

---

Nikola Petrović

## Monte Karlo simulacija transporta čestica kroz apsorbujuću sredinu

---

*Pprezentovani su rezultati dobijeni u simulaciji transporta čestica u apsorbujućoj sredini. Kompiuterska simulacija nam omogućava da izmerimo verovatnoće da će čestica biti apsorbovana, reflektovana ili transmitovana. Sledeći korak podrazumeva traženje ovih veličina kao funkcija verovatnoće apsorpcije pojedinačne čestice i debljine medijuma, kao i pronalaženje odgovarajućeg modela koji bi precizno opisao ove zavisnosti. Da bi proverili ispravnost modela, teorijski smo dobili vrednosti parametara za ekstremne vrednosti parametra  $a$ . Pokazalo se da zavisnosti koeficijenta refleksije i transmisije odgovaraju eksponencijalno rastućoj, odnosno opadajućoj funkciji što se dobro slaže sa rezultatima simulacije.*

---

### Uvod i definicija problema

Monte Karlo simulacija transporta čestica u različitim sredinama je postala moćna tehnika koja se vrlo često koristi u nauci (Heerermann 1990; Binder and Heerermann 1997). Monte Karlo simulacije omogućuju fizički uvid u fenomene koji se dešavaju, veliku preciznost dobijenih rezultata i jednostavno definisanje komplikovanih uslova. Zahvaljujući velikom naporu u stvaranju brzih računara, ove tehnike postaju sve korisnije.

U ovom radu ćemo predstaviti rezultate dobijene za simulaciju transporta čestica kroz apsorbujuću sredinu. Prvo ćemo da uradimo jednostavni model ove pojave na osnovu koga ćemo da napravimo Monte Karlo simulaciju. Naime, čestice prodiru u apsorbujuću sredinu, za koju ćemo pretpostaviti da ima oblik zida čija je uniformna debljina  $x$ , i u njoj se sudaraju sa česticama tog zida. Čestica koja je prodrila u zid, prilikom sudara, može ili da se odbije (u svim pravcima sa jednakom verovatnoćom i bez gubitaka energije) ili da bude apsorbovana, pri čemu mi pretpostavljamo da je verovatnoća da se čestica apsorbuje prilikom pojedinačnog sudara konstantna i iznosi  $a$ . Ona nastavlja ovakvo kretanje sve dok ne bude apsorbovana, dok se ne odbije (reflektuje) natrag ili dok ne prođe kroz zid (transmituje). Verovatnoće da se čestica apsorbuje, reflektuje ili

---

*Nikola Petrović  
(1980), Beograd, Bul.  
AVNOJ-a 116/41,  
učenik 3. razreda  
Matematičke  
gimnazije u Beogradu*

*MENTOR:  
Dr Aleksandar Belić,  
Institut za fiziku,  
Zemun*

transmituje ćemo od sada zvati, respektivno, koeficijentima apsorpcije, refleksije i transmisije.

Cilj ovog rada je bio da se napravi kompjuterska simulacija koja će da meri ova tri koeficijenta u zavisnosti od verovatnoće apsorpcije  $a$  i debljine zida  $d$ , da se utvrdi zavisnost koeficijenata od ova 2 parametra, to jest da se nađe dobar model koji opisuje ovu zavisnost i da se proveri valjanost dobijenih rezultata i dobijenog modela. Ovim ćemo steći uvid u to kako se proces transmisije čestica kroz apsorbujuću sredinu odvija.

Simulacijom bi dosta dobro opisivali veliki broj pojava. Sredina može biti neki gas, tečnost ili amorfno čvrsto telo, sa obzirom na to da su apsorbujuće mete proizvoljno raspoređene. Čestice čiji transport proučavamo mogu biti fotoni, neutroni, hemijski radikali, antičestice ili neki drugi tipovi neutralnih čestica. Simulacija može da se proširi dodavanjem električnog polja, da bi se i naelektrisane čestice mogle analizirati, ili dodavanjem sudara u kojima se nove čestice stvaraju i praćenjem tih čestica.

## Karakteristike kompjuterskog koda

U kompjuterskom programu mi puštamo čestice jednu po jednu. One se kreću pravolinijski dok se ne sudare sa česticom iz apsorbujuće sredine. Dimenzije su u jedinicama srednjeg slobodnog puta između 2 sudara. Slučajnim brojevima se određuje položaj sledećeg sudara i da li se čestica pri tom sudaru apsorbuje. Verovatnoća da se čestica apsorbuje pri pojedinačnom sudaru je  $a$ .

Pozicija čestice se određuje koristeći dva slučajna broja. Prvim slučajnim brojem određujemo rastojanje koje je čestica putovala (u jedinicama srednjeg slobodnog puta). Gustina verovatnoće za ovaj slučajan broj opada eksponencijalno. Drugi slučajni broj iz intervala  $(-1,1)$  određuje odnos dužine projekcije na  $X$ -osu i dužinje putanje (tj. kosinus ugla koji pravac kretanja čestice zaklapa sa  $X$ -osom). Mi pretpostavljamo da se čestica rasejava izotropno i bez gubitka energije, ali se to može modifikovati. Kako pretpostavljamo da se čestica odbija u proizvoljnom smeru sa podjednakom verovatnoćom, može se pokazati da je gustina verovatnoće za ovaj slučajan broj konstanta na celom intervalu  $(-1,1)$ . Rastojanje koje je čestica prešla na  $X$ -osi je proizvod ova dva broja.

Čestice započinju svoje kretanje na početku zida, krećući se duž  $X$ -ose i nastavljaju svoje kretanje sve dok se ne apsorbuju, ne reflektuju nazad, ili ne prođu kroz zid (apsorbujuću sredinu). Nakon ovoga postupak ponavljamo sa sledećom česticom. Dovoljan broj čestica se pušta da bi se dobio zadovoljavajući statistički kvalitet rezultata.

Na slici 1 se može videti na koji način broj puštenih čestica utiče na preciznost dobijenih rezultata. Koristili smo i do 30 000 čestica po merenju, što je pokazalo zadovoljavajuću preciznost. Međutim, i mnogo manji

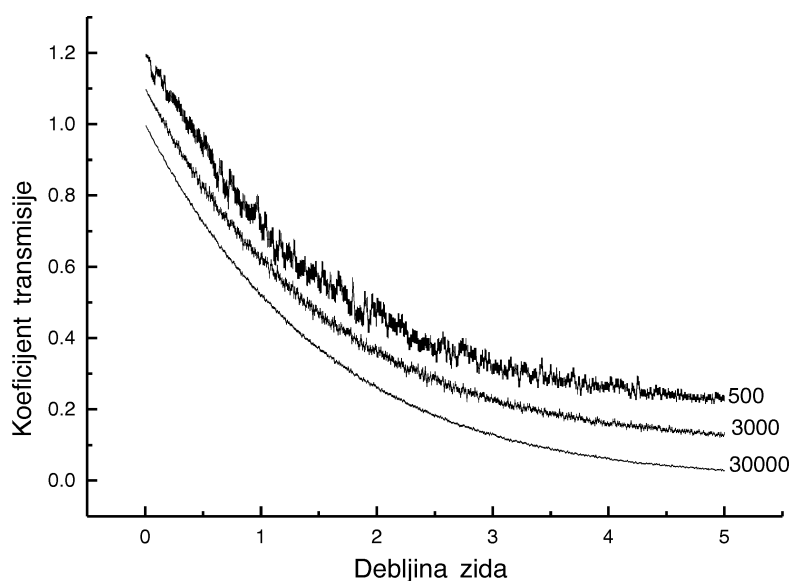
brojevi čestica, npr. 3000 su davali dovoljno dobre rezultate uz mnogo manje utrošenog vremena. Mi smo, dakle, iz praktičnih razloga uglavnom puštali 3000 čestica po merenju.

Debljina zida (apsorbujuće sredine) je data u jedinicama srednjeg slobodnog puta između dva sudara. Simulacija se ponavlja za ceo opseg vrednosti debljine zida. U svim simulacijama smo koristili opseg od 0 do 5.

Postoje dve verzije kompjuterskog koda. U verziji sa pojedinačnim česticama, nakon apsorpcije prestajemo da pratimo česticu i puštamo sledeću. Čestica dakle može samo biti potpuno aprosobana, reflektovana ili transmitovana. Koeficijenti apsorpcije, refleksije i transmisije se respektivno određuju kao odnos apsorbovanih, reflektovanih i transmitovanih čestica prema ukupnom broju merenja (puštenih čestica).

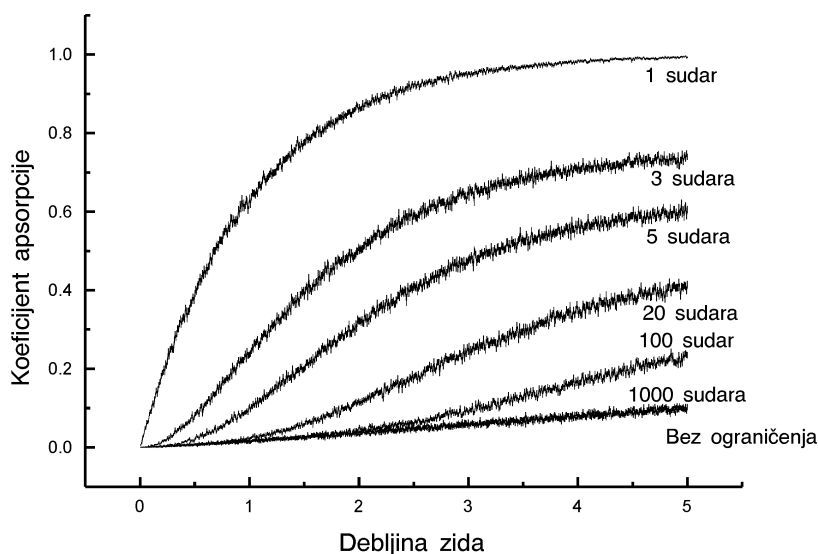
U verziji koda sa snopovima čestica, težina snopa, koja na početku iznosi 1, se prilikom svakog sudara smanjuje za verovatnoću apsorpcije (tj. ako je težina snopa pre sudara bila  $w$ , posle sudara će biti  $w(1 - a)$ ). Simulacija se nastavlja sve dok težina snopa ne dostigne neki mali broj, u kom slučaju se snop smatra potpuno apsorbovanim, ili dok se snop ne reflektuje ili transmituje. Koeficijenti se tada određuju kao aritmetička sredina apsorbovanih, reflektovanih ili transmitovanih težina za sva merenja. Kod sa snopovima čestica daje preciznije rezultate za isti broj merenja, mada mu je potrebno nešto više vremena da bi se izvršio. Greške se i u jednom i u drugom programu računaju koristeći standardne metode (računanjem standardne devijacije podataka).

Da bi nam merenja bila tačna u verziji programa sa snopovima, kritična težina, nakon koje smatramo snop apsorbovanim, mora biti dovoljno mala. U ranijim verzijama programa smo koristili maksimalni doz-



Slika 1.  
Koeficijent transmisije u zavisnosti od debljine zida (u jedinicama srednjeg slobodnog puta). Koristili smo verovatnoću apsorpcije  $a = 0.25$ . Grafici za 500 i 3000 merenja su pomereni na gore za 0.2 i 0.1 respektivno.

Figure 1.  
Transmission coefficient as a function of the thickness of the wall shown in relative units normalized to the mean distance between collisions. In this example we use absorption probability of  $a=0.25$ . Graphs for 500 and 3000 particles are shifted upwards by 0.2 and 0.1 respectively.



Slika 2.  
Koeficijent apsorpcije u zavisnosti od debljine zida za različite maksimalna dozvoljene brojeve sudara u verziji programa sa snopovima čestica. Graf sa maksimalnim brojem od 1000 sudara i grafik bez ograničenog broja sudara se praktično poklapaju. Grafici za refleksiju i transmisiju se ponašaju na sličan način.

voljen broj sudara (nakon kog bismo smatrali snop apsorbovanim) umesto kritične težine. Na slici 2 vidimo kako grafici postaju sve tačniji sa povećanjem maksimalno dozvoljenog broja sudara. Verovatnoća apsorpcije  $a$  je namerno podešena na malu vrednost, jer masa snopa za veće vrednosti mnogo brže opada. Ograničenje od 1000 sudara se pokazalo dovoljnim za sve vrednosti  $a$  na kojima smo vršili merenja.

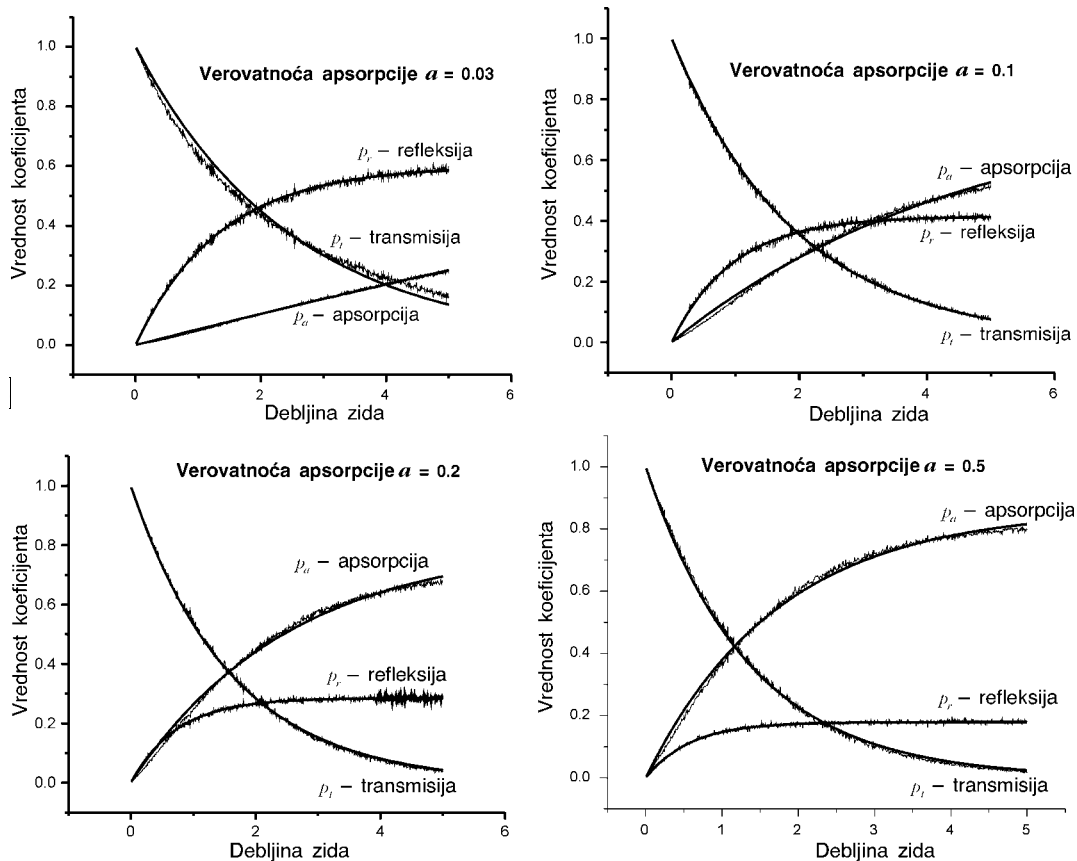
Kompjuterski kod za simulaciju (obe verzije) je napisan u paskalu i dozvoljava puštanje velikog broja čestica. Rezultati su zatim skladišteni u tekstualnu datoteku i dalje analizirani u programu Origin. Rane verzije programa su pisane u Turbo Paskalu sa memorijskim ograničenjem, pa je kod morao biti optimizovan. Programu je na Petnijumu brzine 200MHz u proseku potrebno nešto manje od sekunde za svaku tačku (kada vršimo 3000 merenja). Ceo graf sa oko 600 tačaka za različite debljine zida se generiše za par minuta. Za grafike gde se za svaku tačku vrši reda veličine 30000 merenja treba oko pola sata. Simulacije su izvođene za vrednosti između 0 i 5.

Figure 2.  
Absorption coefficient as a function of the wall thickness for different maximum allowed number of collisions in the beam of particles technique. The graphs for maximum of 1000 collisions and unlimited number of collisions (single particle technique) are indistinguishable. Reflection and transmission follow a similar pattern.

## Rezultati simulacija i postavljanje modela

Rezultati simulacije za nekoliko karakterističnih vrednosti verovatnoće apsorpcije  $a$  su date na slici 3.

Evidentno je da transmisija u svim slučajevima opada i teži nuli, jer je nemoguće proći kroz beskonačno deo zid. Takođe možemo primetiti da što je  $a$  veće to će transmisija brže težiti nuli. Refleksija dosta brzo raste u početku, ali posle nekog vremena konvergira izvesnoj vrednosti  $p_{rmax}$ . Razlog zašto refleksija prestaje da raste je taj što verovatnoća da



čestica uđe duboko u zid i vrati se (reflektuje se) postane zanemarljiva. Vrednost parametra  $p_{r\max}$  evidentno opada sa porastom  $a$  (kada je  $a = 1$ , očigledno nema nikakve refleksije). Svi grafici refleksije i transmisije u velikoj meri podsećaju na grafike eksponencijalnog rasta, odnosno opadanja (respektivno). Apsorpcija, slično kao refleksija, teži  $1 - p_{r\max}$  kako raste debljina zida. Može se ipak dodati da apsorpcija teži ovoj vrednosti mnogo sporije i da, za male vrednosti parametara  $a$ , više podseća na linearnu nego na eksponencijalnu funkciju.

Moglo bi se očekivati da se vrednosti koeficijenata mogu dobro definisati modelom sa jednim eksponencijalnim parametrom  $b$ :

$$\text{refleksija: } p_r = p_{r\max} (1 - e^{-bx}) \quad (3.1)$$

$$\text{transmisija: } p_t = p_{t\max} e^{-bx} \quad (3.2)$$

$$\text{i apsorpcija: } p_a = p_{a\max} (1 - e^{-bx}) \quad (3.3)$$

Slika 3.

Vrednosti apsorpcije, refleksije i transmisije kada su verovatnoće apsorpcije pojedinačne čestice: a) 0.03, b) 0.1, c) 0.2 i d) 0.5. Glatke linije su fitovi u dvostrukom eksponencijalnom modelu.

Figure 3.

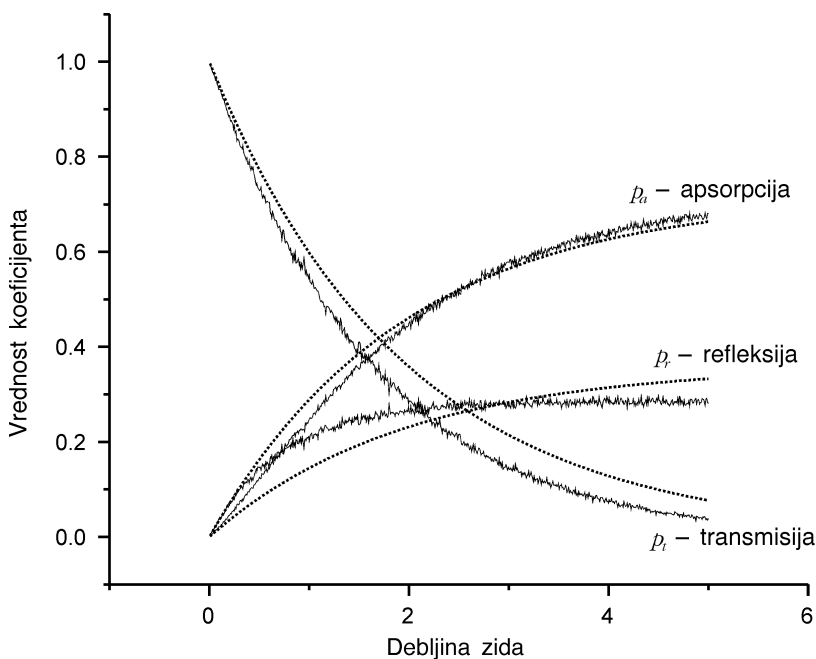
Absorption, reflection and transmission for absorption probability: a) 0.03, b) 0.1, c) 0.2 and d) 0.5. Smooth lines represent fits by double exponential model.

Na slici 4 prikazan je jedan od pokušaja da se fituju rezultati ovim modelom, koji se prvi nameće zato što je najjednostavniji. Može se videti da model ne fituje dobro. Neki delovi su dobro, ali drugi su vrlo loše isfitovani, a kvalitet varira sa debljinom zida, verovatnoćom apsorpcije  $a$  i relativnom veličinom koeficijenta. Takođe, model sa jednim eksponencijalnim parametrom ne bi dozvoljavao da kriva apsorpcije “pretiče” krivu refleksije, što je dobijano u simulacijama (videti sliku 3,  $b-d$ ).

Da bi se rezultati bolje fitovali uveli smo dva različita eksponenta (za refleksiju i transmisiju:  $b_r$  i  $b_t$ ) kao sledeći najjednostavniji model. Podaci pokazuju eksponencijalno opadanje koeficijenta transmisije (3.1) i eksponencijalni rast koeficijenta refleksije (3.2). ApSORPCIJA se može dobro fitovati koristeći uslov (3.3). (Na graficima sa slike 4 apSORPCIJA je fitovana istom jednačinom kao refleksija:  $p(1-e^{-bt})$ , što se pokazalo nepreciznim za većinu vrednosti  $a$ . Pored ovoga, za niske vrednosti  $a$  bi parametar  $p$  težio ogromnim vrednostima, dok bi  $b$  težio nuli, što govori o neeksponencijalnoj prirodi apSORPCIJE).

Simulacije su izvršene za veliki broj različitih verovatnoća apSORPCIJA i vrednosti parametra koji su dobijeni fitovanjem grafika dvostruko eksponencijalnim modelom su dati na slici 5.

Nije odmah jasno kako bi parametri u modelu trebalo da se ponašaju. Da bi smo ih bolje razumeli, kao i da bismo proverili valjanost dobijenih rezultata trebalo bi da se izračunaju u graničnim slučajevima, tj. za male i velike vrednosti koeficijenta apSORPCIJE  $a$ .



Slika 4. Koeficijenti apSORPCIJE, refleksije i transmisije za  $a=0.2$ . Prave linije predstavljaju fitove dobijene u eksponencijalnom modelu sa jednim parametrom. ApSORPCIJA i refleksija su fitovane funkcijama oblika  $p(1-e^{-bt})$  uz uslov da je  $b$  u oba slučaja isto. Zatim je taj parametar  $b$  korišćen i za transmisiju.

Figure 4. Probabilities of absorption, reflection and transmission for the value of  $a=0.2$ . Dotted lines represent fits by a single exponential model. Absorption and reflection were fitted with the function  $p(1-e^{-bt})$  along with the condition that  $b$  was equal for both. Then the parameter  $b$  was then used to evaluate transmission.

## Asimptotsko ponašanje

Sada ćemo izračunati granične vrednosti parametra modela za velike vrednosti  $a$ , to jest za  $a = 1 - \epsilon$ , pri čemu je  $\epsilon$  mnogo manje od 1. Dakle, možemo smatrati da je čestica nakon drugog sudara apsorbirana (pošto je  $\epsilon^2$  zanemarljivo).

Najpre primećujemo da se projekcija čestice nakon sudara određuje proizvoljnim brojem između  $-1$  i  $1$ . Ovaj broj predstavlja koji deo kretanja se projektovao na  $X$ -osu (samo nam je ovo kretanje bitno u našoj, uglavnom, jednodimenzionalnoj simulaciji). Postoji 50% šanse da čestica ode u pozitivnom smeru i 50% šanse da čestica ode u negativnom smeru. Kako je gustina verovatnoće konstantna, možemo smatrati da je efektivna vrednost projekcije 0.5, za svaki pravac. Drugim rečima, bez obzira na pravac, u proseku će čestice nakon neapsorbirajućeg sudara nastavljati svoje kretanje sa polovinom brzine projektovane na  $X$ -osu (tj. ugao koji pravac kretanja zaklapa sa  $X$ -osom biće  $60^\circ$ ).

Ako integralimo eksponencijalnu gustinu verovatnoće od  $x$  do  $\infty$ , dobićemo da verovatnoća da čestica pređe put veći od  $x$  jeste  $e^{-x}$ . Verovatnoća da pređe tačno  $x$  (tj. da je dužina puta u intervalu  $(x, x+dx)$ ) jeste  $e^{-x}dx$  po definiciji gustine verovatnoće. Pre prvog sudara kretanje je na  $X$ -osi, dok se nakon prvog sudara samo polovina kretanja projektuje na ovu osu. Imajući sve ove stvari u vidu možemo lako izračunati granične vrednosti koeficijenata u modelu:  $b_r$ ,  $b_t$  i  $p_{r\max}$ .

Najpre ćemo izračunati parametre za refleksiju, uzimajući u obzir, naravno, samo čestice koje se reflektuju natrag nakon samo jednog sudara. Ostale mogu biti zanemarene, kao što smo već rekli, jer je verovatnoća da ne budu apsorbirane  $\epsilon^2$ , isuviše mala. Pretpostavimo da je debljina zida  $d$ , a da se čestica sudarila na rastojanju  $x$  (Treba da sumiramo sve verovatnoće za sve vrednosti  $x$  od 0 do  $d$ ). Verovatnoća da se čestica sudari u  $x$  je  $e^{-x}dx$ . Verovatnoća da se čestica odbije natrag je 0.5. Verovatnoća da se čestica reflektuje iz sredine pre nego što se sudari je  $e^{-2x}$ . Efektivno, čestica mora da pređe put  $2x$  pošto se kreće pod uglom od  $60^\circ$ . Uzevši sve ovo u obzir i sumirajući za sve vrednosti  $x$ , dobijamo:

$$p_r = \int_0^d 0.5 \epsilon e^{-x} \times e^{-2x} dx = \frac{1}{6} \epsilon \times (1 - e^{-3d}). \quad (4.1)$$

Dakle, dobijamo:

$$p_{r\max} = \frac{1}{6} \epsilon, \quad (4.2)$$

$$b_r = 3. \quad (4.3)$$

Takođe možemo odrediti i  $b_t$ , mada bismo morali da izvršimo dodatne aproksimacije. Uzećemo u obzir i direktnu transmisiju i transmisiju nakon prvog sudara. Prva iznosi  $e^{-d}$ , a druga se slično kao i kod refleksije određuje pomoću formule:

$$p_r = \int_0^d 0.5 \epsilon e^{-x} \times e^{-2(d-x)} dx \quad (4.4)$$

(umesto što se odbija natrag, čestica nastavlja kretanje u drugom pravcu). Konačna formula je:

$$p_t = e^{-d} + 0.5 \times \epsilon \times e^{-d} e^{-2(d-x)} \quad (4.5)$$

Dobijeni rezultat nema istu formu kao u modelu tako da moramo da aproksimiramo rezultat sa formulom  $e^{-b_t d}$  koju treba da dobijemo i mora da na pogodni način odredimo  $b_t$ . Kako obe formule imaju istu vrednost kada je  $x = 0$ , najbolja aproksimacija bi trebalo da bude kada obe formule imaju isti prvi izvod za  $x = 0$  (ovo je relativno gruba aproksimacija, ali za male vrednosti  $\epsilon$  od oko 0.01 daje dosta dobre rezultate, s obzirom na to da funkcija nije toliko osetljiva na krupnije promene  $b_t$ . S druge strane, parametar  $b_t$  se može još preciznije dobiti fitovanjem jednačine (4.5) koristeći program Origin. Ovom metodom dobijamo rezultate u skoro potpunom slaganju sa izmerenim rezultatima). Diferenciranjem jednačine (4.5) se dobija:

$$-b \times e^{b_t d} = -e^{-d} - 0.5 \times \epsilon \times (e^{-d} - 2e^{-2d}), \quad (4.6)$$

a amenjujući  $d = 0$ :

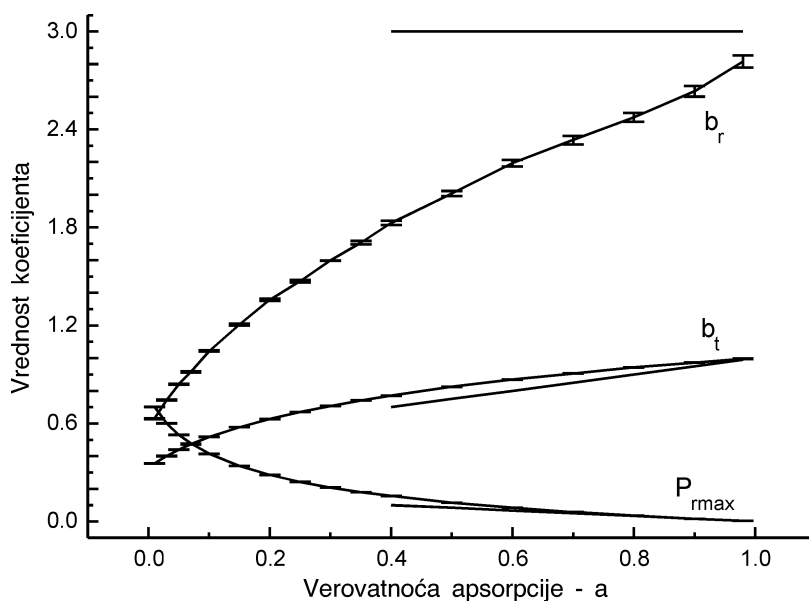
$$b_t = 1 - \epsilon / 2. \quad (4.7)$$

Svi ovi rezultati su u odličnom slaganju sa graničnim vrednostima dobijenim simulacijama (videti sliku 5). Parametar  $b_r$  teži ka trojci dok formule za druga dva parametra daju jako dobre aproksimacije čak i za velike vrednosti  $a$ . Postane teško ocenjivati  $b_r$  kako  $p_{rmax}$  teži nuli.

## Zaključak

Monte Karlo simulacije transporta su izvršene za dosta generalni sistem čestica, na koje nije uticalo električno polje i za nasumice raspoređene apsorbujuće atome u apsorbujućoj sredini. Model baziran na jednom eksponentu nije mogao dobro da fituje rezultate dobijene iz simulacija. Međutim, model sa dva eksponenta koji se dosta razlikuju (videti sliku 5) je omogućio jako dobro fitovanje podataka (videti sliku 3,  $b-d$ ).





Slika 5.  
 Parametri fitovanja u funkciji od verovatnoće apsorpcije. Horizontalne linije predstavljaju statističku grešku fitovanja. Kratke linije su rezultati asimptotskih modela.

Figure 5.  
 Fitting parameters as a function of the absorption probability. Horizontal lines give statistical uncertainty. Shorter lines give the results of the asymptotic model.

Nije lako objasniti zašto model sa jednim eksponentom ne uspeva da se složi sa podacima. Izgleda da refleksija mnogo brže teži ka graničnoj vrednosti (biva saturirana), dok transmisija dosta sporije opada i da su dva eksponencijalna parametra neophodna. To objašnjenje podržava i to što su sve tri veličine vrlo dobro fitovane modelom sa dva eksponencijalna parametra.

Tačnost dobijenih rezultata iz simulacije i predloženog modela je podržana i analitičkim asimptotskim formulama koje su dobijene za granični slučaj kada  $a$  teži jedinici. Asimptotska teorija jako dobro predviđa granične vrednosti parametara za velike vrednosti  $a$ , a u velikoj meri i za nešto manje vrednosti.

Rezultati dobijeni su dosta generalni i mogu se koristiti za proučavanje transporta: neutrona u reaktorima, fotona u apsorbujućem medijumu, reaktivnih čestica u hemijski aktivnoj sredini, čak i makroskopskih pojava koje pokazuju apsorpciju. Simulacije kao ova prezentovana mogu čak da se primene i na sisteme izvan standardne fizike. Neki biološki sistemi ili društvene pojave mogu dosta dobro da se opišu definisanjem osobina kao što su apsorpcija prilikom sudara, trajektorija ili debljina zida.

## Literatura

Heermann, D.W. 1990. *Computer simulation methods in Theoretical Physics*. Berlin: Springer-Verlag.

Binder, K. and Heermann, D.W. 1997. *Monte Carlo simulation methods in Statistical Physics*. Berlin: Springer-Verlag.

## Monte Carlo Simulation of Particle Transport in an Absorbing Medium

Monte Carlo simulation of the transport of particles in different media has become a powerful technique which is used very much in science. In this paper we present our results obtained in the simulation of transport of particles in an absorbing medium. The purpose of this paper was to make a computer simulation that would measure the probability of a particle being absorbed by the medium, reflected back or transmitted through the medium. The next step involved measuring these probabilities as a function of the absorption probability in a single collision and the thickness of the medium (for a wide range of values, see Fig. 4) and finding an acceptable model that would accurately describe this dependence (Eq. 3. 1-3). In order to check the validity of this model we calculated mathematically (Equations 3) the values of the parameters for the extreme values of  $a$  (Fig. 5). It turned out that transmission and reflection resemble exponential decay and growth and that the mathematical calculations were in fine agreement with the obtained results. This simulation may be successfully applied to a number of processes occurring in nature.

