

# 몬테카를로 입자 수송에서의 물리적 상호작용 거리 결정 메커니즘

Dr. Jiyoung CHOI  
CPNR, Chonnam National University

December 31, 2025

## Abstract

본 문서는 몬테카를로 시뮬레이션(Geant4 등)에서 입자의 이동 거리가 결정되는 확률론적 과정과, 기하학적 경계 조건이 이에 미치는 영향을 수식적으로 기술한다. 비어-램버트 법칙에 기반한 이론적 배경부터 역변환 샘플링을 통한 수치적 구현, 그리고 기하학적 경계와의 경쟁 로직을 다룬다.

## 1 이론적 배경: 생존 확률과 반응 단면적 (Theoretical Basis)

입자가 매질 내에서 거리  $x$ 만큼 이동하는 동안 상호작용하지 않고 생존할 확률  $P_{surv}(x)$ 는 비어-램버트 법칙(Beer-Lambert Law)에 따라 거리의 지수함수로 감소한다.

$$P_{surv}(x) = \exp\left(-\int_0^x \Sigma_{total}(s) ds\right) \approx e^{-\Sigma_{total} \cdot x} \quad (1)$$

여기서 사용된 변수의 정의는 다음과 같다.

- $\Sigma_{total}$ : 매질의 거시적 총 반응 단면적 (Macroscopic Total Cross-section,  $[L^{-1}]$ )
- $\lambda = 1/\Sigma_{total}$ : 평균 자유 행로 (Mean Free Path)

따라서, 입자가 거리  $x$ 와  $x + dx$  사이에서 첫 번째 상호작용을 일으킬 확률 밀도 함수(PDF)  $f(x)$ 는 다음과 같이 유도된다.

$$f(x) = \Sigma_{total} e^{-\Sigma_{total} \cdot x} \quad (2)$$

## 2 수치적 구현: 역변환 샘플링 (Inverse Transform Sampling)

Geant4와 같은 몬테카를로 코드에서는 난수(Random Number)를 이용하여 위 확률 분포를 따르는 물리적 거리  $L_{phys}$ 를 결정한다. 이를 위해 역변환 샘플링 기법이 사용된다.

### 샘플링 절차 (Sampling Procedure)

1. 구간  $(0, 1]$ 의 균일 분포(Uniform Distribution)를 따르는 난수  $\xi$ 를 생성한다.
2. 누적 분포 함수(CDF)  $F(x)$ 를 난수  $\xi$ 와 등치시킨다.

$$F(L_{phys}) = \int_0^{L_{phys}} \Sigma_{total} e^{-\Sigma_{total}x} dx = 1 - e^{-\Sigma_{total}L_{phys}} = \xi \quad (3)$$

3. 위 식을  $L_{phys}$ 에 대해 정리하여 물리적 상호작용 거리를 도출한다. (통계적으로  $1 - \xi$  와  $\xi$ 는 동일한 분포를 가지므로 단순화 가능하다.)

$$\therefore L_{phys} = -\frac{1}{\Sigma_{total}} \ln(\xi) = -\lambda \ln(\xi) \quad (4)$$

## 3 스텝 결정 로직: 기하학과의 경쟁 (Step Definition Logic)

실제 시뮬레이션에서의 최종 이동 거리  $L_{step}$ 은 앞서 샘플링된 물리적 거리( $L_{phys}$ )와 기하학적 경계까지의 거리( $L_{geom}$ ) 간의 경쟁(Competition)을 통해 결정된다.

$$L_{step} = \min(L_{phys}, L_{geom}, L_{user\_limit}, \dots) \quad (5)$$

이 경쟁의 결과에 따라 입자의 상태는 다음과 같이 분기된다.

### Case 1: $L_{phys} < L_{geom}$

입자는  $L_{phys}$  지점에서 멈추고 물리적 반응(PostStepDoIt)을 수행한다. 이 과정에서 광전효과, 캠프턴 산란 등의 이산적(Discrete) 상호작용이 발생한다.

### Case 2: $L_{geom} < L_{phys}$

입자는  $L_{geom}$  지점(경계면)까지 이동한다. 이때 물리적 반응은 보류(Preempted)되며, 해당 스텝의 프로세스는 Transportation으로 정의된다. 이후 입자는 경계면을 통과하여 다음 볼륨으로 진입한다.

### Summary

The proposed interaction point is stochastically sampled based on the total cross-section ( $\Sigma_{tot}$ ), but the actual step is strictly constrained by the shortest distance among physics, geometry, and user limits.

*Reference: Geant4 Physics Reference Manual, Section: Mean Free Path & Cross Section.*