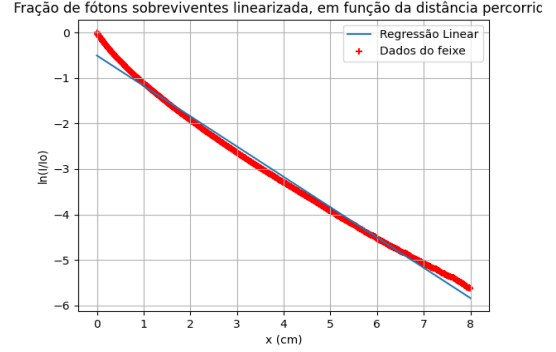


Figura 3. Gráfico do logaritmo da fração de fótons que sobrevivem sem interações com o meio até o comprimento x correspondente, para o feixe policromático. A linha azul corresponde à reta resultante da regressão linear dos dados obtidos do feixe.

policromático foram linearizados, para termos um eixo y logarítmico, tal que

$$\ln \left(\frac{I}{I_0} \right) = -\mu_T x$$

O gráfico com a linearização feita pode ser visto na Figura 3. Da expressão acima, sabe-se que o declive da reta é $-\mu_T$. Com uma regressão linear $y = ax + b$, foram obtidos os valores $a = \mu_T = -0.66689 \text{ cm}^{-1}$ e $b = -0.50443 \text{ cm}^{-1}$. Assim, foi possível estimar um valor para o comprimento de atenuação linear total do material, $\lambda = 1/\mu_T = 1.4995 \text{ cm}$.

Podemos concluir que, em situações nas quais existem infinitas possibilidades (como no caso de infinitos percursos possíveis para um fóton), pode ser excepcionalmente útil e preciso gerar uma amostra utilizando métodos de Monte Carlo. Com a amostra, pode-se extrapolar a informação para as outras possibilidades e criar modelos de imensa precisão.