

# 8

## O MÉTODO DE MONTE CARLO PARA TRANSPORTE DE NÊUTRONS

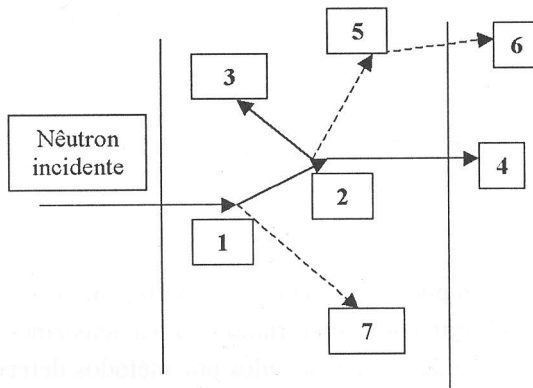
*Helio Yoriyaz*

### **Introdução**

O Método de Monte Carlo pode ser usado para simular um processo estatístico, tal como a interação da radiação com a matéria, sendo particularmente útil em problemas complexos que não podem ser realizados por métodos determinísticos. Neste método, os eventos probabilísticos individuais que compreendem um processo são simulados seqüencialmente. As distribuições de probabilidade que governam estes eventos são amostradas estatisticamente para descrever o fenômeno, que está sendo simulado, de forma global. Este processo de amostragem estatística é baseado na seleção de números aleatórios.

No transporte de partículas, a técnica de Monte Carlo consiste em seguir cada partícula desde a fonte, onde ocorre o seu nascimento, ao longo de sua vida até a sua morte (escape, absorção, etc.). Neste procedimento, as distribuições de probabilidade são aleatoriamente amostradas usando-se dados de transporte. A Figura 1 mostra um exemplo de um histórico de eventos na vida de uma partícula. Trata-se de um nêutron incidente numa placa de material físsil. Números que variam entre 0 e 1 são aleatoriamente selecionados para determinar o tipo de interação e o local, baseado em regras físicas e probabilidades (dados nucleares e atômicos de transporte) que governam o processo e o material envolvido. Neste exemplo, em particular, o nêutron sofre uma colisão no evento 1 e espalhado na direção como mostrado na Figura 1, que também é selecionado aleatoriamente de uma função distribuição, que caracteriza o espalhamento. Um fóton também é produzido neste evento e armazenado temporariamente para análise posterior. No evento 2 ocorre a fissão, resultando no término do nêutron incidente e gerando

dois novos nêutrons e um fóton que é armazenado para análise posterior. Um dos nêutrons de fissão é capturado no evento 3, terminando sua história enquanto que o outro nêutron, por uma seleção aleatória ou randômica, escapa do material no evento 4. O fóton produzido na fissão sofre uma colisão no evento 5 e escapa do sistema no evento 6. O fóton gerado no evento 1 e que havia sido armazenado é seguido sofrendo uma captura no evento 7. Com isto a história do nêutron inicial incidente termina e um segundo nêutron incidente é amostrado e assim por diante.



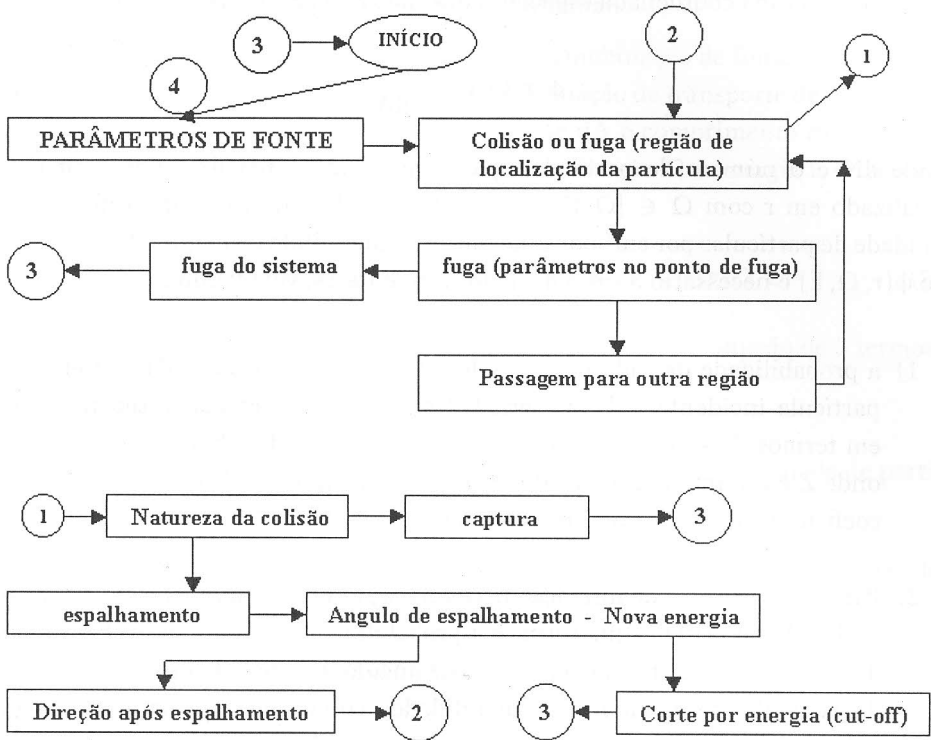
**Figura 1** Histórico de eventos de uma partícula na simulação por Monte Carlo. (Figura adaptada da referência 1)

Em qualquer problema, em geral, uma partícula fica complementemente caracterizada por um conjunto de parâmetros que são suficientes para determinar seu comportamento em todas as situações que podem ocorrer durante a sua história de vida. Dentre estes parâmetros incluem-se as coordenadas de posição, direção e em muitos casos a energia da partícula.

A simulação pelo método de Monte Carlo sempre envolve um conjunto de subrotinas bem definidas que estão descritas de forma esquemática na figura 2 a seguir.

A completa atribuição de todos os parâmetros de uma partícula envolve a distribuição espacial e angular da fonte, bem como a distribuição energética em casos em que a fonte não seja monoenergética.

Existe uma rotina geral designada para decidir se a partícula, partindo de um ponto qualquer, sofrerá colisão na região em que se encontra ou então alcançará uma interface com outra região sem interação. O conceito físico essencial envolvido nesta decisão é o livre caminho médio. Os parâmetros da partícula no ponto de



**Figura 2** Diagrama esquemático das etapas de simulação em Monte Carlo. (Figura adaptada da referência 2)

colisão ou fuga são determinados antes de prosseguir. A rotina de colisão depende do meio e o objetivo é determinar a natureza da colisão e o destino da partícula. Em caso de captura, termina-se a história da partícula, e em caso de espalhamento, prossegue-se a simulação com a determinação dos ângulos de espalhamento e nova energia da partícula.

### Equação de Boltzman

O desenvolvimento matemático a seguir está baseado na referência 3, onde o leitor poderá obter maiores detalhes.

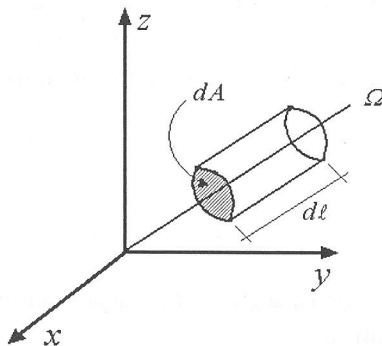
A distribuição de partículas dentro de um sistema com fontes radioativas e absorvedores pode ser completamente descrita especificando-se a fluência de partículas

$\phi(r, \Omega, E)$  em cada coordenada espacial  $r$ , direção  $\Omega$  e energia  $E$  dada por:

$$\phi(r, \Omega, E) = \frac{dN}{dA} \quad (1)$$

onde  $dN$  é o número de partículas que atravessam a área  $dA$  com normal  $\Omega$ , localizado em  $r$  com  $\Omega \in [\Omega, \Omega + d\Omega]$  e  $E \in [E, E + dE]$ , de forma que  $\phi$  tem unidade de partículas por  $\text{cm}^2$  por unidade de ângulo sólido e energia. Para o cálculo de  $\phi(r, \Omega, E)$  é necessário 3 tipos de dados elementares, veja figura 3:

- 1) a probabilidade de cada processo de interação como função da energia  $E$  da partícula incidente e das propriedades do meio. Estes dados são tabulados em termos de seções de choque  $\sigma(E, Z)$  cuja unidade é barns ( $10^{-24} \text{ cm}^2$ ) e onde  $Z$  é o número atômico do meio. Equivalentemente, pode ser utilizado o coeficiente de atenuação linear  $\mu$  em unidades de  $\text{cm}^{-1}$ ;
- 2) Para cada processo de interação necessita-se, também, da função densidade de probabilidade (PDF) que fornece a probabilidade de cada possível resultado da interação especificado em termos de ângulo de espalhamento  $\Omega'$  e energia da partícula emergente  $E'$ . Esta quantidade é conhecida como seção de choque diferencial, cuja expressão é dada por  $d\sigma(\Omega', E'|E) dE' d\Omega'$ ;
- 3) Conhecimento da PDF que governa o transporte de uma partícula primária ou espalhada de um ponto de colisão ao próximo.



**Figura 3** Elemento de volume para derivação da equação de Boltzman

### A forma integro-diferencial da equação de Boltzman

A densidade de fluxo de partículas para qualquer combinação de fontes e condições de contorno é determinada completamente pela equação de transporte de Boltzman. Para isso, considere um cilindro com área de base  $dA$  e comprimento  $dl$  com eixo paralelo a  $\Omega$ . O número líquido de partículas com direção  $\Omega$  e energia  $E$  criado no cilindro por unidade de tempo é:

$$dA[\phi(r + dl\Omega, \Omega, E) - \phi(r, \Omega, E)] = dA dl \Omega \nabla \phi(r, \Omega, E) \quad (2)$$

A diferença no lado esquerdo desta equação é devido a contribuição de 3 termos:

- 1) Termo de atenuação:  $-\sigma(r, E)\phi(r, \Omega, E) dl dA$ .
- 2) Fonte de partículas:  $S(r, \Omega, E) dl dA$ ; onde  $S(r, \Omega, E)$  possui unidade de partículas por unidade de volume, ângulo sólido e energia.
- 3) Espalhamento de partículas do estado  $(\Omega', E')$  para o estado  $(\Omega, E)$  governado pela seção de choque diferencial  $\sigma(\Omega, E|\Omega', E')$ .

Fazendo  $\alpha = (\Omega, E)$  a equação (2) torna-se:

$$\Omega \nabla \phi(r, \alpha) = -\sigma(r, E)\phi(r, \alpha) + \int \phi(r, \alpha') \sigma(\alpha|\alpha') d\alpha' + S(r, \alpha) \quad (3)$$

A Equação (3) é o ponto de partida para o tratamento de problemas de transporte de radiação, e é conhecida como a forma integro-diferencial da equação de Boltzman.

### A forma integral da equação de Boltzman

A transformação da equação (3) na forma integral revela mais claramente a natureza estocástica do fenômeno de transporte de radiação. Expandindo a solução da equação (3) em ordem de espalhamento tem-se:

$$\phi = \sum \phi^n \quad (4)$$

onde  $\phi^n$  representa a densidade de fluxo de partículas do  $n$ -ésimo espalhamento. Desta forma, para cada ordem de espalhamento  $n$  a equação (3) torna-se:

$$\Omega \nabla \phi^n(r, \alpha) = -\sigma(r, E)\phi^n(r, \alpha) + \int \phi^{n-1}(r, \alpha') \sigma(r, \alpha|\alpha') d\alpha' [1 - \delta_{n0}] + S(r, \alpha)\delta_{n0}, \quad (5)$$

onde  $\delta$  é a função de Kronecker.

Considere agora o problema de cálculo da fluência de partículas que surge do  $n$ -ésimo espalhamento ao longo da linha  $r' = r - \Omega R$ , onde  $r$  e  $\Omega$  são fixos e  $R$  é uma variável positiva real, tal que:

$$\phi^n(r', \alpha) = \phi^n(r - \Omega R, \Omega, E) \tag{6}$$

e

$$\frac{d\phi^n(r', \alpha)}{dR} = -\Omega \nabla \phi^n(r', \alpha) \tag{7}$$

Sabemos que:

$$\begin{aligned} \frac{d[\phi^n(r', \alpha)e^{-\sigma R}]}{dR} &= \frac{d\phi^n(r', \alpha)}{dR} e^{-\sigma R} - \sigma(r', E) e^{-\sigma R} \phi^n(r', \alpha) \\ &= -[\Omega \nabla \phi^n(r', \alpha) + \sigma(r', E) \phi^n(r', \alpha)] e^{-\sigma R} \end{aligned} \tag{8}$$

Aplicando a equação (8) na equação (5) obtém-se:

$$\begin{aligned} &[\Omega \nabla \phi^n(r', \alpha) + \sigma(r', E) \phi^n(r', \alpha)] e^{-\sigma R} \\ &= \left\{ \int \phi^{n-1}(r', \alpha') \sigma(r', \alpha|\alpha') d\alpha' [1 - \delta_{n0}] + S(r', \alpha) \delta_{n0} \right\} e^{-\sigma R} \end{aligned}$$

Como  $\delta_{n0} = 0$  para  $n \neq 0$ , para  $n > 0$  tem-se:

$$-\frac{d[\phi^n(r', \alpha)e^{-\sigma R}]}{dR} = e^{-\sigma R} \int \phi^{n-1}(r', \alpha') \sigma(r', \alpha|\alpha') d\alpha' \tag{9}$$

Integrando ambos os lados ao longo da linha  $r' = r - \Omega R$  com  $R$  de 0 a  $\infty$ , tem-se:

$$\begin{aligned} - \int \left\{ \frac{d[\phi^n(r', \alpha)e^{-\sigma R}]}{dR} \right\} dR &= \int e^{-\sigma R} \int \phi^{n-1}(r', \alpha') \sigma(r', \alpha|\alpha') d\alpha' dR \\ -[\phi^n(-\infty, \alpha)e^{-\sigma \infty} - \phi^n(r, \alpha)e^{-\sigma 0}] &= \int e^{-\sigma R} \int \phi^{n-1}(r', \alpha') \sigma(r', \alpha|\alpha') d\alpha' dR \end{aligned}$$

Portanto,

$$\phi^n(r, \alpha) = \int e^{-\sigma R} \int \phi^{n-1}(r', \alpha') \sigma(r', \alpha|\alpha') d\alpha' dR \quad (n > 0) \tag{10}$$

Para  $n = 0$ , tem-se:

$$\Omega \nabla \phi^0(r', \alpha) = -\sigma(r', E) \phi^0(r', \alpha) + S(r', \alpha)$$

ou

$$\Omega \nabla \phi^0(r', \alpha) + \sigma(r', E) \phi^0(r', \alpha) = S(r', \alpha) \quad (11)$$

Analogamente à equação (7) e (8) tem-se:

$$\begin{aligned} d\phi^0(r', \alpha)/dR &= -\Omega \nabla \phi^0(r', \alpha) \\ d[\phi^0(r', \alpha)e^{-\sigma R}]/dR &= [d\phi^0(r', \alpha)/dR]e^{-\sigma R} - \sigma(r', E)e^{-\sigma R}\phi^0(r', \alpha) \\ d[\phi^0(r', \alpha)e^{-\sigma R}]/dR &= -[\Omega \nabla \phi^0(r', \alpha) + \sigma(r', E)\phi^0(r', \alpha)]e^{-\sigma R} \\ d[\phi^0(r', \alpha)e^{-\sigma R}]/dR &= -S(r', \alpha)e^{-\sigma R} \end{aligned}$$

Integrando em R de 0 a  $\infty$ , tem-se:

$$\begin{aligned} \int \{d[\phi^0(r', \alpha)e^{-\sigma R}]/dR\} dR &= - \int S(r', \alpha)e^{-\sigma R} dR \\ \phi^0(-\infty, \alpha) - \phi^0(r, \alpha) &= - \int S(r', \alpha)e^{-\sigma R} dR \\ \phi^0(r, \alpha) &= \int S(r - \Omega R, \alpha)e^{-\sigma R} dR \quad (n = 0) \quad (12) \end{aligned}$$

As equações 10 e 12 demonstram que a única fonte de partículas do n-ésimo espalhamento com energia E, direção  $\Omega$  e posição r provém das partículas do (n-1)-ésimo espalhamento na posição r' que no seu n-ésimo espalhamento vão para o estado ( $\Omega, E$ ) para a posição r. O termo exponencial leva em conta as partículas que foram atenuadas pelo meio antes de alcançar r.

Reformulando a equação de transporte em termos de densidade de colisão tem-se que:

$$C(\beta) = \sigma(r, E)\phi(r, \Omega, E) \quad (13)$$

Esta equação representa o número de partículas no estado  $\beta \equiv (r, \Omega, E)$  sofrendo colisão por unidade de volume, ângulo sólido e energia. Da mesma forma, define-se  $C^n(\beta)$  como a densidade de partículas no estado  $\beta$  sofrendo a n-ésima colisão:

$$\begin{aligned} C^n(r, \alpha) &= \sigma(r, E)\phi^n(r, \alpha) \\ &= \int e^{-\sigma R} \int \sigma(r, E)\phi^{n-1}(r', \alpha')\sigma(r', E') \left[ \frac{\sigma(r', \alpha|\alpha')}{\sigma(r', E')} \right] d\alpha' dR \\ &= \int e^{-\sigma R} \int C^{n-1}(r', \alpha')\sigma(r, E) \left[ \frac{\sigma(r', \alpha|\alpha')}{\sigma(r', E')} \right] d\alpha' dR \end{aligned}$$

Definindo-se  $\beta \equiv (r, \alpha)$  e substituindo-se as duas integrais por uma integral que engloba todo o espaço de fase tem-se:

$$C^n(\beta) = \int C^{n-1}(r', \alpha') P(\beta|\beta') d\beta' \quad (n > 0) \tag{14}$$

onde:

$$P(\beta|\beta') = e^{-\sigma R} \sigma(r, E) \left[ \frac{\sigma(r', \alpha|\alpha')}{\sigma(r', E')} \right] \tag{15}$$

é chamada de probabilidade de transição do estado  $\beta'$  para o estado  $\beta$  e,

$$C^1(\beta) = \sigma(r, E) \phi^0(r, \alpha) = \int \sigma(r, E) S(r - \Omega R, \alpha) e^{-\sigma R} dR \quad (n = 0) \tag{16}$$

Somando-se sobre todas as ordens de espalhamento  $n$  tem-se:

$$C(\beta) = \sum_n \int C^n(\beta') P(\beta|\beta') d\beta' + C^1(\beta) \tag{17}$$

Em muitos casos práticos de transporte não é necessária a especificação completa da radiação em termos de  $C$  e  $\phi$ . Uma típica quantidade de interesse é a quantidade de energia depositada num detetor com uma específica composição e geometria ou então o número de partículas que atravessam uma dada superfície de blindagem radiológica. Estas quantidades podem ser descritas por meio de uma função  $T(\beta)$  que representa a contribuição relativa das partículas que colidem em  $\beta$  para a quantidade de interesse.

O valor médio  $\langle T \rangle$  por partícula emitida é dada pela média da função  $T(\beta)$  sobre todos os estados possíveis.

$$\langle T \rangle = \sum \int T(\beta) P^n(\beta) d\beta \tag{18}$$

$$P^n(\beta) = \frac{C^n(\beta)}{\int C(\beta) d\beta} \tag{19}$$

$$\sigma^2 = \sum \int [ \langle T \rangle - T(\beta) ]^2 P^n(\beta) d\beta \tag{20}$$

Por exemplo, considere um detetor esférico de raio  $r_1$  centrado em  $r_0$ . Então  $T$  que fornece a energia depositada no detetor é dada por:

$$T(r, \Omega, E) = E \quad \text{se } |r - r_0| \leq r_1$$

$$0 \quad \text{se } |r - r_0| \geq r_1$$



Considere agora uma fonte isotrópica num meio absorvedor finito. Cada trajetória da partícula é gerada de acordo com a seguinte seqüência:

- 1) Amostra-se a direção da partícula de fonte a partir de uma PDF que caracteriza a emissão isotrópica de fonte;
- 2) Amostra-se a posição da próxima colisão (distância) através da lei de atenuação exponencial;
- 3) Obtém-se a direção e a energia ( $\Omega, E^1$ ) da partícula espalhada a partir da seção de choque diferencial,  $\sigma(\alpha^1|\alpha^0)/\sigma(E^0)$ ;
- 4) Em cada etapa do procedimento, pode-se verificar se a partícula interage com o detector.

Este processo é repetido até a partícula ser completamente absorvida pelo meio.

### Descrição da simulação do transporte de fótons pelo método de Monte Carlo

Em muitos casos a simulação do transporte de nêutrons envolve o transporte de fótons, uma vez que a maioria das fontes de nêutrons também emitem fótons e além disso, as interações do nêutron com o meio também geram fótons secundários.

A história de um fóton pode ser representada por um conjunto  $S_j^k$ , tal que  $j = 1, 2, 3, \dots, N_k$  e  $k = 1, 2, 3, \dots, M$ , onde  $S_j^k$  denota o estado do fóton antes de sua  $j$ -ésima colisão:

$$S_j^k = (r_j^k, \Omega_j^k, E_j^k, w_j^k) \quad (21)$$

onde  $r_j$ ,  $\Omega_j$  e  $E_j$  indicam a posição, direção e energia do  $k$ -ésimo fóton (fóton da história  $k$  num total de  $M$  histórias) imediatamente antes da  $j$ -ésima colisão e  $w_j^k$  é o peso do fóton e que corresponde à probabilidade com que o  $k$ -ésimo fóton escape de ser absorvido nas primeiras  $(j - 1)$  colisões.

Cada estado  $S_j$  de uma seqüência  $\{S_j\}$  pode ser amostrado através de uma PDF condicional  $P(S_j|S_{j-1})$  que considera o conjunto de todas as trajetórias possíveis pela equação de Boltzman. Desta forma, a escolha do estado  $S_j^k$ , dado  $S_{j-1}^k$  envolve o seguinte procedimento:

1. Atribuindo a energia e direção resultante da  $(j-1)$ -ésima colisão:
  - a) Se  $j = 1 \rightarrow$  colisão de fótons primários: atribui-se randomicamente uma trajetória inicial  $\Omega_1$ , posição  $r_1$  e energia  $E_1$ , a partir da amostragem da função fonte  $S(r, \Omega, E)$ .

b) Se  $j \geq 2 \rightarrow$  fótons previamente espalhados:

- i) Escolhe-se randomicamente o processo de interação na  $(j - 1)$ -ésima colisão baseado nas magnitudes relativas das seções de choque no processo competitivo entre efeito fotoelétrico,  $\sigma_{pe}$ , espalhamento coerente e incoerente,  $\sigma_{co}$ ,  $\sigma_{inc}$  e etc.
- ii) Amostragem da PDF definida pela seção de choque diferencial do processo escolhido em  $i$ , para a escolha da direção de emergência após a  $(j - 1)$ -ésima colisão, isto é, a quantidade  $\Omega_j^k$ .
- iii) Calcula-se a energia  $E_j$  após a  $(j - 1)$ -ésima colisão da relação energia-ângulo de espalhamento.

2. Atribui-se o peso  $w_j^k$  após a  $(j - 1)$ -ésima colisão.

3. Determina-se a posição da  $j$ -ésima colisão  $r_j$ , tal que:

$$r_j = r_{j-1} + \Omega_j S \quad (22)$$

a partir da amostragem da PDF  $P(S)$  tal que:

$$P(S) = \sigma(E_j) \exp(-\sigma(E_j)S) \quad (23)$$

onde  $S$  é a distância entre a posição da  $(j - 1)$ -ésima e a  $j$ -ésima colisão.

4. Determina-se a contribuição desta colisão para a quantidade de interesse.

5. Retornar ao passo 1.

Normalmente em simulações que envolvem meios com número atômico  $Z$  baixo, o processo fotoelétrico acaba terminando a história do fóton uma vez que o fóton acaba sendo totalmente absorvido. Para se aumentar a eficiência da simulação pode-se eliminar o processo fotoelétrico com possível mecanismo de interação compensando com a diminuição do peso  $w_j^k$  após a  $(j - 1)$ -ésima colisão, multiplicando-se pela probabilidade de sobrevivência à absorção fotoelétrica de tal forma que o novo peso fica expresso como:

$$w_j^k = w_{j-1}^k \left[ 1 - \frac{\sigma_{pe}(E_{j-1})}{\sigma(E_{j-1})} \right] \quad (24)$$

Desta forma, a quantidade de interesse pode ser obtida estimando-se a média sobre todas as histórias simuladas:

$$\bar{T} = \frac{1}{M} \sum_{k=1}^M \sum_{j=1}^{N_k} T(\beta_j^k) w_j^k \quad (25)$$

$$\sigma^2 = \frac{1}{M} \sum_{k=1}^M \sum_{j=1}^{N_k} [\bar{T} - T(\beta_j^k)]^2 w_j^k \quad (26)$$

### Amostragem randômica

Como já vimos a simulação por Monte Carlo envolve uma seqüência de escolhas randômicas, tais como, distância para a próxima colisão, tipo de colisão, direção e energia. Cada uma destas etapas envolve a seleção de uma variável randômica  $x^*$  de uma distribuição apropriada  $f(x)$ . Este procedimento é altamente repetitivo, requerendo geralmente um número razoavelmente grande de histórias a fim de se obter resultados confiáveis com precisão requerida, sendo de vital importância, a maximização da eficiência de cálculo para minimizar o tempo e memória computacional.

A forma mais comum para a otimização é usar o fato de que a seleção de uma seqüência de variáveis randômicas  $\{x_1, x_2, \dots\}$  é equivalente à geração de uma seqüência uniformemente distribuída  $\{r_1, r_2, \dots\} \in (0, 1)$ .

A representação do processo de amostragem através da geração de variáveis randômicas uniformemente distribuídas é descrita pelo teorema fundamental da inversão:

**Teorema:** Seja  $X$  uma variável randômica com PDF  $f(x)$  e função cumulativa CDF  $F(x)$  e seja  $r^*$  um número randômico uniformemente distribuído amostrado do intervalo  $(0, 1)$ . Então a probabilidade de escolher  $x^*$  é  $f(x^*)$  sendo que  $x^*$  é definido tal que:

$$r^* = F(x^*) = \int_{-\infty}^{x^*} f(x) dx \quad (27)$$

O equivalente para o caso de variáveis discretas de um conjunto de  $N$  possibilidades  $\{x_i\}_{i=1}^N$  governado pelas probabilidades  $\{P_i\}_{i=1}^N$  tal que  $\sum_{i=1}^N P_i = 1$  e discreto tal que dado um número randômico  $r^*$  a variável randômica  $x^*$  é obtida por:

$$x^* = x_1 \quad \text{se} \quad r^* < P_1 \quad \text{senão} \quad x^* = x_j \quad \text{onde} \quad \sum_{i=1}^{j-1} P_i < r^* < \sum_{i=1}^j P_i$$

*Exemplo:* Obtenção da distância entre 2 colisões – Seja um meio absorvedor e seja  $t$  a distância ao longo da trajetória do fóton entre seu ponto de origem até o limite do meio absorvedor. A probabilidade de o fóton colidir ao longo da distância  $t$  é  $1 - e^{-\mu t}$  onde  $\mu$  é o coeficiente de atenuação linear. A probabilidade que o fóton interaja a uma distância  $x$  de sua origem é  $\mu e^{-\mu x}$ . A probabilidade condicional  $P(x|x \leq t)$  que o fóton colida após viajar a distância  $x$  dado que ela interage dentro do absorvedor é:

$$P(x|x \leq t) = \frac{\mu e^{-\mu x}}{1 - e^{-\mu t}} \quad (28)$$

Aplicando o teorema fundamental da inversão, equação (27) tem-se:

$$r^* = \int_0^{S^*} \frac{\mu e^{-\mu x}}{1 - e^{-\mu t}} dx$$

$$S^* = \frac{1}{-\mu} \ln[1 - r^*(1 - e^{-\mu t})] \quad (29)$$

### Amostragem por inversão numérica

Existem casos em que soluções como o exemplo acima nem sempre são possíveis ou então muito difíceis de obter de forma eficiente. Uma alternativa para estes casos é aproximar a PDF por uma função “step” no intervalo  $[a, b]$ , que assume valores discretos  $f_i$ ,  $i = 0, 1, 2, \dots, N$ , de forma que, em cada sub-intervalo  $[x_{j-1}, x_j]$ , tem-se:

$$\int_{x_{j-1}}^{x_j} f(x) dx = \frac{1}{N} \quad (j = 1, 2, \dots, N) \quad \text{e} \quad f_j = \frac{1}{N(x_j - x_{j-1})} \quad (30)$$

onde  $x_0 = a$  e  $x_N = b$ .

Para amostrar o valor  $x^*$  de  $f$ , gera-se 2 números randômicos  $r_1^*$  e  $r_2^*$  tal que:

$$k^* = \text{Int}[Nr_1^*] + 1 \quad x^* = C_{k^*-1} + r_2^*(C_{k^*} - C_{k^*-1}) \quad (31)$$

### Amostragem por rejeição

Este método é prático quando o cálculo de  $f(x)$  é direto. Dado a PDF  $f(x)$  definido em  $[a, b]$  onde  $M = \sup_{x \in [a, b]} f(x)$ :

- 1) Gere 2 números randômicos  $r_1^*$  e  $r_2^* \in [0, 1]$
- 2) Calcule  $x^* = a + (b - a)r_1^*$
- 3) Aceite  $x^*$  se  $r_2^* \leq f(x^*)/M$ , senão volte para a etapa 1.

A eficiência deste método é a fração de pares  $(r_1^*, r_2^*)$  que não são rejeitadas e é numericamente igual à área sob a curva  $f(x)$  dividida pela área do retângulo  $M(b-a)$ . Se os valores de  $f(x)$  variarem muito esta técnica pode não ser muito prática.

Esta técnica pode ser generalizada incluindo PDF's que podem ser fatoradas como segue:

$$f(x) = \frac{g(x)h(x)}{\int_{-\infty}^{\infty} g(x)h(x) dx} \quad (32)$$

onde  $g(x)$  é a PDF,  $h(x) \geq 0$  e  $M = \sup_x [h(x)]$ .

As etapas do procedimento neste caso são:

- 1) Escolha uma amostra  $x^*$  de  $g(x)$
- 2) Gere um número randômico  $r^* \in (0, 1)$
- 3) Aceite  $x^*$  se  $r^* \leq h(x^*)/M$ , senão volte para a etapa 1.

## Referências

- |   |   |
|---|---|
| <p>[1] J. F. Briesmeister, MCNP: MCNP - A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, , Version 4C, LA-13709-M, Los Alamos Scientific Laboratory, Los Alamos, New Mexico, 2000.</p> <p>[2] E. D. Cashwell and C. J. Everett. A Practical Manual on the Monte Carlo</p> | <p>Method for Random Walk Problems. International tracts in computer science and technology and their applications, 1, 1959.</p> <p>[3] Morin R. L. Monte Carlo Simulation in the Radiological Sciences Boca Raton, Florida, CRC Press, 1988.</p> |
|---|---|