

Exercício 03: Monte Carlo

Ana Moreira 54514

Este trabalho foi realizado com o intuito de implementar o método de Monte Carlo para simular o comportamento de fótons em interação com um meio material, utilizando um feixe monocromático e um policromático.

I. EXERCÍCIO 1: FEIXE MONOCROMÁTICO

De modo a estudar a interação de fótons com um meio material, consideramos a lei de atenuação exponencial, dada por:

$$I = I_0 e^{-\mu x} \quad (1)$$

onde I_0 é o número de fótons contidos no feixe inicialmente (consideramos $I_0 = 1$ em todo o trabalho), x a distância que um fóton consegue percorrer no material até interagir, e $\mu = \mu_f + \mu_R + \mu_C$ o coeficiente linear de atenuação total: μ_f o coeficiente devido ao efeito fotoelétrico; μ_R devido à dispersão elástica de Rayleigh e μ_C devido à dispersão inelástica de Compton. O coeficiente linear de atenuação total pode ser escrito como a soma dos diferentes coeficientes de atenuação uma vez que estes são independentes uns dos outros. Estas interações são as únicas consideradas porque são as interações relevantes para fótons de energia da ordem do keV.

Assim, de modo a implementar métodos de Monte Carlo, considerou-se um feixe monocromático de energia 1 keV a atravessar um bloco de alumínio de espessura infinita com coeficientes de atenuação dados por: $\mu_f = 3.19 \times 10^3 \text{ cm}^{-1}$, $\mu_R = 6.09 \text{ cm}^{-1}$ e $\mu_C = 3.83 \times 10^{-2} \text{ cm}^{-1}$.

Os valores de x podem ser obtidos pelo método da transformação utilizando a seguinte equação:

$$x_i = -\frac{1}{\mu} \log(1 - \epsilon) \quad (2)$$

onde ϵ é um número aleatório entre 0 e 1, gerado através da função `drand48()`. Podemos utilizar esta equação uma vez que a probabilidade de um fóton interagir depois de percorrer um comprimento x , dada por $p(x)$, é proporcional a $e^{-\mu x}$. Para além desta fórmula, utilizou-se também esta equação que descreve a fração de fótons que sobrevivem sem interagir ao fim de um comprimento x ($\frac{I}{I_0}$):

$$\frac{I}{I_0} = e^{-\mu x} \leftrightarrow \ln\left(\frac{I}{I_0}\right) = -\mu x \quad (3)$$

Utilizando 100000 fótons, e calculando valores de x através da equação (2), distribuindo os números obtidos em 10000 intervalos de comprimento 10^{-8} cm , produziu-se o gráfico do logaritmo da intensidade do feixe (obtido pela função (3)) em função do valor de x , juntamente

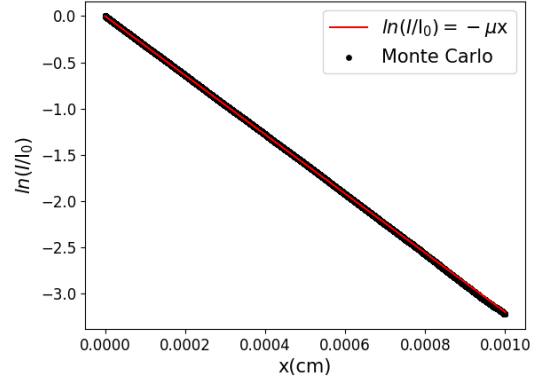


Figura 1. Gráfico do logaritmo da fração de fótons que não interagem no fim de um determinado intervalo em função de x , juntamente com a previsão analítica (dada pela equação da legenda com $\mu = 3196.1283 \text{ cm}^{-1}$) para um feixe monocromático de energia 1 keV. 100000 fótons simulados, divididos em 10000 intervalos de comprimento 10^{-8} cm . A curva obtida analiticamente encontra-se a vermelho e os obtidos por simulação a preto.

com os valores previstos analiticamente (uma linha de declive $-\mu$), gráfico apresentado na Figura 1.

De seguida, calculou-se a espessura de material necessário para reduzir a intensidade do feixe a metade do seu valor inicial, que corresponde à situação em que $\frac{I}{I_0} = 0.5$. Analiticamente, o valor obtido é de $x = 2.16873 \times 10^{-4} \text{ cm}$. O valor obtido com o método foi de $x = 2.165 \times 10^{-4} \text{ cm}$, com incerteza de $1 \times 10^{-7} \text{ cm}$, valor equivalente a um erro de 0.17%. Daqui conclui-se que o valor obtido pelo método é muito próximo do valor analítico. Destes valores e da Figura 1 conclui-se que a implementação do método de Monte Carlo resultou em boas aproximações da interação de fótons com o material para um feixe monocromático.

II. EXERCÍCIO 2: FEIXE POLICROMÁTICO (TUBO DE RAIOS X)

Como para um feixe policromático os fótons tem diferentes valores de energia, não podemos utilizar o método da transformação. Mas como temos os valores discretos

da energia, juntamente com as frequências que estas energias são medidas (fornecidos no ficheiro "110kV.spec"), podemos calcular a probabilidade de cada valor de energia.

Utilizou-se um feixe policromático, com energias entre 11 keV e 110 keV, com incrementos de 1 keV, e escolheu-se como material o alumínio, com densidade $\rho = 2.69890 \text{ g/cm}^3$, cujos valores do coeficiente de atenuação total para cada valor de energia (convertidas para MeV) foram retirados do site do NIST (*National Institute of Standards and Technology*).

Para obter os valores de x e $p(x)$, primeiro ordenamos por ordem crescente as probabilidades associadas a cada valor de energia, e dividimo-las em intervalos do tipo $(p_0, p_0 + p_1, p_0 + p_1 + p_2, \dots)$ até a soma ser 1. Logo, ao gerar um número aleatório, este terá probabilidade p_2 de estar no intervalo $p_0 + p_1 + p_2$. Consequentemente, a sua energia será a associada à probabilidade p_2 . Desde valor de energia, calculamos x e $p(x)$ a partir dos coeficientes de atenuação já obtidos.

Tal como no exercício 3.1, calculou-se a espessura de material necessário para reduzir a intensidade do feixe a metade do valor inicial, obtendo-se, para $\frac{I}{I_0} = 0.4983$ $x = 5.103 \times 10^{-5} \text{ cm}$.

Utilizando 10000 fotões, obteve-se mais uma vez o gráfico do logaritmo da fração de fotões que não inte-

ragiram com o meio em função do valor de x a partir do processo já descrito no exercício 3.1, gráfico presente na Figura 2. Devido ao comportamento linear dos pontos obtidos, podemos concluir que o método de Monte Carlo deu-nos uma boa estimativa do coeficiente de atenuação linear do alumínio.

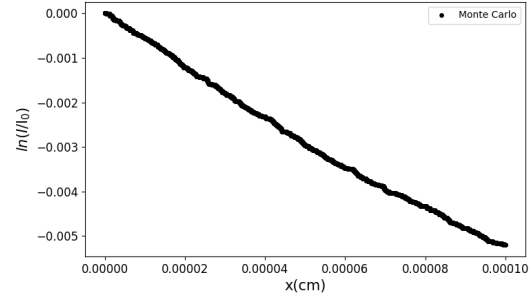


Figura 2. Gráfico do logaritmo da fração de fotões que não interagem no fim de um determinado intervalo em função de x , para um feixe policromático com energias entre keV e keV. 100000 fotões simulados, divididos em 10000 intervalos de comprimento 10^{-8} cm .