







INTERACTIONS OF PARTICLES WITH MATTER

SIMULATION

Agnieszka Obłąkowska-Mucha
Faculty of Physics and Applied Computer Science
AGH-UST Kraków

HOW TO DETERMINE THE OUTCOME OF AN EXPERIMENT

- When you flip a coin you get  OR  .
- But after a many experiments you obtain about 50%  and 50% of  .
- It was easy to calculate since the probability of each outcome is $1/2$.
- How can you predict an outcome if you have 10^{23} coins with 10^{12} options? You cannot...
- The only option is to use Monte Carlo methods.
- MC methods are a set of computational algorithms on **repeated random sampling** to obtain numerical results for solving problems that are deterministic in principle.
- The desired calculation is typically a sum of a discrete distribution or integral of a continuous distribution and is intractable to calculate. The calculation may be intractable for many reasons, such as the large number of random variables, the stochastic nature of the domain, noise in the observations, the lack of observations, and more.
- MC methods in physics were first used in Manhattan project.

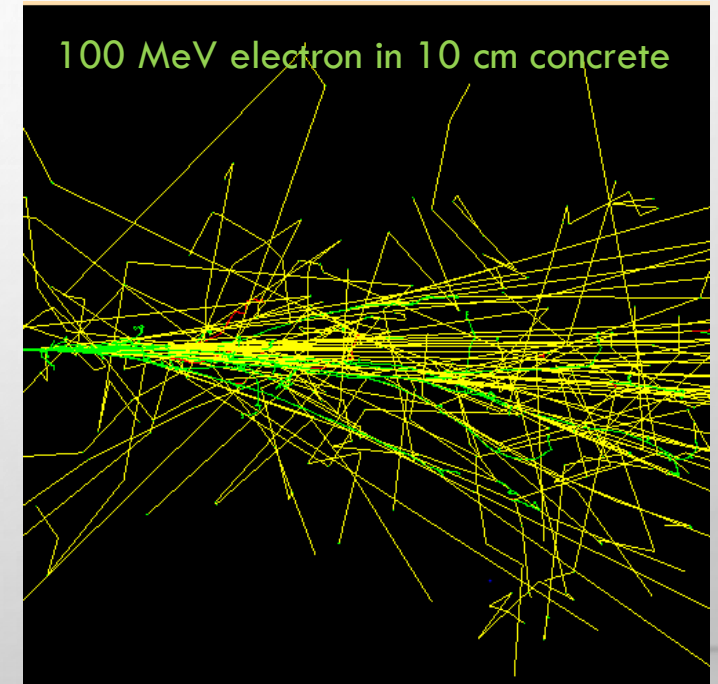
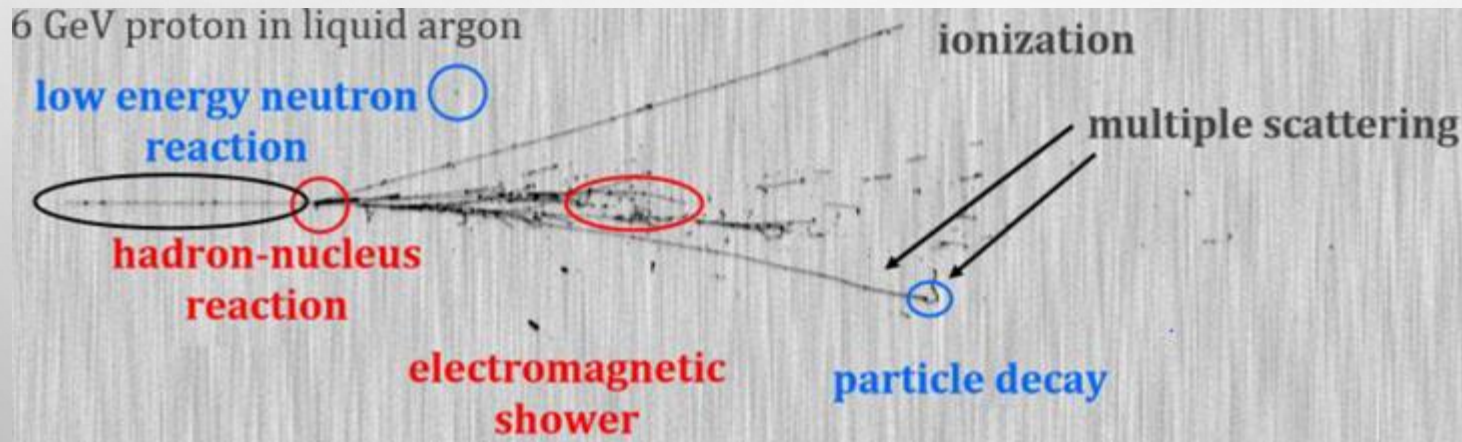


SIMULATION WITH MONTE CARLO METHODS

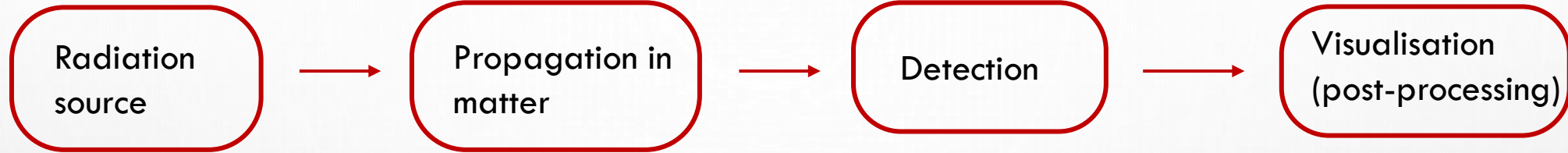
- Monte Carlo simulation refers to drawing a sample with complex computational simulation.
- Multiple samples are collected and used to approximate the desired quantity.
- Given the law of large numbers from statistics, the more random trials that are performed, the more accurate the approximated quantity will become.
- By generating enough samples, we can achieve any desired level of accuracy we like. The main issue is: how do we efficiently generate samples from a probability distribution, particularly in high dimensions?
- According to the central limit theorem, the distribution of the samples will form a Normal distribution, the mean of which can be taken as the approximated quantity and the variance used to provide a confidence interval for the quantity.

WHAT NEEDS TO BE SIMULATED

- Production of radiation from the source (type of particles, energy spectrum, physics model).
- Particle transport (energy deposition in the target material **averaged** over a track length of interest).
- Deposited energy and other dosimetry parameters (dose, ..)
- Nice if distributions are clearly visualidated.
- Results: estimators



HOW TO SIMULATE AN EXPERIMENT WITH RADIATION

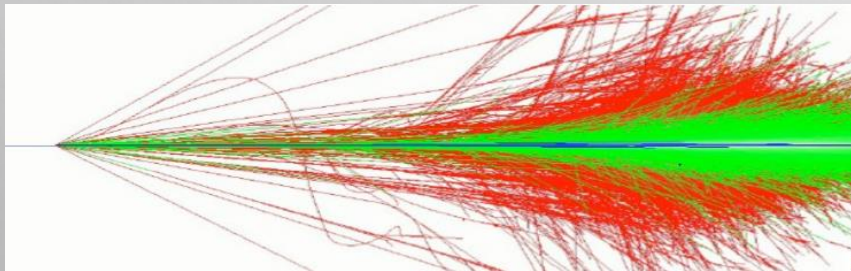


Type,
energy spectrum, activity,
shape, angular distribution,
Window,
HEP – collisions:
model of particle production
(Pythia, EPOS, Herwig)

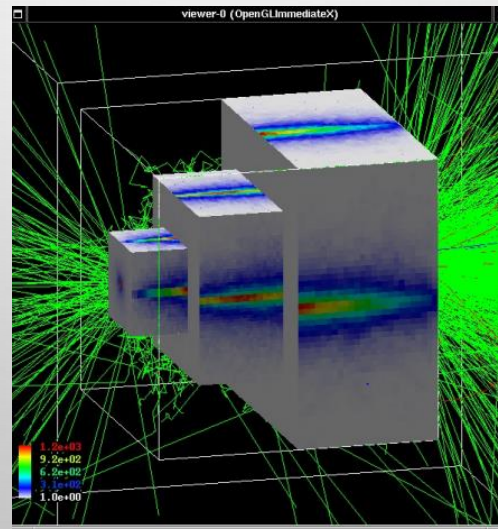
Bethe-Bloch formula,
Delta-ray production,
Non-ionising energy loss
Models for elastic and
hadron-nucleon collision
Low-energy neutrons
...

Deposited energy,
fluence

GEOMETRY



<https://geant4.web.cern.ch/node/1>



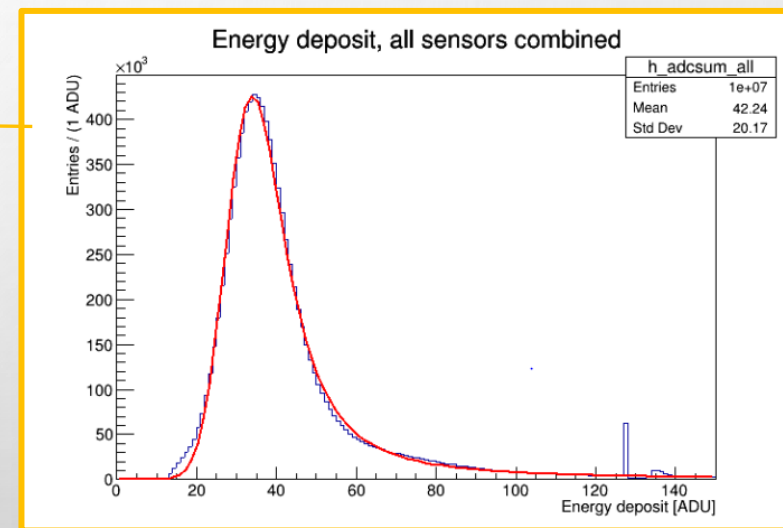
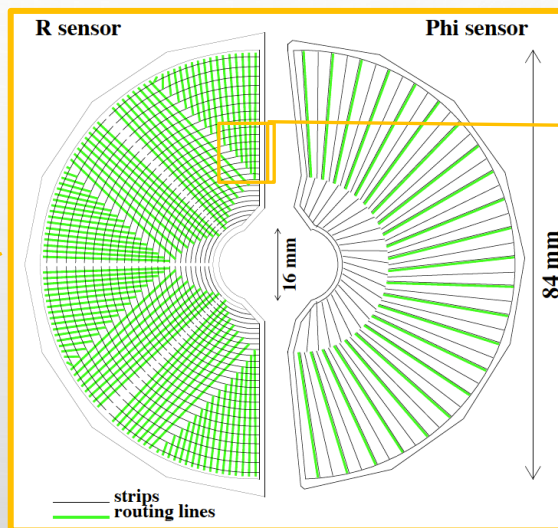
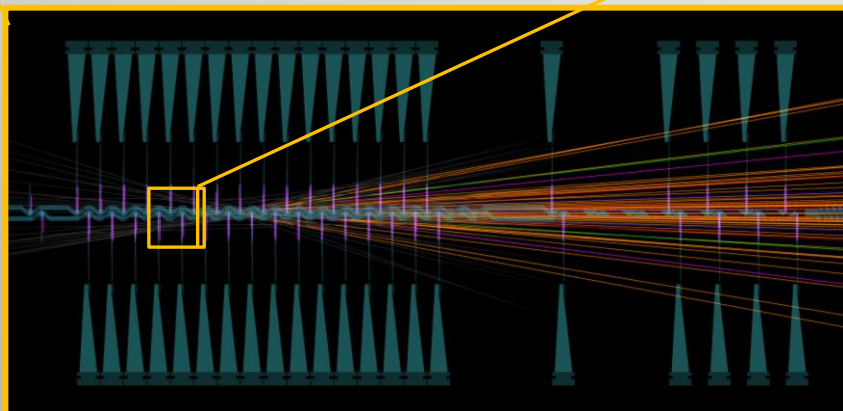
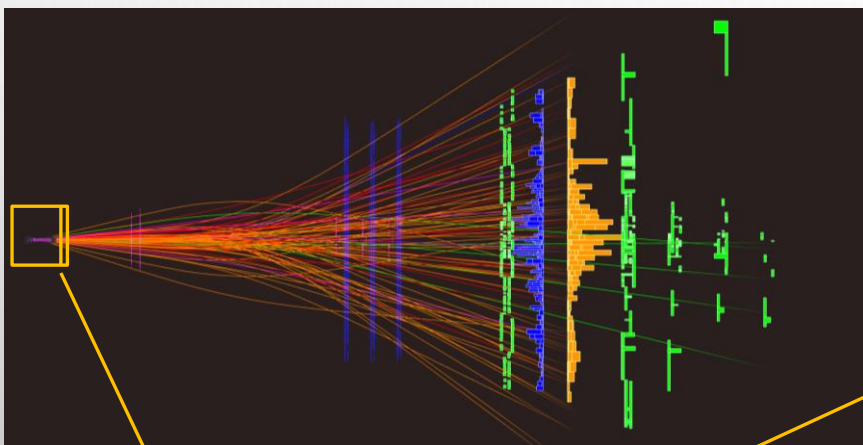
```
MyHit.hh
#include "G4VHit.hh"
#include "G4Allocator.hh"
class MyHit : public G4VHit
{
public:
    MyHit(some_arguments);
    inline void*operator new(size_t);
    inline void operator delete(void *aHit);
    ...
};
extern G4ThreadLocal G4Allocator<MyHit>* MyHitAllocator;
inline void* MyHit::operator new(size_t)
{
    if (!MyHitAllocator)
        MyHitAllocator = new G4Allocator<MyHit>;
    return (void*)MyHitAllocator->MallocSingle();
}
inline void MyHit::operator delete(void* aHit)
{ MyHitAllocator->FreeSingle((MyHit*)aHit); }

MyHit.cc
#include "MyHit.hh"
G4ThreadLocal G4Allocator<MyHit>* MyHitAllocator = 0;
```

LABORATORIUM / PROJEKT I

Depozyty energii w cienkich warstwach krzemu (sensory VELO LHCb)

1. Analiza symulacji przejścia cząstek pochodzących ze zderzeń protonów w LHC przez detektor VELO LHCb (ROOT, ntupel jest przygotowany), opis jest [tutaj](#)



HOW TO SIMULATE AN EXPERIMENT WITH RADIATION

Radiation source



Propagation in matter



Detection



Visualisation (post-processing)

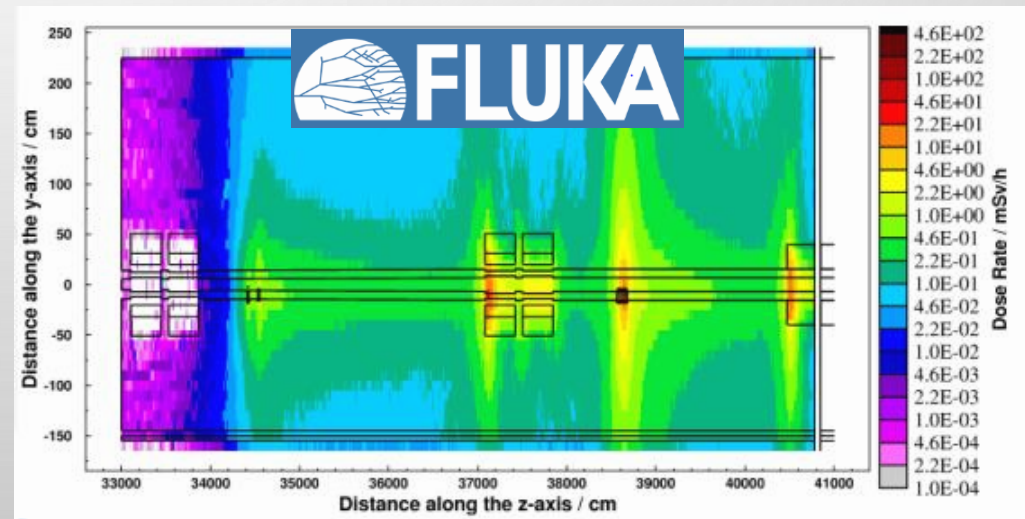
Type,
energy spectrum, activity,
shape, angular distribution,
Window,
HEP – collisions:
model of particle production
(Pythia, EPOS, Herwig)

Bethe-Bloch formula,
Delta-ray production,
Non-ionising energy loss
Models for elastic and
hadron-nucleon collision
Low-energy neutrons
...

Deposited energy,
fluence

GEOMETRY

<https://fluka.cern/>



LABORATORIUM / PROJEKT I

Wyznaczenie zasięgu protonów i elektronów w różnych materiałach

1. Obserwacja różnic w oddziaływaniach protonów i elektronów
2. Wyznaczenie zasięgu penetracji protonów i porównanie z wartościami tablicowymi:
 - energia kinetyczna: 50 MeV, 100 MeV, 100+, 500 MeV, 1 GeV, 2 GeV
 - absorbent: powietrze, woda, aluminium, krzem, miedź, ołów, beton
3. Sprawdzenia prawa skalowania.

Porównanie wyników i sprawozdanie

FLUKA – LABORATORIUM I

Wyznaczenie zasięgu protonów i elektronów w różnych materiałach

1. Obserwacja różnic w oddziaływaniach protonów i elektronów (BEAMPART, ALL-PART, ENERGY, EM-ENERGY, DOSE),

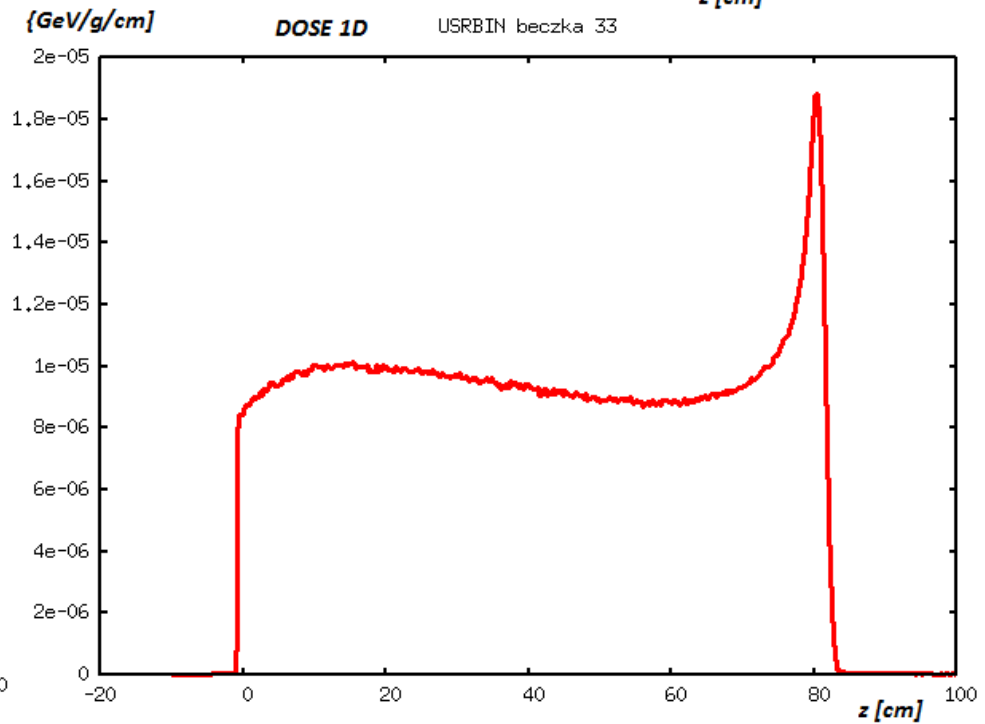
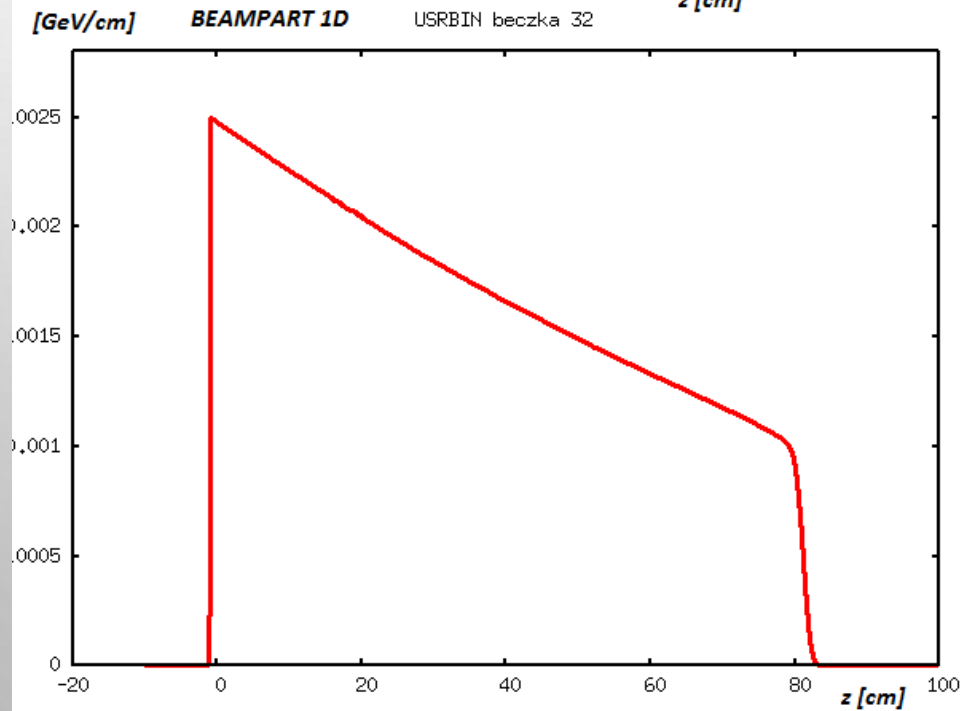
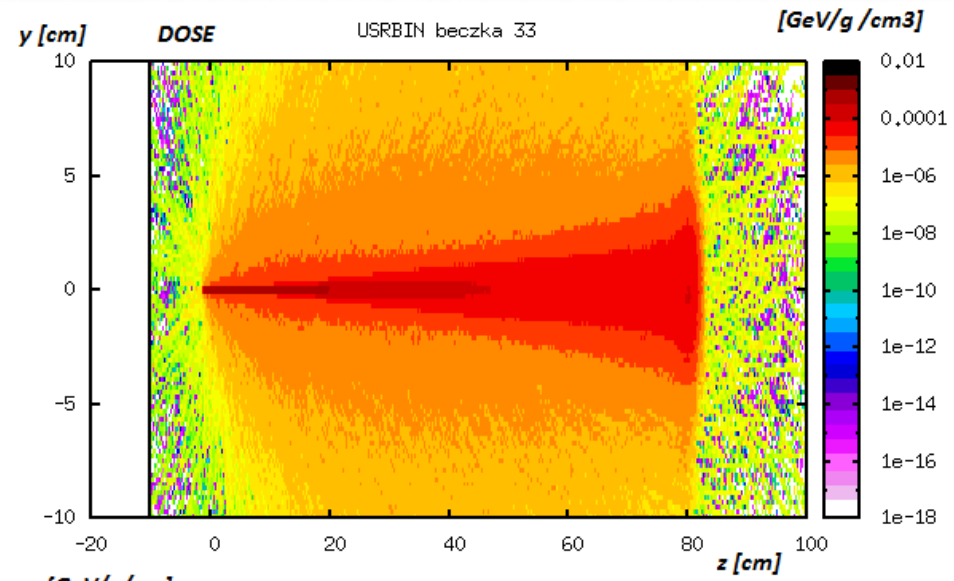
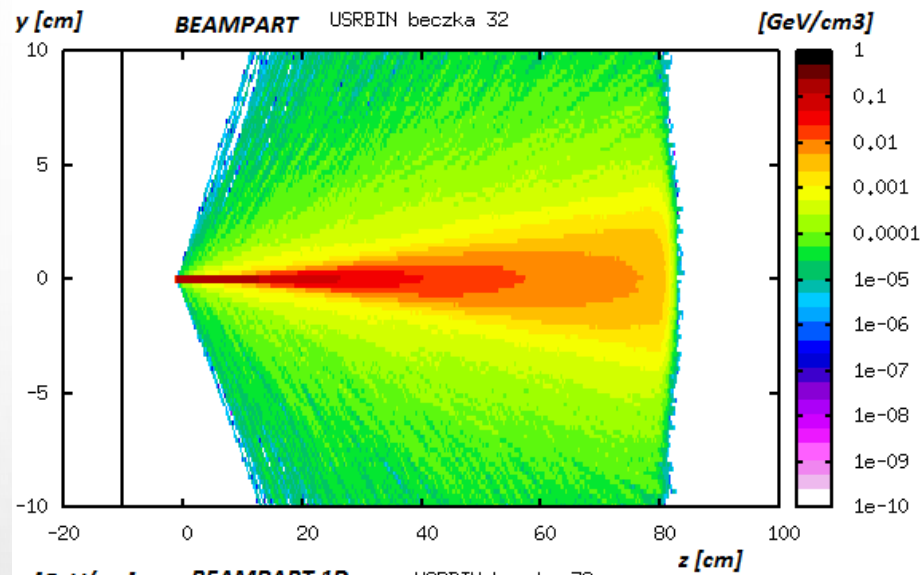
BEAMPART - gęstość oddziaływań nieelastycznych TYLKO cząstek pierwotnych (źródła promieniowania),

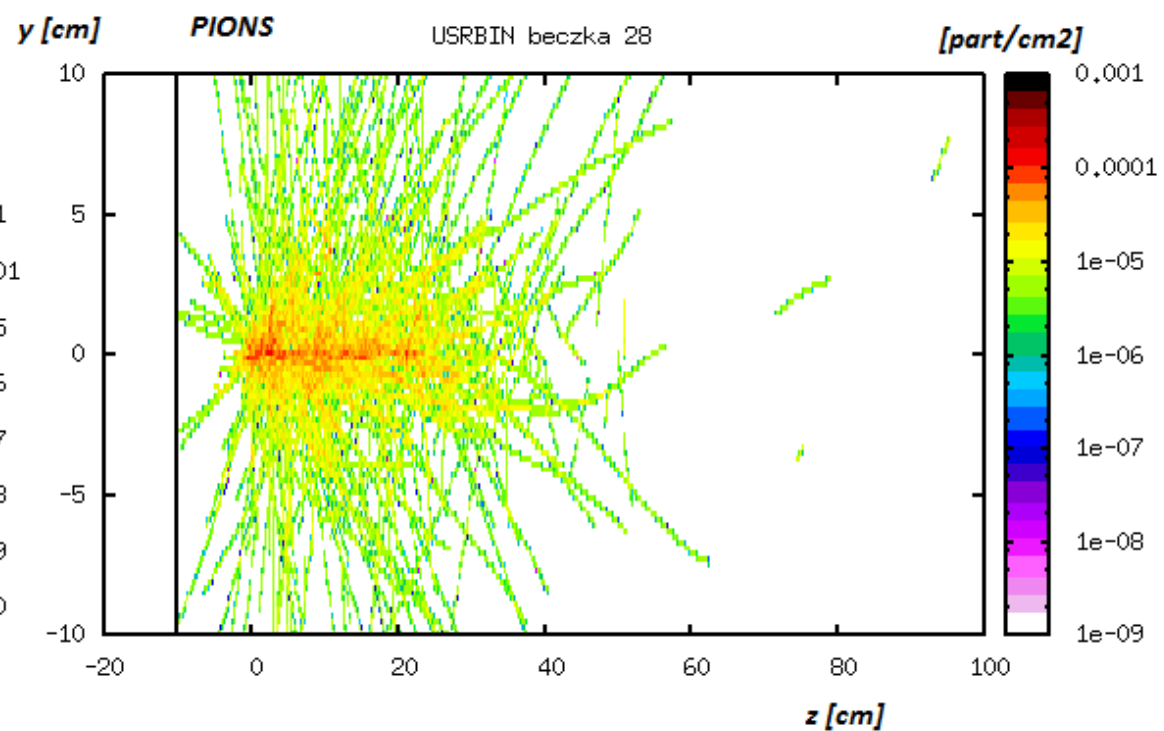
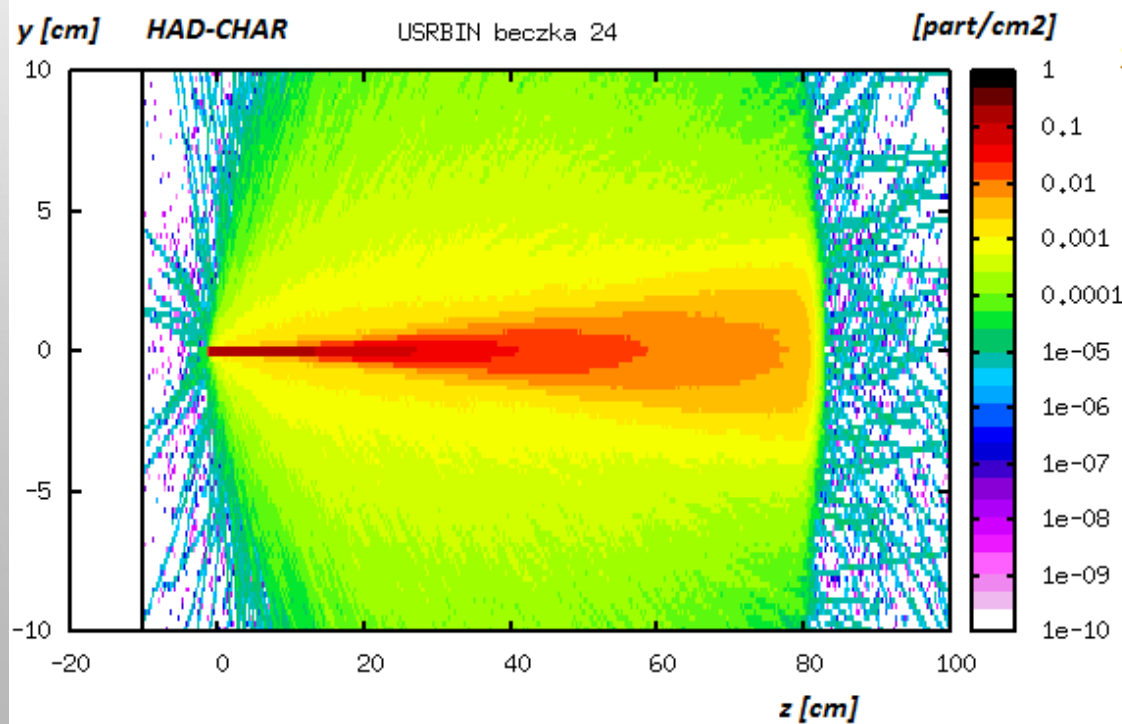
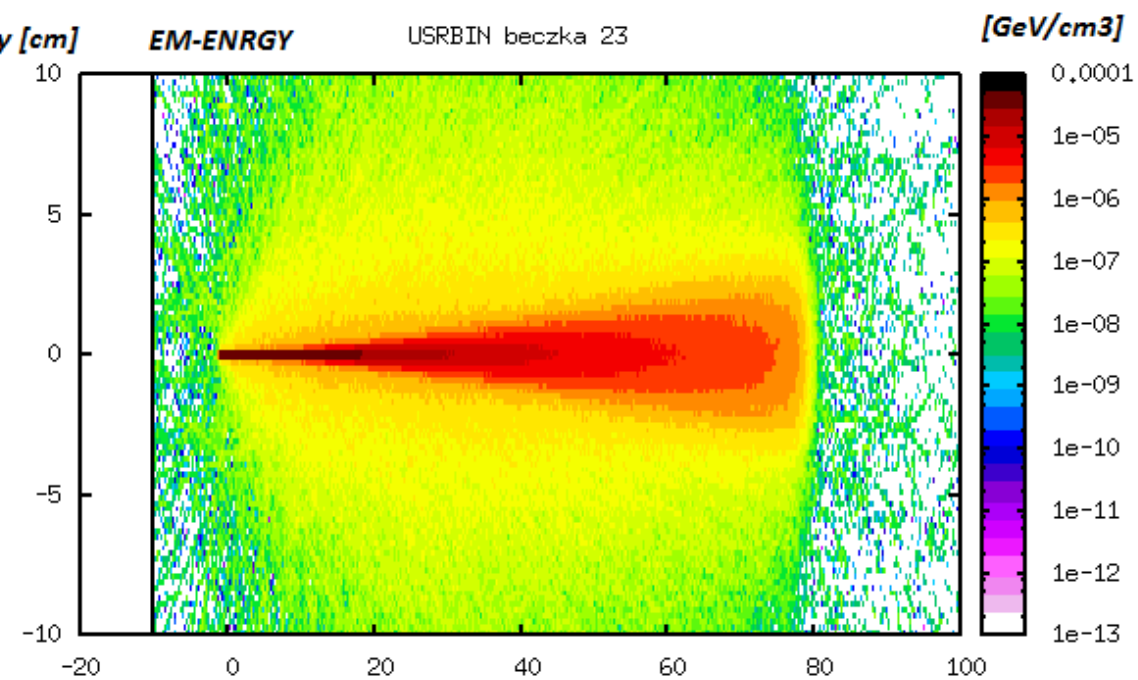
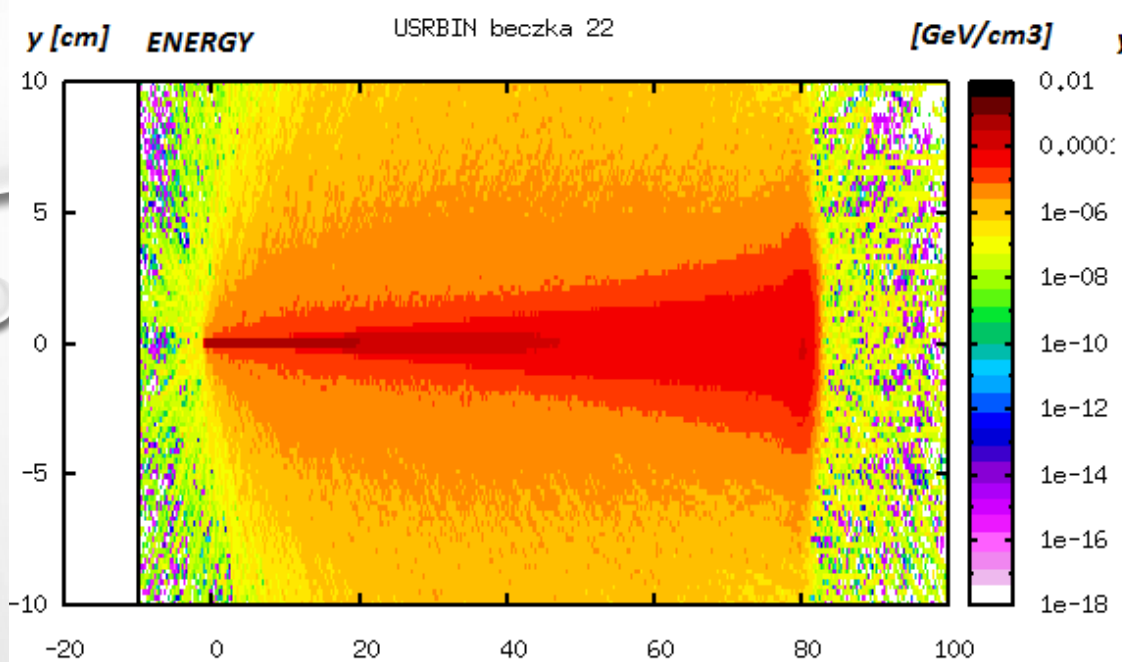
ALL-PART - gęstość oddziaływań nieelastycznych wszystkich cząstek,

ENERGY - całkowita zdeponowana energia kinetyczna jonizacyjna i niejonizacyjna (bardziej ściśle: gęstość energii), [GeV/cm³]

EM-ENERGY - energia promieniowania elektromagnetycznego (elektrony, fotony), [GeV/cm³]

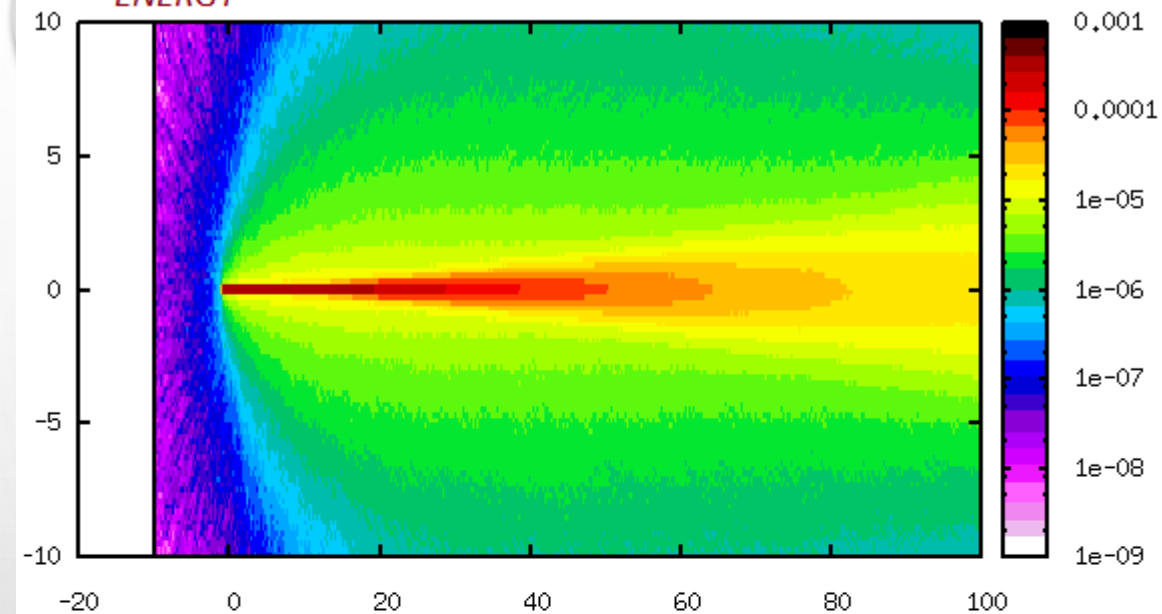
DOSE - dawka promieniowania, [GeV/g], aby wynik był w [Gy]=[GeV/g]x1.602e-7, dawka to energia jonizacyjna zdeponowana w jednostce masy.





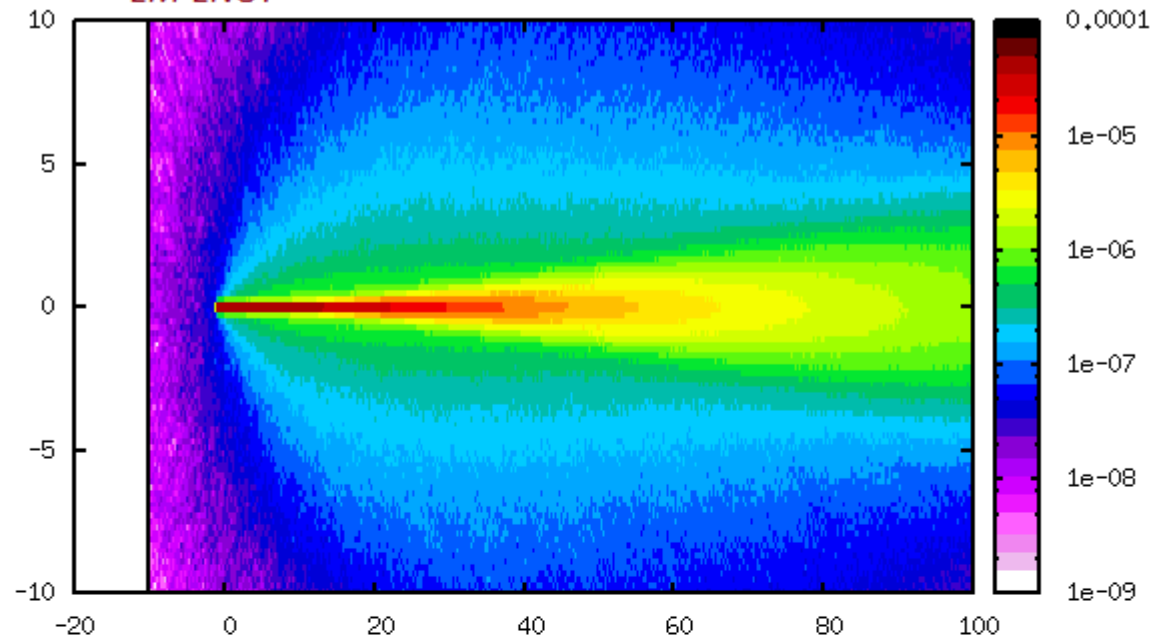
USRBIN beczka 22

ENERGY



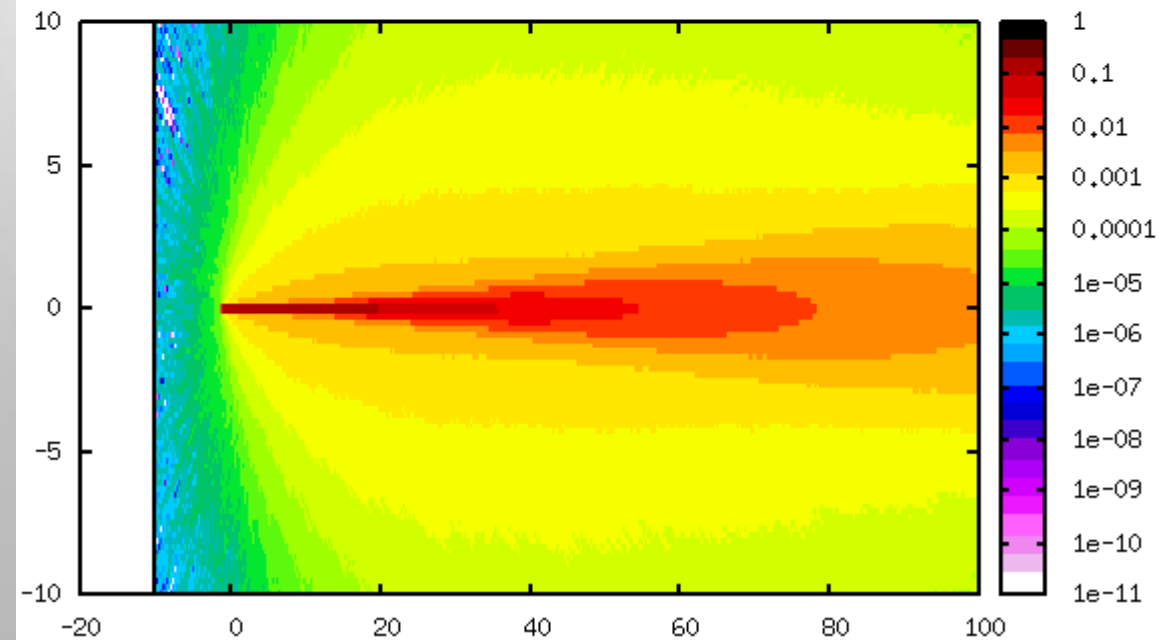
USRBIN beczka 23

EM-ENGY



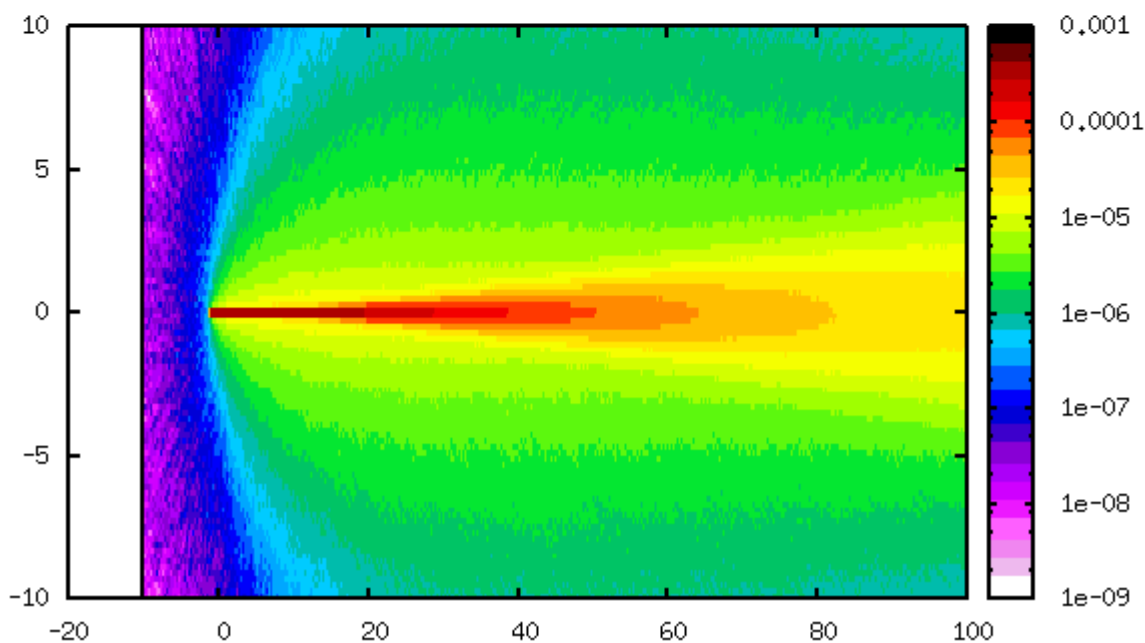
USRBIN beczka 24

HAD-CHAR



USRBIN beczka 33

DOSE



Calculator

Search

Viewer Editor Print

Clipboard Input Card Edit Filter View

Flair Input Geometry Run Plot Compile

Preprocessor Delete Show Comment Move Up Move Down

Material Change Clone State Refresh

all Search

Input

TITLE Stopping power studies

GLOBAL Max #reg: Analogue: Analogue DNear: Geometry: Input: Geometry: Part: PROTON

DEFAULTS PRECISIO

BEAM Beam: Energy E: 10.0 Part: PROTON
 Δp : Flat $\Delta \phi$: Flat $\Delta \phi$:
 Shape(X): Rectangular Shape(Y): Rectangular Δy :

BEAMPOS x: 0.0 y: 0.0 z: -1.
 cosx: 0. cosy: 0. Type: POSITIVE

GEOBEGIN Log: Acc: Opt: Inp: Out: Fmt: COMBNAME
 Title: Beczka z wodą

RPP blakhole Xmin: -10.5 Xmax: 10.5
 Ymin: -10.5 Ymax: 10.5
 Zmin: -10.5 Zmax: 100.5

RPP water Xmin: -10. Xmax: 10.
 Ymin: -10. Ymax: 10.
 Zmin: -10. Zmax: 100.

END

REGION regbhole Neigh: 5 Volume:
 expr: +blakhole -water

REGION regwat Neigh: 5 Volume:
 expr: +water

END

GEOEND

ASSIGNMA Mat: BLCKHOLE Reg: regbhole to Reg: Step: Field:
 Mat(Decay):

ASSIGNMA Mat: WATER Reg: regwat to Reg: Step: Field:
 Mat(Decay):

SCORE Part1: ENERGY Part2: BEAMPART Part3: Part4:

USRBIN Unit: 22 BIN Name: Enhad
 Type: X-Y-Z Xmin: -10. Xmax: 10. NX: 100.0
 Part: HAD-CHAR Ymin: -10. Ymax: 10. NY: 100.
 Zmin: -10. Zmax: 100. NZ: 500.

USRBIN Unit: 23 BIN Name: Enelm
 Type: X-Y-Z Xmin: -10. Xmax: 10. NX: 100.0
 Part: EM-ENRGY Ymin: -10. Ymax: 10. NY: 100.
 Zmin: -10. Zmax: 100. NZ: 500.

USRBIN Unit: 24 BIN Name: EnHad20
 Type: X-Y-Z Xmin: -10. Xmax: 10. NX: 100.0
 Part: HADGT20M Ymin: -10. Ymax: 10. NY: 100.
 Zmin: -10. Zmax: 100. NZ: 500.

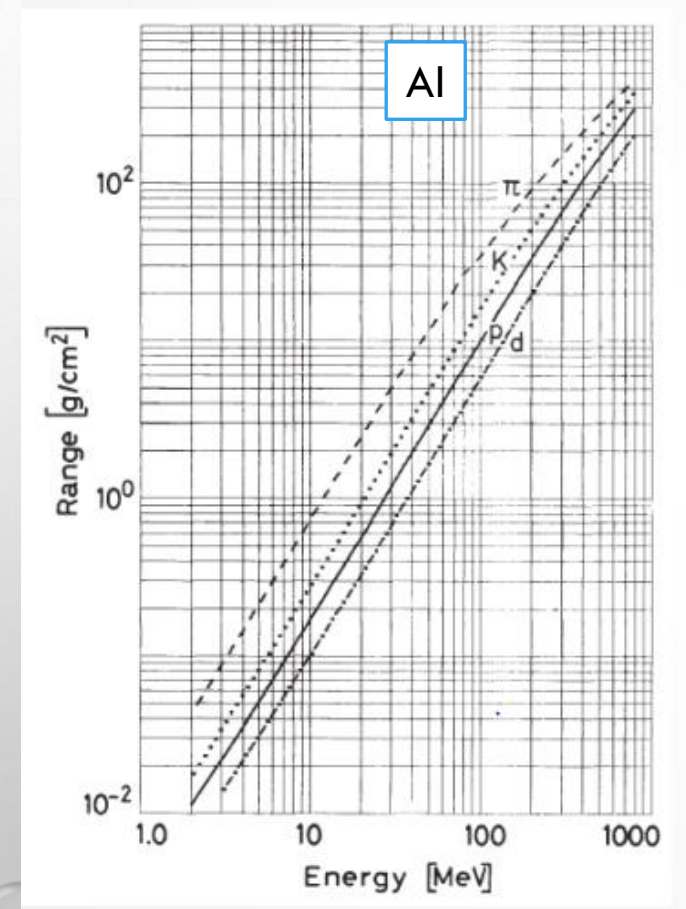
USRBIN Unit: 25 BIN Name: EnProt
 Type: X-Y-Z Xmin: -10. Xmax: 10. NX: 100.0
 Part: PROTON Ymin: -10. Ymax: 10. NY: 100.
 Zmin: -10. Zmax: 100. NZ: 500.

FLUKA – LABORATORIUM II

Wyznaczenie zasięgu protonów i elektronów w różnych materiałach

2. Wyznaczenie zasięgu i porównanie z wartościami tablicowymi,

Material	Z	A	X_0 [g/cm ²]	X_0 [cm]	E_c [MeV]
Hydrogen	1	1.01	61.3	731 000	350
Helium	2	4.00	94	530 000	250
Lithium	3	6.94	83	156	180
Carbon	6	12.01	43	18.8	90
Nitrogen	7	14.01	38	30 500	85
Oxygen	8	16.00	34	24 000	75
Aluminium	13	26.98	24	8.9	40
Silicon	14	28.09	22	9.4	39
Iron	26	55.85	13.9	1.76	20.7



FLUKA – LABORATORIUM II

Wyznaczenie zasięgu protonów i elektronów w różnych materiałach

3. Sprawdzenia prawa skalowania:

Obserwacje pokazały, że dla niskich energii wielkość: $R_t \rho / \sqrt{A}$ jest stała (z dokładnością ok. 15%)

Prawo Bragga-Kleemanna:

A- ciężar atomowy

$$\frac{R_{t,1}}{R_{t,2}} \approx \frac{\rho_2}{\rho_1} \sqrt{\frac{A_1}{A_2}}$$

zasięg

$$R_t = \int_0^{E_{ki}} \frac{dE_k}{(-dE/d\chi)}$$

stopping power

$$-\frac{dE}{d\chi} = \frac{1}{\rho} \frac{dE}{dx}$$

FLUKA – LABORATORIUM II

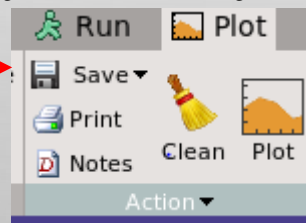
Wyznaczenie zasięgu protonów i elektronów w różnych materiałach

SPRAWOZDANIE:

1. Proszę wybrać rozkład pokazujący różnice w propagacji elektronów i protonów w materii.
2. Dla protonów lub elektronów dla 3-5 energii wyznaczyć zasięg w jednym materiale, pokazać na rozkładzie 1D.
3. Dla protonów o jednej wybranej energii w kilku materiałach (3-5) sprawdzić prawo skalowania.

Jeśli zdalna praca z FLUKĄ jest bardzo uciążliwa proszę wykonać mniejszą liczbę symulacji.

4. Rysunki we Flairze zapisuje się tutaj: →



MEAN RANGE AND ENERGY LOSS

Mean Range and Energy Loss in Lead, Copper, Aluminum, and Carbon

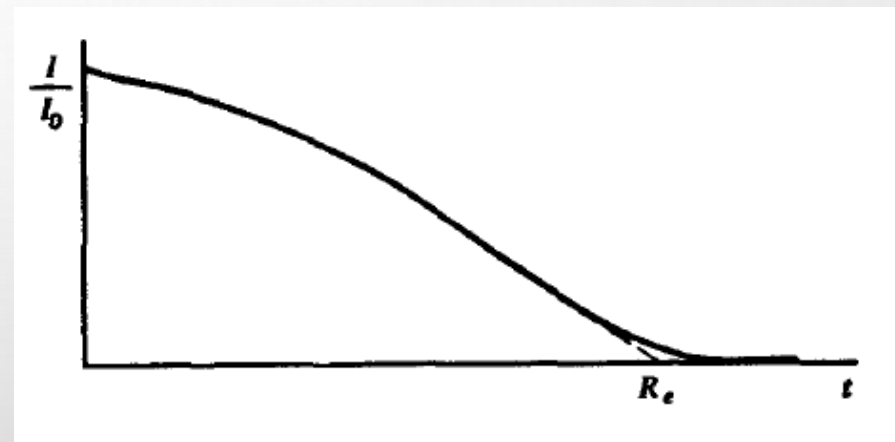
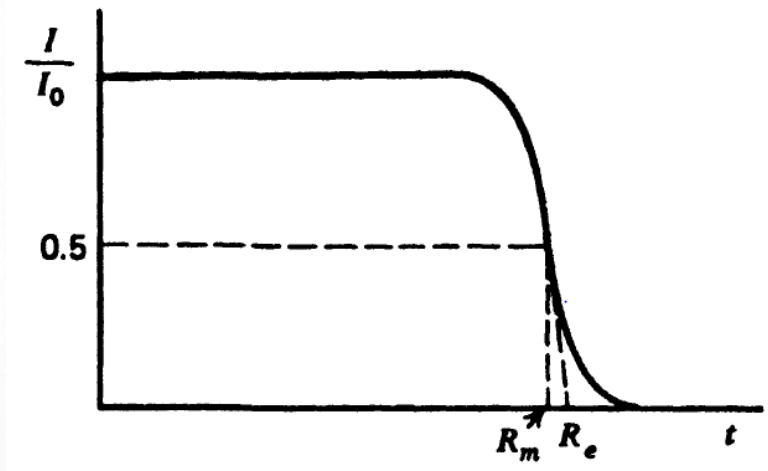
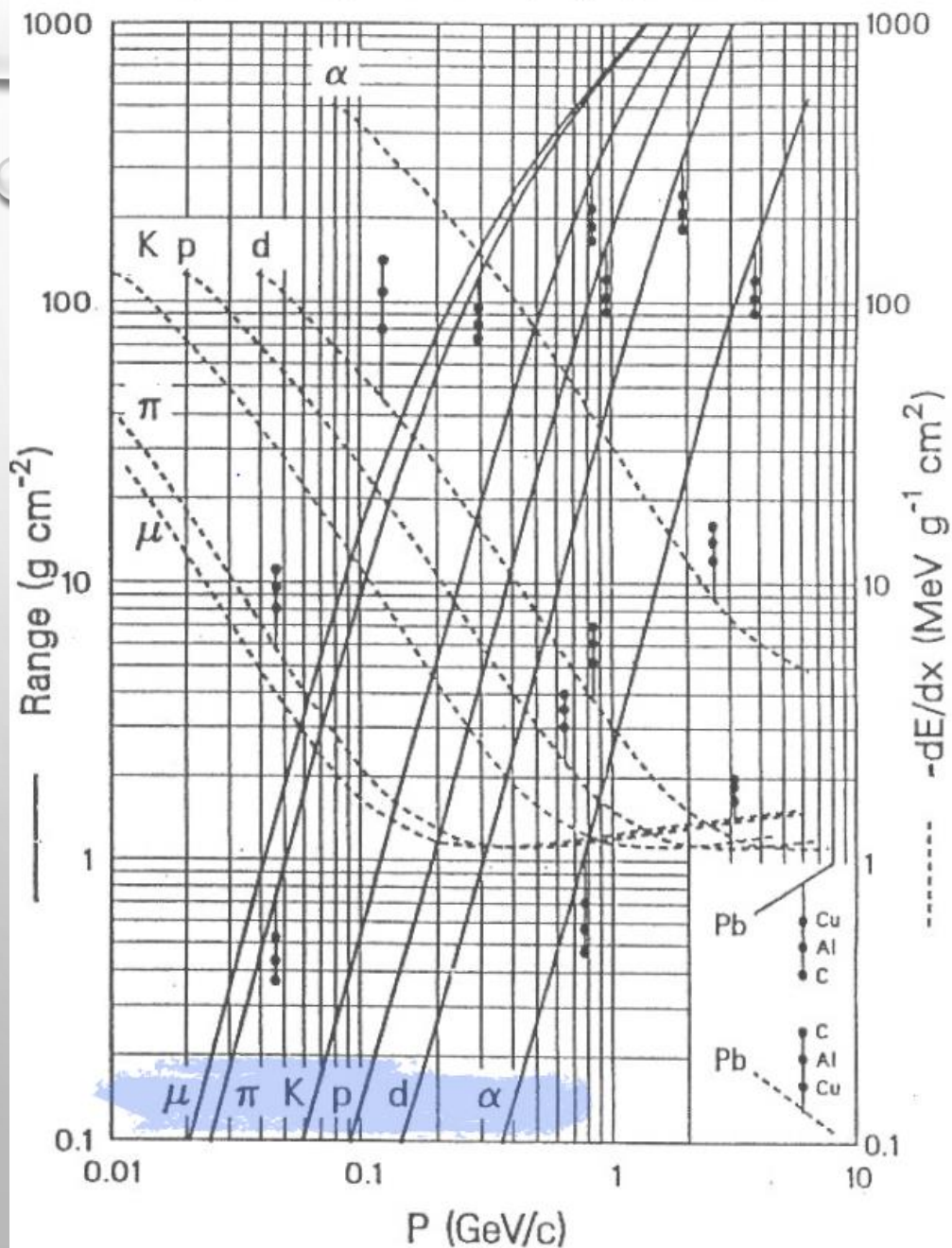
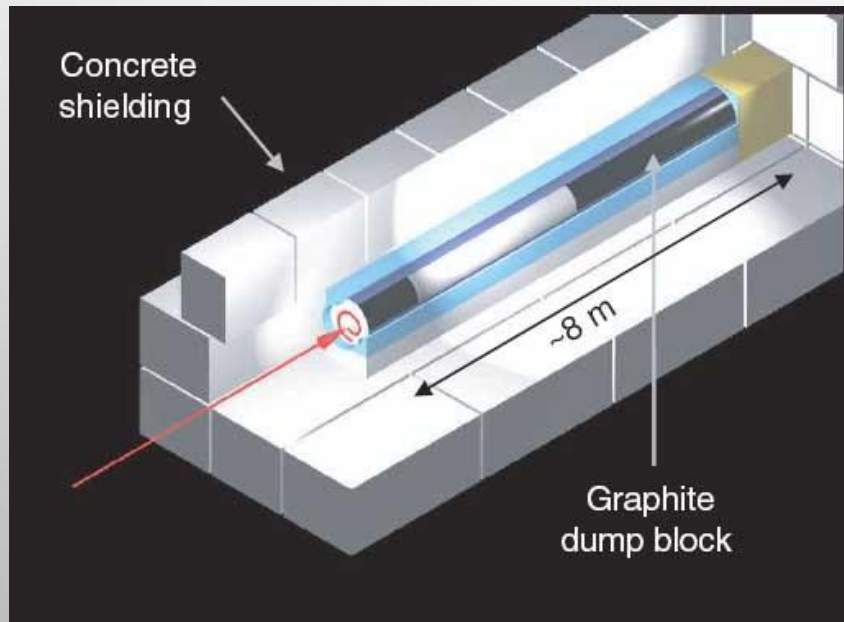


Fig. 2.16 Mean range in g cm^{-2} and stopping power in $\text{MeV g}^{-1} \text{cm}^2$ from Eq. (2.1) for various particles in Pb, with scaling to Cu, Al and C (adapted and republished with permission from Kelly, R.L. et al., Particle Data Group, Review of Particle Physics, *Rev. of Mod. Phys.* **52**, S1 (1980); Copyright (1980) by the American Physical Society).

FLUKA – PROJEKT

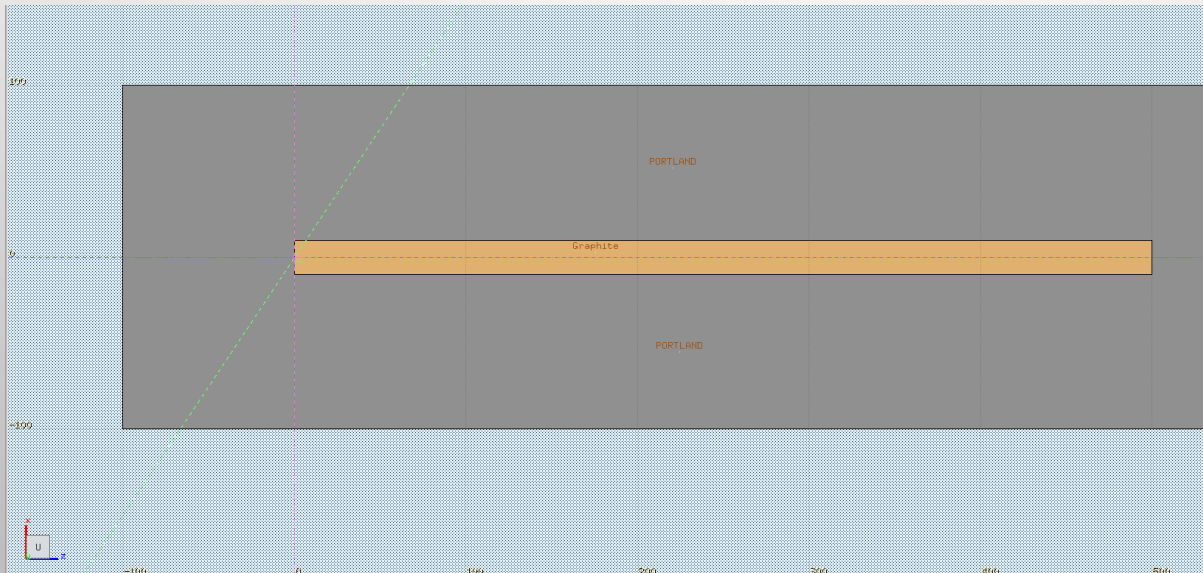
- Symulacja bloku zatrzymującego protony z LHC (**beam dump**).
- Projekt bloku do pochłonięcia (bardzo) wysokoenergetycznej wiązki protonów z LHC. Protony mają energię 7 TeV i ich liczba to rząd 10^{12} cząstek. Proszę zrobić symulację dla co najmniej 1 TeV i policzyć dawki otrzymane po zrzuceniu takiej wiązki do bloku z wybranego przez siebie materiału. Proszę zmienić wymiary z tego przykładu.
- Liczba cząstek do symulacji powinna być tak dobrana, aby zapewnić wystarczającą statystykę, tzn. przynajmniej po 300 w trzech cyklach. Flair przelicza rozkłady normalizując je do jednej padającej cząstki. Otrzymane rozkłady należy zatem przemnożyć przez 10^{12} (w oknie **Norm**).



<https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1367-2630/8/11/290>

FLUKA – PROJEKT

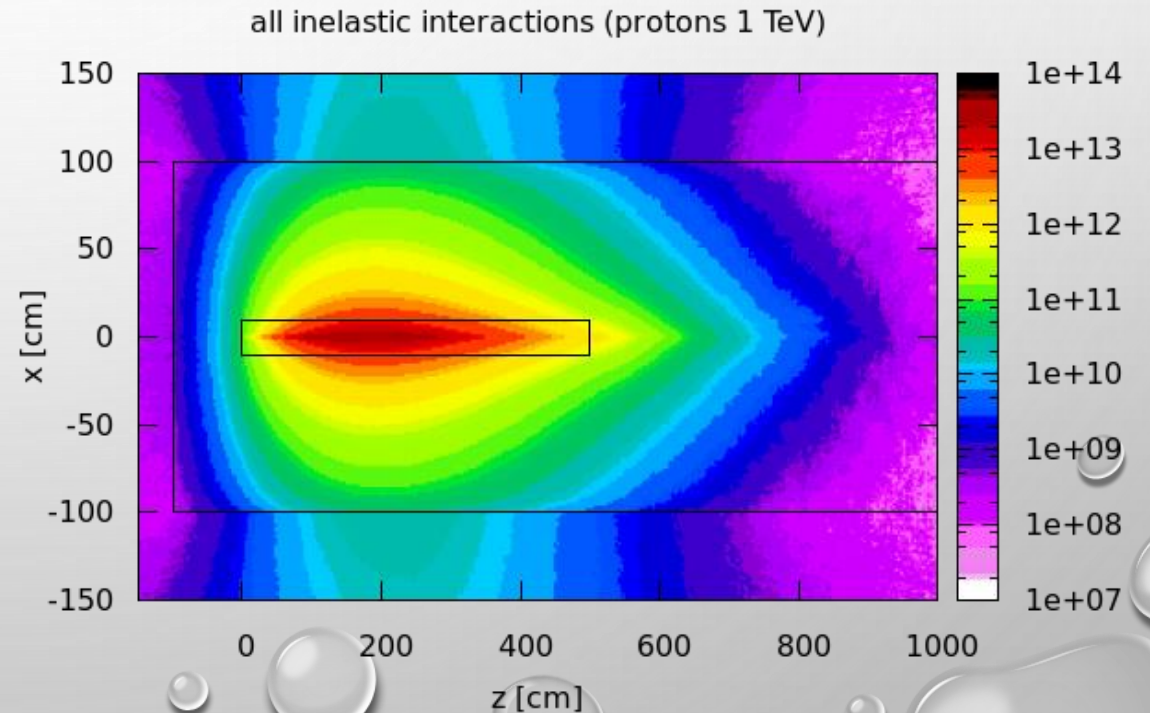
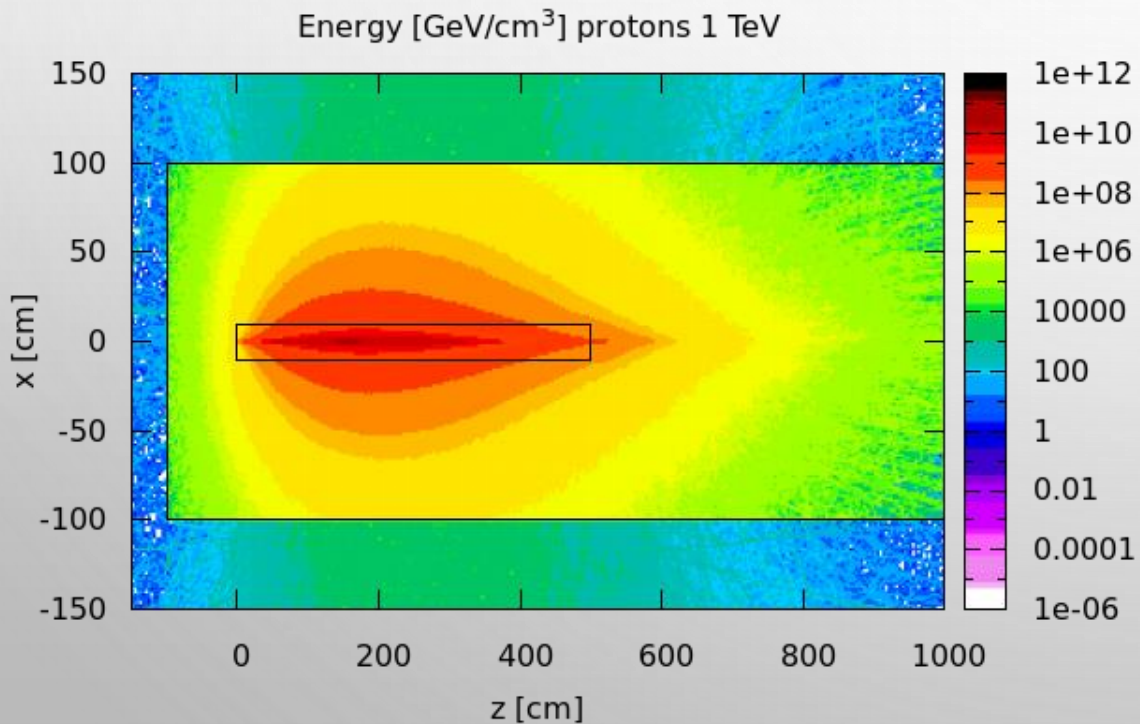
- Symulacja bloku zatrzymującego protony z LHC (**beam dump**).
- Liczba cząstek do symulacji powinna być tak dobrana, aby zapewnić wystarczającą statystykę, tzn. przynajmniej po 300 w trzech cyklach. Flair przelicza rozkłady normalizując je do jednej padającej cząstki. Otrzymane rozkłady należy zatem przemnożyć przez 10^{12} (w oknie **Norm**).
- Przykładowy input **dump.inp** ma dodane nowe materiały: grafit i beton (portland).
- Geometria zawiera grafitowy target, betonowe osłony, a wszystko jest w pomieszczeniu wypełnionym powietrzem.
- Symulacja 100 protonów o energii 1 TeV trwa ok 30 min, a o energii 7 TeV ponad 4 godziny.



FLUKA – PROJEKT – CIEKAWE OBSERWACJE

Rys 1. Całkowita energia zdeponowana. Jest to energia zdeponowana przez 10^{12} protonów o energii 1 TeV. Powinna tu obowiązywać zasada zachowania energii. Ile to dzuli? Jak bardzo niszcząca jest taka energia? Czy stopi kawałek miedzi?

Rys 2. Najwięcej oddziaływań silnych (jądrowych, nieelastycznych) jest na 200 cm. Co się dzieło z protonami pomiędzy $z = 0$ a $z = 100$ cm?



FLUKA – PROJEKT – CIEKAWE OBSERWACJE

Rys. 1. Najwięcej oddziaływań silnych (jądrowych, nieelastycznych) jest na ok. 200 cm.

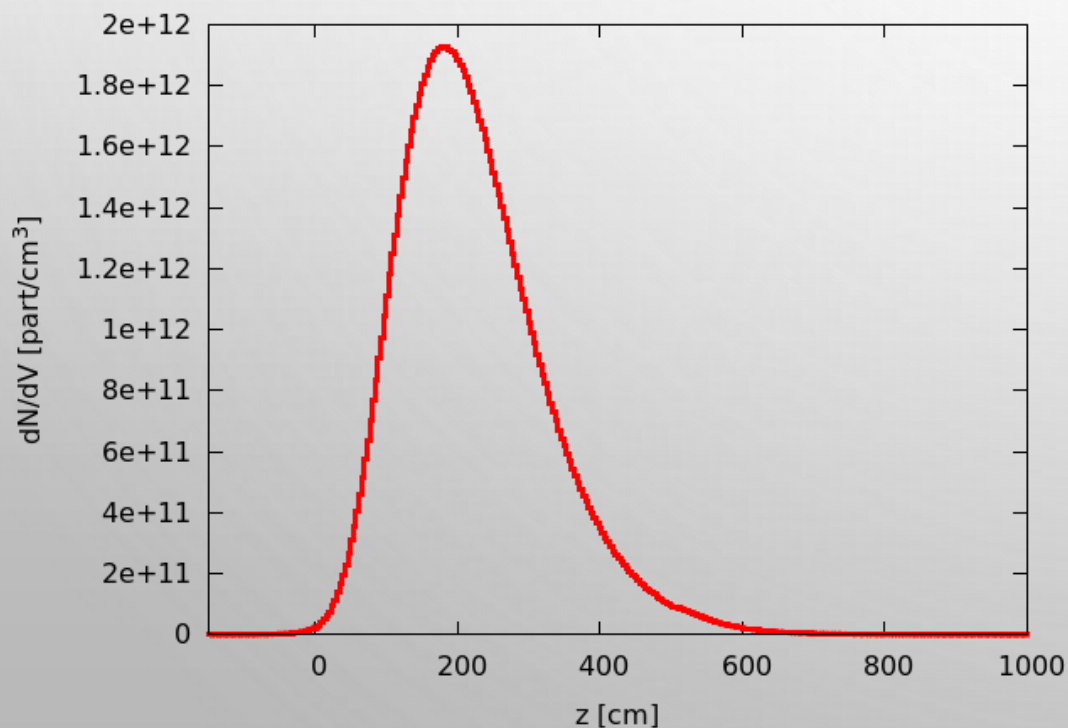
Rys. 2. Liczba oddziaływań pierwotnych protonów maleje wyraźnie eksponentalnie i po 150 cm praktycznie oddziaływań pierwotnych już nie ma! Jaka jest tu średnia droga swobodna i jak ją porównać z tablicami?

Dlaczego, gdy cała pierwotna wiązka straciła energię, nastąpił wzrost liczby oddziaływań?

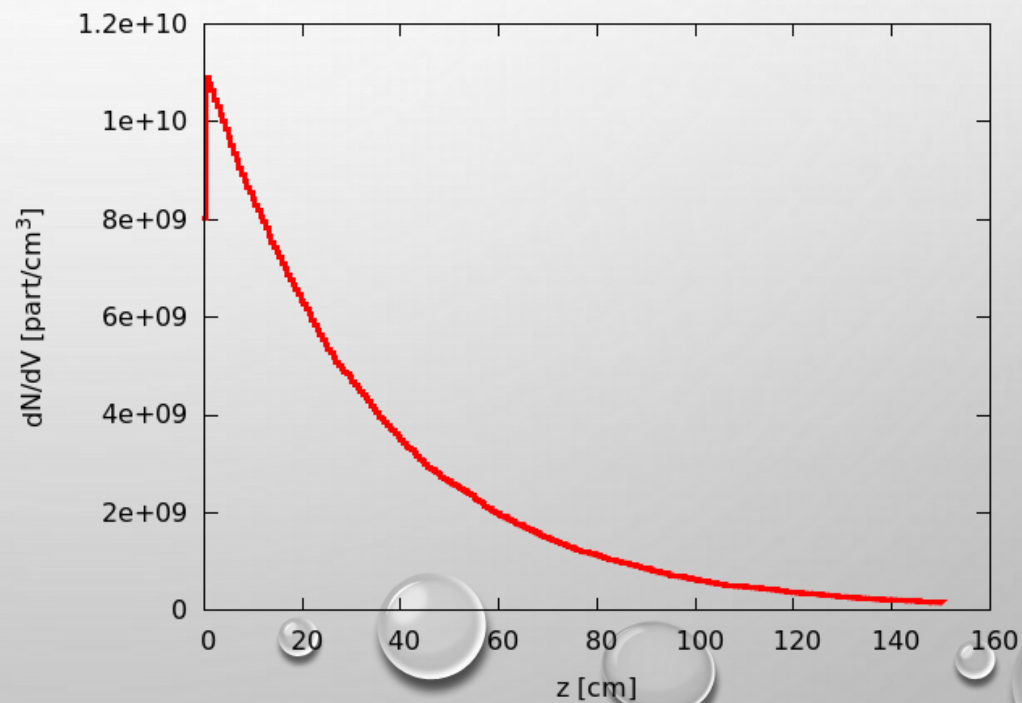
Ciekawe jest zobaczenie tych wykresów w skali pół-log.

Axes		
▼	Label	Log
x:		<input type="checkbox"/>
y:		<input checked="" type="checkbox"/>
cb:		<input checked="" type="checkbox"/>

all inelastic interactions (protons 1 TeV)



primary beam interactions (protons 1 TeV)

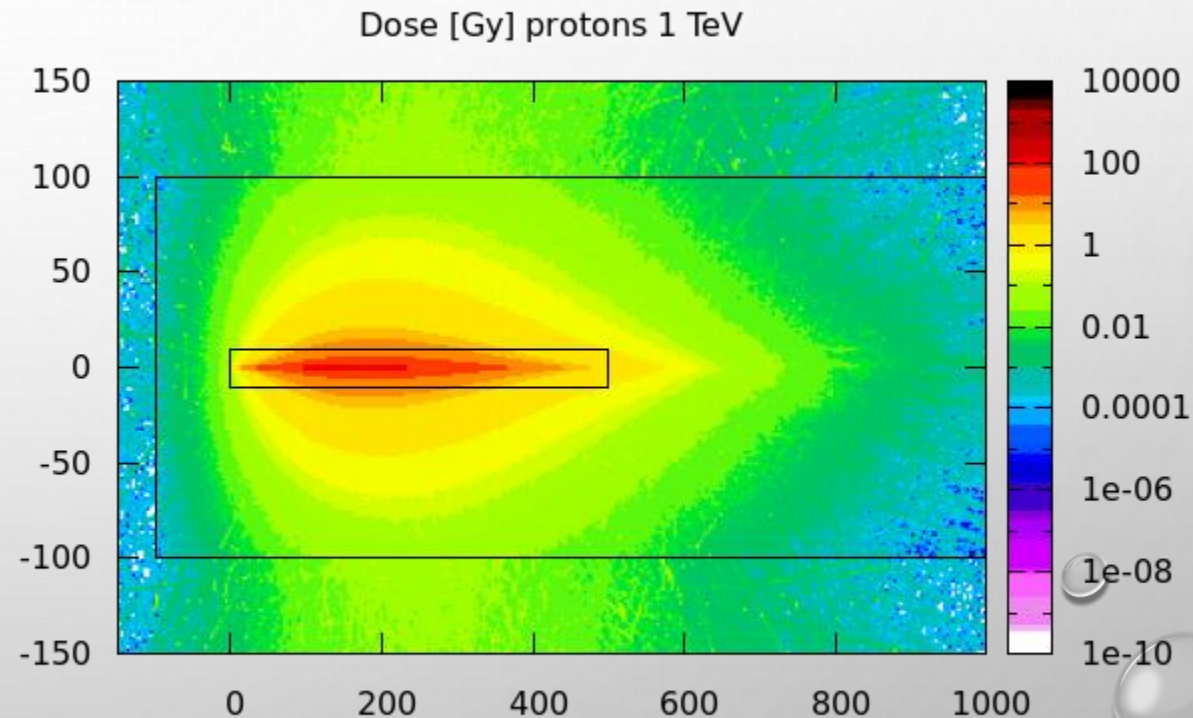
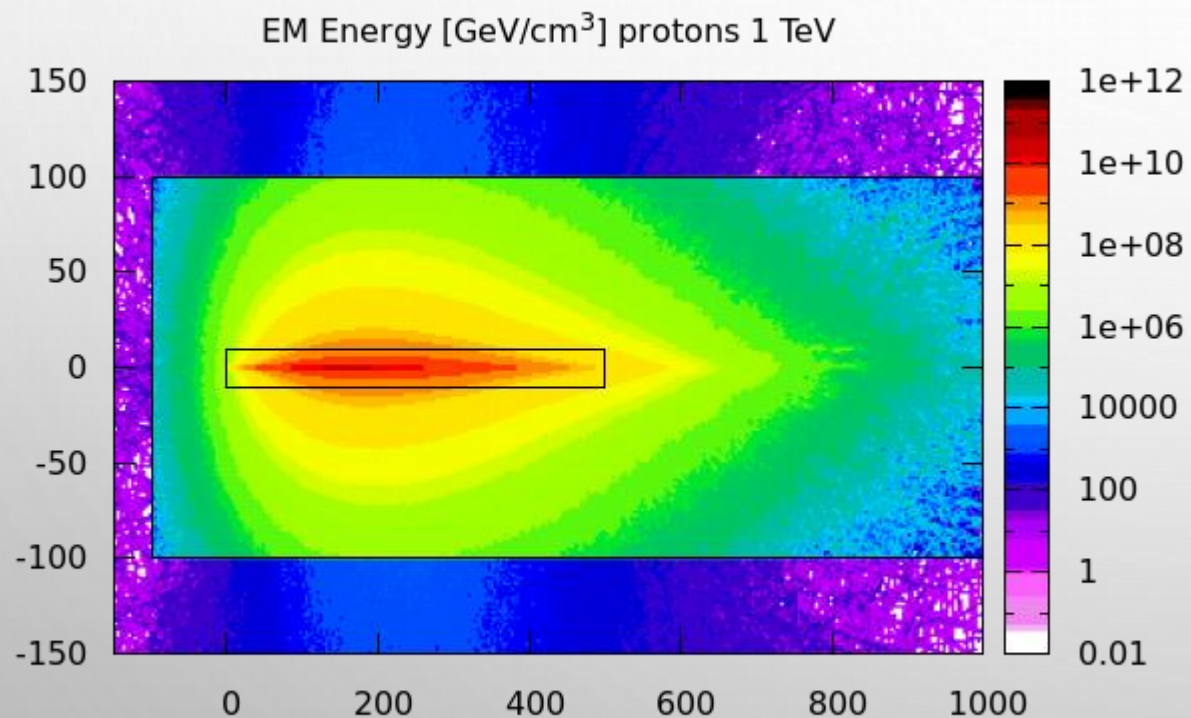


FLUKA – PROJEKT – CIEKAWE OBSERWACJE

Rys. 1. Energia kinetyczna zdeponowana przez elektrony i fotony.

Rys. 2. Dawka. Czy bezpiecznie jest stać w tym pomieszczeniu (przemyśleć przeliczenie jednostki!)?

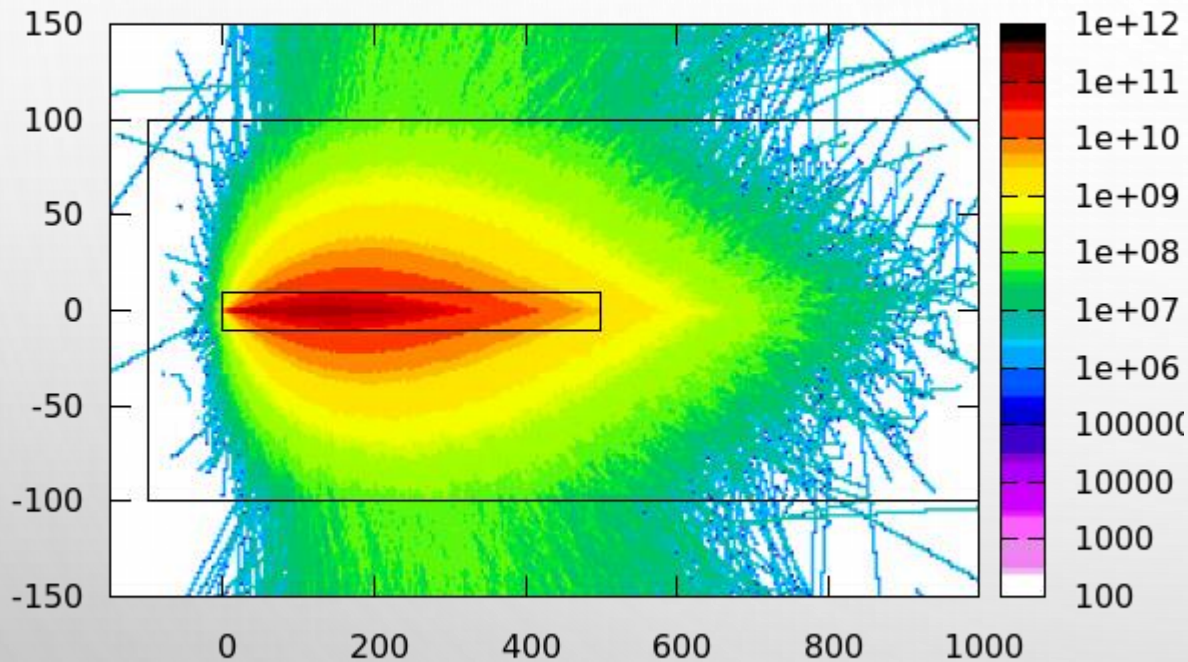
Czy osłony są wystarczające?



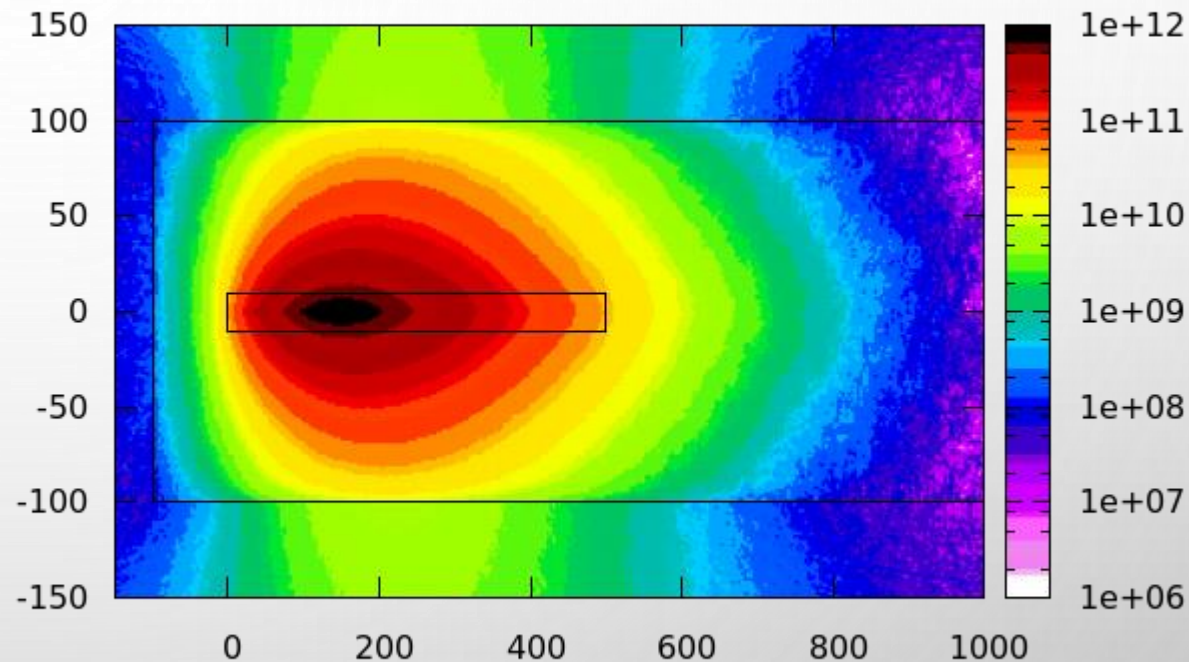
FLUKA – PROJEKT – CIEKAWE OBSERWACJE

Po zderzeniu protonów z materiałem powstały cząstki wtórne: **piony**, **neutrony**, protony oraz fotony i elektrony:

pions



neutrons

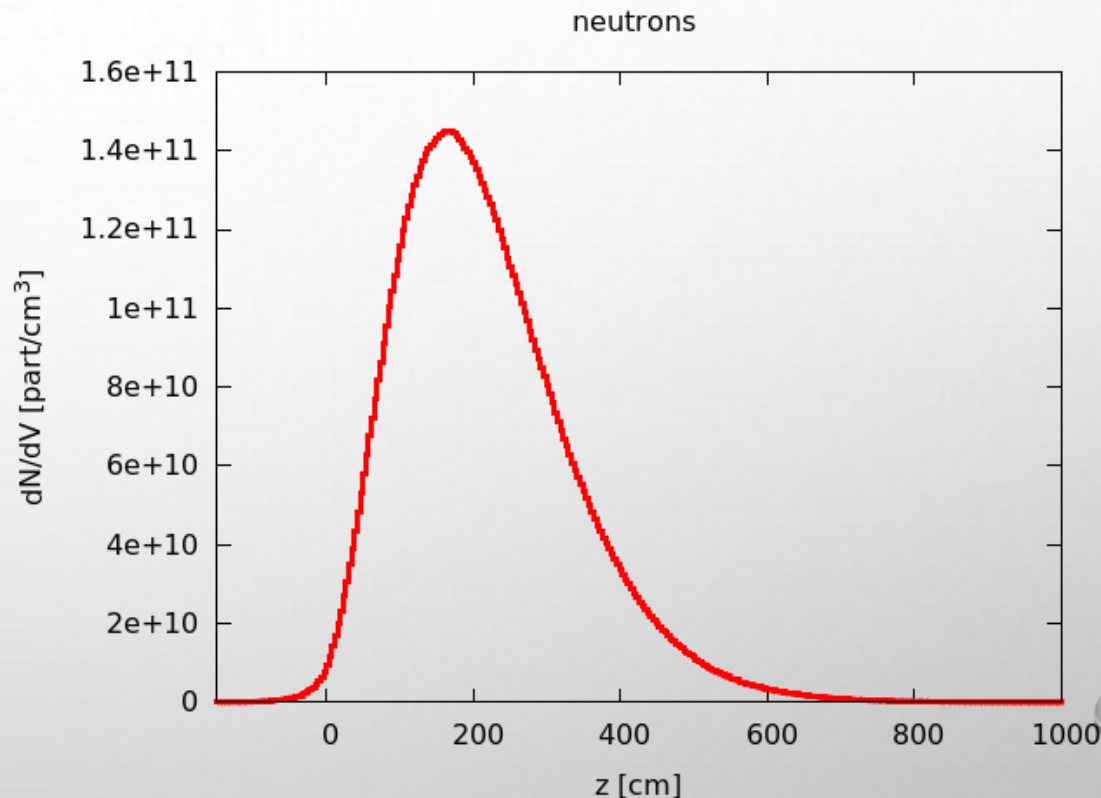
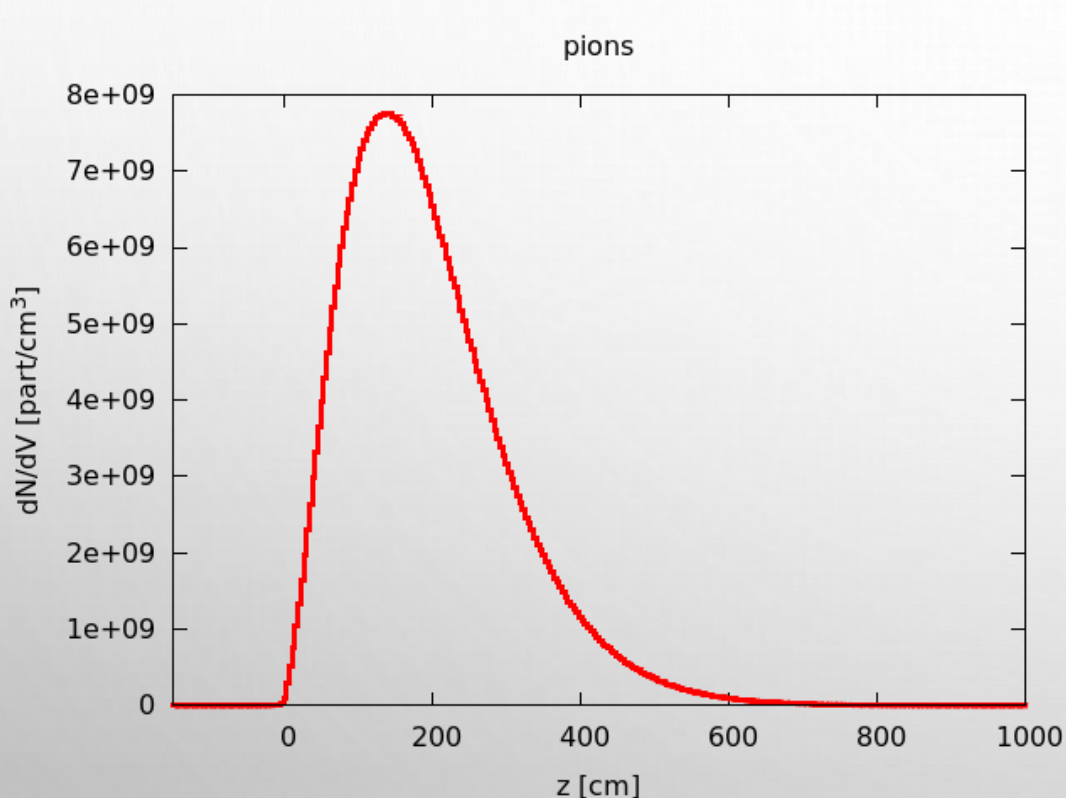


Jakie jest pochodzenie tych cząstek? Skąd tyle neutronów?

Rozkłady pokazują tzw. fluencję, czyli liczbę cząstek przechodzących przez powierzchnię prostopadłą do kierunku w dwuwymiarowej siatce przestrzennej. Wartości z trzeciego wymiaru (tutaj y) są średniowane.

FLUKA – PROJEKT – CIEKAWE OBSERWACJE

Po zderzeniu protonów z materiałem powstały cząstki wtórne: **piony**, **neutrony**, protony oraz fotony i elektrony. Czy da się zauważyć, które cząstki zostały wyprodukowane najwcześniej? Skala log będzie pomocna.



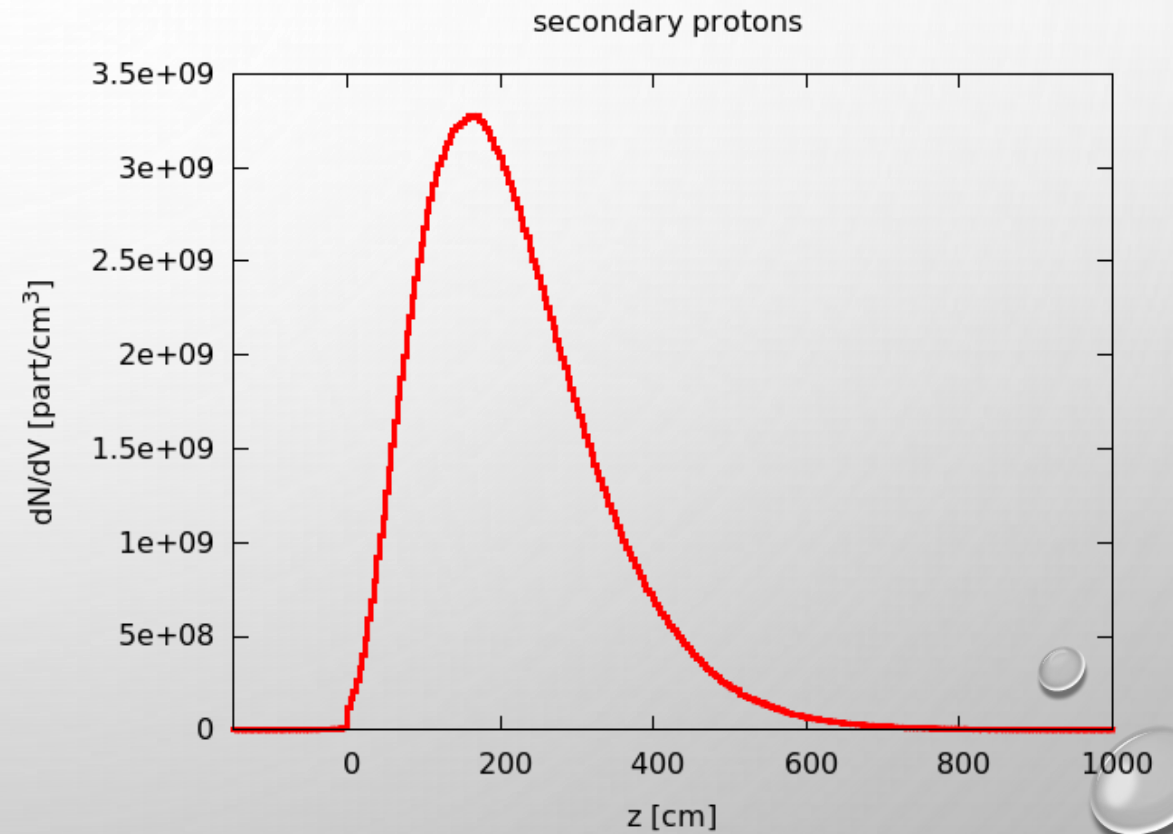
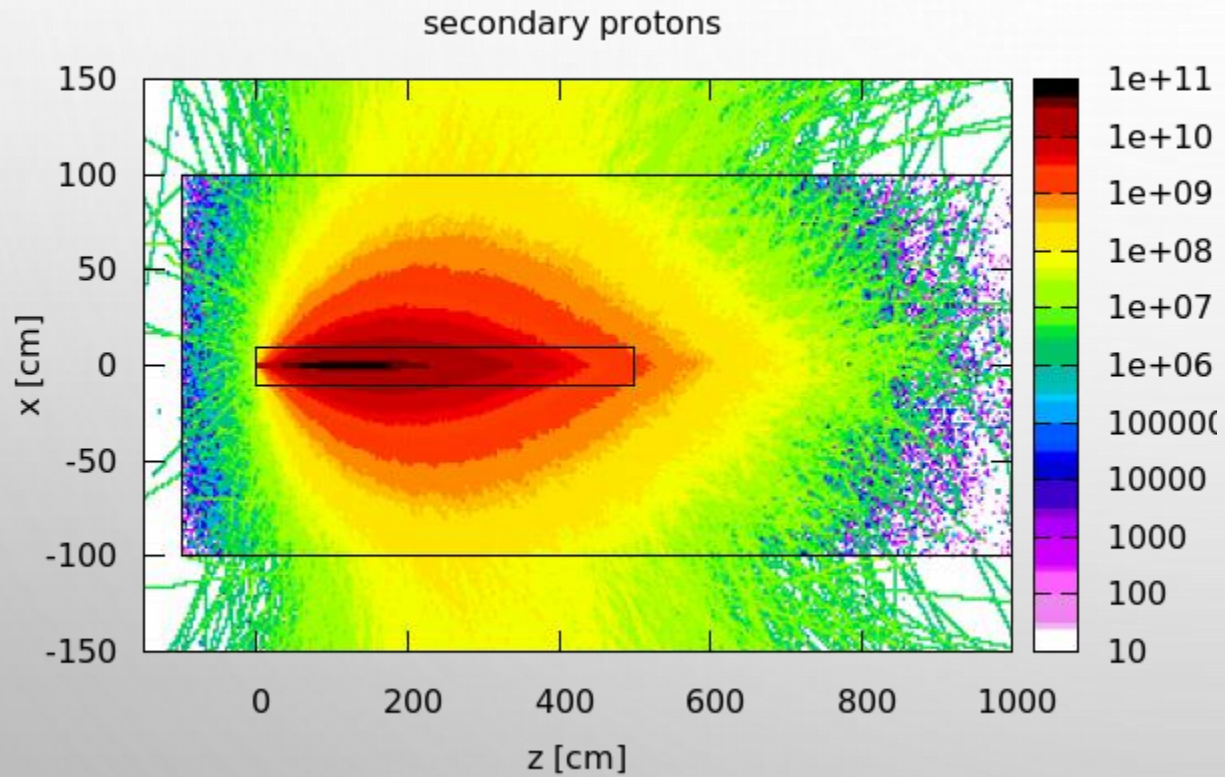
Rozkłady przedstawiają fluencję w funkcji odległości od źródła z .

Fluencja to liczba cząstek/powierzchnię, ale w tej symulacji jest policzona jako długość wszystkich śladów na jednostkę objętości.

Stąd jest: $\frac{dN}{dV}$ [part/dx dy dz], ale właściwie powinno być [part/cm²]. Jeśli rozkład jest w funkcji „z”, tzn, że każda wartość jest średnią po x i y .

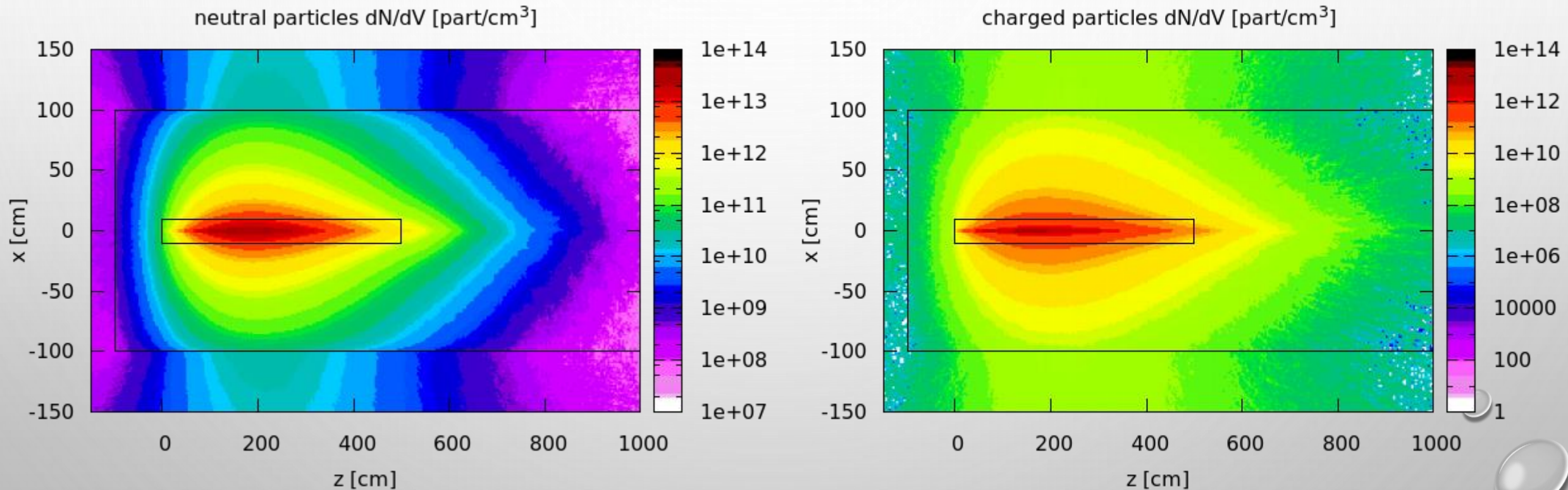
FLUKA – PROJEKT – CIEKAWE OBSERWACJE

Po zderzeniu protonów z materiałem powstały cząstki wtórne: piony, neutrony, **protony** oraz fotony i elektrony:



FLUKA – PROJEKT – CIEKAWE OBSERWACJE

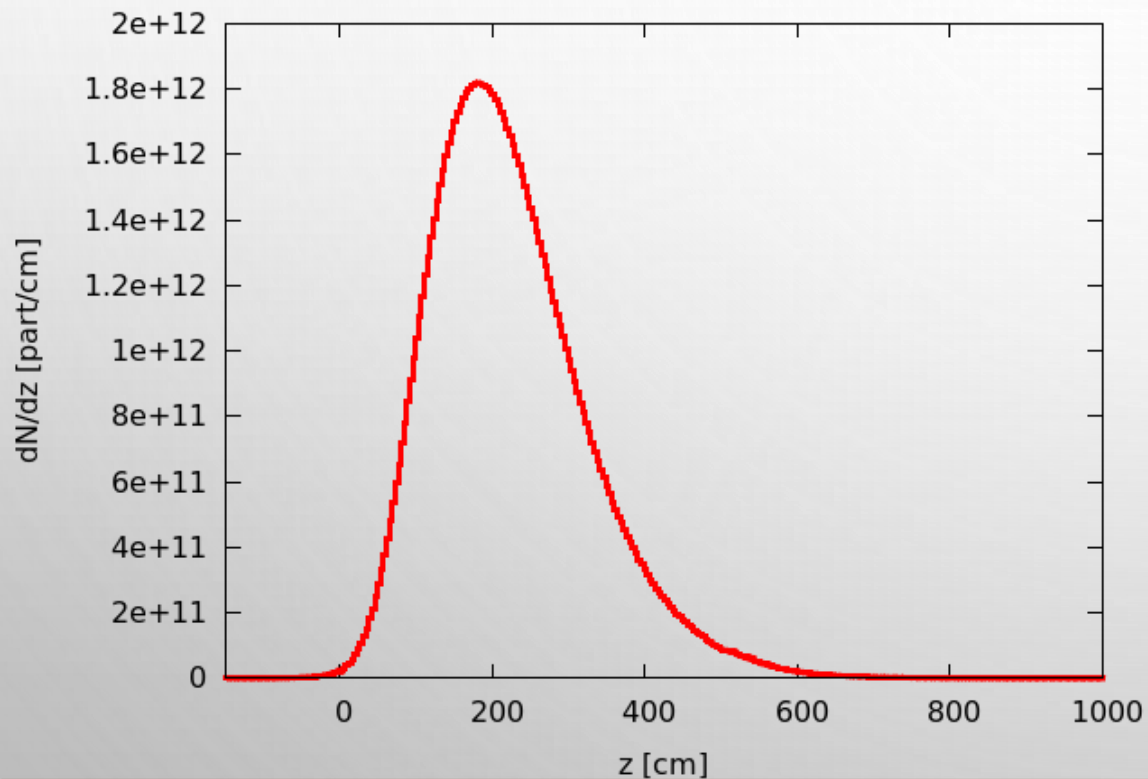
Po zderzeniu protonów z materiałem powstały cząstki wtórne: piony, neutrony, protony oraz **fotony** i elektrony:



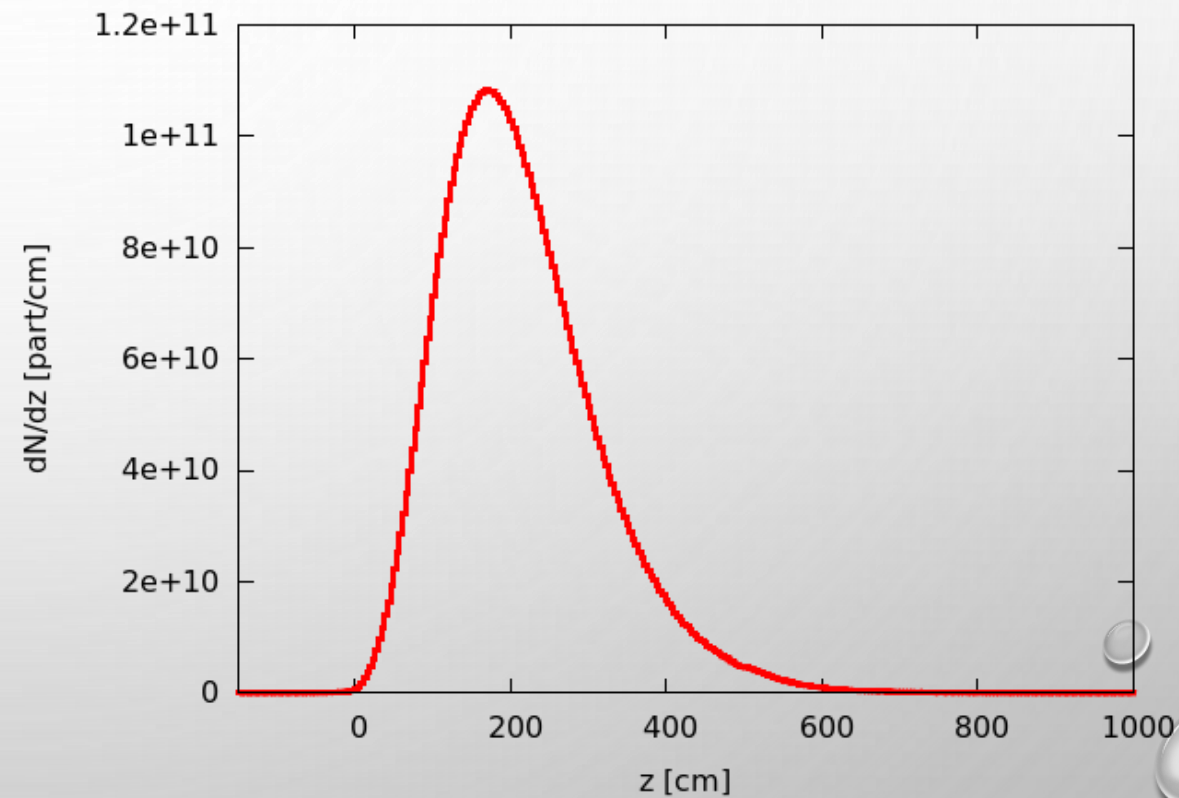
FLUKA – PROJEKT – CIEKAWE OBSERWACJE

Po zderzeniu protonów z materiałem powstały cząstki wtórne: piony, neutrony, protony oraz fotony i elektrony:

neutral particles



charged particles



W skali log można zobaczyć, jakie jest promieniowanie **przed** miejscem uderzenia wiązki w blok grafitowy.

Dyskusja wyników?

FLUKA – PROJEKT INPUT FILE

```

SPH blkbody      x: 0.0          y: 0.0          z: 0.0
                  R: 1000000.0
RPP void         Xmin: -5000.0  Xmax: 5000.0
                  Ymin: -5000.0  Ymax: 5000.0
                  Zmin: -1000.   Zmax: 10000.
Cylindrical target
RCC target      x: 0.0          y: 0.0          z: 0.0
                  Hx: 0.0        Hy: 0.0        Hz: 200.0
                  R: 5.0
RPP target      Xmin: -10.       Xmax: 10.
                  Ymin: -10.       Ymax: 10.
                  Zmin: 0.         Zmax: 500.
RPP shield      Xmin: -100.      Xmax: 100.
                  Ymin: -100.      Ymax: 100.
                  Zmin: -100.      Zmax: 5000.

```

```

END
Black hole
REGION BLKBODY      Neigh: 5
  expr: +blkbody -void
Void around
REGION ROOM         Neigh: 5
  expr: +void -shield
concrete shield
REGION BLOCKS       Neigh: 5
  expr: +shield -target
Target
REGION TARGET       Neigh: 5
  expr: +target

```

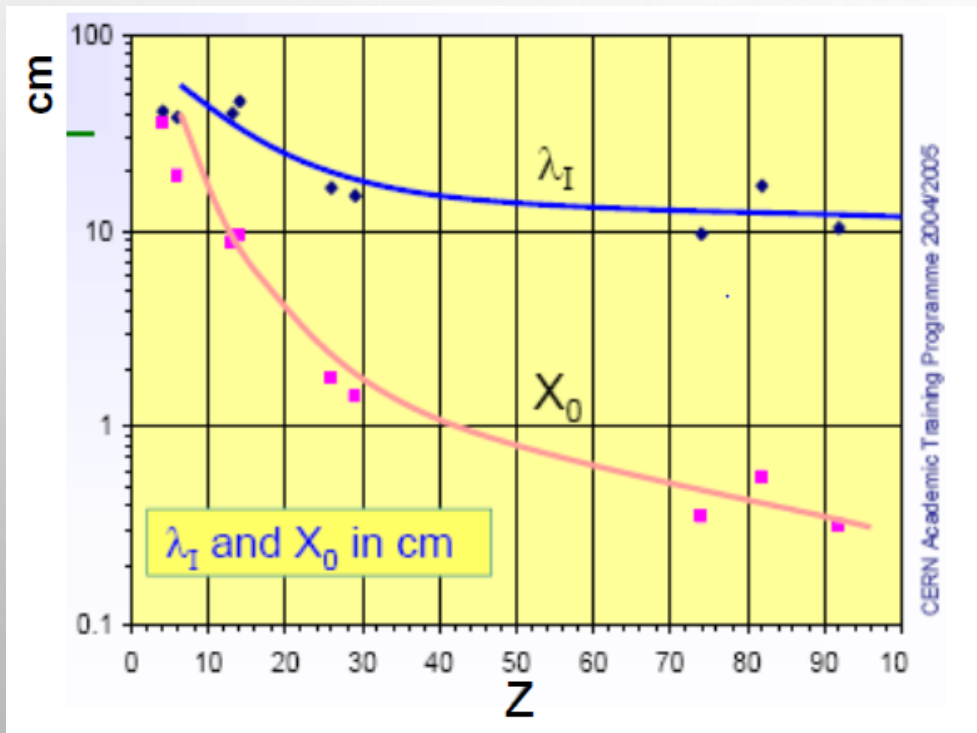
Beton składa się głównie z SiO₂

```

MATERIAL Graphite #: 2.26
  Z: 6.            Am: A: dE/dx:
MATERIAL POTASSIU #: 0.862
  Z: 19           Am: A: dE/dx:
Concrete portland
Concrete has a wide variation in density and composition.
MATERIAL PORTLAND #: 2.3
  Z:              Am: A: dE/dx:
COMPOUND PORTLAND Mix: Mass Elements: 10..12
  f1: 0.01         M1: HYDROGEN f2: 0.001 M2: CARBON
  f3: 0.529107    M3: OXYGEN f4: 0.016 M4: SODIUM
  f5: 0.002       M5: MAGNESIU f6: 0.033872 M6: ALUMINUM
  f7: 0.337021    M7: SILICON f8: 0.013 M8: POTASSIU
  f9: 0.044       M9: CALCIUM f10: 0.014 M10: IRON
  f11:            M11: f12: M12:
...+...1...+...2...+...3...+...4...+...5...+...6...+...7...
ASSIGNMA Mat: BLCKHOLE Reg: BLKBODY to Reg:
  Mat(Decay): Step: Field:
ASSIGNMA Mat: AIR Reg: ROOM to Reg:
  Mat(Decay): Step: Field:
ASSIGNMA Mat: PORTLAND Reg: BLOCKS to Reg:
  Mat(Decay): Step: Field:
ASSIGNMA Mat: Graphite Reg: TARGET to Reg:
  Mat(Decay): Step: Field:
LOW-MAT Mat: Graphite LowMat: C. Graphite bound nat. Carbon, 296K

```

FLUKA – PROJEKT INPUT FILE



	USRBIN	Type: X-Y-Z ▾ Part: ENERGY ▾	Xmin: -150. Ymin: -150. Zmin: -150.	Unit: 21 BIN ▾ Xmax: 150. Ymax: 150. Zmax: 1000.	Name: energy NX: 200. NY: 100. NZ: 300.
	USRBIN	Type: X-Y-Z ▾ Part: ALL-PART ▾	Xmin: -150. Ymin: -150. Zmin: -150.	Unit: 22 BIN ▾ Xmax: 150. Ymax: 150. Zmax: 1000.	Name: allpart NX: 200. NY: 100. NZ: 300.
	USRBIN	Type: X-Y-Z ▾ Part: BEAMPART ▾	Xmin: -15. Ymin: -15. Zmin: -15.	Unit: 23 BIN ▾ Xmax: 15. Ymax: 15. Zmax: 150.	Name: beampart NX: 200. NY: 10. NZ: 300.
	USRBIN	Type: X-Y-Z ▾ Part: EM-ENRGY ▾	Xmin: -150. Ymin: -150. Zmin: -150.	Unit: 24 BIN ▾ Xmax: 150. Ymax: 150. Zmax: 1000.	Name: emenerg NX: 200. NY: 100. NZ: 300.
	USRBIN	Type: X-Y-Z ▾ Part: DOSE ▾	Xmin: -150. Ymin: -150. Zmin: -150.	Unit: 25 BIN ▾ Xmax: 150. Ymax: 150. Zmax: 1000.	Name: dose NX: 200. NY: 100. NZ: 300.
	USRBIN	Type: X-Y-Z ▾ Part: PIONS+ ▾	Xmin: -150. Ymin: -150. Zmin: -150.	Unit: 26 BIN ▾ Xmax: 150. Ymax: 150. Zmax: 1000.	Name: pions NX: 200. NY: 100. NZ: 300.
	USRBIN	Type: X-Y-Z ▾ Part: NEUTRON ▾	Xmin: -150. Ymin: -150. Zmin: -150.	Unit: 27 BIN ▾ Xmax: 150. Ymax: 150. Zmax: 1000.	Name: neutron NX: 200. NY: 100. NZ: 300.
	USRBIN	Type: X-Y-Z ▾ Part: PROTON ▾	Xmin: -150. Ymin: -150. Zmin: -150.	Unit: 28 BIN ▾ Xmax: 150. Ymax: 150. Zmax: 1000.	Name: proton NX: 200. NY: 100. NZ: 300.
	USRBIN	Type: X-Y-Z ▾ Part: ALL-NEUT ▾	Xmin: -150. Ymin: -150. Zmin: -150.	Unit: 29 BIN ▾ Xmax: 150. Ymax: 150. Zmax: 1000.	Name: allneut NX: 200. NY: 100. NZ: 300.
	USRBIN	Type: X-Y-Z ▾ Part: ALL-CHAR ▾	Xmin: -150. Ymin: -150. Zmin: -150.	Unit: 30 BIN ▾ Xmax: 150. Ymax: 150. Zmax: 1000.	Name: allchar NX: 200. NY: 100. NZ: 300.

