OTIMIZAÇÃO NO TEMPO DE SIMULAÇÃO DE CASCATAS ELETROMAGNÉTICAS NA ATMOSFERA

Luiz Américo de Carvalho

Otimização no tempo de simulação de cascatas eletromagnéticas na atmosfera

Luiz Américo de Carvalho

Dissertação de Mestrado em Física apresentada ao
Instituto de Física Gleb Wataghin
para obtenção do título de Mestre em Física

Física de Partículas Elementares

Orientador: Profa. Dra. Carola Dobrigkeit Chinellato
D.R.C.C - I.F.G.W. - Unicamp

Campinas, UNICAMP, 1996.

Este exemplar corresponde à versão final da Tese de Mestrado defendida pelo Sr. Luiz Américo de Carvalho e aprovada pela Comissão Examinadora.
28.01.1997
Carola Dobrigkeit Chinellato

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
INSTITUTO DE FÍSICA
GLEB WATAGHIN

PARECER DE APROVAÇÃO

DEFESA DE TESE DE MESTRADO

LUIZ AMÉRICO DE CARVALHO

DATA: 18.07.96

BANCA EXAMINADORA:

- Profa. Dra. CAROLA DOBRIGKEIT CHINELLATO (Orientadora)

- Profa. Dra. RENATA ZUKANOVITCH FUNCHAL

- Prof. Dr. JOSÉ AGUSTO CHINELLATO

Banca Examinadora

- Profa. Dra. Carola Dobrigkeit (Orientador) - IFGW/UNICAMP
- Prof. Dr. José Augusto Chinellato - IFGW/UNICAMP
- Profa. Dra. Renata Zukanovitch Funchal - IF/USP
- Prof. Dr. Edison Hiroyuki Shibuya (Suplente) - IFGW/UNICAMP
- Prof. Dr. Sérgio Ferraz Novaes (Suplente) - IFT/UNESP

...À minha família: Edna e João

Igor e Ilsa

Agradecimentos

À Profa. Carola pela confiança depositada em mim e ao Prof. José Augusto pela ajuda no trabalho. Agradeço a ambos pelos meses de convivência.

Aos professores Aury, Antonio, Gaspar e Maria Cecília da UNESP de Guaratinguetá, que foram importantes na minha escolha pela carreira acadêmica e na realização desta.

Aos amigos Ewans Abdul e Rodrigo Gandra e os quase 20 anos de amizade.

Às amigas: Andréia Miguéis, Lilian, Raquel Ribeiro, Renata e Ana Kuhn.

Aos tios e às tias, primos e primas e etc... não vou citar para não esquecer ninguém.

Aos colegas Juliana R. Fleitas e Sérgio L.C. Barroso pela imensa paciência em me ajudarem com os problemas de computação.

Aos demais colegas de sala: Prof. Ary, Kesley, Mara, Mirian e Montanha.

Aos professores: Bellandi, Covolan, Gustavo, Guzzo e Shibuya.

Aos demais colegas de cursos (graduação e pós), de APGF(Terra e cia.), professores do DRCC e da FEG-UNESP.

Aos funcionários: Armando, Márcia, Maria Ignez, Mário, Teresa, Sandra e Da. Sebastiana.

À CAPES pelo apoio financeiro e à Fapesp pelo suporte técnico.

Resumo

Estudamos e utilizamos dois procedimentos com o objetivo de diminuir o tempo gasto na simulação de cascatas eletromagnéticas a altas energias para grandes profundidades na atmosfera. O primeiro procedimento é baseado no transporte longitudinal das partículas, ou seja, sem considerar as deflexões devidas ao espalhamento múltiplo coulombiano e a influência do campo magnético terrestre. As subcascatas que não contribuírem com partículas de energia acima do limiar na profundidade de detecção são eliminadas. Aquelas partículas que contribuírem são então transportadas, agora considerando o espalhamento e a influência do campo magnético. O segundo procedimento é baseado no corte de subcascatas, sem nem mesmo transportá-las longitudinalmente. Para isto foi estudada uma função corte dependente da profundidade que a partícula ainda deve atravessar até o nível de detecção. Com o uso conjunto destes procedimentos conseguimos um considerável ganho no tempo de simulação, sem comprometer os resultados.

Abstract

We have studied and applied two procedures with the aim of reducing the time for simulation of high energy electromagnetic cascades for high depths in the atmosphere. The first procedure is based on the longitudinal transport of particles, i.e., without considering the deflections due to the multiple Coulomb scattering and the influence of the magnetic field of the Earth; in this way we remove subcascades that do not contribute with particles above threshold energy at the detection level. Those that contribute are then transported, now considering scattering and the influence of the magnetic field. The second procedure is based on the cut of subcascades avoiding even the longitudinal transport. For this we have studied a cut function that depends only on the depth the particle has to move till the detection level. With the use of both procedures we get a considerable profit in the time of simulation without jeopardizing the results.

Conteúdo

Introdução **1**

1 Processos físicos envolvidos **9**

1.1 Produção de pares 9

1.2 Bremsstrahlung 11

1.3 Espalhamento múltiplo coulombiano 11

2 Simulação de cascatas eletromagnéticas na atmosfera **15**

2.1 Gerenciamento computacional dos dados das partículas 16

2.2 Transporte das partículas 19

3 Otimização de tempo na simulação **21**

3.1 Procedimento A: Algoritmo catalisador 22

3.2 Procedimento B: Função corte 22

4 Resultados **30**

5 Conclusão **40**

A Parametrização da densidade atmosférica **42**

B Comprimento de Radiação **43**

C Método de simulação de Monte Carlo **45**

C.1 Geração de números aleatórios 45

C.2 Amostragem de variáveis aleatórias de uma dada distribuição a partir da distribuição uniforme 49

D Simulação dos Processos Físicos envolvidos **53**

D.1 Amostragem da fração de energia do fóton secundário no processo de Bremsstrahlung 54

D.2 Amostragem da fração de energia do elétron (pósitron)-filho menos energético no processo de produção de pares 57

D.3 Amostragem do ângulo Θ para o processo de espalhamento múltiplo coulombiano 59

D.4 Amostragem do livre caminho 62

Lista de Tabelas

4.1 Relação entre ganho de tempo e entrada no algoritmo catalisador 31

4.2 Ganho de tempo com os procedimentos (algoritmo catalisador e função corte): valores para γ primário de 10 TeV, $E_{catalisador}$ = 6 GeV, E_{limiar} = 4 MeV. 32

4.3 Comportamentos médios em número de partículas sem os procedimentos e diferenças com os procedimentos para ajustes 0 e +0,7 33

4.4 Comportamentos médios em soma de energia das partículas sem os procedimentos e diferenças com os procedimentos para ajustes 0 e +0,7 34

4.5 Comportamentos médios em número de partículas sem os procedimentos e diferenças com os procedimentos para ajustes 0 e +0,7 para a profundidade de 25 X_0. Apresentamos também as diferenças minimizadas após estudo dos histogramas da distribuição dos 1.000 eventos 35

4.6 Comportamentos médios em soma de energia das partículas sem procedimentos e diferenças com os procedimentos para ajustes 0 e +0,7 para a profundidade de registro de 25 X_0. Apresentamos também as diferenças minimizadas após estudo dos histogramas da distribuição dos 1.000 eventos. 35

Lista de Figuras

0.1 Esquema da propagação de cascatas eletromagnéticas 1

1.1 Diagramas de Feynman para os processos de Bremsstrahlung e produção de pares. 9

1.2 Diagrama de espalhamento múltiplo coulombiano 12

2.1 Esquema simplificado do gerenciamento de dados 17

3.1 Esquema simplificado do gerenciamento de dados no algoritmo catalisador. A partícula-pai no algoritmo catalisador não necessariamente é a partícula primária que inicia a cascata. . . . 23

3.2 Esquema do acompanhamento de partículas na atmosfera com entrada no algoritmo catalisador. 24

3.3 Esquema do acompanhamento de partículas na atmosfera, agora fazendo o transporte real considerando as deflexões das partículas do subchuveiro que, neste exemplo, contribui com pelo menos um descendente na profundidade de registro. 25

3.4 Esquema mostrando a profundidade Δt que a partícula tem que percorrer até a profundidade de registro. Aqui t_p é a profundidade de criação da partícula, t_r é a profundidade de registro e Δt é a diferença entre estas profundidades. 26

3.5 Gráfico da energia versus a profundidade até o registro de elétrons (pais de subchuveiros com sobreviventes) de um γ primário de 10 TeV, com transporte longitudinal desses subchuveiros abaixo de 6 GeV e energia de limiar de 4 MeV. Gráfico da função corte construída e função corte com ajuste +0,7 (reta tracejada). Foram simulados 10 eventos. 27
3.6 Gráfico da energia versus a profundidade até o registro de γ's (pais de subchuveiros com sobreviventes) de um γ primário de 10 TeV, com transporte longitudinal desses subchuveiros abaixo de 6 GeV e energia de limiar de 4 MeV. Gráfico da função corte construída e função corte com ajuste +0,7 (reta tracejada). Foram simulados 10 eventos. 28

4.1 Histogramas com a distribuição do número de elétrons registrados em 1.000 eventos 36
4.2 Histogramas com a distribuição da soma das energias dos elétrons registrados em 1.000 eventos 37
4.3 Histogramas com a distribuição do número de fótons registrados em 1.000 eventos 38
4.4 Histogramas com a distribuição da soma das energias dos fótons registrados em 1.000 eventos 39

C.1 Esquema sobre ran1. Algoritmo embaralhador para tirar correlações sequenciais de baixa ordem. Números circulados indicam a ordem dos eventos : em cada chamada, o número aleatório em y é usado para escolher um elemento na sequência embaralhadora v (com 40 inteiros, onde 8 são descartados). Desta sequência sairá o número aleatório gerado, e também a semente para o y seguinte. A sequência embaralhadora é devidamente renovada, a cada 32 números amostrados. 48

D.1 Histograma exemplo da amostragem da fração de energia do fóton-filho em Bremsstrahlung com as curvas teórica e de ajuste (tracejada) com iguais pesos. 56
D.2 Histograma exemplo da amostragem da fração de energia do elétron(pósitron)-filho menos energético na produção de pares e curvas teórica e de ajuste com iguais pesos. Obs: as curvas são coincidentes. 58
D.3 Gráficos de $f^{(0)}$, $f^{(1)}$ e $f^{(2)}$ 59
D.4 Gráficos da equação transcendente (1.14) 61
D.5 Gráfico exemplo da amostragem de Θ variando a energia. . . . 63
D.6 Histogramas exemplos da amostragem do livre caminho em Bremsstrahlung e produção de pares; e respectivas curvas teórica e de ajuste. Obs: curvas coincidentes em ambos os casos. . . . 65

Introdução

O fenômeno denominado cascata eletromagnética é o processo de sucessiva produção (ou multiplicação) de elétrons (pósitrons) e fótons de alta energia na matéria, através de interações eletromagnéticas. Outras partículas podem estar presentes no fenômeno, como, por exemplo, os prótons, múons, káons e píons, mas nos preocuparemos apenas com as citadas anteriormente. Neste fenômeno ocorrem processos como Bremsstrahlung, produção de pares, perda de energia por ionização, espalhamento inelástico do elétron (pósitron), efeito Compton, espalhamento múltiplo coulombiano, efeito fotoelétrico, aniquilação do pósitron, etc..

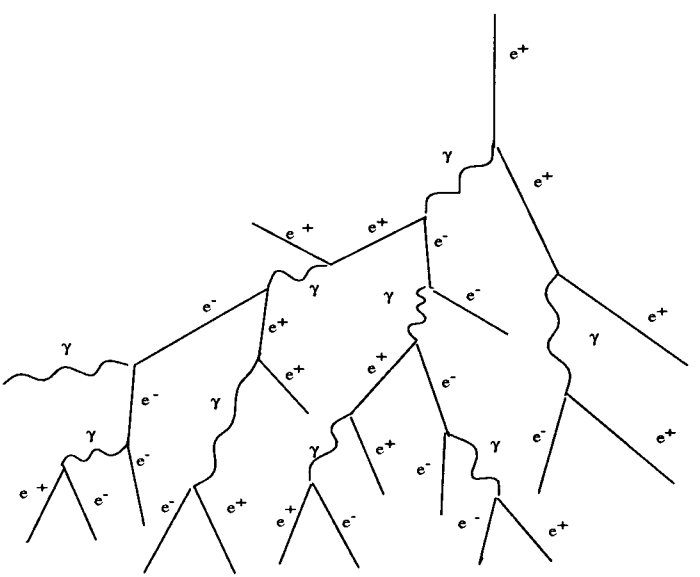

Figura 0.1: Esquema da propagação de cascatas eletromagnéticas

Cascatas eletromagnéticas estão presentes em fenômenos mais com-

plexos, como, por exemplo, os chuveiros atmosféricos de raios cósmicos.

Muitos experimentos de raios cósmicos e física de partículas são projetados de forma a detectar as cascatas iniciadas por partículas carregadas, ou por fótons (γ's) e determinar sua energia e direção de vôo. A simulação de cascatas eletromagnéticas possibilita prever resultados, auxiliar no projeto de detectores e interpretar resultados experimentais.

Neste trabalho denominaremos de partículas primárias aquelas que iniciam a cascata e não as que incidem no topo da atmosfera. Assim as partículas primárias poderão ser elétrons, pósitrons ou fótons. No tratamento de partículas primárias de altas energias, os processos de Bremsstrahlung e produção de pares são dominantes quanto à energia transferida para as partículas-filho, conforme Bhabha e Heitler (1937), além da perda de energia por ionização das partículas carregadas. Quanto às deflexões sofridas em relação à direção de propagação da partícula-pai, o processo de espalhamento múltiplo coulombiano é dominante em relação aos outros processos.

O meio material considerado para a simulação é a atmosfera, cuja composição considerada em porcentagem de número é :

$$\begin{aligned} N_2 &= 78,11\% \\ O_2 &= 20,95\% \\ Ar &= 0,94\% \end{aligned}$$

Aproxima-se essa composição para "Z" e "A" efetivos pela porcentagem em número de átomos presentes no ar. Calculando temos :

$$\begin{aligned} Z_{efetivo} &= 7,37 \\ A_{efetivo} &= 14,56 \qquad uma \end{aligned}$$

ou seja, considera-se a atmosfera formada por apenas um tipo de átomo com número atômico efetivo e número de massa efetivo dados acima.

O estudo de cascatas eletromagnéticas pode ter dois enfoques, um tratando da propagação unidimensional, ou seja, longitudinal das partículas, e outro tratando da propagação tridimensional das partículas, onde se leva em conta a abertura lateral da cascata.

Quanto aos processos considerados, temos duas aproximações para efetuar o tratamento : "A" e "B". Na aproximação "A" são considerados apenas os processos de Bremsstrahlung, produção de pares e espalhamento múltiplo coulombiano, enquanto na aproximação "B" é acrescentada a perda de energia por ionização a uma razão constante. Estamos, portanto, em nosso tratamento, adotando a aproximação "B".

A simulação utiliza o método de Monte Carlo, que consiste em amostrar quantidades físicas a partir de variáveis aleatórias, conhecendo o comportamento dessas quantidades físicas.

Os resultados obtidos com o método de simulação evidenciam as flutuações inerentes ao fenômeno, ao contrário da solução analítica das equações de difusão correspondentes, que levam a resultados médios. Estes resultados médios também podem ser conseguidos na simulação, mas o número de eventos necessários para se diminuir os erros relativos nas grandezas médias exigiria um tempo de simulação e quantidade de memória consideráveis. Mas isto não diminui a importância da simulação porque em experimentos em Física de Partículas pode-se estar analisando um reduzido número de eventos. Outra vantagem da simulação é a não-necessidade de se recorrer a aproximações nas expressões das seções de choque como são necessárias para solução analítica.

Certamente um marco de referência importante na simulação de cascatas eletromagnéticas foi colocado em 1.985, com o código EGS4([1]), escrito por pesquisadores do SLAC (Stanford Linear Acelerator). O EGS4 (Electron-Gamma Shower) é a versão mais recente de um sistema de subrotinas para efetuar o transporte acoplado de elétrons (pósitrons) e fótons em uma dada geometria, aplicável para energias das partículas no intervalo de alguns KeV até vários TeV .

O grande inconveniente ao se utilizar um modelo computacional para descrever fenômenos complexos da natureza é o tempo gasto para se efetuar os cálculos. Mesmo não sendo objetivo principal dos trabalhos, a economia de tempo é uma preocupação para pesquisadores que utilizam modelos computacionais.

Especificamente em Raios Cósmicos necessita-se de um modelo computacional que efetue o transporte e as interações das partículas pela atmosfera e outros meios materiais como chumbo e água. As informações de interesse são o espectro de energia, a distribuição radial de elétrons e fótons, o número de partículas em função da altitude (ou da profundidade em relação ao topo da atmosfera).

Quanto maior a energia da partícula primária, maior será o número de partículas envolvidas e com isso maior tempo será necessário para o transporte das partículas. O tempo gasto pode ser tão elevado que torna proibitivo o uso do modelo computacional para a simulação do fenômeno.

Com o intuito de economizar tempo muitos trabalhos foram desenvolvidos nos últimos anos, motivados também pela grande evolução dos computadores neste período.

Em 1.985 Longo e Luminari([2]) desenvolveram um método para otimização no tempo de simulação baseado na recombinação de chuveiros eletromagnéticos previamente gerados. Este método foi aplicado para cascatas em cristais de BGO($Bi_4Ge_3O_{12}$) de dimensões próximas às do calorímetro eletromagnético do detector do experimento L3 no CERN (Organisation Européenne pour la Recherche Nucléaire).

A informação obtida dos chuveiros previamente gerados e armazenados é a densidade de partículas em células de tamanho apropriado do detector. O transporte efetivo das partículas é realizado para todas as partículas do chuveiro cuja energia está acima de um valor de corte dado por uma fração considerável da energia da partícula primária. Partículas com energia abaixo deste valor de corte não são transportadas. Usa-se, então , a informação obtida com os chuveiros previamente gerados. Desta maneira, é possível reproduzir flutuações e correlações, porque cada chuveiro simulado por Monte Carlo é constituído por outros chuveiros também simulados, de energia mais baixa.

Com objetivo principal de aumentar a precisão nos cálculos de transporte de elétrons, mas economizando tempo de CPU, existe um trabalho de 1.986 de Bielajew e Rogers([3]). Eles desenvolveram um algoritmo com-

posto por três procedimentos interligados. O primeiro procedimento é um algoritmo que diminui as diferenças entre o caminho total percorrido (curvo) pelo elétron ao sofrer espalhamento múltiplo coulombiano e o caminho de transporte (reto). Desta maneira, permite-se transportar os elétrons por passos maiores que os usuais sem perda na precisão dos cálculos. O segundo procedimento leva em consideração a translação perpendicular à direção de movimento durante o passo de transporte do elétron. Esta correção se torna importante quando é aumentado o passo de transporte do elétron no primeiro procedimento, pois com passos maiores esses deslocamentos no plano perpendicular são mais significativos. O último procedimento permite um transporte dos elétrons mais seguro e confiável próximo às fronteiras entre dois meios materiais. Isto é feito com a diminuição automática do passo de transporte.

A. Ferrari e colaboradores ([4]) trabalharam na mesma linha do trabalho de Bielajew e Rogers. Eles aplicaram procedimentos semelhantes em algoritmos para os Códigos FLUKA([5])(usado basicamente no transporte de hádrons e léptons de altas energias) e MCNPE-BO([6]) (usado no transporte de neutrons, fótons e elétrons).

Linn ([7]) em 1.989 desenvolveu um algoritmo para ser implantado no Programa GEANT ([8]), também com a intenção de reduzir o tempo de simulação de cascatas eletromagnéticas. Usando técnicas paramétricas, ele conseguiu preservar as características mensuráveis das cascatas eletromagnéticas aproximando um calorímetro de amostragem, construído de camadas alternadas de absorvedor e meio material sensível, por um meio homogêneo e parametrizando as distribuições que caracterizam os chuveiros iniciados por partículas de baixa energia. Seu algoritmo foi desenvolvido e implementado tendo em vista a aplicação para o experimento DØ, no Fermilab, no que se refere à resposta do detector, e resultou numa versão parametrizada que é 20 vezes mais rápida que a versão completa.

Também em 1.989 Grindhammer e colaboradores ([9]) desenvolveram um algoritmo para economizar tempo na simulação de chuveiros eletromagnéticos e hadrônicos em uma geometria definida pelo usuário com o

GEANT3([8]). A distribuição longitudinal e a lateral, bem como suas flutuações e correlações são modeladas de maneira consistente. Os dados da simulação por Monte Carlo foram gerados e testados para as estruturas de amostragem típicas do calorímetro H1, do experimento de mesmo nome no HERA(Hadron-Electron Ring Accelerator).

Todor Stanev e H.P. Vankov ([10]) em 1.994 desenvolveram um algoritmo híbrido para simulação de cascatas eletromagnéticas. Este algoritmo utiliza resultados previamente gerados de chuveiros iniciados por elétrons com energia entre 25 MeV e 100 GeV, divididos em 19 intervalos iguais em escala logarítmica (portanto, com cinco valores de energia por década). Todas as partículas do chuveiro com energia acima de 1,5 MeV são gravadas em intervalos de 1/2 comprimento de radiação. Para cada partícula são registrados seu tipo, sua energia, seus cossenos diretores e as duas projeções da distância da partícula ao eixo do chuveiro no plano perpendicular a ele. Considera-se que os elétrons com energia abaixo de 25 MeV não contribuem significativamente depois de 1/2 comprimento de radiação. A biblioteca contém dez chuveiros de cada energia previamente gerados. Todos os subchuveiros de elétrons com energia abaixo de 100 GeV são construídos randomicamente a partir dos dados colocados na biblioteca. Elétrons com energia acima de 100 GeV e fótons são seguidos num modelo tradicional de Simulação por Monte Carlo. Com a utilização deste método conseguiu-se diminuir o tempo de CPU de um fator de 5000.

Outra maneira de se conseguir resultados do fênomeno de cascatas é com a utilização de parametrizações, que são calculadas a partir de resultados de simulação. Existem alguns trabalhos ([11], [12], [13], [14], [15] e [16]) que seguiram esta metodologia, mas não serão abordados aqui devido ao enfoque diferente adotado neste trabalho de tese.

A pesquisa nesta tese abrangeu os estudos do Método de Monte Carlo e as técnicas de amostragem de variáveis aleatórias de diversas distribuições envolvidas no processo de cascatas eletromagnéticas. Igualmente foi estudada a geração de números aleatórios e foram testados algoritmos existentes na literatura.

Também foram estudados os processos físicos de criação de pares, Bremsstrahlung e espalhamento múltiplo coulombiano e foi feita a implementação das subrotinas de simulação desses processos. As subrotinas de simulação dos processos de Bremsstrahlung e criação de pares nos dão a fração de energia da partícula-filho em relação à partícula-pai, utilizando o método misto (com técnicas de rejeição e composição) nas expressões das seções de choque dos referidos processos, e o livre caminho antes do respectivo processo ocorrer. A subrotina de simulação do processo de espalhamento múltiplo coulombiano nos dá o ângulo de deflexão das partículas carregadas (elétron / pósitron) devido à presença no ar de outras partículas carregadas.

Também necessárias para a simulação são uma subrotina que efetua o transporte da partícula através da atmosfera, considerando as deflexões devidas ao campo magnético terrestre e ao espalhamento múltiplo coulombiano, e as subrotinas que relacionam a profundidade (dada em g/cm^2) e a altura a partir do nível do mar (dada em mm) com a parametrização da densidade atmosférica.

É de fundamental importância a subrotina que gerencia os dados das partículas chamando as demais subrotinas e, basicamente fazendo a multiplicação das partículas e eventual registro (que aqui corresponde à detecção). O gerenciamento dos dados é de grande relevância na simulação de qualquer fenômeno físico, principalmente na economia de tempo utilizado de máquina.

Como a simulação de cascatas eletromagnéticas consome um considerável tempo, principalmente para primários de altas energias (acima de 1 TeV), foram utilizados dois procedimentos[1] com a intenção de melhorar o desempenho da simulação sem o comprometimento dos resultados.

O primeiro procedimento baseia-se no transporte longitudinal virtual das partículas, sem considerar a influência do campo magnético terrestre, nem do espalhamento sofrido no meio material.

O segundo procedimento baseia-se no corte de partículas sem transportá-las nem mesmo virtualmente. Para tal, foi calculada uma função corte

[1] A idéia inicial da utilização destes procedimentos veio de um trabalho não publicado de Josef Spitzer(1989), quando no Instituto Max Planck, Heidelberg/Alemanha.

a partir de um estudo de subchuveiros com sobreviventes (pelo menos uma partícula com energia acima do limiar de detecção, que é considerada registrada).

Estes procedimentos foram adotados pois o grande gasto de tempo de simulação (até cerca de 80%) está no transporte de partículas pela atmosfera.

Capítulo 1

Processos físicos envolvidos

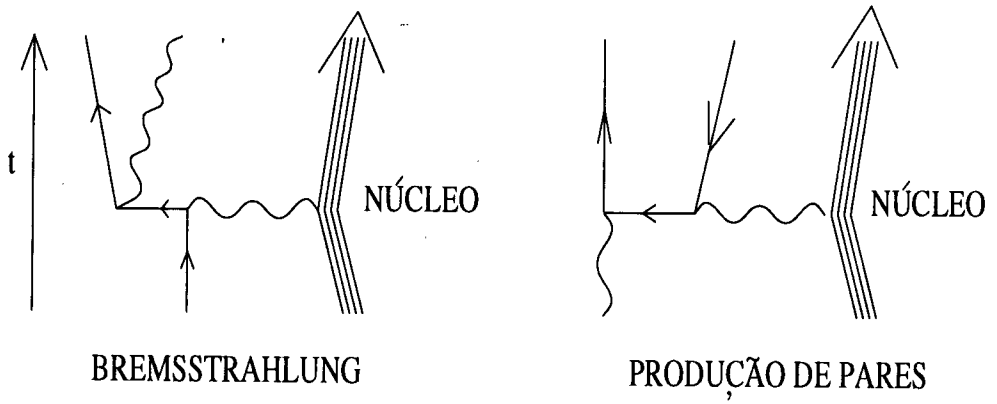

Figura 1.1: Diagramas de Feynman para os processos de Bremsstrahlung e produção de pares.

Os processos físicos estudados foram: produção de pares, Bremsstrahlung e espalhamento múltiplo coulombiano. Apresentamos os diagramas de Feynman elementares para os processos de Bremsstrahlung e produção de pares na figura (1.1).

1.1 Produção de pares

A seção de choque diferencial (microscópica, ou seja, por átomo) com correção coulombiana de Bethe-Heitler para um fóton com energia E produzir

um par elétron-pósitron (onde a partícula de menor energia do par tem ϵE) é dada em ([1]) pela expressão:

$$\frac{d\sigma}{d\epsilon} = r_0^2 \alpha Z(Z+\xi)\{[\epsilon^2 + (1-\epsilon)^2][\Phi_1(\delta) - F(Z)] + [\frac{2}{3}\epsilon(1-\epsilon)][\Phi_2(\delta) - F(Z)]\} \tag{1.1}$$

onde $\Phi_i(\delta)$ são as funções blindagem dependentes da variável blindagem δ dadas por :

$$\begin{aligned}
\Phi_1(\delta) &= 20,867 - 3,242\delta + 0,625\delta^2 \quad se \quad \delta \leq 1 \\
\Phi_1(\delta) &= 21,120 - 4,184 \quad ln(\delta + 0,952) \quad se \quad \delta > 1 \\
\Phi_2(\delta) &= 20,209 - 1,930\delta - 0,086\delta^2 \quad se \quad \delta \leq 1 \\
\Phi_2(\delta) &= 21,120 - 4,184 \quad ln(\delta + 0,952) \quad se \quad \delta > 1
\end{aligned} \tag{1.2}$$

$$\delta = \frac{136 m_e}{Z^{1/3} E} \frac{1}{\epsilon(1-\epsilon)}$$

Na aproximação de partículas primárias com altas energias temos :

$$\begin{aligned}
\delta &= 0 \\
\Phi_1(\delta = 0) &= 20,867 \\
\Phi_2(\delta = 0) &= 20,209
\end{aligned} \tag{1.3}$$

Temos ainda :

$$\begin{aligned}
F(Z) &= 4 \quad ln(Z^{-1/3}) \quad para \quad E < 0,05 GeV \\
&= 4 \quad ln(Z^{-1/3}) + 4 f_c(Z) \quad para \quad E \geq 0,05 GeV
\end{aligned} \tag{1.4}$$

onde $f_c(Z)$ é a constante de correção coulombiana para um material de número atômico Z e é dada pela expressão :

$$
\begin{aligned}
f_c(Z) &= a[\frac{1}{1+a} + 0,20206 - 0,0369a + 0,0083a^2 - 0,002a^3] \quad (1.5)\\
a &= (\alpha Z)^2\\
\alpha &= \frac{1}{137}
\end{aligned}
$$

$\xi(Z)$ é a função usada para considerar a interação com os elétrons atômicos. Esta função é dada pela expressão :

$$
\xi(Z) = \frac{ln(1194Z^{-2/3})}{ln(184,15Z^{-1/3}) - f_c(Z)} \quad (1.6)
$$

A atmosfera ($Z_{efetivo} = 7,37$) é o meio material em nossa simulação e, para este, $f_c(Z)$ é desprezível $(0,5\%)$ nas expressões de $F(Z)$ e $\xi(Z)$.

1.2 Bremsstrahlung

A seção de choque diferencial microscópica com correção coulombiana de Bethe-Heitler para um elétron (pósitron) com energia E produzir um fóton com energia ϵE é dada em ([1]) pela expressão:

$$
\begin{aligned}
\frac{d\sigma}{d\epsilon} = \frac{r_0^2 \alpha Z(Z+\xi(Z))}{\epsilon} \{ & [1 + (1-\epsilon)^2][\Phi_1(\delta) - F(Z)]\\
& -[\frac{2}{3}(1-\epsilon)][\Phi_2(\delta) - F(Z)]\} \quad (1.7)
\end{aligned}
$$

Aplicam-se aqui as mesmas considerações feitas sobre as diversas funções e variáveis para o processo de produção de pares, exceto a variável blindagem, que é dada pela expressão :

$$
\delta = \frac{136 m_e}{Z^{1/3} E} \frac{\epsilon}{(1-\epsilon)} \quad (1.8)
$$

1.3 Espalhamento múltiplo coulombiano

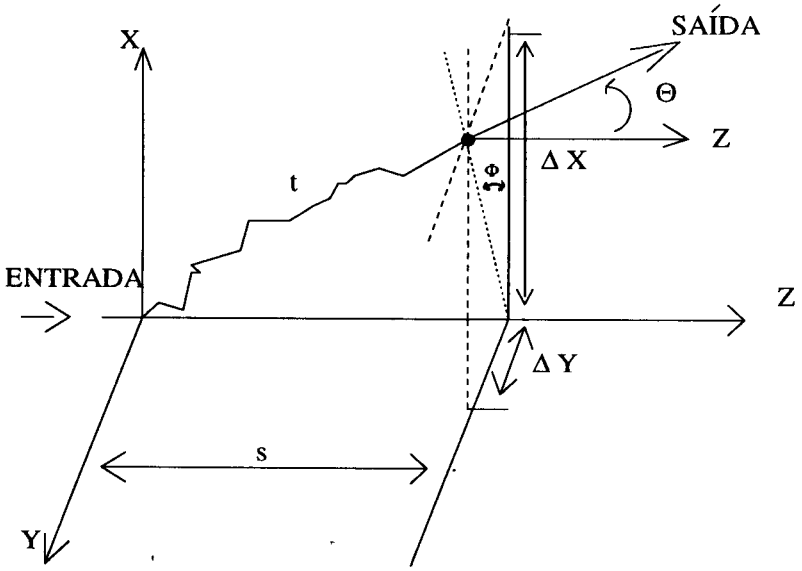

Figura 1.2: Diagrama de espalhamento múltiplo coulombiano

O processo de espalhamento múltiplo coulombiano é descrito pela Teoria de Molière com a formulação dada por Bethe [17]. Com ela pode-se estimar as pequenas deflexões que o elétron (pósitron) sofre ao passar por um meio material qualquer. Além de considerar as colisões elásticas com o núcleo atômico, existe um termo $\xi(Z)$ (idêntico aos termos nas seções de choque dos processos de Bremsstrahlung e produção de pares) que leva em conta a influência dos elétrons atômicos.

Consideremos que o elétron incide normalmente sobre um fatia de espessura s(cm) como mostrado na figura 1.2.

Ao alcançar a outra extremidade da fatia, o elétron terá percorrido uma distância total t (cm), terá deslocamentos laterais da direção inicial de Δx e Δy, e propagar-se-á em uma direção especificada pelos ângulos Θ e Φ. É feita uma correção para minimizar as diferenças entre s e t, mas os deslocamentos Δx e Δy serão aqui desprezados. Obviamente, isto só será possível impondo certos limites para passos de transporte do elétron.

A distribuição no ângulo azimutal (Φ) é uniforme no intervalo $(0, 2\pi)$.

A Teoria de Molière relaciona a função distribuição de probabilidade

em Θ com uma função distribuição de probabilidade em θ, denominado ângulo reduzido. Esta função distribuição de probabilidade no ângulo reduzido não depende explicitamente da energia da partícula.

A função distribuição de probabilidade em Θ é dada pela expressão :

$$f(\Theta) = f_M(\Theta)(\frac{sen \quad \Theta}{\Theta})^{1/2} \tag{1.9}$$

O ângulo reduzido relaciona-se com Θ pela expressão :

$$\theta = \frac{\Theta}{\chi_c B^{1/2}}, \tag{1.10}$$

onde χ_c e B são parâmetros que dependem da energia, do material (no caso o ar), e do livre caminho a percorrer.

A função distribuição de probabilidade no ângulo reduzido é dada pelos três primeiros termos da equação de Bethe [eq. 25 de [17]] :

$$f_r(\theta) = f_M(\Theta) = [f^{(0)}(\theta) + \frac{f^{(1)}(\theta)}{B} + \frac{f^{(2)}(\theta)}{B^2}], \tag{1.11}$$

sendo a fórmula geral para os $f^{(n)}$:

$$f^{(n)}(\theta) = (n!)^{-1} \int_0^\infty \mu d\mu J_0(\theta\mu) \exp(-\frac{\mu^2}{4})[\frac{1}{4}\mu^2 \quad ln(\frac{\mu^2}{4})]^n \tag{1.12}$$

Para $n = 0$ esta expressão se reduz a :

$$f^{(0)}(\theta) = 2\exp(-\theta^2) \tag{1.13}$$

O parâmetro B é obtido da equação transcendente:

$$B - \quad lnB = b \tag{1.14}$$

Onde :

$$b = ln\,(\frac{b_c t}{\beta^2}) \tag{1.15}$$

E:

$$b_c = \frac{4\pi N_a \hbar^2 \rho Z_S \exp(Z_E/Z_S)}{m_e^2 c M \exp(Z_X/Z_S)} \tag{1.16}$$

O parâmetro χ_c é dado pela expressão :

$$\chi_c = \frac{(4\Phi N_a \rho Z_S t)^{1/2} r_0 m_e}{E_{MS}\beta^2 M^{1/2}}, \tag{1.17}$$

com :

$$\begin{aligned} Z_S &= \sum p_i Z_i (Z_i + \xi_{MS}) \\ Z_E &= \sum p_i Z_i (Z_i + \xi_{MS}) \quad ln(Z_i^{-2/3}) \\ Z_X &= \sum p_i Z_i (Z_i + \xi_{MS}) \quad ln(1 + 3,34(\alpha Z_i^2)) \end{aligned} \tag{1.18}$$

N_a : constante número de Avogadro

ρ : densidade do material (g/cm^3)

α : constante de estrutura fina

r_0 : raio clássico do elétron

p_i : proporção em número do $i^{ésimo}$ elemento no material

Z_i : número atômico do $i^{ésimo}$ elemento no material

$f_c(Z_i)$: constante de correção coulombiana para o elemento Z_i para produção de pares e Bremsstrahlung

ξ_i : constante de correção dos elétrons atômicos do elemento Z_i para produção de pares e Bremsstrahlung.

E_{MS}: energia da partícula em MeV.

m_e: massa do elétron.

c: velocidade da luz no vácuo.

Os parâmetros apresentados acima são dados em [1].

Capítulo 2

Simulação de cascatas eletromagnéticas na atmosfera

A simulação de cascatas eletromagnéticas envolve o desenvolvimento de um modelo computacional que realize operações que representem a propagação e as interações das partículas envolvidas.

A base do modelo é que as seções de choque físicas são diretamente representadas por distribuições de probabilidade, e assim podemos amostrar a transferência de energia para a partícula-filho utilizando o método de Monte Carlo nas expressões da seção de choque diferencial dos processos de produção de pares e Bremsstrahlung.

A propagação de cada partícula carregada produzida no fenômeno envolve o processo de espalhamento múltiplo coulombiano, a influência do campo magnético terrestre e, consequentemente, a atualização dos cossenos diretores e das coordenadas da partículas com a parametrização da densidade atmosférica, além da perda de energia por ionização a uma razão constante ($6{,}678 \times 10^{-2}$ GeV/X_0). Já a propagação dos fótons envolve apenas a atualização das coordenadas com a parametrização da densidade atmosférica.

A simulação inicia-se com a entrada na atmosfera de uma partícula primária que pode ser um γ, ou elétron, ou pósitron com energia entre 4 MeV e 1.000 TeV. Esse é o intervalo de energia na atmosfera no qual apenas esses processos físicos são relevantes e as expressões de seção de choque

anteriormente apresentadas são válidas.

2.1 Gerenciamento computacional dos dados das partículas

Nesta seção é apresentado o algoritmo simulador usual de cascatas eletromagnéticas, na maneira conveniente para implementação do método proposto . O gerenciamento é similar ao utilizado pelo EGS4 ([1]) que privilegia o acompanhamento das partículas de menor energia.

Os vários parâmetros das partículas já produzidas, mas cujos subchuveiros ainda não foram simulados, são guardados na sequência de "gavetas" chamada "pilha". A gaveta contém os dados referentes a uma partícula. O algoritmo é organizado de maneira que a pilha contenha os dados das partículas continuamente do índice 1 até o de mais alto valor da pilha. A variável contendo o mais alto valor atual do índice é chamada "ponteiro" da pilha. A qualquer momento, a partícula no ponteiro da pilha é transportada, e a partícula anterior ao ponteiro está esperando pelo processamento. A partícula é removida da pilha quando sua energia fica menor que a energia de limiar de detecção, que é a mínima para registro, ou quando ela interage e seus secundários são produzidos. Os parâmetros dos secundários são devidamente colocados nas gavetas da pilha, de maneira que os referentes ao filho de maior energia sejam colocados na gaveta até então destinada ao pai e os parâmetros do filho de menor energia sejam colocados na próxima gaveta.

O processo continua com a partícula no novo ponteiro, a menos que o ponteiro da pilha indique zero, mostrando que não há mais partícula a ser transportada e que a simulação do chuveiro total terminou.

Os dados da partícula colocados na gaveta são :

- tipo da partícula : γ, e^+ ou e^-
- sua energia (GeV)
- seus cossenos diretores : $\cos\alpha$, $\cos\beta$ e $\cos\gamma$

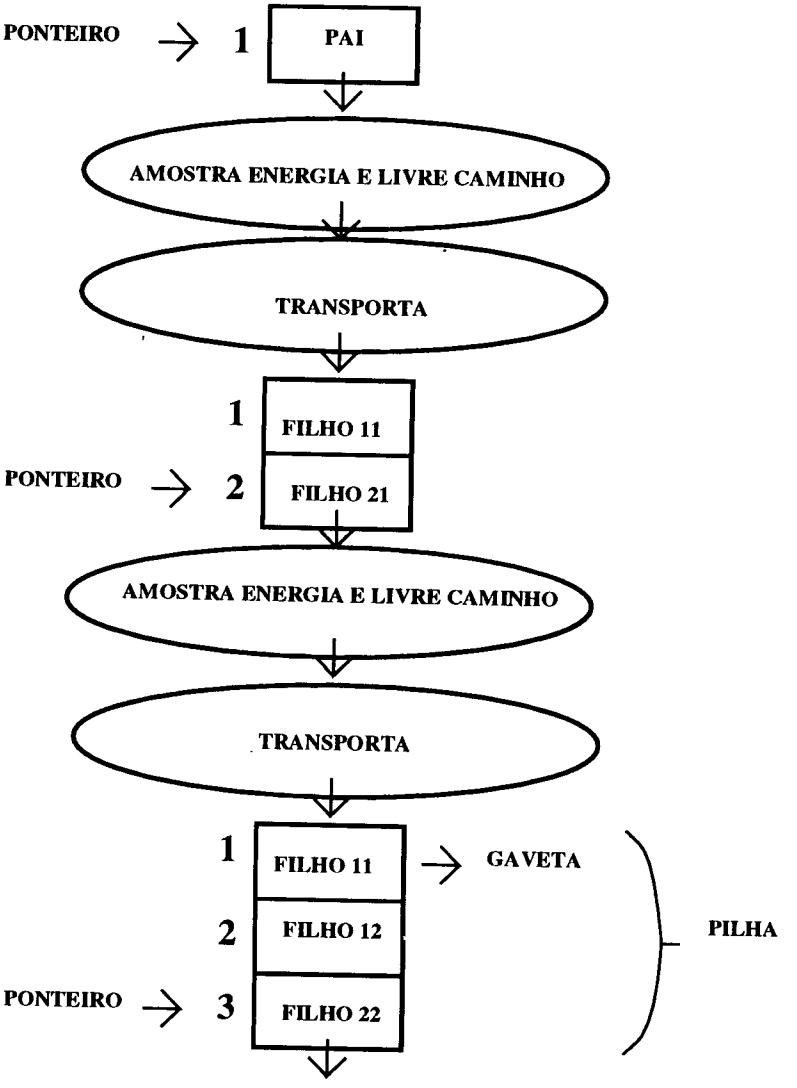

Figura 2.1: Esquema simplificado do gerenciamento de dados

- suas coordenadas no plano perpendicular ao eixo do chuveiro(mm): x, y e a altura a partir do nível do mar(mm): z

- seu índice da região da partícula; o programa permite até 4 níveis de detecção ou registro

- seu caminho total percorrido (mm) ou tempo de vôo

- sua profundidade (vertical) na atmosfera (g/cm^2)

A partícula produzida com menor energia será sempre posta no ponteiro da pilha para evitar colocar um grande número de partículas na pilha, e desta maneira acarretando a necessidade de uma grande memória de armazenamento. Dessa maneira, o tamanho da pilha não deve exceder $log_2(E_{primário}/E_{registro})$ [1], um número geralmente menor que 100, onde $E_{registro}$ é a energia de limiar.

A organização do algoritmo é dada na sequência abaixo :

(1) colocam-se os dados da partícula na primeira posição da pilha.

(2) verifica-se o tipo da partícula: γ ou e^{+ou-}.

(3) verifica-se a energia é menor que a mínima para registro. Se sim, volta-se a (2) e busca-se (caso exista) a partícula anterior na pilha.

(4) chama-se um dos processos: se γ - Produção de pares, se e^{+ou-} - Bremsstrahlung; amostra-se a fração de energia dos filhos e o livre caminho do pai.

(5) transporta-se a partícula-pai, que retorna com um índice chamado bandeira indicando se a partícula:

- (a) foi rejeitada, porque ou sua energia diminuiu para um valor menor que o da energia mínima de registro, ou a partícula está se movendo na direção contrária à da Terra. Diminui-se a pilha de 1 e volta-se para (2).

- (b) atingiu uma profundidade de registro. Retorna-se para (2), mantendo o ponteiro na mesma posição da pilha, a menos que esta seja a

última profundidade de registro, quando então se diminui a pilha de 1 e volta-se a (2).

(6) colocam-se os filhos na pilha priorizando o de menor energia para o ponteiro da pilha. Volta-se para (2).

(7) os 7 passos anteriores serão repetidos até não haver mais partícula na pilha.

Os passos acima são esquematizados na figura (2.1) de maneira simplificada para melhor visualização do gerenciamento de dados.

2.2 Transporte das partículas

O transporte de partículas pela atmosfera envolve:

Fótons

- atualização das coordenadas espaciais com a parametrização da atmosfera de Shibata/Gaisser/Chinellato (ver Apêndice A) que permite transformar profundidades (dadas em g/cm^2) em alturas (dadas em mm) e vice-versa;
- registro das partículas.

Elétrons

- amostragem do ângulo Θ de espalhamento múltiplo coulombiano;
- amostragem do ângulo azimutal Φ de uma distribuição uniforme $(0,2\pi)$;
- deflexão devida ao campo magnético terrestre (calculado para o Equador);
- atualização da direção de vôo (cossenos diretores);
- atualização das coordenadas espaciais com a parametrização da atmosfera;

- registro das partículas.

Para realizar estes ítens foi desenvolvida uma subrotina para transportar a partícula, que pode ser movida com ou sem espalhamento múltiplo e deflexão no campo magnético: se for um elétron (ou pósitron), ela move a partícula considerando as influências do espalhamento e do campo, se for γ, não há tal necessidade.

A partícula será transportada de um passo que é o menor dentre :

- distância até o próximo nível de registro;
- livre caminho até a próxima interação;
- 0,2 X_0 (7,4 g/cm^2), que é o passo máximo para espalhamento múltiplo coulombiano [1].

Como há perda de energia por ionização, antes de transportar, verificamos se a energia não estará abaixo do limiar ao final do passo. Sendo assim, não há transporte.

Calcula-se então a deflexão sofrida devida ao campo magnético terrestre. Este ângulo não será maior que 0,05 (para um passo de 0,2 X_0) radianos para a aproximação utilizada ser válida (ver página 128 do EGS4 [1]). Se ultrapassar este limite, devemos reduzir o passo do transporte. Calculam-se então os novos cossenos diretores.

Feito isto, precisa-se quantificar a deflexão devida ao espalhamento múltiplo coulombiano amostrando os ângulos Θ e Φ, e atualizar a direção da partícula (os novos cossenos diretores).

Estes limites impõem a necessidade de um grande gasto de tempo em propagar as partículas carregadas em vários passos, pois estes são fundamentais para a simulação do fênomeno. Aumentando o tamanho dos passos pode-se perder a precisão necessária para efetuar os cálculos.

Capítulo 3

Otimização de tempo na simulação

Como já foi citado, o transporte de partículas pela atmosfera é a etapa que mais consome tempo na simulação do fenômeno. Para exemplificar : na simulação de uma cascata iniciada por um fóton primário de 10 TeV, com uma energia de limiar (ou registro) de 4 MeV e com a profundidade de registro de 25 X_0 (cerca de 400m acima do nível do mar) gasta-se 75% do tempo de simulação no transporte de elétrons e 3% para o transporte de fótons. Sem a menor dúvida, a maneira mais eficiente de economizar tempo é buscar opções para realizar esta etapa sem desperdiçar tempo com partículas que não contribuirão para os resultados da simulação do fenômeno, ou seja, não contribuirão com partículas com energia acima do limiar na profundidade de detecção.

Pensando nisto, foram estudados dois procedimentos, os quais denominamos:

- A) Algoritmo catalisador
- B) Função corte

3.1 Procedimento A: Algoritmo catalisador

Um esquema simplificado do gerenciamento de dados no algoritmo catalisador é apresentado na figura (3.1).

O algoritmo catalisador foi construído para efetuar virtualmente o transporte longitudinal das partículas. O transporte é virtual pois os dados das partículas que interagem não são eliminados da pilha. O transporte longitudinal consiste em mover a partícula de uma distância dada pelo livre caminho amostrado nas subrotinas dos processos de produção de pares e Bremsstrahlung, sem considerar as deflexões de espalhamento e no campo magnético terrestre e sem converter esses valores segundo a parametrização atmosférica. Um esquema ilustrativo é apresentado na figura 3.2. A entrada no algoritmo catalisador é feita para partículas com energia menor que um valor que pode ser escolhido pelo usuário no ínicio da simulação, e não há obrigatoriedade desta energia ser a mesma da partícula primária. Discutiremos a energia de entrada no algoritmo catalisador ilustrado esquematicamente na figura 3.3 no Capítulo 4. Caso a partícula-pai desse subchuveiro que entrou no algoritmo catalisador, ou pelo menos um de seus descendentes chegue à profundidade de registro com energia acima do limiar, todo o subchuveiro será transportado, agora efetivamente, como mostrado no capítulo anterior. Senão, todo o subchuveiro será descartado.

3.2 Procedimento B: Função corte

Neste procedimento descartam-se partículas, sem nem mesmo transportá-las virtualmente, desde que suas energias sejam menores que valores calculados a partir de uma função dependente da profundidade que a partícula ainda tem que percorrer até o nível de registro.

Esta função foi calculada a partir de um estudo na propagação longitudinal de partículas e possível registro destas, ou de pelo menos um de

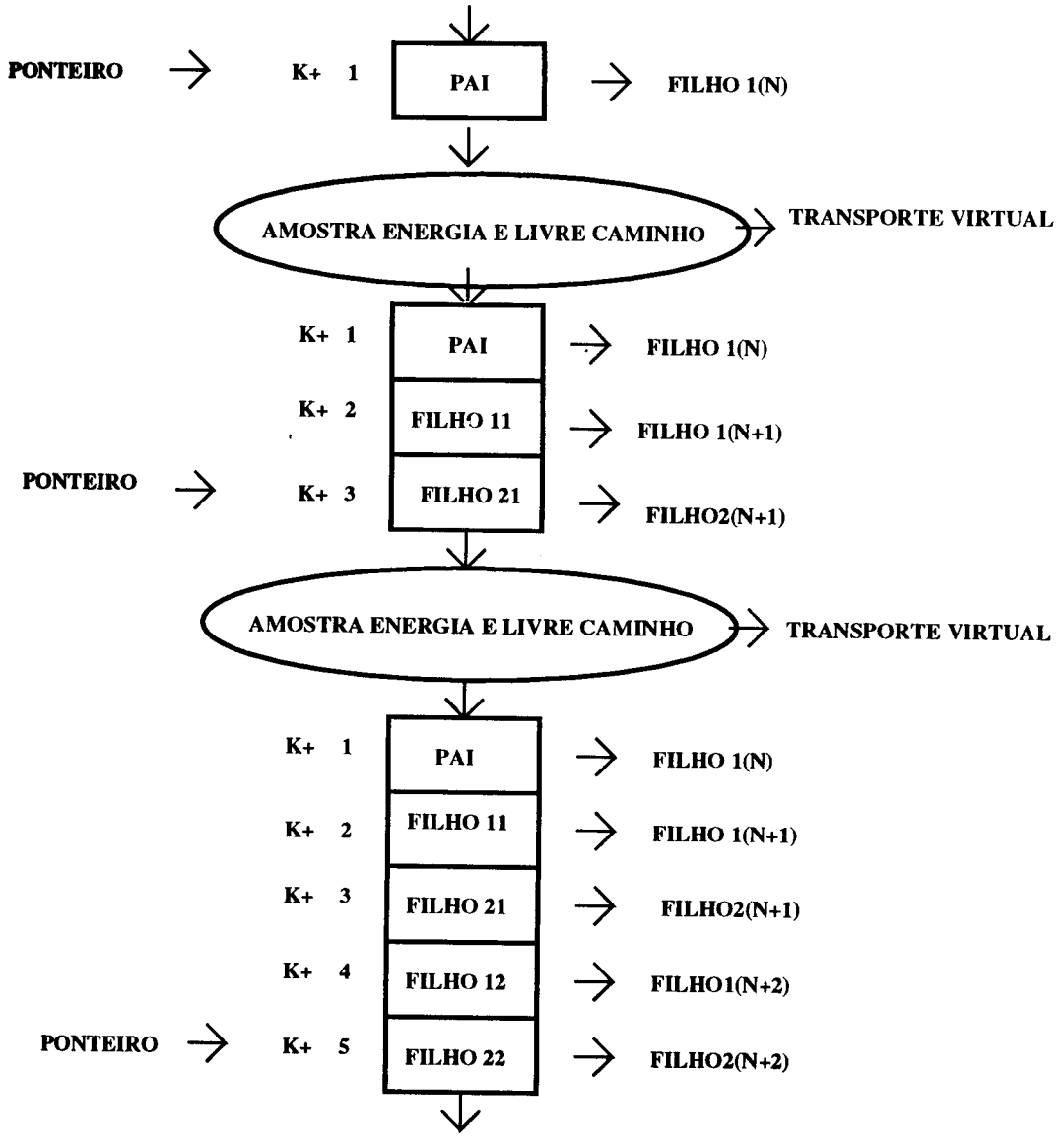

Figura 3.1: Esquema simplificado do gerenciamento de dados no algoritmo catalisador. A partícula-pai no algoritmo catalisador não necessariamente é a partícula primária que inicia a cascata.

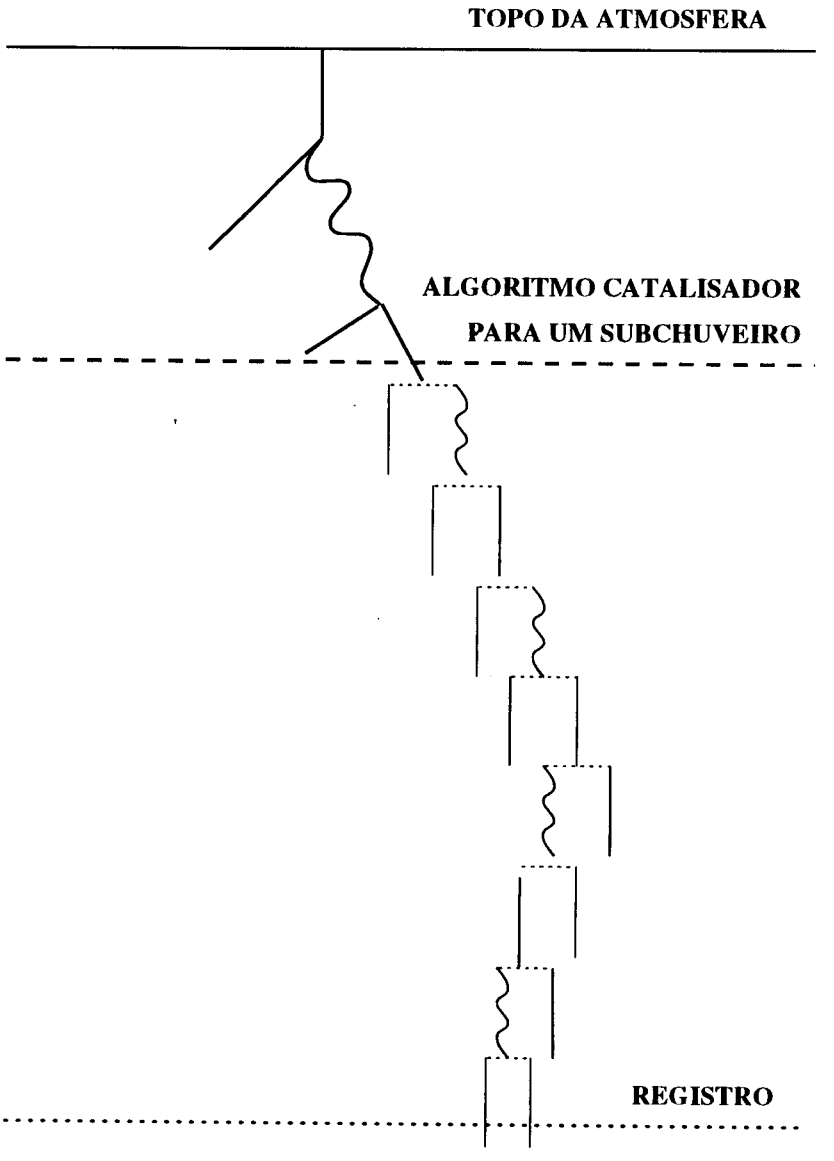

Figura 3.2: Esquema do acompanhamento de partículas na atmosfera com entrada no algoritmo catalisador.

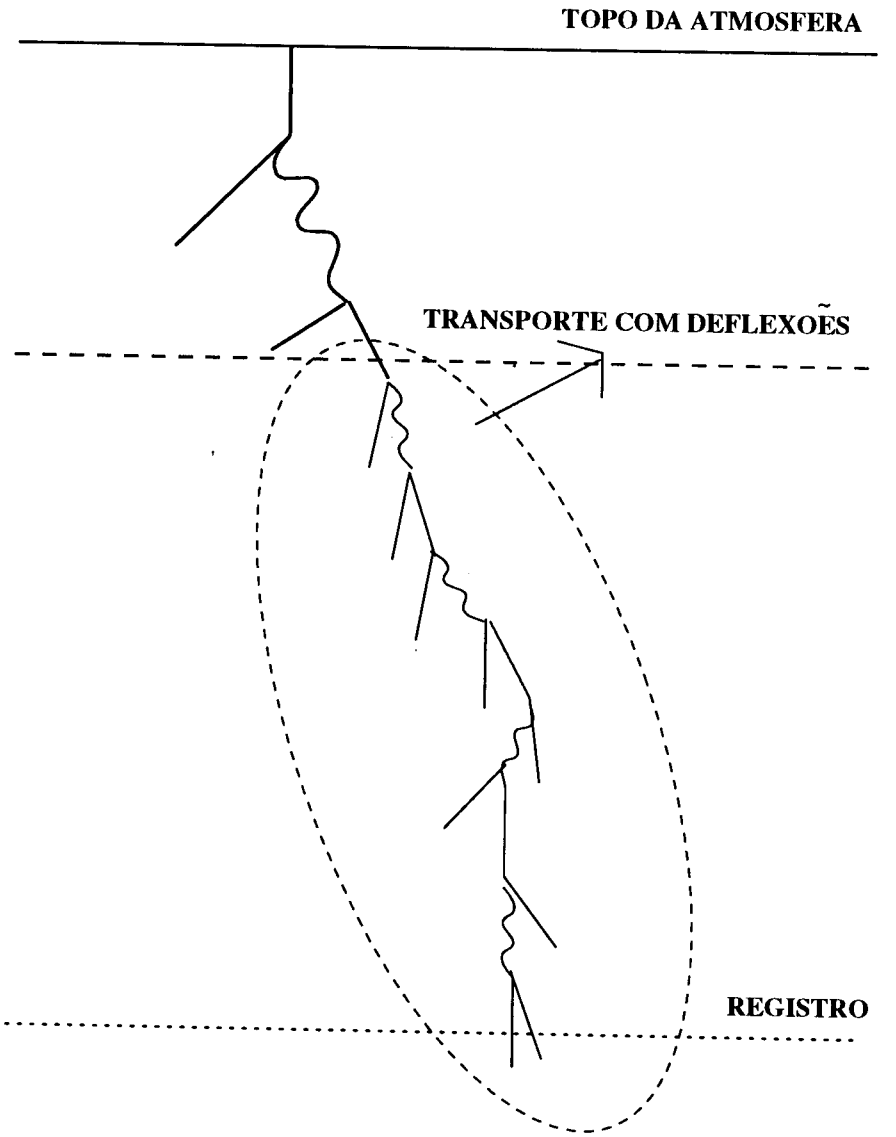

Figura 3.3: Esquema do acompanhamento de partículas na atmosfera, agora fazendo o transporte real considerando as deflexões das partículas do sub-chuveiro que, neste exemplo, contribui com pelo menos um descendente na profundidade de registro.

seus descendentes. Para isto construíram-se gráficos com as energias dos pais (fótons ou elétrons) dos subchuveiros com sobreviventes e as respectivas profundidades até o registro. Os gráficos com os subchuveiros sobreviventes e respectivas profundidades até o registro são dados, respectivamente, nas figuras (3.5 e 3.6) para elétrons e fótons.

Do estudo destes gráficos foi construída uma função corte. Esta função nos dá o valor de energia para o qual, abaixo deste, os subchuveiros muito provavelmente não terão pelo menos um sobrevivente na profundidade de registro, exceto quando ocorrerem grandes flutuações, que, como já dito, são inerentes ao processo. A função corte é dada pela expressão:

$$f_{corte}(\Delta t) = \frac{E_{corte}(\Delta t)}{GeV} = 10^{-3,0+0,12243\Delta t+ajuste} \tag{3.1}$$

sendo Δt a profundidade que a partícula tem que percorrer até o registro, expressa em unidades de X_0.

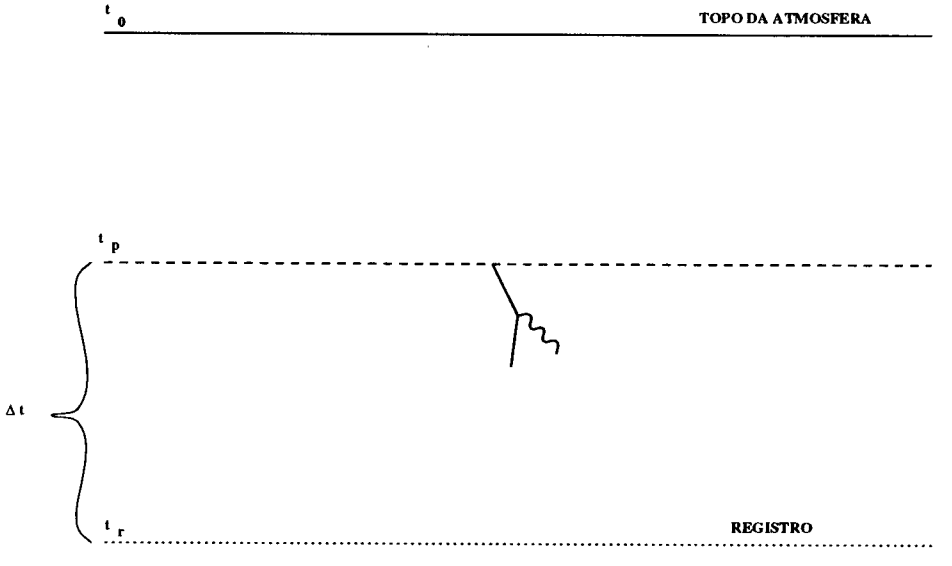

Figura 3.4: Esquema mostrando a profundidade Δt que a partícula tem que percorrer até a profundidade de registro. Aqui t_p é a profundidade de criação da partícula, t_r é a profundidade de registro e Δt é a diferença entre estas profundidades.

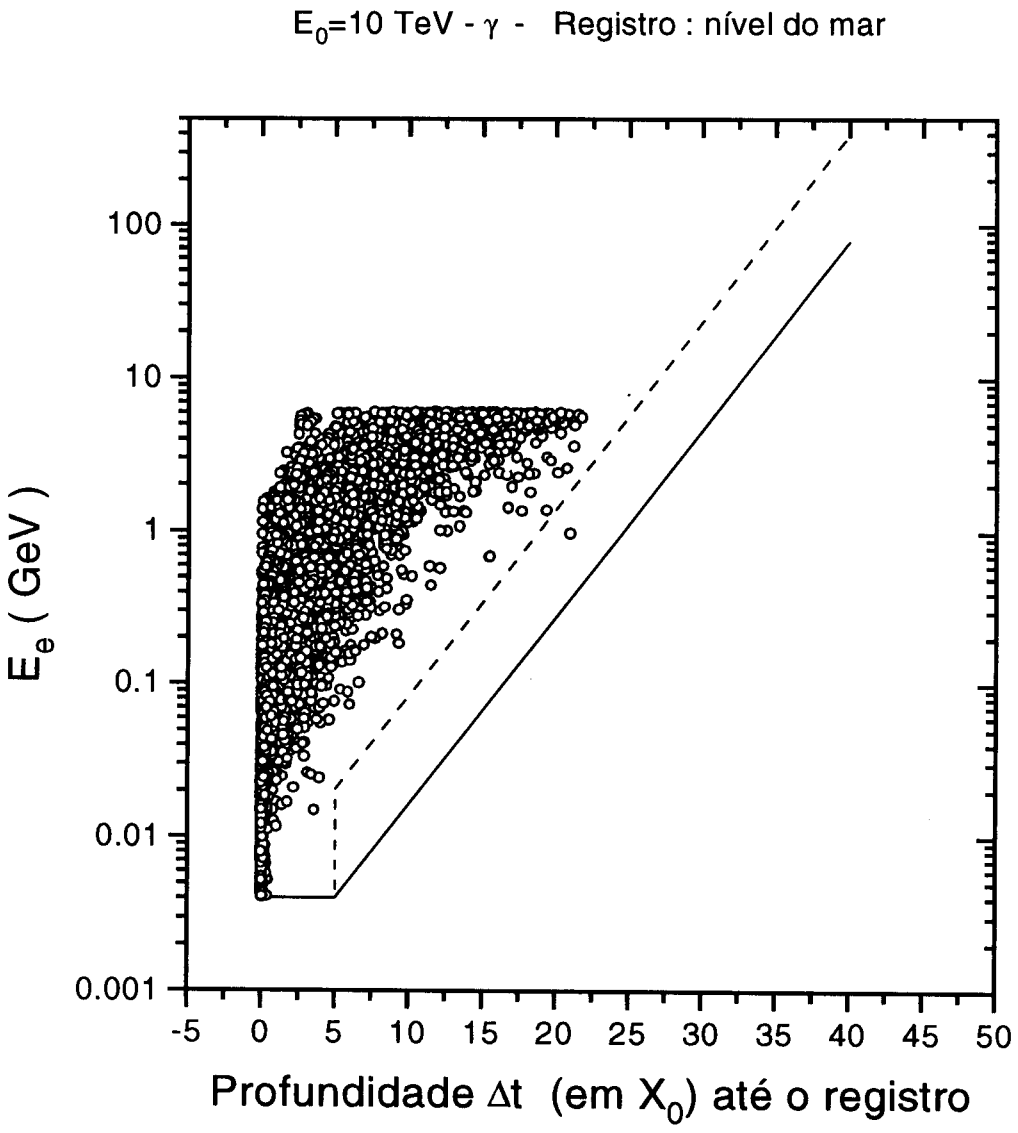

Figura 3.5: Gráfico da energia versus a profundidade até o registro de elétrons (pais de subchuveiros com sobreviventes) de um γ primário de 10 TeV, com transporte longitudinal desses subchuveiros abaixo de 6 GeV e energia de limiar de 4 MeV. Gráfico da função corte construída e função corte com ajuste +0,7 (reta tracejada). Foram simulados 10 eventos.

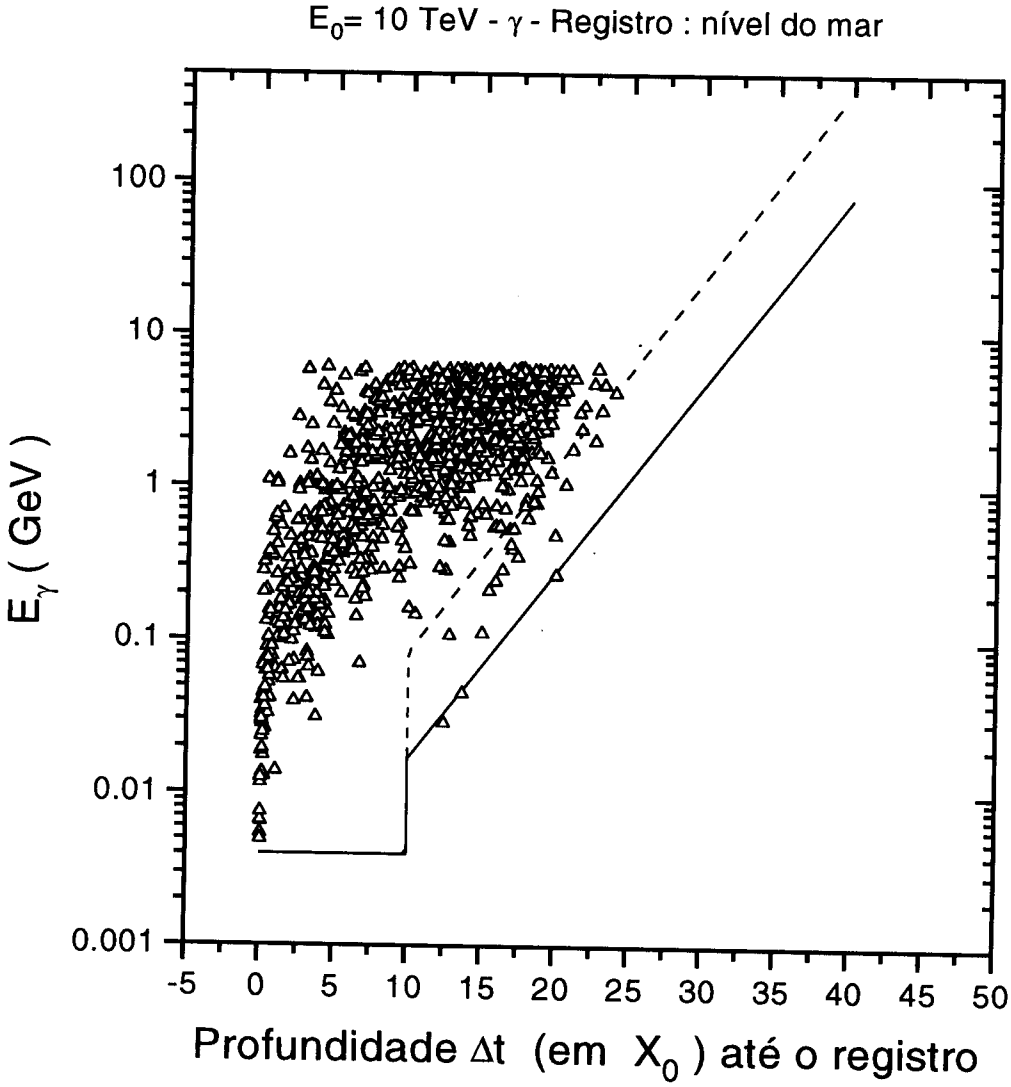

Figura 3.6: Gráfico da energia versus a profundidade até o registro de γ's (pais de subchuveiros com sobreviventes) de um γ primário de 10 TeV, com transporte longitudinal desses subchuveiros abaixo de 6 GeV e energia de limiar de 4 MeV. Gráfico da função corte construída e função corte com ajuste +0,7 (reta tracejada). Foram simulados 10 eventos.

Pode-se notar pelos gráficos apresentados nas figuras (3.5 e 3.6) que tanto para elétrons, quanto para fótons, utilizamos a mesma função corte. Isto é feito para simplificar o corte, minimizando a necessidade de comandos condicionais na simulação. Um parâmetro de ajuste pode ser colocado para, de acordo com as necessidades do usuário, poder cortar maior ou menor número de subchuveiros dentro de uma margem de segurança relacionada com a probabilidade do subchuveiro não contribuir com pelo menos um sobrevivente na profundidade de registro.

É importante notar (ver figuras 3.5 e 3.6) que existem profundidades mínimas para corte, que são: $10{,}0X_0$ para fótons e $5{,}0X_0$ para elétrons. Estas são colocadas para permitir possíveis flutuações no livre caminho amostrado.

Capítulo 4

Resultados

O programa que executa a simulação utiliza algumas subrotinas descritas neste trabalho e foi desenvolvido em linguagem Fortran [18]. As simulações foram realizadas em estação de trabalho modelo Alpha.

Como já foi citado anteriormente, não há a necessidade de se utilizar o algoritmo catalisador no início do fenômeno, ou seja, já com a partícula primária entrando neste algoritmo. Podem entrar no algoritmo partículas cujas energias sejam menores que determinado valor (aqui denominado energia de entrada no catalisador). Uma sensata maneira de avaliar a energia de entrada é estudar o ganho de tempo em função da razão entre esta energia de entrada e a energia de limiar. Assim apresentaremos o resultado de um estudo feito sobre a razão entre a energia de entrada no algoritmo catalisador (e, consequentemente, a realização dos procedimentos A e B) e a energia de limiar. As simulações mostradas na tabela 4.1 foram feitas para um γ primário de $E_0 = 10$ TeV, $E_{limiar} = 10$ MeV e profundidade de registro: 25 X_0.

Na tabela 4.1 vemos que, se a energia de entrada no algoritmo catalisador ($E_{catalisador}$) for de 100 MeV (10 vezes a energia de limiar), realizamos a simulação 2,3 vezes mais rapidamente do que quando não utilizamos os procedimentos. O ganho máximo é para uma energia de entrada de 10 GeV (1.000 vezes a energia de limiar). Acima desta razão há uma saturação no

$E_{catalisador}$	Ganho de tempo
100 MeV	2,3
1 GeV	4,7
10 GeV	5,6
100 GeV	5,6
1 TeV	5,6

Tabela 4.1: Relação entre ganho de tempo e entrada no algoritmo catalisador

ganho de tempo, ou seja, a energia de entrada não precisa ser muito maior que 1.000 vezes a energia de limiar. Uma boa escolha da razão entre as energias de entrada no algoritmo e energia de limiar está entre 1.000 e 2.000. Esta razão foi obtida para outras profundidades e pode ser estendida para outros valores de energia da partícula primária.

O estudo acima é útil para justificar e guiar a escolha dos valores de energia de entrada no catalisador.

Foram realizadas, também, simulações para quantificar o ganho de tempo, sempre utilizando conjuntamente os dois procedimentos. Resultados que mostram estes ganhos são apresentados na tabela 4.2 para algumas profundidades para cascatas iniciadas por um γ primário de 10 TeV com entrada no catalisador abaixo de 6 GeV e energia de limiar de 4 MeV. O valor 6 GeV (para energia de entrada no algoritmo e realização dos procedimentos) foi escolhido por dois motivos: o primeiro vem do estudo da razão entre as energias de entrada e energia de limiar, e o segundo vem da energia máxima de corte calculada pela função de corte dada pela equação 3.1. A energia máxima de corte estimada é 3,6 GeV , que corresponde ao valor de energia de corte para uma partícula que atravessa a atmosfera desde seu topo até o nível do mar (cerca de 28 X_0). Isto significa que nunca será cortada, sem ser transportada virtual ou realmente, uma partícula com energia maior que 3,6 GeV, utilizando a função corte sem ajuste.

Na tabela (4.2) podemos ver que o ganho máximo foi conseguido com a utilização dos procedimentos para o caso simulado com a profundidade de

registro em 25 X_0 (cerca de 400m acima do nível do mar) e com o parâmetro de ajuste da função de corte igual a +0,7. Este valor de ajuste aumenta em cerca de 5 vezes as energias de corte calculadas. Apresentamos resultados para os seguintes valores de ajuste: +0,7, +0,3, -0,3 e -0,7, e, é claro, sem ajuste (ou este igual a 0).

Profundidades	ajuste +0,7	ajuste +0,3	sem ajuste	ajuste -0,3	ajuste -0,7
10,0 X_0	2,2	1,9	1,9	1,7	1,6
14,6 X_0	2,5	2,3	2,2	2,2	2,2
25,0 X_0	15,9	8,5	7,0	4,8	4,0

Tabela 4.2: Ganho de tempo com os procedimentos (algoritmo catalisador e função corte): valores para γ primário de 10 TeV, $E_{catalisador}$ = 6 GeV, E_{limiar} = 4 MeV

Para justificar a utilização dos procedimentos temos que, além de quantificar o ganho de tempo, mostrar que os resultados da simulação são mantidos com a utilização dos procedimentos. Podemos comparar bem os resultados analisando os comportamentos médios do número de partículas registradas e as distribuições destes números registrados em cada cascata simulada. Isto é feito nas tabelas e gráficos seguintes.

A tabela (4.3) mostra os comportamentos do número médio[1] de fótons e elétrons registrados e a tabela (4.4) mostra os comportamentos médios da soma de energia de fótons e elétrons registrados. Foram simulados 1.000 eventos.

Nas tabelas (4.3 e 4.4) podemos ver que as maiores diferenças são: cerca de 9% para número de elétrons registrados e 7% para número de fótons registrados utilizando conjuntamente os procedimentos e considerando o parâmetro de ajuste igual a +0,7 para uma profundidade de registro de 25 X_0; cerca de 13% para soma de energia de elétrons registrados e 10% para

[1] Apresentamos os valores médios e respectivos desvios padrão. O desvio padrão indica a flutuação em torno da média e não o erro no cálculo.

		A e B	A e B	SEM A e B
Tipo	Profundidades	ajuste= +0,7	sem ajuste	médias
e^-	10,0 X_0	-1,7%	-1,1%	$(10,1 \pm 2,6)10^3$
e^-	14,6 X_0	+1,7%	+1,2%	$(8,6 \pm 1,7)10^3$
e^-	20,0 X_0	+4,1%	+2,0%	$(2,1 \pm 1,5)10^3$
e^-	25,0 X_0	+8,7%	+5,0%	$(3,0 \pm 4,2)10^2$
γ	10,0 X_0	-2,1%	-1,5%	$(28,3 \pm 7,9)10^3$
γ	14,6 X_0	+1,3%	+0,9%	$(28,6 \pm 4,1)10^3$
γ	20,0 X_0	+3,5%	+1,2%	$(8,4 \pm 4,8)10^3$
γ	25,0 X_0	+7,2%	+4,2%	$(1,4 \pm 1,6)10^3$

Tabela 4.3: Comportamentos médios em número de partículas sem os procedimentos e diferenças com os procedimentos para ajustes 0 e +0,7

soma de energia de fótons registrados. Estas diferenças são completamente aceitáveis considerando a grande flutuação nesta profundidade. A flutuação é avaliada pelo desvio padrão, o qual, nos casos citados, chega a um valor máximo duas vezes maior que a média calculada (no caso da soma de energia de fótons). Estas flutuações, como já dissemos, são inerentes ao fenômeno. Estas diferenças são totalmente aceitáveis , também, para os outros valores usados para o parâmetro de ajuste.

As diferenças obtidas não são exclusivamente ocasionadas pelo uso dos procedimentos, mas sim, pelo baixo número de eventos aqui simulados. Este fato é bem ilustrado pelos histogramas apresentados nas figuras 4.1, 4.2, 4.3 e 4.4. Como exemplo analisemos os dados apresentados nos histogramas da figura 4.1. Neste caso o número médio de elétrons registrados é igual a 300 e pelo histograma vemos que em cerca de 90% dos eventos simulados (em ambos os casos apresentados: com procedimentos e ajuste +0,7 e sem procedimentos) são registrados até 600 elétrons (até o terceiro intervalo dos histogramas). Os outros 10% estão distribuídos entre 600 e 6.000 elétrons registrados. As flutuações extremas desses eventos são grandes contribuintes para as diferenças nos valores médios e acabam prejudicando a análise e

		A e B	A e B	SEM A e B
Tipo	Profundidades	ajuste= +0,7	sem ajuste	ΣE (GeV)
e^-	10,0 X_0	+0,5%	+0,4%	$(3{,}7\pm0{,}7)10^3$
e^-	14,6 X_0	+3,8%	+2,1%	$(1{,}4\pm0{,}7)10^3$
e^-	20,0 X_0	+6,5%	+3,9%	$(2{,}1\pm2{,}3)10^2$
e^-	25,0 X_0	+13,0%	+13,0%	$(2{,}2\pm4{,}3)10^1$
γ	10,0 X_0	+1,8%	+1,4%	$(3{,}8\pm0{,}5)10^3$
γ	14,6 X_0	+2,5%	+1,8%	$(1{,}7\pm0{,}6)10^3$
γ	20,0 X_0	+5,3%	+3,3%	$(3{,}3\pm2{,}8)10^2$
γ	25,0 X_0	+9,8%	+8,2%	$(4{,}3\pm6{,}4)10^1$

Tabela 4.4: Comportamentos médios em soma de energia das partículas sem os procedimentos e diferenças com os procedimentos para ajustes 0 e +0,7

comparação dos comportamentos médios. Uma maneira alternativa para comparação seria analisar as médias para os eventos com até 600 elétrons registrados. Esta faixa englobaria cerca de 90% dos eventos simulados. Como podemos ver pela tabela (4.5) a diferença entre as médias calculadas diminui de 8,7% para 2,4% no caso mais extremo (com procedimentos e ajuste +0,7).

Analogamente podemos reavaliar os comportamentos médios para a soma de energia dos elétrons bem como para o número e soma de energia dos fótons registrados. Esta reavaliação é mostrada nas tabelas (4.5) e (4.6) e delas podemos reforçar o que já foi discutido sobre o acordo dos resultados e a influência do baixo número de eventos simulados.

Pelos histogramas apresentados nas figuras (4.1), (4.2), (4.3) e (4.4) podemos nos convencer da coerência dos resultados obtidos utilizando os procedimentos, visto que as distribuições dos números de partículas e da soma de energia nos 1.000 eventos deste caso são bem próximas às das distribuições correspondentes sem procedimentos. Conseguimos, então, mostrar que os resultados se mantêm com a utilização dos procedimentos. Isto pode ser visto, também, para as outras profundidades simuladas e para os outros valores do parâmetro de ajuste da função de corte construindo os respectivos

histogramas.

		A e B	A e B	SEM A e B
Tipo	Eventos	ajuste= +0,7	sem ajuste	médias
e^-	Todos	+8,7% (100%)	+5,0% (100%)	$(3{,}0 \pm 4{,}2)10^2$ (100% dos eventos)
e^-	$N_e < 600$	+2,4% (87,5%)	-0,6% (88,6%)	$(2{,}0 \pm 1{,}3)10^2$ (89,3% dos eventos)
γ	Todos	+7,2% (100%)	+4,2% (100%)	$(1{,}4 \pm 1{,}6)10^3$ (100% dos eventos)
γ	$N_\gamma < 3.000$	-0,02% (87%)	-0,07% (88%)	$(9{,}5 \pm 5{,}6)10^3$ (89% dos eventos)

Tabela 4.5: Comportamentos médios em número de partículas sem os procedimentos e diferenças com os procedimentos para ajustes 0 e +0,7 para a profundidade de 25 X_0. Apresentamos também as diferenças minimizadas após estudo dos histogramas da distribuição dos 1.000 eventos

		A e B	A e B	SEM A e B
Tipo	Eventos	ajuste= +0,7	sem ajuste	ΣE (GeV)
e^-	Todos	+13,0% (100%)	+13,0% (100%)	$(2{,}2 \pm 4{,}3)10^1$ (100% dos eventos)
e^-	$\Sigma E_e < 60$ GeV	-0,05% (90,9%)	-1,7% (92,4%)	$(1{,}4 \pm 1{,}3)10^1$ (93,7% dos eventos)
γ	Todos	+9,8% (100%)	+8,2% (100%)	$(4{,}3 \pm 6{,}4)10^1$ (100% dos eventos)
γ	$\Sigma E_\gamma < 80$ GeV	+0,01% (89,6%)	+0,01% (91,5%)	$(2{,}9 \pm 2{,}1)10^1$ (91,9% dos eventos)

Tabela 4.6: Comportamentos médios em soma de energia das partículas sem procedimentos e diferenças com os procedimentos para ajustes 0 e +0,7 para a profundidade de registro de 25 X_0. Apresentamos também as diferenças minimizadas após estudo dos histogramas da distribuição dos 1.000 eventos.

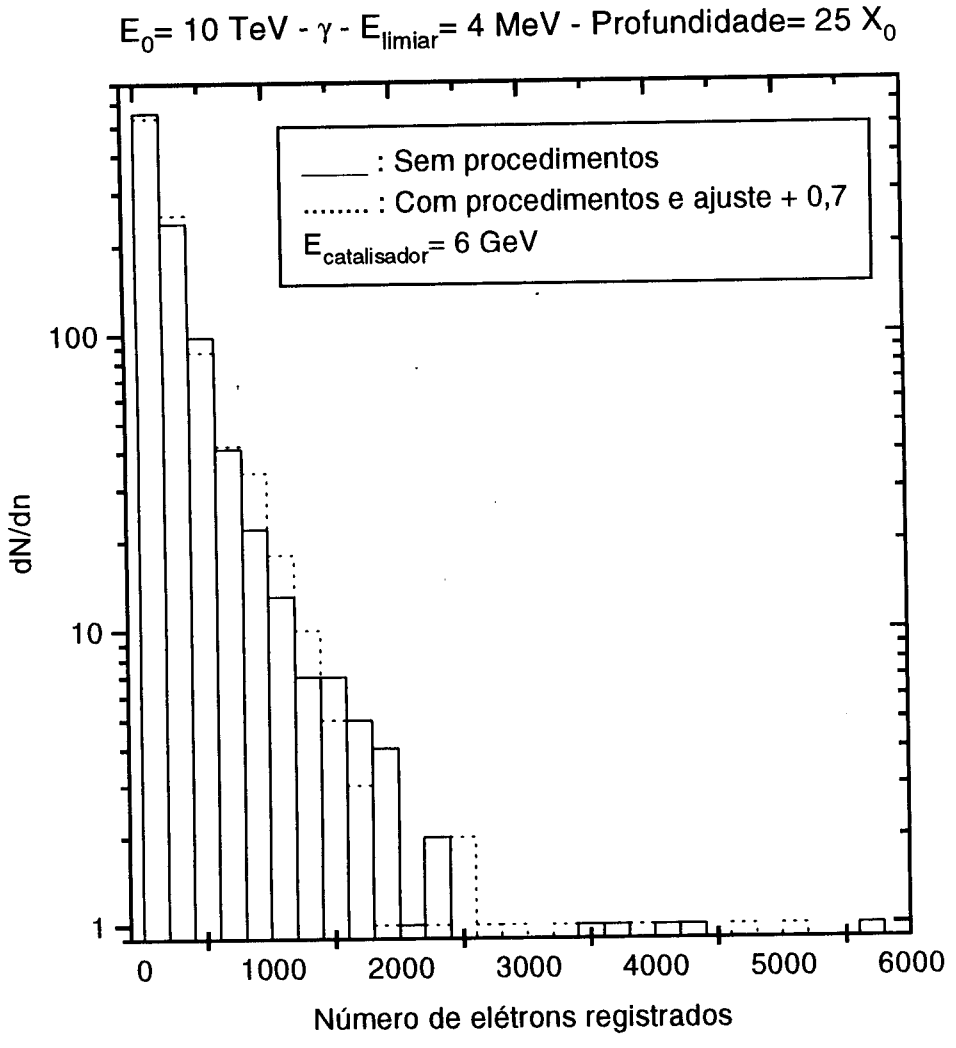

Figura 4.1: Histogramas com a distribuição do número de elétrons registrados em 1.000 eventos

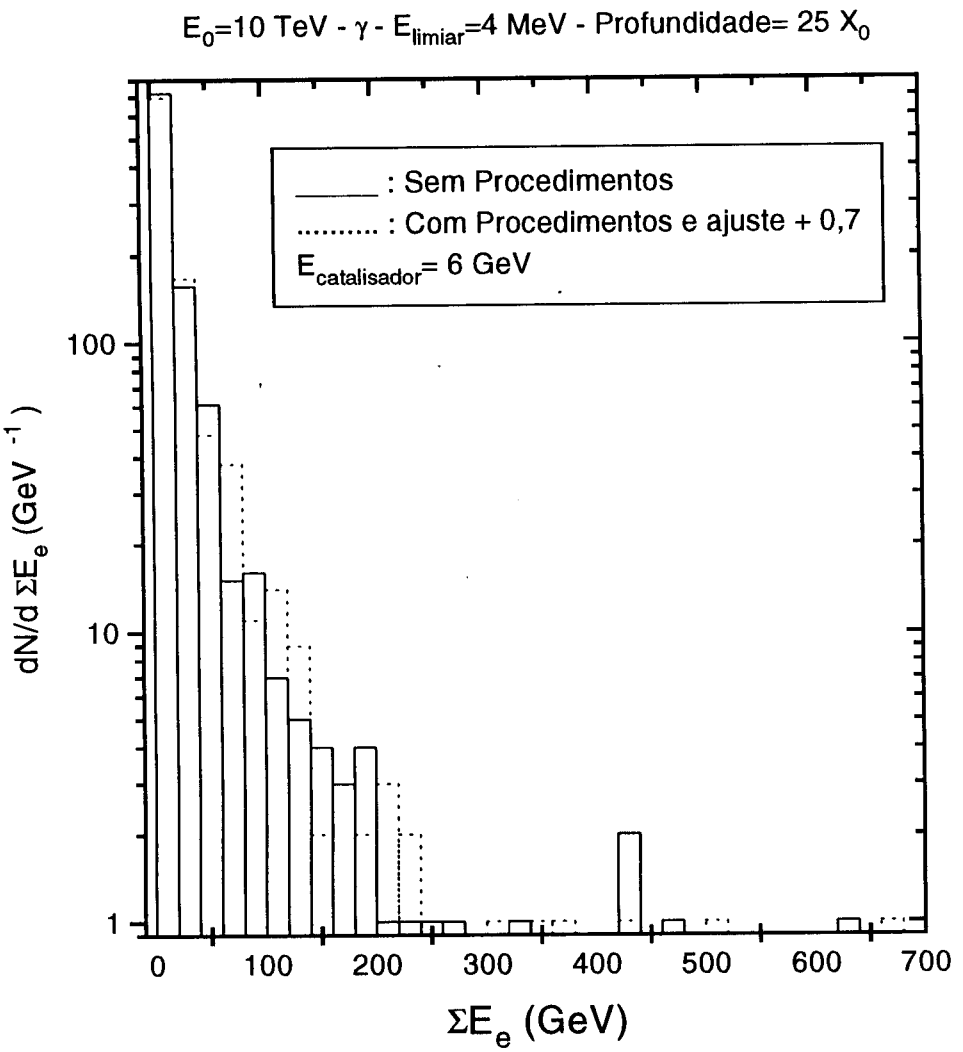

Figura 4.2: Histogramas com a distribuição da soma das energias dos elétrons registrados em 1.000 eventos

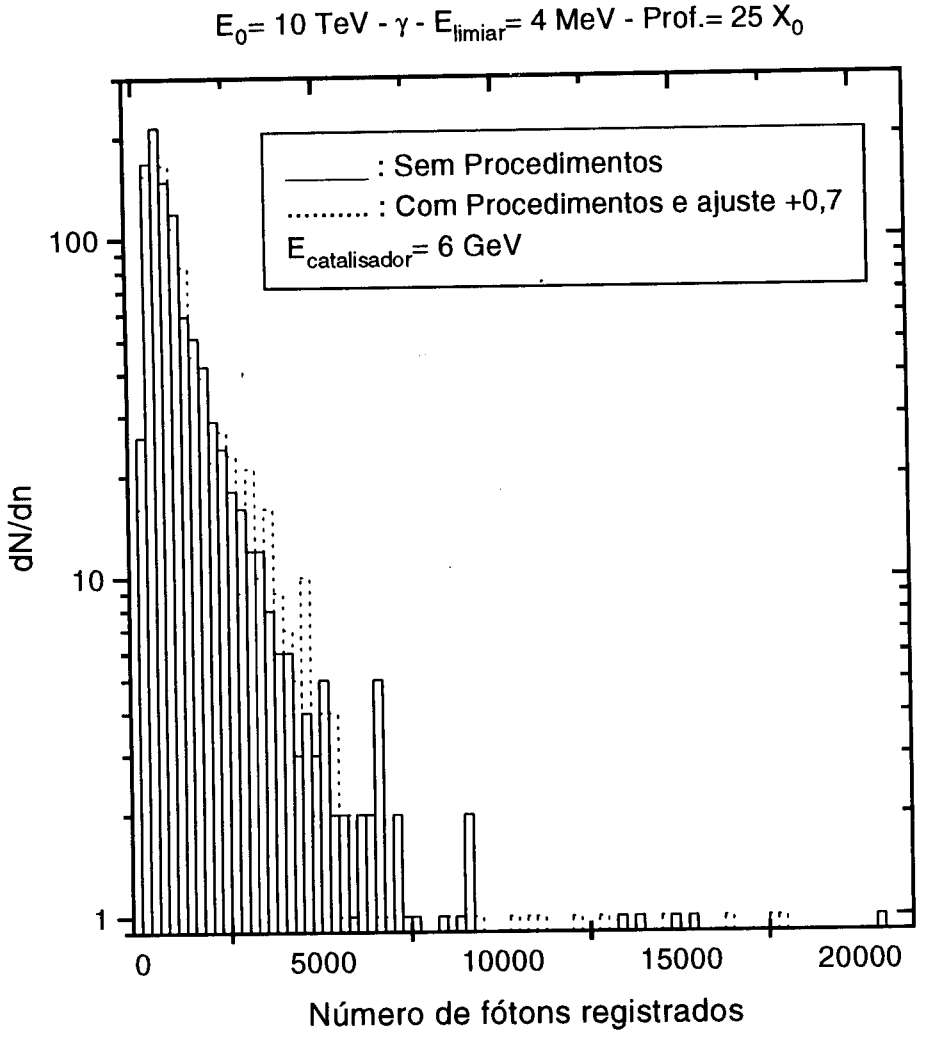

Figura 4.3: Histogramas com a distribuição do número de fótons registrados em 1.000 eventos

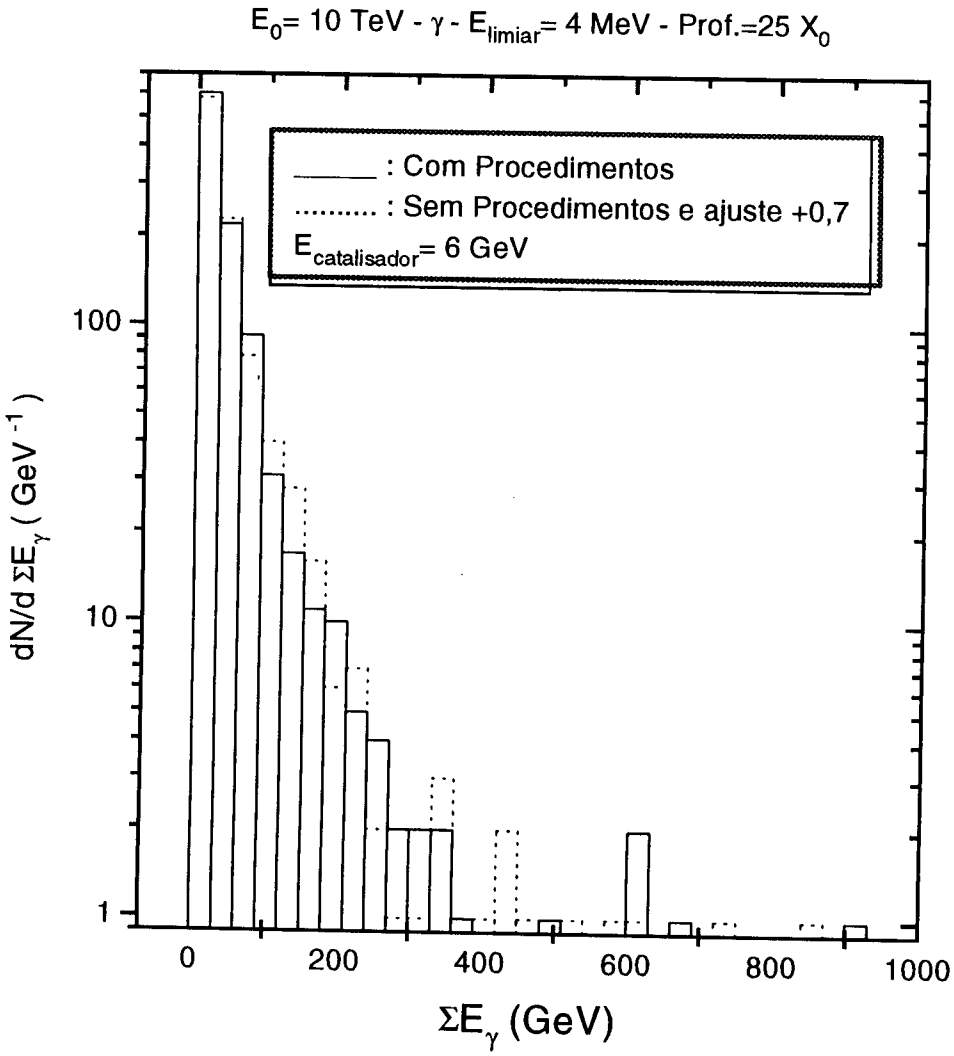

Figura 4.4: Histogramas com a distribuição da soma das energias dos fótons registrados em 1.000 eventos

Capítulo 5

Conclusão

Com a utilização dos procedimentos estudados conseguimos um considerável ganho de tempo. A simulação foi executada até 16 vezes mais rápida (para a profundidade de 25,0 X_0). Podemos alcançar maior economia para energias maiores que 10 TeV e para profundidades maiores que 25,0 X_0.

Desta maneira, conseguimos minimizar o grande inconveniente da simulação, que é o tempo dispendido.

Os resultados da simulação com a utilização dos procedimentos são os mesmos, comparando-os aos da simulação sem os procedimentos e considerando a influência da flutuação, que é inerente ao fenômeno.

Esses procedimentos podem ser implementados no Programa EGS4 ([1]), pois o gerenciamento de dados utilizado neste trabalho é similar ao utilizado no programa citado.

Os procedimentos podem ser utilizados em outros meios materiais, pois a função corte foi desenvolvida em unidades de comprimento de radiação. Apenas deve-se ter um certo cuidado ao estender os procedimentos para materiais mais densos que o ar, pois nestes as deflexões são mais relevantes, ou seja, as diferenças entre as propagações longitudinal e tridimensional são maiores.

Na simulação completa de chuveiros atmosféricos os procedimentos utilizados devem melhorar bastante o desempenho da simulação, visto que

o maior tempo é gasto na simulação da parte eletromagnética dos chuveiros atmosféricos.

Uma eficiência ainda maior pode ser obtida com a utilização de diferentes funções corte para elétrons e fótons, pois para os elétrons (maiores consumidores de tempo de simulação) podemos utilizar um valor de parâmetro de ajuste maior do que para fótons sem corrermos o risco de prejudicarmos a simulação. Este argumento foi conseguido dos gráficos mostrados nas figuras (3.5 e 3.6).

Apêndice A

Parametrização da densidade atmosférica

As subrotinas que convertem profundidade atmosférica (g/cm^2) em altitude (mm), e vice-versa, foram desenvolvidas por Chinellato ([19]) a partir de uma parametrização da densidade atmosférica :

$$\begin{aligned} h_\nu(km) &= 47.05 + 6.9 ln X_\nu + 0.299 ln^2(1/10 X_\nu), X_\nu < 25 g/cm^2 \\ h_\nu(km) &= 45.5 - 6.64 ln X_\nu, \qquad 25 g/cm^2 < X_\nu < 230 g/cm^2 \qquad \text{(A.1)} \\ h_\nu(km) &= 44.34 - 11.861 (X_\nu)^{0.19}, \qquad X_\nu > 230 g/cm^2; \end{aligned}$$

feita por Shibata e Gaisser (pág. 34 do [20]). Foram feitas correções nas fronteiras $25 g/cm^2$ e $230 g/cm^2$ da equação (A.1) a fim de tornar as funções e suas derivadas contínuas, evitando assim possíveis diferenças nas reciprocidades das conversões.

Apêndice B

Comprimento de Radiação

Dentro das aproximações "A" e "B" da Teoria de Cascatas Eletromagnéticas o desenvolvimento de uma cascata é independente do meio material quando distâncias são medidas em comprimento de radiação; assim, em nossa simulação, teremos resultados para livre caminho expressos em comprimento de radiação. O comprimento de radiação (X_0) é definido como :

$$
\begin{aligned}
X_0 &= N_a \rho 4 \alpha r_0^2 (Z_{AB} - Z_F)/M \\
Z_{AB} &= \sum p_i Z_i (Z_i + \xi_i) \quad ln(184,15 Z_i^{-1/3}) \\
Z_A &= \sum p_i Z_i (Z_i + \xi_i) \quad ln(184,15) \\
Z_B &= \sum p_i Z_i (Z_i + \xi_i) \quad ln(Z_i^{-1/3}) \\
Z_F &= \sum p_i Z_i (Z_i + \xi_i) f_c(Z_i),
\end{aligned}
\tag{B.1}
$$

sendo :

N_a : constante número de Avogadro

ρ : densidade do material (g/cm^3)

α : constante de estrutura fina

r_0 : raio clássico do elétron

p_i : proporção em número do $i^{ésimo}$ elemento no material

Z_i : número atômico do $i^{ésimo}$ elemento no material

$f_c(Z_i)$: constante de correção coulombiana para o elemento Z_i para produção de pares e Bremsstrahlung

ξ_i : constante de correção dos elétrons atômicos do elemento Z_i para produção de pares e Bremsstrahlung.

Apêndice C

Método de simulação de Monte Carlo

Este método consiste, basicamente, na utilização de números aleatórios para estimar quantidades numéricas ou comportamentos estatísticos . O nome Monte Carlo surgiu na década de 40 no desenvolvimento de armas nucleares por cientistas em Los Alamos.

A simplicidade conceitual do método e o nível de evolução da capacidade de cálculo dos computadores atuais favorecem o seu uso, em detrimento a um método " determinístico " convencional. Outro fator importante é o de o método, apesar de não ter sido exclusivamente criado para tal, conduzir a resultados satisfatórios na descrição de processos físicos.

Geralmente o método de Monte Carlo utiliza geradores de números aleatórios distribuídos uniformemente de (0,1), mas na descrição de sistemas físicos frequentemente necessitamos de outras distribuições. Assim, desenvolveram-se várias técnicas que permitem a obtenção de distribuições quaisquer a partir da distribuição uniforme.

C.1 Geração de números aleatórios

O desenvolvimento de cascatas eletromagnéticas apresenta flutuações intrínsecas, e por isso, a simulação por Monte Carlo é muito adequada para estudar o fenômeno. Os resultados podem ser caracterizados por um ou mais

números x_i, onde:

$$-\infty < x_i < +\infty \tag{C.1}$$

Esses números podem ser distribuídos contínua ou discretamente.

Como obter números aleatórios para utilizá-los em simulação computacional, visto que estes números são imprevisíveis de antemão? Para isto temos os geradores de números aleatórios, que são algoritmos numéricos que produzem uma sequência de números uniformementes distribuídos no intervalo (0,1) (e aparentemente aleatórios) a partir de um número inteiro inicial (semente). Primeiramente aparecem dois problemas a serem enfrentados:

- os geradores devem satisfazer as leis estatísticas.
- a utilização de um mesmo valor inicial (semente) irá sempre produzir a mesma sequência .

Obviamente, nenhum gerador é " perfeito estatisticamente ". Podemos classificá-lo pelo nível de correspondência com o comportamento estatístico esperado. Para isto, testes são realizados analisando :

- o comportamento do valor médio da sequência gerada.
- o comportamento da variância da sequência gerada.
- o período (quantidade de números gerados sem repetição) da sequência.
- o histograma da sequência gerada.

Esses geradores são quase sempre baseados na congruência linear, gerando uma sequência de inteiros I_1, I_2, I_3,..., entre 0 e "m-1" pela relação de recorrência[1]:

[1]Seja um inteiro não nulo. Para quaisquer inteiros a, b diz-se que a é congruente com b módulo m, denotado por $a \equiv b(mod \quad m)$, se e somente se $(a-b)$ for divisível por m, ou seja, os restos das divisões de a/m e b/m forem iguais.

$$I_{j+1} \equiv aI_j + c(mod \quad m) \tag{C.2}$$

onde "m" é um número inteiro não nulo, e "a" e "c" são inteiros positivos chamados de multiplicador e incremento, respectivamente. A equação C.2 repetirá eventualmente um mesmo número inteiro com um período que é obviamente menor que "m". Se "m", "a" e "c" forem adequadamente escolhidos, então o período terá o tamanho máximo, isto é, o tamanho de "m". Neste caso todos os possíveis inteiros entre 0 e "m-1" ocorrem em algum ponto e qualquer semente escolhida para I_0 é tão boa quanto qualquer outra. O número real entre 0 e 1 que é retornado é geralmente I_{j+1}/m, de modo que ele é estritamente menor que 1, mas ocasionalmente (uma vez em "m" chamadas) igual a zero.

O método de congruência linear tem a vantagem de ser nuito rápido, requerendo poucas operações por chamada, daí ele ser de uso universal.

Park e Miller [21] propuseram um gerador denominado "Minimal Standard Generator" baseado nos dados :

$$\begin{aligned} a &= 7^5 = 16.807 \\ m = 2^{31} - 1 &= 2.147.483.647 \\ c &= 0 \end{aligned} \tag{C.3}$$

Este gerador tem passado em todos novos testes teóricos ao longo dos anos, e (talvez mais importante) acumulado uma grande quantidade de uso bem sucedido.

Não é possível implementar as equações C.2 e C.3 diretamente em uma linguagem de alto nível, pois o produto de "a" e "m-1" excede o máximo valor de um inteiro para 32-bits.

Um truque feito por Schrage [21] baseado na fatoração aproximada de "m" permite usar o Minimal Standard Generator em qualquer máquina e implementá-lo em qualquer linguagem.

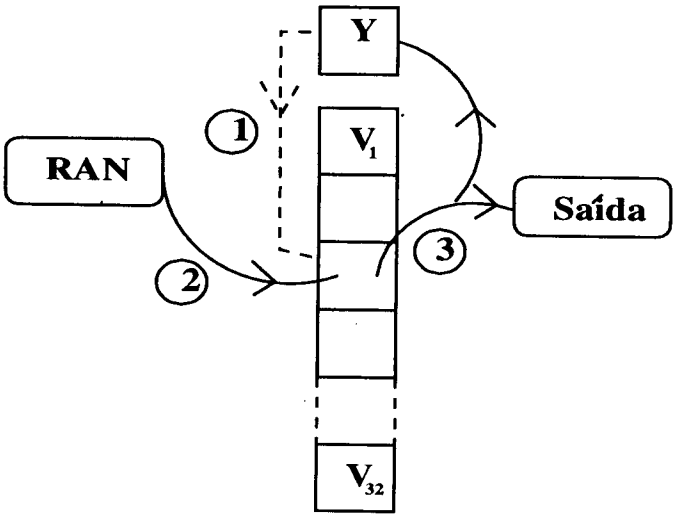

Figura C.1: Esquema sobre ran1. Algoritmo embaralhador para tirar correlações sequenciais de baixa ordem. Números circulados indicam a ordem dos eventos : em cada chamada, o número aleatório em y é usado para escolher um elemento na sequência embaralhadora v (com 40 inteiros, onde 8 são descartados). Desta sequência sairá o número aleatório gerado, e também a semente para o y seguinte. A sequência embaralhadora é devidamente renovada, a cada 32 números amostrados.

A rotina escolhida para ser utilizada, ran1 [21], usa o Minimal Standard Generator para gerar seus valores aleatórios, mas embaralha a saída para remover correlações em série de baixa ordem. O desvio aleatório derivado do $j^{ésimo}$ valor na sequência, I_j, não sai na $j^{ésima}$ chamada, mas preferivelmente numa randomização após a chamada "j+32", em média. O algoritmo embaralhador foi feito por Bays e Durham como descrito no Numerical Recipes [21], e está ilustrado na figura (C.1).

De fato, não se sabe de qualquer teste estatístico em que ran1 falhe, exceto quando o número de chamadas começa a ficar da ordem do período "m", ou seja $> 10^8 = m/20$.

Esta rotina é recomendada por [21] devido ao seu alto grau de confiabilidade aliado ao rápido tempo de execução.

C.2 Amostragem de variáveis aleatórias de uma dada distribuição a partir da distribuição uniforme

O método que utilizaremos na simulação de cascatas eletromagnéticas para amostragem de variáveis aleatórias é o método misto. Este método permite amostrar valores da variável aleatória de uma dada função distribuição de probabilidade a partir de valores de uma variável uniformemente distribuída no intervalo (0,1) com técnicas de composição e rejeição.

Primeiramente introduziremos alguns conceitos de variáveis aleatórias e probabilidade. Nós iremos representar variáveis colocando um "^ " sobre elas. Se E é uma expressão lógica envolvendo variáveis aleatórias, então nós escreveremos $Pr\{E\}$ para a probabilidade de que E seja verdade. Chamaremos F a função distribuição acumulativa de $\hat{x}$ se :

$$F(x) = Pr\{\hat{x} < x\} \tag{C.4}$$

onde F(x) é diferenciável; assim :

$$f(x) = \frac{dF(x)}{dt} \tag{C.5}$$

é a função densidade de probabilidade (fdp) de $\hat{x}$ e

$$Pr\{a < \hat{x} < b\} = \int_b^a f(x)dx \tag{C.6}$$

Neste caso $\hat{x}$ é chamada uma variável aleatória contínua. No caso discreto temos :

$$F(x) = \sum_{x_i \leq x} p_i \tag{C.7}$$

Sendo P a fdp de $\hat{x}$ se :

$$\begin{aligned} P(x) &= p_i \quad se \quad x = x_i \\ P(x) &= 0 \quad se \quad x \neq x_i \end{aligned} \tag{C.8}$$

Quando temos várias variáveis aleatórias $x_i (i = 1, ..., n)$, nós definimos uma função distribuição unificada dada por :

$$F(x_i, ..., x_n) = Pr\{\hat{x}_i \leq x_i, ..., \hat{x}_n \leq x_n\} \tag{C.9}$$

O conjunto de variáveis aleatórias é chamado independente se :

$$Pr\{\hat{x}_i \leq x_i, ..., \hat{x}_n \leq x_n\} = \prod_{i=1}^{n} Pr\{\hat{x}_i < x_i\} \tag{C.10}$$

Sendo F diferenciável em cada variável, então nós temos uma fdp unificada dada por :

$$f(x_1, ..., x_n) = \frac{\partial^n F(x_1, ..., x_n)}{\partial x_1 ... \partial x_n} \tag{C.11}$$

Assim, se A é algum subconjunto de R^n(espaço euclidiano n-dimensional):

$$Pr\{\hat{x} \in A\} = \int_A f(x)d^n x \tag{C.12}$$

Após esta introdução passaremos ao método de amostragem. Iremos representar as variáveis aleatórias uniformemente distribuídas por $\hat{u}_i$, e valores amostrados pela distribuição uniforme por u_i. Claramente, se F e f são distribuição cumulativa e fdp, respectivamente, de $\hat{u}_i$, então elas são dadas por :

$$\begin{aligned} F(u_i) &= u_i \quad se \quad 0 < u_i \leq 1 \\ &= 0 \quad caso \quad contrário \\ f(u_i) &= 1 \quad se \quad u_i \in (0,1) \\ &= 0 \quad caso \quad contrário \end{aligned} \tag{C.13}$$

e assumimos ter um número ilimitado de valores disponíveis para a variável uniformemente distribuída. Agora supondo que $\hat{x}$ e $\hat{y}$ estão relacionadas por $\hat{y} = h(\hat{x})$ (com h monotonicamente crescente), e que $\hat{x}$ e $\hat{y}$ têm distribuições F e G, então :

$$\begin{aligned} F(x) &= Pr\{\hat{x} < x\} = Pr\{h^{-1}(\hat{y}) < x\} \\ &= Pr\{\hat{y} < h(x)\} = G(h(x)) \end{aligned} \tag{C.14}$$

Assim, podemos encontrar F, dados G e h(x). No nosso caso (distribuição uniforme no intervalo (0,1)), temos :

$$\hat{x} = F^{-1}(\hat{u}) \tag{C.15}$$

e assim :

$$G(y) = y \tag{C.16}$$

e :

$$h(x) = F(x) \tag{C.17}$$

então temos :

$$Pr\{\hat{x} < x\} = G(h(x)) = F(x) \tag{C.18}$$

Esta é a base para o chamado método da inversão, que faz a amostragem de $\hat{x}$, em que temos :

$$F(x) = u, \tag{C.19}$$

onde os valores x são calculados, dada a fdp, pela relação :

$$F(x) = \int_0^x f(x)dx = u \tag{C.20}$$

Para aplicarmos as técnicas de composição e rejeição conjuntamente, escrevemos a fdp da variável $\hat{x}$ na forma :

$$f(x) = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i f_i(x) g_i(x) \tag{C.21}$$

Se todo $g_i = 1$, nós temos a composição pura; e se $n = 1$, nós temos a rejeição pura.

A técnica de composição é baseada na definição elementar da probabilidade condicional. Essa soma de termos (ou integral, no caso contínuo) é obtida pela seleção aleatória de um único termo (através dos coeficientes α_i) seguida pela amostragem da distribuição (f_i) daquele termo. Ou seja, estamos utilizando o fato de escrevermos $f(x)$ como uma soma e, portanto ser ou $f_1(x)$, ou $f_2(x)$, ou..., com pesos probabilísticos α_i (que obviamente, devem somar 1).

A técnica de rejeição consiste no sorteio de um número aleatório e submissão deste a um teste, podendo ser aceito ou não. Uma importante característica é a não necessidade do conhecimento da normalização da fdp a ser amostrada. A sua grande desvantagem está na possível baixa eficiência, ou seja, a rejeição de muitos números sorteados até a aceitação de um, o que provoca um gasto de tempo de processamento.

Apêndice D

Simulação dos Processos Físicos envolvidos

As subrotinas que simulam os processos de Bremsstrahlung e produção de pares foram desenvolvidas por Gaisser e Stanev [22] e basicamente foram conseguidas com aproximações nas expressões usadas pelo GEANT [23] para altas energias (4 MeV a 1.000 TeV) na atmosfera. Estas subrotinas amostram a fração de energia do fóton secundário (Bremsstrahlung) e do elétron (pósitron) filho menos energético (produção de pares) segundo as respectivas expressões da seção de choque diferencial com correção coulombiana de Bethe e Heitler.

O livre caminho da partícula antes do processo ocorrer é amostrado de uma função densidade de probabilidade de interação exponencial.

A subrotina de simulação do processo de espalhamento múltiplo coulombiano foi desenvolvida [1] usando a teoria de Molière com a formulação dada por Bethe. Esta amostra o ângulo Θ (entre as direções final e inicial) usando a função densidade de probabilidade $f_r(\theta)$ no ângulo reduzido θ. Conforme já foi dito, o ângulo reduzido θ é utilizado por ser independente da energia da partícula e das características do meio atravessado.

D.1 Amostragem da fração de energia do fóton secundário no processo de Bremsstrahlung

A expressão 1.7 é fatorada na forma da equação C.21 da seguinte maneira :

$$\sum_{i=1}^{2} \alpha_i f_i(\epsilon) g_i(\epsilon) \tag{D.1}$$

sendo:

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= ln2(\frac{4}{3} + \frac{2}{18ln(184.15Z^{-1/3})}) \\ f_1(\epsilon) &= \frac{1}{ln2}\frac{1-\epsilon}{\epsilon} \\ g_1(\epsilon) &= 1 \end{aligned} \tag{D.2}$$

$$\begin{aligned} \alpha_2 &= \frac{1}{2} \\ f_2(\epsilon) &= 2\epsilon \\ g_2(\epsilon) &= 1 \end{aligned}$$

Assim a simulação é efetuada da seguinte maneira :
sorteia-se um número aleatório em distribuição uniforme para saber qual das 2 subdistribuições será utilizada para a amostragem da fração de energia. Isto é feito comparando o número aleatório sorteado com as razões :
se

$$u < \frac{\alpha_1}{\alpha_1 + \alpha_2} \tag{D.3}$$

então será amostrado a $f_1(\epsilon)$.
Caso contrário, será amostrado a $f_2(\epsilon)$.

Quando for escolhida a primeira subdistribuição fatora-se novamente esta subdistribuição na forma :

$$f_1(\epsilon) = \sum_{j=1}^{N} \alpha_{1j} f_{1j}(\epsilon) g_{1j}(\epsilon) \tag{D.4}$$

onde :

$$\begin{aligned}
\alpha_{1j} &= 1 \\
f_{1j} &= \frac{1}{ln2}2^{j-1} \quad se \quad \epsilon < 2^{-j} \\
&= \frac{1}{ln2}(\frac{1-2^{j-1}\epsilon}{\epsilon}) \quad se \quad \epsilon \in (2^{-j}, 2^{-j+1}) \\
g_{1j}(\epsilon) &= 1
\end{aligned} \tag{D.5}$$

O inteiro j é calculado pelo sorteio de um número aleatório u pela relação :

$$j = \quad INTEIRO. \ (Nu) + 1 \tag{D.6}$$

Na simulação N foi considerado igual a 9. É feita uma mudança de variáveis da forma :

$$\begin{aligned}
\epsilon' &= \frac{\epsilon}{p} \\
p &= 2^{1-j}
\end{aligned} \tag{D.7}$$

desta maneira f_{1j} é escrita como :

$$f_{1j}d\epsilon = g(\epsilon')d\epsilon' \tag{D.8}$$

onde :

$$g_k(\epsilon') = \alpha'_k h_k(\epsilon') \tag{D.9}$$

sendo:

$$\begin{aligned}
\alpha'_1 &= \frac{1}{2ln2} \\
h_1(\epsilon') &= 2 \\
\alpha'_2 &= \frac{ln2 - 1/2}{ln2} \\
h_2(\epsilon') &= \frac{1-\epsilon'}{\epsilon'(ln2 - 1/2)}
\end{aligned} \tag{D.10}$$

Assim, ao ser escolhida a primeira subdistribuição f_1, repete-se o procedimento para a escolha de uma das subdistribuições de $f_1(\epsilon)$. Escolhida

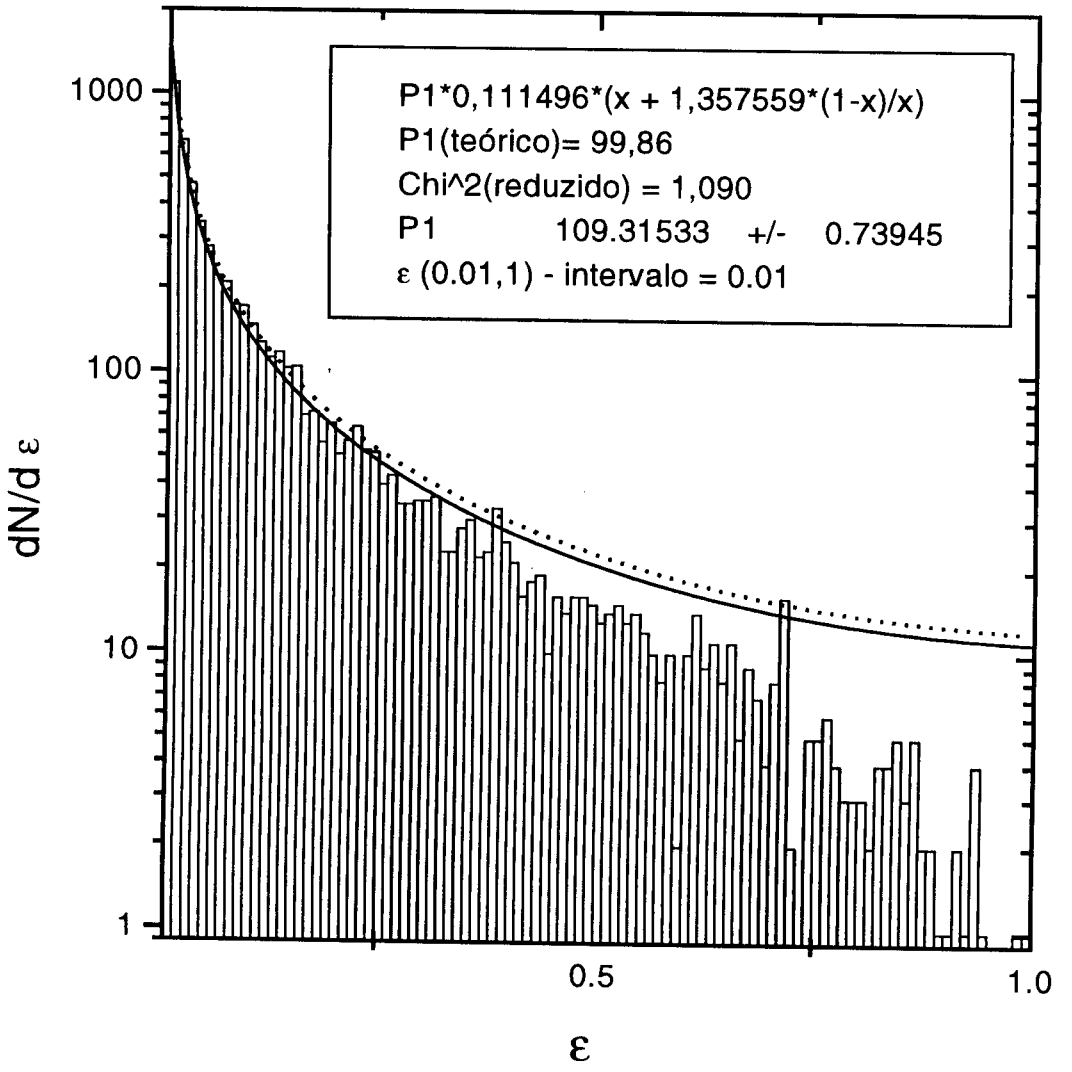

Figura D.1: Histograma exemplo da amostragem da fração de energia do fóton-filho em Bremsstrahlung com as curvas teórica e de ajuste (tracejada) com iguais pesos.

qual subdistribuição, a amostragem desta se dá utilizando a equação C.20. Como as funções rejeição g_1 e g_2 são iguais a 1, todo valor de fração de energia amostrado será aceito.

Apresentamos, para exemplificar a amostragem, um histograma da fração de energia para 8.366 valores amostrados. Este histograma é comparado à respectiva curva teórica e de ajuste, e é apresentado na figura (D.1). Isto é feito para mostrar que as subrotinas estão efetuando corretamente a amostragem.

D.2 Amostragem da fração de energia do elétron (pósitron)-filho menos energético no processo de produção de pares

A expressão 1.1 da seção de choque diferencial para o processo de produção de pares deve ser fatorada como a equação C.21 tendo a forma :

$$\sum_{i=1}^{2} \alpha_i f_i(\epsilon) g_i(\epsilon) \tag{D.11}$$

Onde os termos são :

$$\begin{aligned}
\alpha_1 &= \frac{2}{3} - \frac{1}{36\, ln(184,15Z^{-1/3})} \\
f_1(\epsilon) &= 2 \\
g_1 &= 1 \\
\\
\alpha_2 &= \frac{1}{12}\frac{4}{3} - \frac{1}{9\, ln(184,15Z^{-1/3})} \\
f_2 &= 24(\epsilon - 1/2)^2 \\
g_2 &= 1
\end{aligned} \tag{D.12}$$

Da mesma forma que no processo de Bremsstrahlung, apresentamos, para exemplificar a amostragem, um histograma de fração de energia para

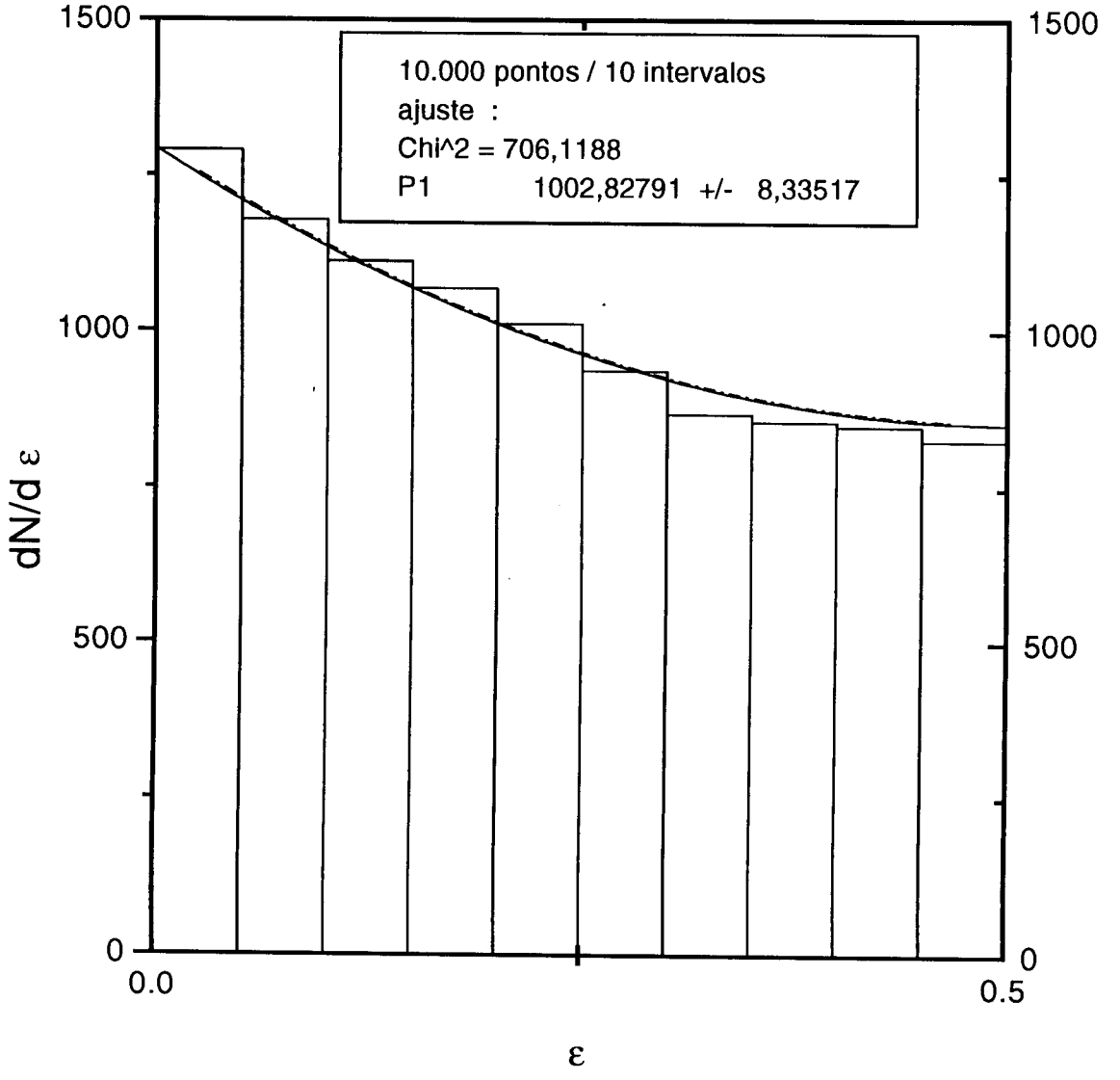

Figura D.2: Histograma exemplo da amostragem da fração de energia do elétron(pósitron)-filho menos energético na produção de pares e curvas teórica e de ajuste com iguais pesos. Obs: as curvas são coincidentes.

10.000 valores amostrados. Novamente é feita a verificação dos cálculos comparando a curva teórica com o respectivo histograma. Este gráfico é apresentado na figura (D.2).

D.3 Amostragem do ângulo Θ para o processo de espalhamento múltiplo coulombiano

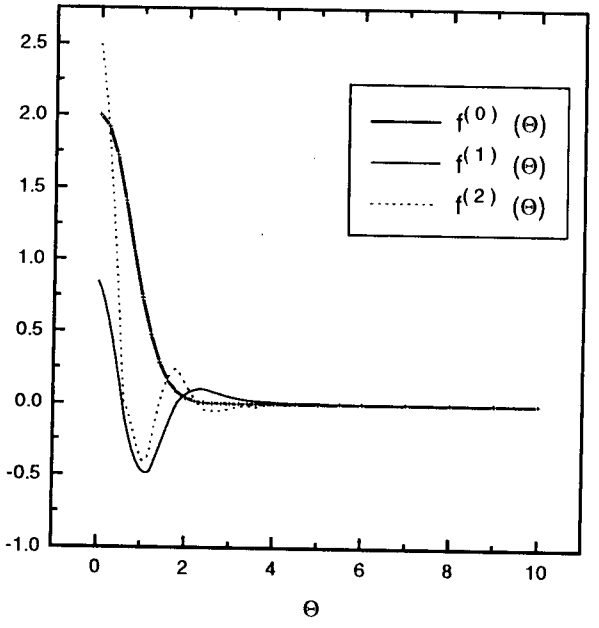

Figura D.3: Gráficos de $f^{(0)}$, $f^{(1)}$ e $f^{(2)}$

Para amostrar Θ precisamos fatorar a função densidade de probabilidade do ângulo reduzido, dada pela equação 1.11, na forma :

$$f_r(\theta) = \sum_i \alpha_i f_i(\theta) g_i(\theta) \tag{D.13}$$

Seria de se esperar que pudéssemos usar as $f^{(n)}$ como subdistribuições, mas como $f^{(1)}$ e $f^{(2)}$ não são sempre positivas, isto não é possível. Para evitar este problema é feita uma mistura de $f^{(0)}$ com $f^{(1)}$ e $f^{(2)}$, de maneira a trabalharmos com funções positivas em cada região. Gráficos destas funções são dados na figura (D.3).

Assim os termos da equação D.13 são dados por :

$$\begin{aligned}
\alpha_1 &= 1 - \frac{\lambda}{B} \\
f_1(\theta) &= 2\exp(-\theta^2) \qquad para \quad \theta \in (0, \infty) \\
g_1(\theta) &= 1 \qquad .
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\alpha_2 &= \frac{\mu g_{2,Norm}}{B} \\
f_2(\theta) &= \frac{1}{\mu} \qquad para \quad \theta \in (0, \mu) \\
g_2(\theta) &= \frac{\theta}{g_{2,Norm}}(\lambda f^{(0)}(\theta) + f^{(1)}(\theta) + \frac{f^{(2)}(\theta)}{B})
\end{aligned} \tag{D.14}$$

$$\begin{aligned}
\alpha_3 &= \frac{g_{3,Norm}}{2\mu^2 B} \\
f_3(\theta) &= 2\mu^2\theta^{-3} \qquad para \quad \theta \in (\mu, \infty) \\
g_3(\theta) &= \frac{\theta^4}{g_{3,Norm}}(\lambda f^{(0)}(\theta) + f^{(1)}(\theta) + \frac{f^{(2)}(\theta)}{B})
\end{aligned}$$

Quando é selecionada a terceira subdistribuição, amostramos η (onde $\eta = 1/\theta$) usando :

$$\begin{aligned}
f_{\eta 3}(\eta) &= 2\mu^2\eta \quad para \quad \eta \in (0, 1/\mu) \\
g_{\eta 3}(\eta) &= \frac{\eta^{-4}}{g_{3,Norm}}(\lambda f^{(0)}(\theta) + f^{(1)}(\theta) + \frac{f^{(2)}(\theta)}{B})
\end{aligned} \tag{D.15}$$

Desta maneira estas subdistribuições necessitam de 4 parâmetros λ, μ, $g_{2,Norm}$ e $g_{3,Norm}$; os dois últimos são dados para que $g_2(\theta)$ e $g_{3\eta}(\eta)$ tenham

valores máximos próximos de 1. A primeira subdistribuição é a gaussiana que domina para grandes B. A terceira subdistribuição representa a cauda do espalhamento único. A segunda subdistribuição pode ser considerada como um termo de correção para valores centrais de θ. O parâmetro μ separa a região central da cauda. O parâmetro λ determina a mistura de $f^{(0)}$ com $f^{(1)}$ e $f^{(2)}$, de modo que $g_2(\theta)$ e $g_{3\eta}(\theta)$ sejam sempre positivas.

Os valores utilizados são os mesmos adotados pelo EGS4 [1] e são : $\lambda = 2$, $\mu = 1$, $g_{2,Norm} = 1,8$ e $g_{3,Norm} = 4,05$.

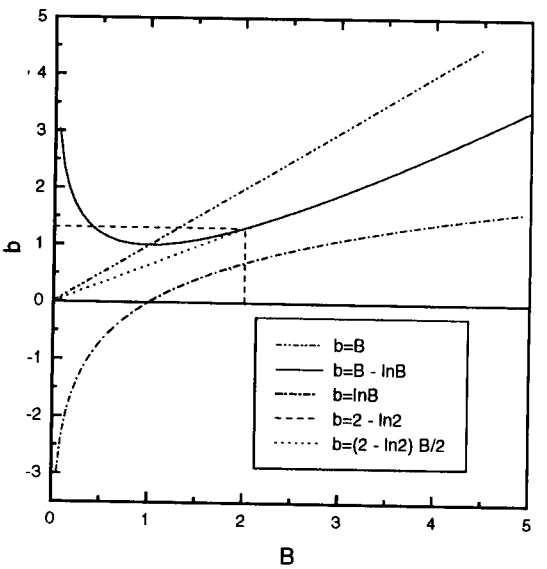

Figura D.4: Gráficos da equação transcendente (1.14)

Também pode-se notar que α_1 fica negativo se $B < \lambda$. Neste caso, para amostragem é desconsiderada a $f_1(\theta)$ (ou seja, a gaussiana) e faz-se $1/\lambda = 1/B$ para o sorteio. Mas, ao se calcular Θ pela equação 1.10, usa-se o B calculado.

É preciso resolver a equação transcendente 1.14. Esta equação está representada na figura (D.4). Assim para valores de $b < (2 - ln2)$ é feita uma extrapolação da curva para baixo como uma reta. Para valores de

$b > (2 - ln2)$ é feito um ajuste quadrático em 7 intervalos de b no intervalo $(2 - ln2, 30)$.

Para completar a discussão, é feito um ajuste das funções de rejeição, $g_2(\theta)$ e $g_{3\eta}(\theta)$ que são divididas em B partes independentes da forma :

$$\begin{aligned} g_2(\theta) &= g_{21}(\theta) + \frac{g_{22}(\theta)}{B} \quad para \quad \theta \in (0,1) \\ g_{3\eta}(\theta) &= g_{31}(\theta) + \frac{g_{32}(\theta)}{B} \quad para \quad \eta \in (0,1) \end{aligned} \tag{D.16}$$

Estas funções foram ajustadas pelo EGS4 [1] usando o método de ajuste quadrático por partes ("piecewise quadratic fit").

É apresentado o gráfico da amostragem realizada do ângulo Θ para livre caminho de 0,1 X_0, variando a energia. O resultado está apresentado na figura (D.5).

D.4 Amostragem do livre caminho

O livre caminho t de uma partícula é amostrado segundo a função densidade de probabilidade de interação exponencial :

$$\int_0^t \exp(-x/\lambda)\frac{dx}{\lambda} = u \tag{D.17}$$

O livre caminho médio λ para os processos de produção de pares e Bremsstrahlung é calculado pela relação:

$$\lambda = \frac{1}{\sum_t} \tag{D.18}$$

onde $\sum_t$ é a seção de choque total macroscópica calculada em unidades do inverso do comprimento de radiação pela expressão :

$$\sum_t = \frac{N_a \rho}{M} \int_{\frac{E_c}{E}}^1 \frac{d\sigma}{d\epsilon} d\epsilon \tag{D.19}$$

A energia de corte E_c suprime o efeito da catástrofe do infravermelho no processo de Bremsstrahlung. As expressões da seção de choque diferencial

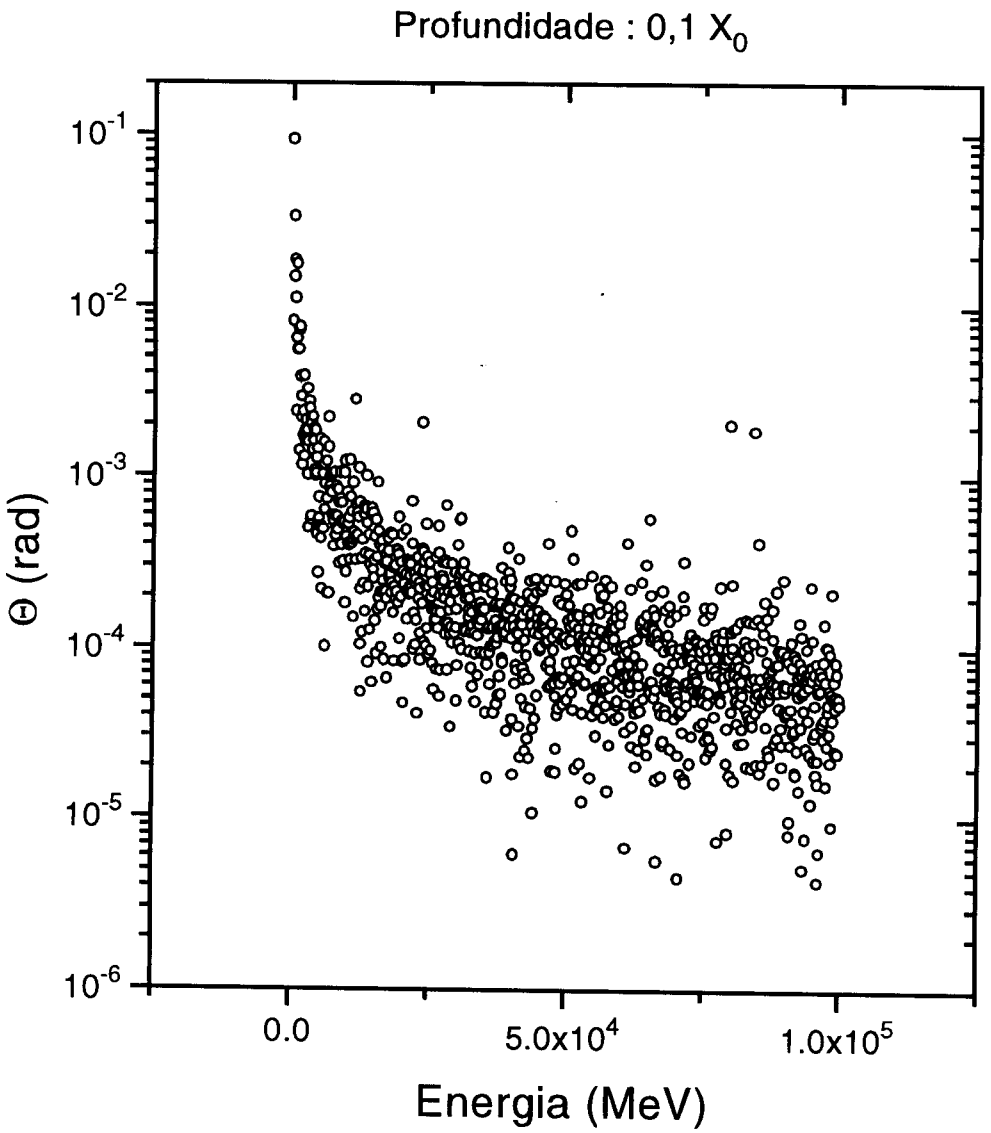

Figura D.5: Gráfico exemplo da amostragem de Θ variando a energia.

são dadas pelas equações 1.1 e 1.7, respectivamente, para produção de pares e Bremsstrahlung. A razão $\frac{E_c}{E}$ para Bremsstrahlung é calculada pela expressão:

$$\frac{E_c}{E} = (\frac{\rho N_0 Z r_0 \lambda_0^2}{M\pi})^{1/2} \tag{D.20}$$

Para o ar essa razão é igual a $1,3903\ 10^{-6}$. Para o processo de produção de pares pode ser considerada igual a 0. Mais detalhes podem ser conseguidos em [1].

O livre caminho médio foi calculado para os dois processos e são dados pelos valores :

$$\begin{aligned} \lambda_{pares} &= 1,29260 \quad X_0 \\ \lambda_{Bremss} &= 0,111496 \quad X_0 \end{aligned} \tag{D.21}$$

Também apresentamos, para exemplificar, os histogramas de 10.000 valores para a amostragem em ambos processos. Esses gráficos estão apresentados na figura (D.6) para Bremsstrahlung (a) e produção de pares (b).

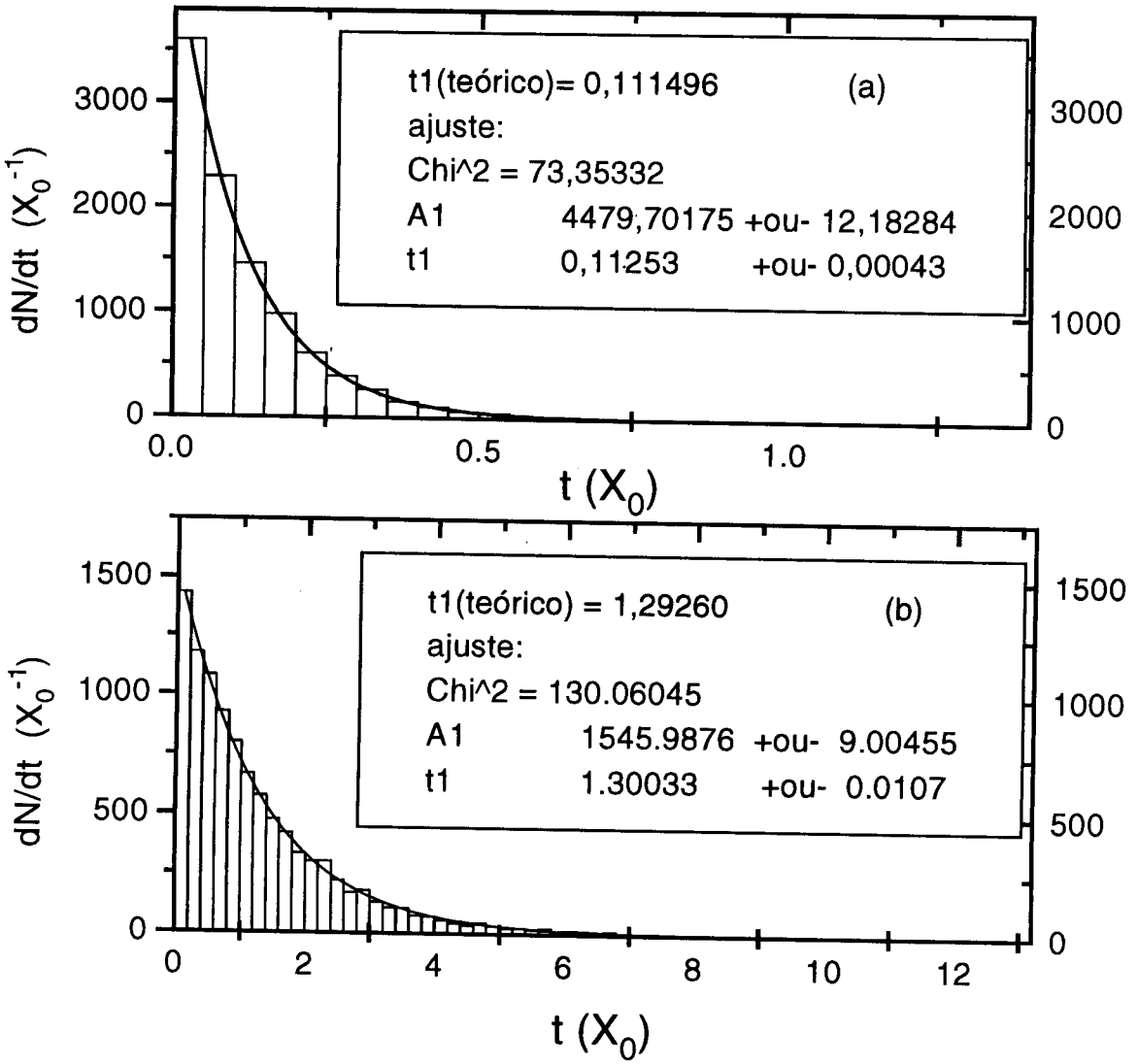

Figura D.6: Histogramas exemplos da amostragem do livre caminho em Bremsstrahlung e produção de pares; e respectivas curvas teórica e de ajuste. Obs: curvas coincidentes em ambos os casos.

Bibliografia

[1] W.R. Nelson, H. Hirayama e D.W.O. Rogers, The EGS4 Code System (1985).

[2] E. Longo e L. Luminari, Fast Electromagnetic Shower Simulation, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A 239 (1985) 506-512.

[3] Alex F. Bielajew e D.W.O Rogers, PRESTA: The Parameter Reduced Electron-Step Transport Algorithm for electron Monte Carlo transport, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 18 (1987) 165-181.

[4] A. Ferrari et al, An Improved Multiple Scattering Model for Charged Particle Transport, Nuclear Instruments and Methods in Physics Resarch B 71 (1992) 412-426.

[5] P. Aarnio et al, FLUKA92 User Manual, veja também A. Ferrari et al, Can we predict radiation levels in Calorimeter? II-th International Conference on Calorimetry in High Energy Physics, outubro de 1991, Capri, Itália.

[6] R. Guaraldi e F. Padoani, MCNPE-BO User Manual.

[7] Stephan L. Linn, A method for fast electromagnetic shower simulation in the GEANT Monte Carlo Program, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A288(1990) 598-602.

[8] Applications Software Group Computing and Networks Division of CERN, GEANT3 : Detector description and simulation tools (1986).

[9] G. Grindhammer et al, The Fast Simulation of Electromagnetic and Hadronic Showers, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A 290 (1990) 469-488.

[10] Todor Stanev e H.P. Vankov, Hybrid simulations of electromagnetic cascades, Astroparticle Physics 2 (1994) 35-42.

[11] E.J. Fenyves et al, Electromagnetic component of $10^{14} - 10^{16}$ eV air showers, Physical Review D 37 (1988) 649.

[12] I. Y. Crewter e R. J. Protheroe, Fluctuations in gamma-ray initiated air showers, J. Phys. G.: Nucl. Part. Phys. 16 (1990) L13-L20.

[13] S. Mikocki et al, Monte Carlo simulation of extensive air showers initiated by gamma rays and protons, J. Phys. G.: Nucl. Part. Phys. 17 (1991) 1303-1315.

[14] Todor Stanev e H. P. Vankov, Air shower detection and the energy flow in electromagnetic cascades, J. Phys. G.: Nucl. Part. Phys. 18 (1992) L49-L54.

[15] B. D'Ettorre Piazzoli e G. Di Sciascio, Monte Carlo simulation of photon-induced air showers, Astroparticle Physics 2 (1994) 199-214.

[16] V. Patera et al, Simulation of electromagnetic component of extensive air showers, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A 356(1995) 514-525.

[17] H.A. Bethe, Phys. Rev. 89 (1953) 1256.

[18] M.E. Hehl, Linguagem de Programação Estruturada Fortran 77, 2^a., McGraw-Hill, 1987.

[19] J.A. Chinellato, Comunicação particular.

[20] T.K. Gaisser, Cosmic rays and particle physics, Cambridge University Press , Cambridge, 1990.

[21] W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling e B.P. Flamnery, Numerical Recipes in Fortran : The Art of Scientific Computing, 2^a Ed., Cambridge University Press, Cambridge, 1992.

[22] T. Stanev e C.P. Vankov, Comp. Phys. Comm. 16(1979) 363.

[23] Applications Software Group Computing and Networks Division of CERN, GEANT4 : Detector description and simulation tools (1993).