
放射線シミュレーションの概要

Geant4 10.3.P3準拠

Geant4 HEP/Space/Medicine 講習会資料



大学共同利用機関法人
高エネルギー加速器研究機構

本資料に関する注意

- 本資料の知的所有権は、高エネルギー加速器研究機構およびGeant4 collaborationが有します
- 以下のすべての条件を満たす場合に限り無料で利用することを許諾します
 - 学校、大学、公的研究機関等における教育および非軍事目的の研究開発のための利用であること
 - ・ Geant4の開発者はいかなる軍事関連目的へのGeant4の利用を拒否します
 - このページを含むすべてのページをオリジナルのまま利用すること
 - ・ 一部を抜き出して配布したり利用してはいけません
 - 誤字や間違いと疑われる点があれば報告する義務を負うこと
- 商業的な目的での利用、出版、電子ファイルの公開は許可なく行えません
- 本資料の最新版は以下からダウンロード可能です
 - <http://geant4.kek.jp/lecture/>
- 本資料に関する問い合わせ先は以下です
 - Email: lecture-feedback@geant4.kek.jp

目次

- 放射線シミュレーションとは？
- 粒子輸送と物理相互作用の記述
- モンテカルロ法と相互作用の発生アルゴリズム
- Geant4における粒子輸送と相互作用の記述
- 最後に

放射線シミュレーションとは？

シミュレーションとは？

- 自然科学分野、社会科学分野、工学分野などの研究において、観測／実験を直接行って結果を求めることが不可能な場合がある：
 - 時間がかかりすぎる (例: 生態系の変化, cosmology simulation)
 - コストがかかりすぎる (例: 自動車, 車両等の外形設計)
 - 実験が不可能である (例: 汚染物質の拡散)
- このような場合, 研究対象のシステムを近似的に表現するモデルを作成し, そのモデルに対して観測／実験を行い特性を調べることをシミュレーションとよぶ
- モデルは物理模型を作る直接的な手法もあるが、計算機上に構築して特性を調べることが多く、この手法は計算機シミュレーションとよばれる
- 計算機上でモンテカルロ法を用いて、シミュレーションを行うことはモンテカルロ・シミュレーションとよばれる
 - [注] モンテカルロ法:
 - 乱数を基礎としてランダム・サンプリングを行い問題を解く手法
 - 手法の要点: [Appendix 1 参照](#)

放射線シミュレーションとは？

■ 放射線とは？

- 物質と電磁相互作用、強い相互作用、弱い相互作用をする粒子：

[例] 素粒子、原子核、イオン、など

- この講義では放射線と粒子とは同義語

■ 放射線(粒子)シミュレーションとは？

- 粒子が物質内を通過する際に生じる相互作用をシミュレーションすること
- 粒子は(基本的に)物質を電離させるエネルギー以上(eV以上)を持つものが対象
[注] 例外として可視光を扱えるものもある (例: Geant4)
- シミュレーションの基本手法は計算機によるモンテカルロ法
- シミュレーションに際して粒子を物質中を動かすことを輸送とよび、以下は全て同義語：

- 放射線輸送 : radiation transport
- 粒子輸送 : particle transport
- 粒子トラッキング : particle tracking

本講義ではこれらの言葉を
区別せずに使う

放射線シミュレーションとモンテカルロ法

■ 放射線シミュレーションで使われるモンテカルロ手法

- 放射線シミュレーション手法は大きく分けて以下の二つのがある
 - 手法 1: ボルツマン方程式を解くことで放射線が物質に与える影響をシミュレートする
 - 手法 2: 放射線が物質中を進行する過程で生じる相互作用を逐次シミュレートする
- この違いを知っておくことは、さまざまな放射線シミュレーション・パッケージから最適なものを選択する際の手がかりとなる

■ 手法1: ボルツマン方程式を解く

- 放射線シミュレーションは歴史的には放射線遮蔽分野への応用として発展してきた技術
- この分野では、ボルツマン方程式を解析的、あるいはモンテカルロ法で解くことで放射線遮蔽計算を行う
 - 手法の概要: [Appendix 2 参照](#)

■ 手法 2: 放射線が物質中を進行する過程で生じる相互作用を逐次シミュレートする

- 主に高エネルギー物理学分野で使用する粒子検出器のシミュレーション手法として発展してきた
- この手法ではシミュレーションの対象となる粒子(放射線)を一つ一つを、発生点から停止点まで物質との相互作用を考慮しながら輸送する
- この手法の重要な点は、一つ一つの粒子に対する検出器の応答を個別にシミュレートできること

HEPでの検出器とシミュレーション手法

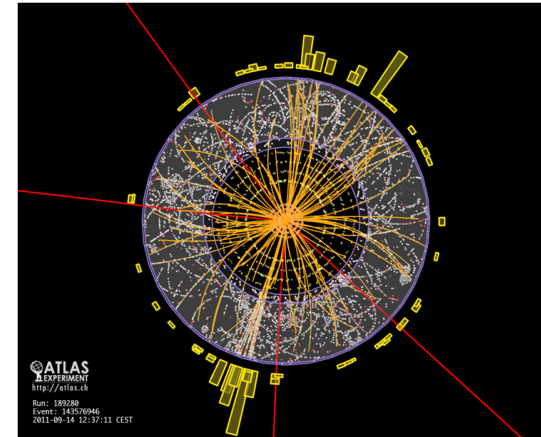
■ 飛跡検出器シミュレーション

- 飛跡検出器では単独粒子の飛跡観測が可能
 - ← シミュレーションでは単独粒子の生成から消滅までを相互作用を考慮した輸送が必要
- 手法2のシミュレーションが必要

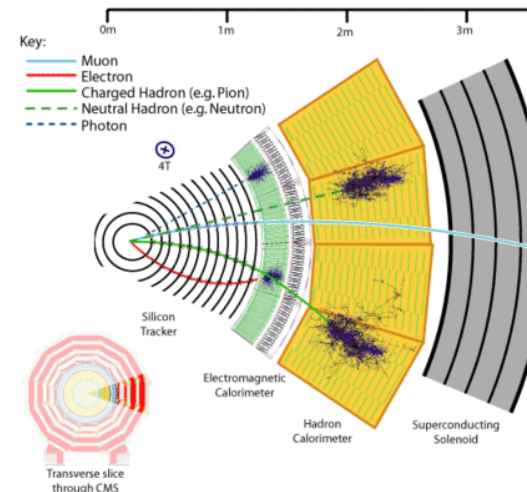
■ カロリメータ検出器シミュレーション

- カロリメータは粒子が物質に付与するエネルギーから粒子のエネルギーを観測
 - ← シミュレーションでは粒子が物質に付与するエネルギーが計算できれば良い
- 手法1と手法2のいずれも使用可能

Atlas/LHC実験 飛跡検出器



CMS/LHC実験 カロリメータ



物質視点と粒子視点

■ 放射線シミュレーションを行う上での手法1と手法2の相違

● 手法1 = 物質視点シミュレーション

- 歴史的に放射線遮蔽分野への応用から発展してきた手法
- すなわち、物質が通過放射線のエネルギーをどれだけ吸収するかを計算
 - ← 概念的に物質視点のシミュレーション
- 手法の特徴としては、物質を通過する放射線束全体が物質に与える影響をシミュレーションする

● 手法2 = 粒子視点シミュレーション

- 歴史的に素粒子相互作用を研究対象とする分野への応用として発展してきた手法
- 単独の粒子が物質中を通過する過程で、粒子の物理量がどのように変化するかを計算
- すなわち、一つの粒子が物質を通過する過程を逐次トラッキングしていく
 - ← 概念的に粒子視点のシミュレーション
- 手法の特徴としては、手法1と異なり単独粒子に注目して、その振る舞いをシミュレーションする

■ 手法1と手法2でのモンテカルロ法のモデルにつて

- 二つのシミュレーション手法は、ボルツマン方程式を出発点するかどうかで、基本的に異なる
- しかし、手法1でも手法2でもモデルの対象となる粒子と物質の物理相互作用は当然同じである
- Geant4は手法2に基づいたシミュレーターである

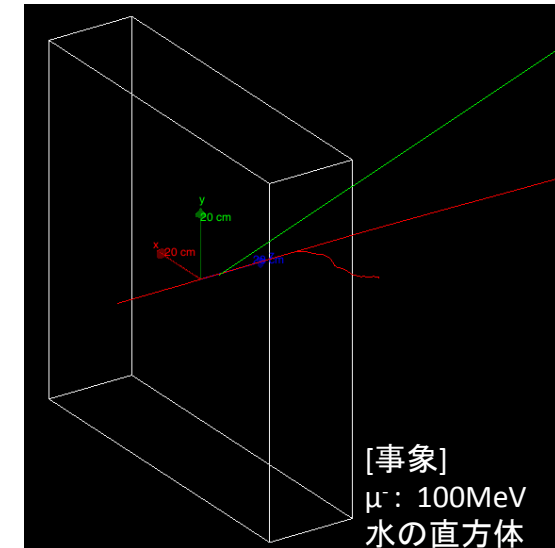
[注] 以下の講義はGeant4が採用している手法2を念頭にして進める

粒子輸送と物理相互作用の記述

粒子輸送の概要

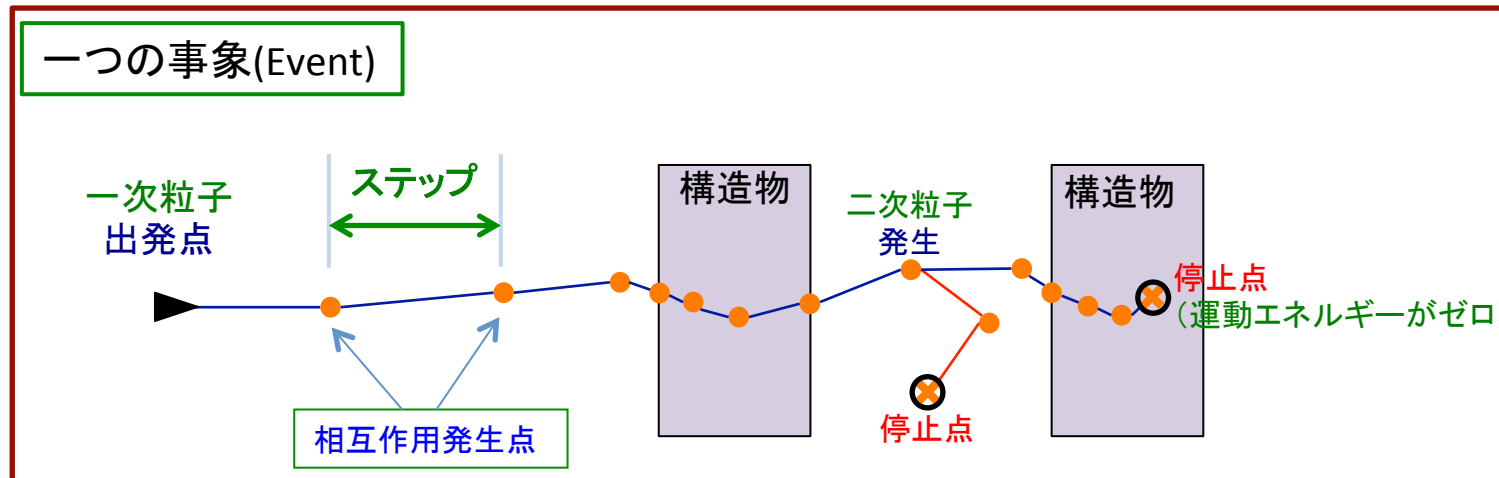
- 粒子輸送は粒子(e^\pm, p, n, π, \dots)の自然界での振る舞い(粒子と物質の相互作用)を逐次シミュレート(模倣)することで行う
 - シミュレーションでは粒子と物質相互作用の様々なモデルが用いられる
 - 輸送において生じる相互作用は、その反応断面積をもとに確率的に決定
 - 輸送は粒子進路に沿った微少な空間間隔(ステップ)ごとに進める
 - ステップ各点での粒子の物理状態(時間、場所、運動量、スピン、など)を計算する
- 粒子輸送は粒子が相互作用で消失、あるいはエネルギー損失で停止した時点で終了
- 初期粒子(primary particle)と二次粒子(secondary particles)
 - シミュレーション開始時に存在する粒子を初期粒子とよぶ
 - シミュレーション進行過程で発生する粒子を二次粒子とよぶ
- シミュレーションは事象(event)単位で行われる
 - 事象とは初期粒子と二次粒子が起こす物質と相互作用の全体をさす
 - 事象内の全粒子の輸送終了で一つの事象シミュレーションが完了

← シミュレーションは事象を単位として進行する



粒子輸送の基本的なアルゴリズムと用語

- 粒子はその進路(track)に沿ったステップ(step)単位でトラッキング (tracking)される
 - ← trackは一つのステップが進行したのちの粒子の物理状態(場所、運動量、など)の情報をすべて保持
- 粒子が何らかの物理相互作用を起こした時点で一つのステップは終了
- 粒子を一つのステップ時空間移動(transportation)させることも物理相互作用の一つとして扱う
- 粒子が構造物の任意の境界面に達した時、その到達点で一つのステップは必ず終了
- 粒子は運動エネルギーがゼロになれば停止し、トラッキングは完了
- trackingで形成される粒子の進路を飛跡(trajecory)とよぶ
 - ← 飛跡検出器や泡箱で視覚化できる粒子飛跡を思い出せば良い



物理相互作用の記述

■ アナログ手法による記述

- 粒子輸送において生じる物理相互作用を逐次、自然を模倣してシミュレーション
- この手法で記述できる相互作用過程例:

- 電磁相互作用過程
- ハドロン相互作用過程
- 光子／レプトンとハドロン相互作用過程
- 光学光子過程
- 粒子崩壊過程、 その他

[注]

- アナログ／非アナログという言葉は歴史的に放線遮蔽分野で使われてきたもの
- ここでは、意味を拡張して用いる

[注] これらの過程記述には、理論、実験結果の数値表現、経験則等に基づく多様なモデルを用いる

← 広範なエネルギー領域の相互作用を扱うため、統一的な物理モデルで記述する事は不可能

■ 非アナログ手法による記述

- アナログ手法では計算時間の制約で扱えない相互作用のシミュレーション
- 人為的(自然界に存在しない)相互作用のシミュレーション
- この手法で記述できる相互作用過程例:
 - 電離相互作用、多重散乱、など (次のスライド参照)
 - 粒子シャワーのパラメータ表現
 - 分散低減化法、 その他

■ Geant4ではアナログ手法がと非アナログ手法が使われる

アナログ手法の限界

■ 電磁相互作用におけるエネルギー損失の扱いの特殊性

- 荷電粒子の電磁相互作用におけるエネルギー損失は赤外発散を伴う過程
- 構成物質と荷電粒子が起こす電磁散乱を”single scattering”として一回ごとにシミュレートすることは現実的に不可能

➤ アナログ手法を忠実に行えば計算時間が発散する

- これは電磁相互作用理論の古典的問題でもある

➤ 荷電粒子と多数の原子の電磁場との非弾性散乱をどう計算するか

$$-\frac{dE}{dx} = 4\pi N_e r_0^2 \frac{z^2}{\beta^2} \left(\ln \frac{2m_e c^2 \beta^2 \gamma^2}{I} - \frac{\beta^2}{2} \left(1 - \frac{T_c}{T_{\max}} \right) - \frac{C}{Z} + \frac{G - \delta - F}{2} + zL_1 + z^2 L_2 \right) \quad \text{Bethe-Blochの式(補正を含む)}$$

➤ エネルギー損失過程は多数の電磁相互作用のをひとまとめた過程として記述

- Bethe-Bloch式のように多数の散乱をまとめて扱う手法は”condensed simulation”とよばれる

➤ 非アナログ手法

■ 電磁相互作用における多重散乱の扱いの特殊性

- 多重散乱過程の記述においても、エネルギー損失過程の扱いと同様のことが当てはまる
- 多重散乱過程を”single scattering”として一回ごとにシミュレートすることは現実的に不可能
- Geant4では標準としてUrbanモデルとよばれる”condensed simulation”が使われる

➤ 非アナログ手法

Geant4における粒子輸送と相互作用の記述

Geant4の物理相互作用過程の分類： プログラム実装からの観点

■ 離散過程 (Discrete Processes)

- 一つの相互作用が生じるたびにを、それを独立にシミュレートする
- アナログ手法を用いた記述
- Geant4の大多数の相互作用はこの手法で記述
- 相互作用例：
 - 電磁相互作用過程（エネルギー損失、多重散乱などを除く）
 - ハドロン相互作用過程
 - 光子／レプトンとハドロン相互作用過程

■ 連続過程 (Continuous Processes)

- 一つ相互作用を独立にシミュレートするのではなく、多数の相互作用をひとまとめにして記述
- 非アナログ手法を用いた記述（“condensed simulation”手法）
- 相互作用例：
 - 電磁相互作用でのエネルギー損失の過程
 - 電磁相互作用での多重散乱の過程
 - チェレンコフ放射過程

■ 静止過程 (Stop Processes)

- 粒子の輸送が終了した後に生じる相互作用の記述
 - 粒子崩壊過程
 - 粒子消滅過程

どの相互作用が生じるか？

■ 粒子輸送の開始点で粒子の運命を決定

- 粒子が持つ全離散過程に対して、それぞれの相互作用の発生点までの距離を乱数で決定
 - 指数分布($e^{-\sigma x}$)サンプリングを用いる (σ : 全断面積、 x : 距離)
 - ← サンプリング手法の概要: [Appendix 3-1,2,3 参照](#)
 - 発生点までの距離はNumber of Mean Free Path (NMFP)を単位として決定
 - ← NMFPを単位とすれば粒子の輸送距離は物質の種類に無関係に計算可能
 - ← NMFPとは: [Appendix 4 参照](#)

■ 続いて、粒子の現在位置で以下の計算を行う

- NMFPを物質情報(密度、断面積、など)を用い、それぞれの発生点の空間距離に変換
- 最短距離にある物質境界面までの距離を計算
 - 粒子の物質境界との交差は相互作用として扱う

■ 上記で計算した距離で最短距離を粒子輸送のステップとする

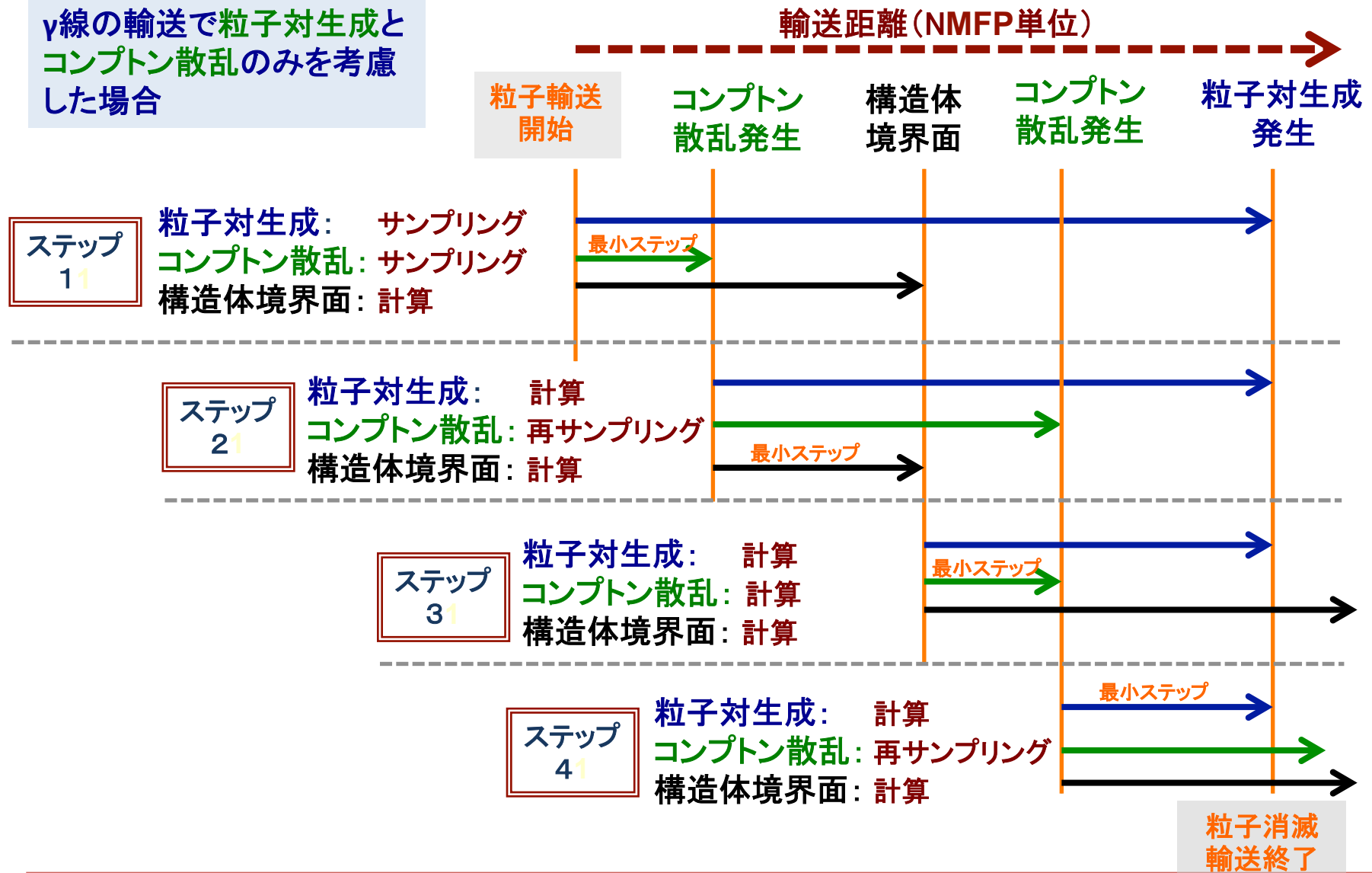
- 粒子を決定されたステップだけ輸送する
- ステップを決定した相互作用を生じさせる

■ 一つのステップ輸送を終了後に何をするか

- 生じた相互作用で親粒子が消失した場合、粒子輸送はそこで完了
- 生じた相互作用で親粒子が消失していない場合、改めてNMFPのサンプリング計算を行う
 - 構造体の境界面がステップを決めた場合は不必要
- 他の相互作用については、もとのNMFPから直前のステップ長に対応するNMFPを差し引いたものが新しいNMFPとなる

どの相互作用が生じるか - 続き

γ 線の輸送で粒子対生成と
コンプトン散乱のみを考慮
した場合



Geant4のステップ決定アルゴリズムのまとめ

■ アルゴリズムの特徴

- 粒子輸送におけるステップは基本的にGeant4が内部的に自動決定
 - ユーザは基本的にはステップを気にする必要はない
- ユーザが積極的にステップ長をコントロールしたい場合その手段が用意されている
 - G4StepLimiter過程を使うことで可能（ユーザー・リミット）
 - 薄い物質の中を細かくステップを切って粒子輸送したい場合などに使う
 - ステップ数を多数設定すると、計算パフォーマンスが劣化するので注意が必要

■ ステップの自動決定アルゴリズム

- 離散過程が主要なステップ決定の要素（前のスライド参照）
- 連続過程は積極的にステップに関与はしない
 - 基本的には離散過程が決定したステップの長さに対してその過程の寄与を計算
 - ❖ ステップ内でのエネルギー損失計算
 - ❖ ステップ内での多重散乱の計算
- ただし、以下の場合、連続過程が優先的にステップ決定をする
 - エネルギー損失過程： 離散過程が決めたステップ内でのエネルギー損失を考慮すると、各反応断面積が大きく変化してしまう
 - 多重散乱過程： 離散過程が決めたステップ内で多重散乱を計算すると、物質境界面での影響を精度よく見積もれない

粒子輸送終了とエネルギー損失による粒子の停止アルゴリズム

■ シミュレーションにおいて粒子の輸送が終了するのは以下の場合

1. 粒子がエネルギー損失で停止
2. 粒子が物質と相互作用を起こして消滅
3. 粒子が定義された空間(ワールド)の果てに来た時
4. 粒子がシミュレーション条件として人為的に設定した輸送停止条件を満足した時

← 上記の1番目以外は終了条件は単純である

■ エネルギー損失による粒子の停止アルゴリズム

● Geant4以外の多くの粒子輸送プログラムでは以下の手法を採用

- 輸送粒子の運動エネルギーにカット・オフ値を設定、その閾値で粒子輸送を停止
- カットを導入することで粒子輸送処理時間の増大を避ける
- この手法は停止点の位置情報、物質へのエネルギー付与に誤差が発生

● Geant4では輸送粒子の運動エネルギーが正しくゼロになるまで輸送する

- 輸送粒子の運動エネルギーにカット・オフ値は存在しない
- その代わり2次粒子の生成に閾値を設定することで粒子輸送処理時間の増大を避ける

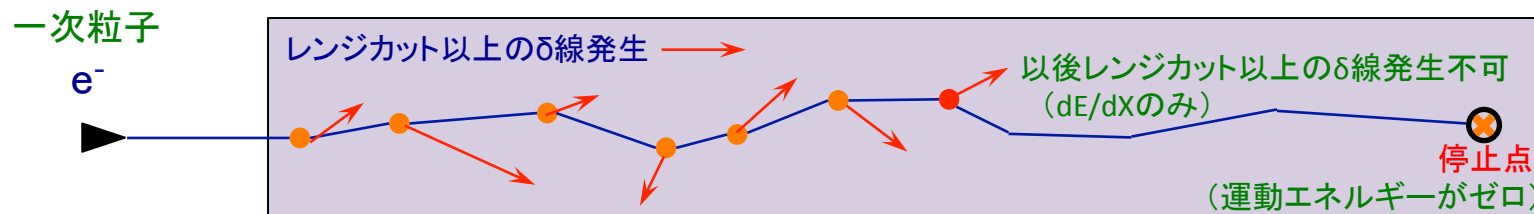
← 次のスライド参照

- この手法では停止点の位置情報、物質へのエネルギー付与に誤差がない

2次粒子生成の閾値

- Geant4では粒子の輸送を終了させるエネルギー・カットは存在しない
 - すなわち、粒子はその運動エネルギーがゼロになるまで輸送される
- 粒子が生成できる2次粒子に対して飛程カット(range: 長さ)を設定
 - カット値以下の飛程しか持たない2次粒子は、輸送されない
 - 発生場所で全エネルギーを放出

[注] Geant4でいうカットは、粒子の輸送停止エネルギーではなく、粒子が作る二次粒子が走る飛程(range)への制限であることを覚えておくことが重要
- 粒子がエネルギー損失をして、飛程カットを超える二次粒子が発生しなくなると、粒子輸送は以下のように進む:
 - 離散過程としての二次粒子生成はない
 - 粒子は連続過程のエネルギー損失のみを考慮しながら、運動エネルギーがゼロになるまで輸送する



なぜGeant4で飛程カット(Range Cut)が採用されているか？

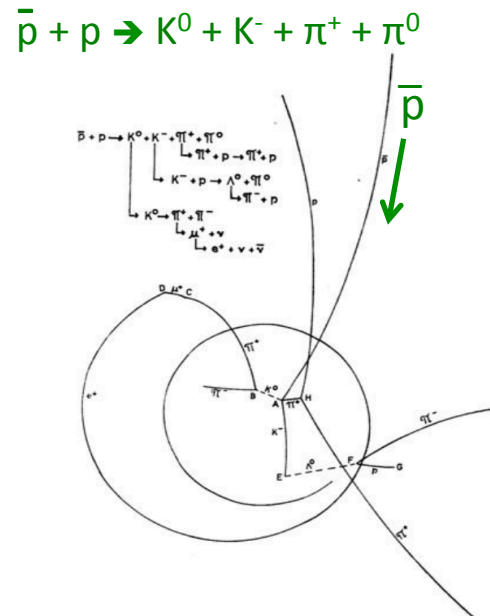
- ユーザがミュレーションで二次粒子生成の閾値を設定する時、その判断基準として
便利な物理量は粒子のエネルギーではなく、粒子の飛程という距離情報
 - 粒子のエネルギー情報で閾値を決めようとすると、シミュレーションを構成する物体の
様々な密度の考慮が必要。しかし、距離情報を判断基準にすればこの必要はない
 - 飛跡検出タイプの測定器では、有感空間内で生成される粒子の飛程が測定器の空間分
解(空間情報)より小さい場合、粒子輸送することは意味がない: 距離情報が重要
 - カロリメータタイプの測定器では、有感空間内で生成される粒子の飛程がその中に収ま
るか、それとも出て行くかという距離情報が問題
- [注] カロリメータではエネルギー分解能が問題であるから、一見、エネルギー情報が
閾値設定の判断基準として考えやすいと思えるが、Geant4はエネルギーがゼロにな
るまで粒子は輸送するので、エネルギー情報で判断基準する必要はない
- 一般的に、密度が大きく異なる二つの物体の境界近傍での粒子輸送に於いては、大きな
密度で生成された粒子がその物体内で静止するのか、それとも密度の小さい物体へ出て
行くのかという空間情報が重要

運動エネルギーがゼロになるまで粒子輸送することの必要性

■ 静止粒子の吸収過程

- μ 、 π 、 K 、反陽子などは静止後に吸収反応を起こす
- これらの反応シミュレーションでは粒子の停止位置を正確に再現できなければならない
 - ← ハドロン・シャワーのシミュレーションに重要（1970年代では吸収過程自体が重要な研究テーマであった）
- 以下は反陽子と陽子の消滅反応の泡箱写真

Example of antiproton annihilation at rest in a liquid hydrogen bubble chamber



[Ref] L. DiLella Lecture: CERN Summer School 2004

- 停止位置を正確に再現するには粒子をゼロエネルギーまで正しく輸送する必要がある
 - ← この要件はGeant4設計の時点で必ず実現しなければならない機能と設定された

最後に

放射線シミュレーションのモデルと知識データベース

■ 放射線シミュレーションで使われるモデル

- 基本的に自然界での粒子が物質を通過する相互作用過程を逐次、模倣するモデル
 - このモデルは前述の二種類のモンテカルロ法に共通して使われる
- 広範囲のエネルギー領域にわたる粒子と物質の相互作用を表現できなければならない
- 現在の物理学の知識では、この相互作用を統一的な理論とし記述はできない
 - ➔ 統一モデルではなく、以下のような様々なモデルを合体した記述となる
 - 粒子と物質の相互作用理論に基づく数式表現
 - 現象論に基づく数式表現
 - 実験データに基づく数値表現

[注] 通常、それぞれの表現は特定の相互作用に対してで、適用のエネルギー範囲が存在する

■ 知識データベースとしての放射線シミュレーション

- 放射線シミュレーションのモデル構築には素粒子／原子核／原子物理学などが現在までに蓄積した研究・実験の総合知識が必要
 - ➔ 放射線シミュレーションは知識データベース
- 放射線シミュレーションを知識データベースと捉えることにより、以下のような新たな知見が得られた場合、データベースに加えることで、知識を早期に有効に利用できる
 - ある相互作用についての新たな理論
 - ある相互作用の新たな実験データ

Appendix

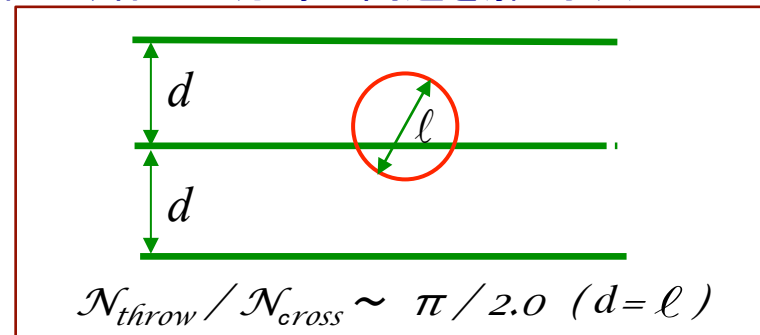
Appendix 1: モンテカルロ法とは？

[戻る](#)

■ モンテカルロ法とは何か

- 乱数を基礎としてランダム・サンプリングを行い、様々な分野の問題を解く手法

- モンテカルロ法の古典的な応用は
Buffon's Needle: (右図参照)



■ モンテカルロ法が対象とする問題

- 大きく分けて次の二つがある

- 決定論的な問題

例: 定積分を求める, 偏微分方程式で表現できる力学系の挙動解析, 等.

- 確率的な問題

例: 気体中の粒子間衝突等のランダム要素を含む系の解析

[注] モンテカルロ法はランダム事象だけでなく厳密解がある問題にも応用できることに注意

■ モンテカルロ・シミュレーション手法の歴史

- 基本手法はStanislaw Ulamにより提案 (核兵器開発に絡む中性子の拡散問題への応用、1947)
- John von Neumannにより計算機上(Eniac/Los Alamos)でこの手法が応用された

[Ref] Eckhardt, Roger (1987). "Stan Ulam, John von Neumann, and the Monte Carlo method". Los Alamos Science, No 15
(<http://permalink.lanl.gov/object/tr?what=info:lanl-repo/lareport/LA-UR-88-9068>)

Appendix 2: 放射線遮蔽計算とボルツマン方程式

[戻る](#)

■ 放射線遮蔽計算でのボルツマン方程式応用

[参照] 小佐古、笹本 「放射線遮蔽」 オーム社

- 放射線遮蔽計算で使われるボルツマン方程式は、以下の'phase space'での微小体積内での粒子発生・消滅とエネルギーの保存から導出される
- 以下で示す方程式は定常状態(時間依存なし)の放射線環境での放射線の評価のためのもの
 - 個々の粒子の運動を計算するのではなく、多数の粒子の全体としての統計的な振る舞いを計算する
- 計算手法の概要:
 - 6次元'phase space' $P(r, \Omega, E)$ での放射線束分布を以下の時間に依存しないボルツマン方程式(積分型)から求める

$$\phi(P) = \int K(P' \rightarrow P) \phi(P') dP' + S(P)$$

図解: $\phi(P)$ は P点での放射線束, $K(P' \rightarrow P)$ は P'点とP点での放射線束をつなぐカーネル(プロパゲータ), $S(P)$ は線源からの直接の放射線束, $\phi(P')$ は P'点での放射線束.

$P = P(r, \Omega, E)$: phase space,
r: 空間点(x,y,z) ← 3次元
 Ω : 角度(θ, ϕ) ← 2次元
E: エネルギー ← 1次元

- プロパゲータを解析的、あるいはモンテカルロ法で求めることで対象とする系の放射線評価
← 通常、ターリーとよばれる結果集計機能が用意されており、これを用いて評価を行う

[注] 時間変化を考慮したい場合は、時間依存のあるボルツマン方程式を解くことになる

Appendix 3-1: モンテカルロ法での相互作用の発生アルゴリズム

■ 指数的減衰

σ : 粒子が物質の原子と特定の相互作用を起こす(ミクロ)断面積

N : 物質中の単位体積あたりの原子(ターゲット)の数

とすると、物質単位長さあたりの相互作用が生じる確率 w は

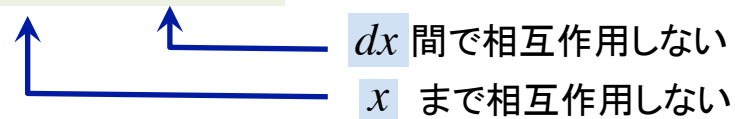
$$w = N \cdot \sigma$$

$$w \text{ の次元} = [L^{-1}]$$

$P(x)$: 粒子が相互作用を起こさずに x だけ輸送される確率 (確率分布関数)

とすると、さらに dx 輸送されても、相互作用が生じない確率は

$$P(x + dx) = P(x)(1 - w dx)$$



上式を積分すると

$$P(x) = \exp(-w x)$$

$$P(0) = 1$$

すなわち、確率分布関数は指数的減衰となる

参考文献: W.R.Leo,
"Techniques for Nuclear and
Particle Physics Experiments"

Appendix 3-2: モンテカルロ法での相互作用の発生アルゴリズム

■ 相互作用の発生確率

$P_{\text{int}}(x)$: x から $x + dx$ の間で粒子が相互作用を起こす確率 (確率密度関数: PDF)
とすると、

$$P_{\text{int}}(x)dx = P(x)w dx$$

上式を積分するとある区間で粒子が相互作用を起こす確率が得られる

$F_{\text{int}}(x)$: 出発点から x の間で粒子が相互作用を起こす確率 (累積分布関数: CDF)

$$\begin{aligned} F_{\text{int}}(x) &= \int_0^x P_{\text{int}}(x') dx' = \int_0^x P(x')w dx' = \int_0^x w \exp(-wx') dx' \\ &= 1 - \exp(-wx) \end{aligned}$$

■ 逆変換法 (Inverse Transformation Method)

CDF $F_{\text{int}}(x)$ からその逆関数 $F_{\text{int}}^{-1}(\eta)$ を求めるため、 $\eta = 1 - \exp(-wx)$ と置いて、 x で解くと

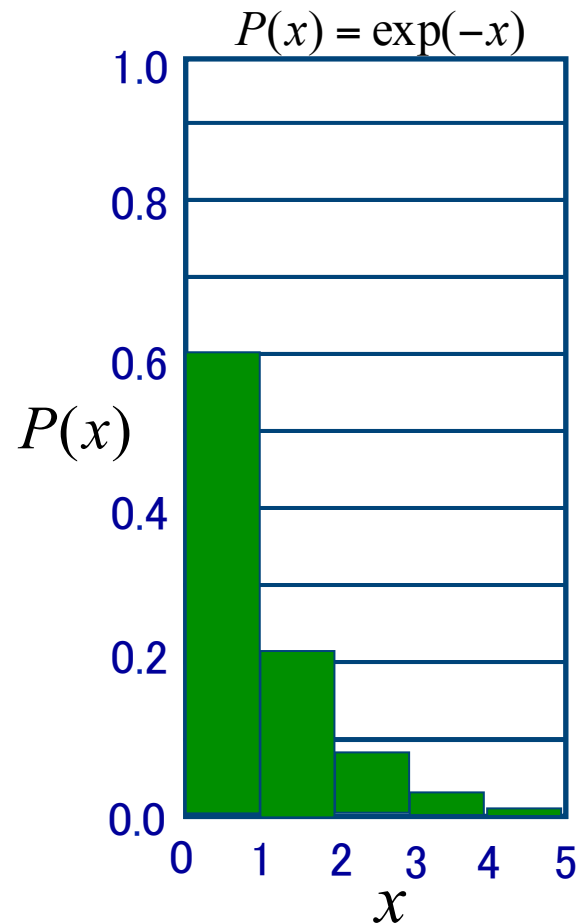
$$x = -\ln(1 - \eta) / w \equiv F_{\text{int}}^{-1}(\eta)$$

逆関数の変数 η に一様乱数 $[0,1]$ 与えると、得られる関数値 x はもとの指数的減衰をする

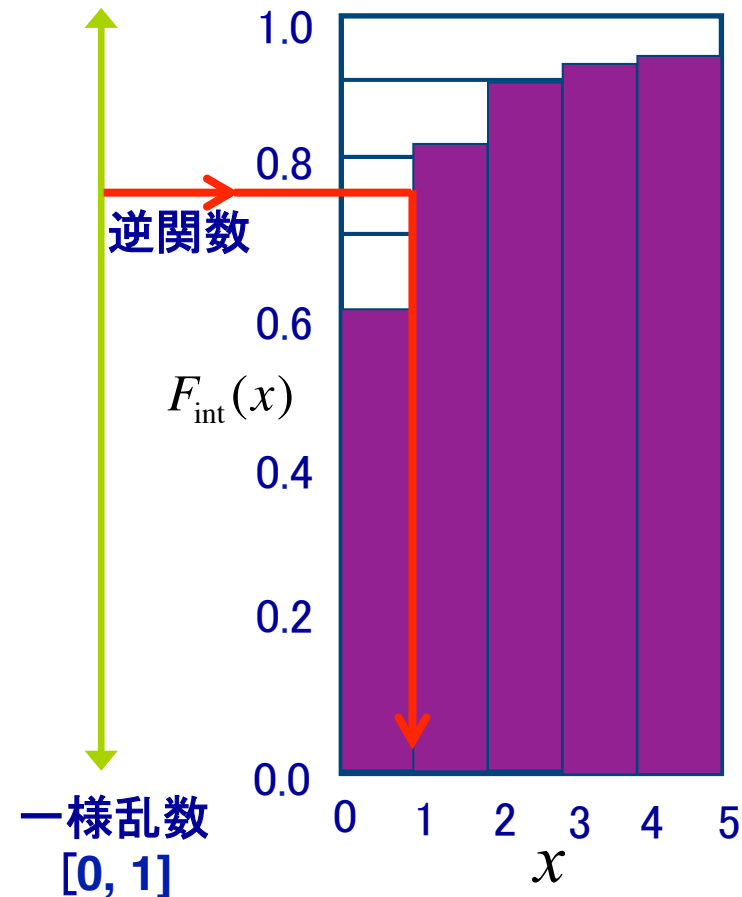
← 次のスライド参照

Appendix 3-3: 逆変換法 (Inverse Transformation Method) [戻る](#)

確率密度関数
Probability Density Function
(PDF)



累積分布関数
Cumulative Distribution Function
(CDF)



Appendix 4: 平均自由行程 (Mean Free Path)

[戻る](#)

■ 相互作用の発生確率異なる物質間の粒子輸送

- Appendix 3の議論では粒子は一種類の物質内を輸送
- 現実的なシミュレーションでは粒子は様々な物質内を輸送
- 相互作用の発生場所を物質の種類に関係なく記述する方法が必要

■ 平均自由行程 (Mean Free Path: λ)

平均自由行程(λ)は粒子が相互作用を起こすまでに輸送される距離で、以下のように定義

$$\lambda \equiv \int_0^{\infty} xP(x)dx \Bigg/ \int_0^{\infty} P(x)dx$$

上式で $P(x) = \exp(-wx)$ とおいて積分すると

$$\lambda = 1/w = 1/N \cdot \sigma$$

λ の次元 = [L]

[注]

Mean Free Path (平均自由行程) と
Interaction Length (相互作用長) は同義

■ 物質に依存しない相互作用発生点の記述

前述の相互作用の発生点 x は、CDFの逆関数 $F_{\text{int}}^{-1}(\eta)$ を使って決めたが、その値は物質に依存

$$x = F_{\text{int}}^{-1}(\eta) = -\ln(1-\eta)/w = -\ln(1-\eta) \cdot \lambda$$

λ, w は物質依存

この式を以下のように変形して、 x を λ の単位で測れば発生点は物質に依存しなくなる

$$x/\lambda = -\ln(1-x)/w$$

x/λ を Number of Mean Free Path (NMFP) とよぶ