

# Integracije z metodo Monte Carlo

Miha Čančula

8. december 2011

## 1 Masa in težišče čudnega telesa

### 1.1 Opis telesa

Telo je krogla, ki smo ji izrezali presek z valjem, tako da je radij valja polovica radija krogle, valj pa se ravno dotika središča krogle. Točka  $\vec{r} = (x, y, z)^T$  je v tem telesu, če:

1. Je znotraj krogle:  $r^2 < 1$
2. Je zunaj valja:  $(x - \frac{1}{2})^2 + y^2 > \frac{1}{4}$

Pri tem smo privzeli, da je os valja vzporedna osi  $z$ , nahaja pa se na koordinatah  $x = 1/2$  in  $y = 0$ . Pri tako izbranem koordinatnem sistem je zaradi simetrije težišče vedno na osi  $x$ :  $\vec{r}^* = (x^*, 0, 0)^T$ .

Ker bomo računali v krogelnih koordinatah, sem drugi pogoj prepisal kot

$$\left(x - \frac{1}{2}\right)^2 + y^2 = x^2 + y^2 - x + \frac{1}{4} > \frac{1}{4} \quad (1)$$

$$x^2 + y^2 > x \quad (2)$$

$$r^2 \sin^2 \vartheta > r \sin \vartheta \cos \varphi \quad (3)$$

$$r \sin \vartheta > \cos \varphi \quad (4)$$

### 1.2 Enakomerna gostota

Izračun mase telesa z enakomerno gostoto je enostaven: naključno izberemo nekaj točk znotraj krogle in preštejemo, kolikšen delež točk je znotraj našega telesa. Ta delež je enako razmerju prostornin telesa in krogle, ki je enako razmerju mas. Napako tega deleža lahko izračunamo po formuli za binarno porazdelitev.

Za izračun težišča pa sem izbral drugo varianto metode Monte Carlo. Težišče je definirano kot  $\vec{r}^* = \langle \vec{r} \rangle$ , torej ga lahko izračunamo kot povprečje, tako seštejemo položaje vseh naključno izbranih točk, ki ležijo znotraj telesa, nato pa to delimo s številom takih točk. Prednost takšne izbire metod je v tem, da lahko za oba izračuna uporabimo iste naključno izbrane točke. Napako težišča sem ocenil kot standardno deviacijo meritev.

Naključno točko znotraj krogle lahko generiramo s tremi enakomernimi naključnimi števili:

$$dm = \rho_0 dV = \rho_0 r^2 dr d\varphi \sin \vartheta d\vartheta = \frac{\rho_0}{3} d(r^3) d\varphi d(\cos \vartheta) \quad (5)$$

Parametri  $r^3$ ,  $\varphi$  in  $\cos \vartheta$  morajo biti naključna števila, porazdeljena enakomerno po primernem intervalu. Če so  $\xi_i$  števila, naključno porazdeljena med 0 in 1, lahko izrazimo  $r$ ,  $\varphi$  in  $\vartheta$  kot

$$r = \sqrt[3]{\xi_1} \quad (6)$$

$$\varphi = 2\pi\xi_2 \quad (7)$$

$$\vartheta = \arccos(2\xi_3 - 1) \quad (8)$$

Pri tem moramo paziti, da za  $\xi_1$  in  $\xi_3$  dovolimo obe mejni vrednosti, medtem ko mora biti za  $\xi_2$  interval na eni strani odprt.

### 1.3 Spremenljiva gostota

Tu je račun podoben, le da moramo naključne točke izbirati drugače. Enakomerna porazdelitev po masi ne pomeni več tudi enakomerne porazdelitve po prostoru, ampak jo moramo prej primerno transformirati.

$$dm = \rho_0 (r/R)^3 dV = \frac{\rho_0}{R^3} r^5 dr d\varphi \sin \vartheta d\vartheta = \frac{\rho_0}{6R^3} d(r^6) d\varphi d(\cos \vartheta) \quad (9)$$

Kotna porazdelitev je enako kot prej, le namesto  $r^3$  mora biti sedaj enakomerno porazdeljen  $r^6$ .

$$r = \sqrt[6]{\xi_1} \quad (10)$$

$$\varphi = 2\pi\xi_2 \quad (11)$$

$$\vartheta = \arccos(2\xi_3 - 1) \quad (12)$$

Ker točke izbiramo iz krogle, moramo upoštevati še, da ima krogla s takšno gostoto ravno polovico mase krogle z enakomerno gostoto.

### 1.4 Rezultati

V računih sem za poenostavitev vzel vrednosti  $\rho_0 = R = 1$ , uporabil sem  $10^8$  točk. Rezultati so v tabeli

Gostota	Masa $m$	$\sigma_m$	Težišče $x^*$	$\sigma_{x^*}$
Enakomerna	2,9835	0,0002	0,24086	0,00005
Spremenljiva	1,5689	0,0001	0,24081	0,00005

Tabela 1: Masi in težišči teles z različnima gostotama

S tabele lahko vidimo, da imata telesi z danima odvisnostma gostote enaki težišči.

## 2 Sevanje v krogli

Zaradi krogelne simetrije lahko vsak foton, ki nastane v krogli, opišemo z dvema parametroma: razdaljo  $r \leq 1$  od središča krogle do mesta nastanka in kot  $\vartheta$  med središčem krogle, točko nastanka in smerjo fotona. S tema dvema podatkom lahko izračunamo, kolikšno pot mora preleteti foton, da pride iz krogle. Brez izgube splošnosti smo privzeli, da je radij krogle enak 1, v nasprotnem primeru moramo  $r$  in  $l$  le pomnožiti s tem radijem.

Središče krogle, točka nastanka fotona in točka, kjer foton izleti iz krogle tvorijo trikotnik, v katerem poznamo dve razdalji in kot, ki leži nasproti daljši stranici. Tretjo stranico lahko določimo po kosinusnem izreku.

$$1^2 = r^2 + l^2 + 2rl \cos \vartheta \quad (13)$$

Plus pred zadnjim členom je zato, ker v trikotniku nastopa kot  $\pi - \vartheta$ . Ker je  $r \leq 1$ , ima enačba eno samo pozitivno rešitev

$$l = -r \cos \vartheta + \sqrt{1 + r^2 \cos^2 \vartheta - r^2} = \sqrt{1 - r^2 + r^2 u^2} - ru \quad (14)$$

Povsod nastopa le kosinus kota  $\vartheta$ , zato uvedemo substitucijo  $u = \cos \vartheta$ .

### 2.1 Porazdelitev razdalje $l$

Najprej sem izračunal, kakšna je verjetnostna porazdelitev po razdalji  $l$ , ki jo mora foton prepotovati, da uide. Da to določimo moramo integrirati po vseh takih  $r$  in  $\vartheta$ , ki nam data razdaljo  $l$ .

#### 2.1.1 Analitični pristop

$$w(l) = \int_{l(r,u)=l} dV d\Omega = \int \delta(l(r,u) - l) dV d\Omega \quad (15)$$

$$= 8\pi^2 \iint \delta(l(r,u) - l) r^2 dr du \quad (16)$$

V ta namen moramo iz enačbe (13) izraziti zvezo med  $r$  in  $\vartheta$  pri konstantnem  $l$ . V nasprotju s prejšnjim izračunom pa izraz za  $r$  ni enoličen, saj je dolžina  $l$  lahko večja od radija krogle in dobimo dve pozitivni rešitvi za  $r$ . Zato sem raje izrazil parameter  $u$ .

$$u(r, l) = \frac{1 - r^2 - l^2}{2rl} \quad (17)$$

$$\frac{\partial u(r, l)}{\partial l} = \frac{-4rl^2 + 2r(r^2 + l^2 - 1)}{4r^2 l^2} = \frac{r^2 - l^2 - 1}{2rl^2} \quad (18)$$

$$\delta(l(r, u) - l) = \delta(u(r, l) - u) \cdot \left| \frac{\partial u}{\partial l} \right| = \delta(u(r, l) - u) \cdot \left| \frac{r^2 - l^2 - 1}{2rl^2} \right| \quad (19)$$

$$w(l) = 8\pi^2 \iint \delta(u(r, l) - u) \cdot \frac{1 + l^2 - r^2}{2rl^2} \cdot r^2 dr du \quad (20)$$

Izraz pod absolutno vrednostjo ni nikoli pozitiven, saj sta  $r$  in  $l$  nenegativni dolžini,  $r^2$  pa vedno manjši ali enak 1. Zato lahko absolutno vrednosti izpustimo in namesto tega pišemo nasprotno vrednost izraza.

Zgornji izrazi veljajo le, ko je  $u \in [-1, 1]$ , saj je le takrat kot  $\vartheta$  definiran. Ob pogledu na geometrijo hitro vidimo, da so ob izbranem  $r$ , možne le dolžine med  $1 - r$  in  $1 + r$ . Ker integriramo po  $r$ , ta pogoj obrnemo in zapišemo kot  $|l - 1| \leq r \leq 1$ . Absolutna vrednosti ni najlepša stvar v mejo integrala, ampak v tem primeru imamo srečo, saj je integrand liha funkcija  $r$ , zato je integral med  $-|1 - l|$  in  $|1 - l|$  enak 0.

$$w(l) = \frac{8\pi^2}{2l^2} \int_{1-l}^1 (1 + l^2 - r^2) r \, dr = \frac{8\pi^2}{2l^2} \left( \frac{r^2}{2} + \frac{l^2 r^2}{2} - \frac{r^4}{4} \right) \Big|_{1-l}^1 \quad (21)$$

$$= \frac{8\pi^2}{2l^2} \left( -\frac{-2l + l^2}{2} - \frac{-2l^3 + l^4}{2} + \frac{-4l + 6l^2 - 4l^3 + l^4}{4} \right) \quad (22)$$

$$= \pi^2(4 - l^2) \quad (23)$$

Dobljeni izraz za  $w(l)$  moramo še normirati, tako da ga delimo s skupno prostornino krogle in prostorskim kotom, v katerega lahko odleti foton. Dejanska verjetnost za dolžino  $l$  je

$$p(l) = \frac{\partial P}{\partial l} = \frac{\int_{l(r,u)=l} dV \, d\Omega}{\int dV \, d\Omega} = \frac{w(l)}{V \cdot 4\pi} = \frac{3}{16\pi^2} w(l) \quad (24)$$

$$p(l) = \frac{3}{16} (4 - l^2) \quad (25)$$

Za izračun verjetnosti potrebujemo inverz kumulativne porazdelitve:

$$dP = \frac{3}{16} (4 - l^2) dl = d \left( \frac{1}{16} (12l - l^3) \right) \quad (26)$$

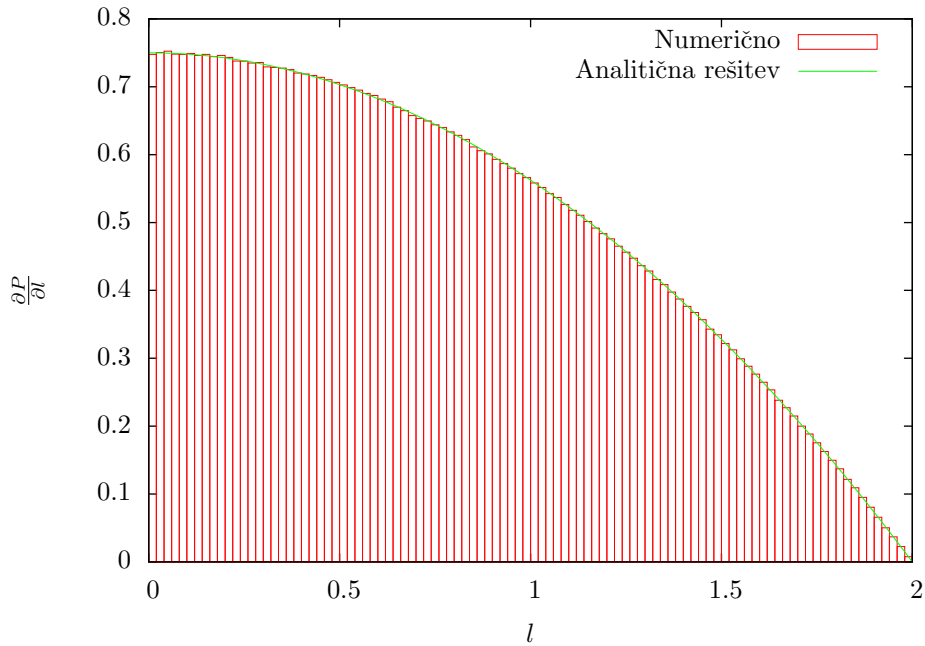
$$P(l) = \frac{1}{16} (12l - l^3) \quad (27)$$

Da dobimo primerno porazdeljen  $l$  iz enakomerno porazdeljenega naključnega števila  $\xi$ , moramo rešiti polinom tretje stopnje.

### 2.1.2 Numerični pristop

Oceno za porazdelitev verjetnosti dolžine  $l$  lahko določimo tudi numerično, tako da generiramo fotone z naključnim položajem in smerjo in izračunamo potrebno pot za pobeg iz krogle. Za izračun verjetnosti za pobeg si bomo nato želeli naključna števila z enako porazdelitvijo. Rezultat takšnega izračuna z  $10^8$  točkami in 100 predalčki je na sliki 1

Knjižnica **GSL** ponuja generacijo naključnih števil s poljubno porazdelitvijo, če je ta porazdelitev podana v obliki histograma. Na ta način lahko v naslednjem koraku zajemamo naključne  $l$  s pravo porazdelitvijo.



Slika 1: Primerjava verjetnostne gostote izračunane analitično in z numerično integracijo po metodi Monte Carlo

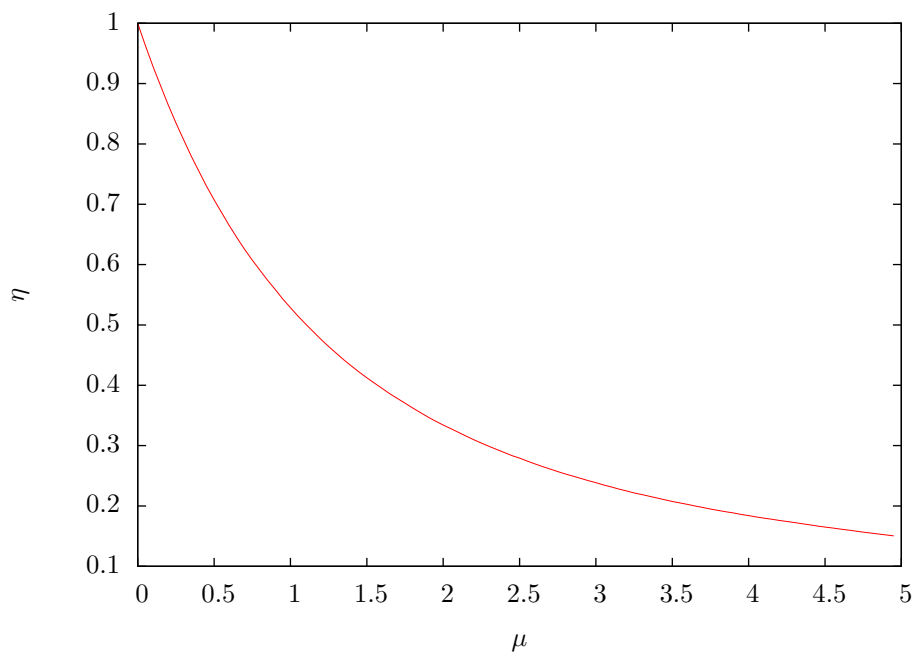
## 2.2 Verjetnost pobega

Verjetnost, da foton prepotuje pot  $l$  do roba krogle je sorazmerna z  $e^{-\mu l}$ . Če upoštevamo še porazdelitev dolžine poti, dobimo izraz za prepustnost oz. izkoristek krogle

$$\eta = \int_0^2 p(l) e^{-\mu l} dl \quad (28)$$

Integral sem izračunal po “pravem” postopku Monte Carlo: Naključno sem generiral pravilno porazdeljeno vrednost  $l$  in enakomerno število  $y$  med 0 in 1, na koncu pa preštel vse take pare  $l, y$ , kjer je  $e^{-\mu l} > y$ . Računal sem vzporedno za več različnih koeficientov  $\mu$ , tako da sem z istimi naključnimi števili dobil

celotno odvisnost  $\eta(\mu)$ . Postopek je možno pospešiti, če so  $\mu$  urejeni po vrsti in ob vsakem koraku izračunamo največ kolikšen je lahko  $\mu$ , da bo foton še ušel iz krogle. Ker se odvisnosti na sliki 1 tako dobro ujemata, sem za generacijo naključnih dolžin uporabil kar numerično dobljen rezultat.



Slika 2: Prepustnost krogle za fotone v odvisnosti od absorpcijskega koeficienta  $\mu$  (inverzne povprečne proste poti)

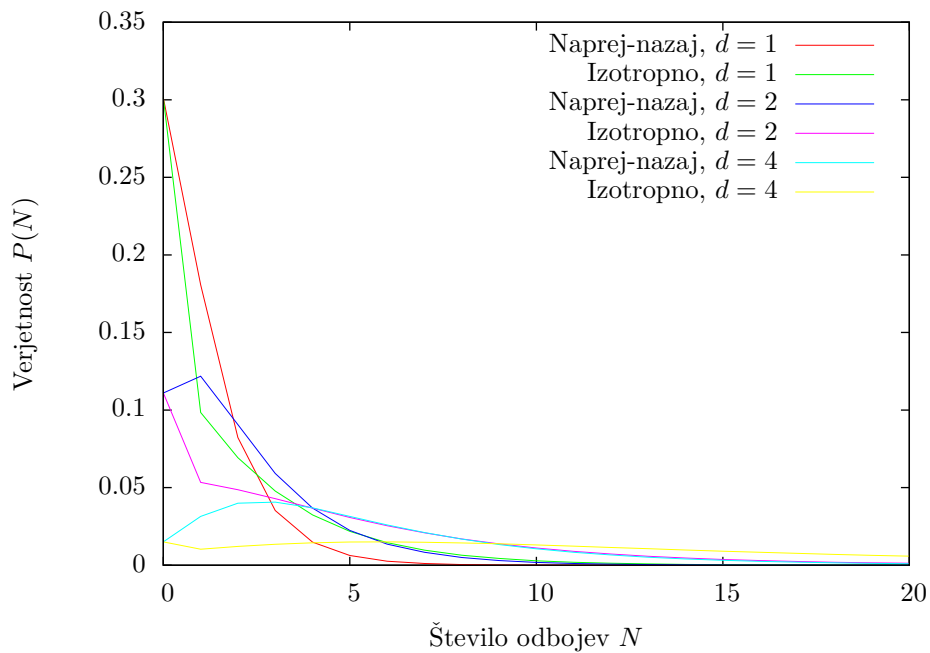
### 3 Nevtronski reflektor

Porazdelitev po številu sipanj je v tem primeru najlažje določiti numerično. Za dovolj veliko število delcev spremljamo njihovo pot in si za vsak delec zapišemo, kolikokrat se je sibal.

Odvisnost od debeline pregrade v tem primeru določimo tako, da si namesto ene pregrade z določeno debelino zamislimo serijo enakih pregrad, nato pa za vsako pregrado v seriji shranimo število sipanj, po katerem jo je delec prvič zapustil. Koeficient  $\mu$  sem zaradi enostavnosti postavil na 1, debelina pregrade pa je bila med 0.1 in 10. Simulacijo za posemezen delec sem ustavil, ko je delec zapustil zadnjo pregrado ali se vrnil nazaj na začetni položaj.

#### 3.1 Število sipanj

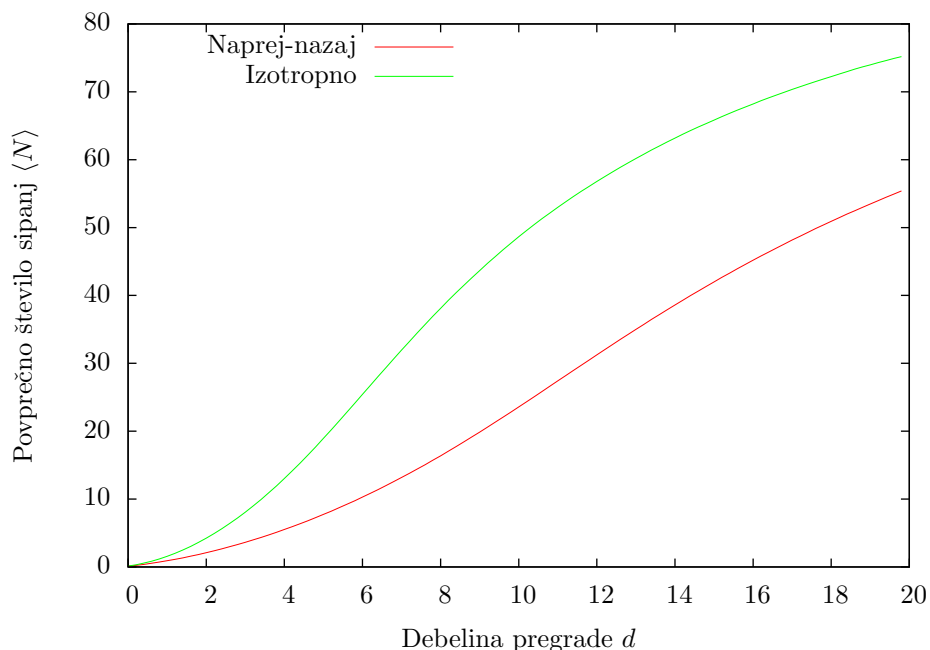
Pri prvem računu me ni zanimalo, v katere smer je na koncu odletel delec, ampak le kolikokrat se je sibal znotraj pregrade. Porazdelitev pri nekaj različnih debelinah pregrade sem narisal na sliki 3.



Slika 3: Porazdelitev po številu sipanj za oba modela

Z grafa je očitno, da sta rezultata precej različna. Verjetnost za prehod brez sipanja,  $P(0)$ , je po pričakovanju enaka, saj v tem primeru med modeloma ni nobene razlike. Pri vseh ostalih  $N \neq 0$  pa je razlika med obema modeloma velika. V modelu z izotropnim so bolj verjetna višja števila sipanj, saj je pri isti hitrosti delcev projekcija te hitrosti na smer pobega manjša.

Ta razlika je bolj vidna, če narišemo povprečno število sipanj za oba modela, na primer na sliki 4



Slika 4: Povprečno število sipanj  $\langle N \rangle$

Graf potrjuje naša pričakovanja: povprečno število sipanj je pri izotropnem sipanju vedno večje kot pri sipanju le naprej in nazaj. Če nas zanima število sipanj, potem model s sipanjem le v eni smeri ni dober približek.

### 3.2 Prepustnost pregrade

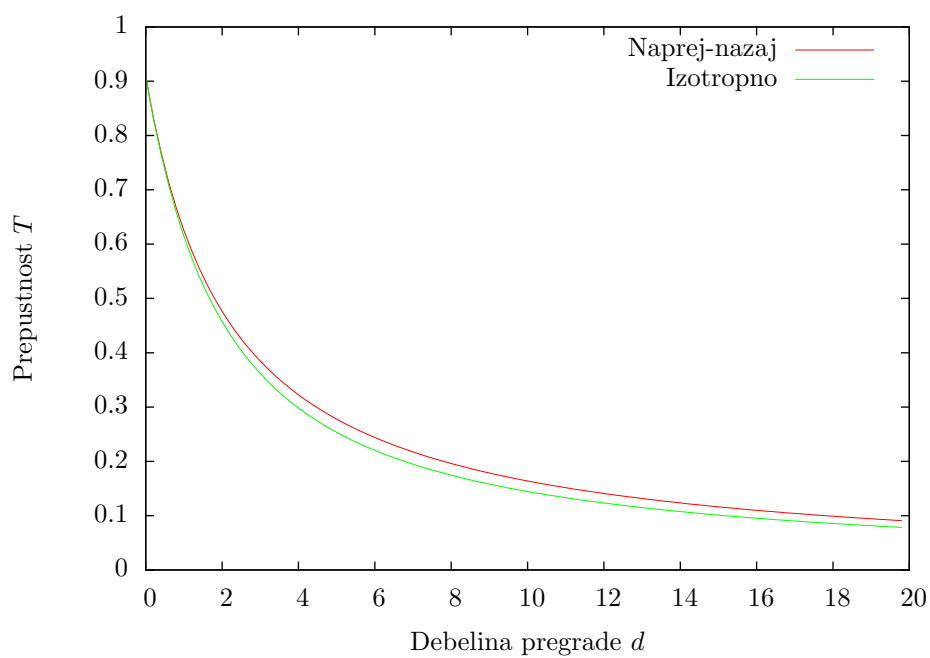
Slika pa je drugačna, ko izračunamo prepustnost takšne pregrade, brez ozira na število sipanj. Kot lahko vidimo na sliki 5, je prepustnost z upoštevanjem enostavnejšega modela ne glede na razdaljo zelo blizu rezultatu izotropnega modela. V primeru, da ne potrebujemo natančnega rezultata, ampak nas bolj omejuje generacija naključnih števil, je tudi model s sipanjem naprej in nazaj primeren za opis prepustnosti pregrade.

### 3.3 Kotna porazdelitev fotonov

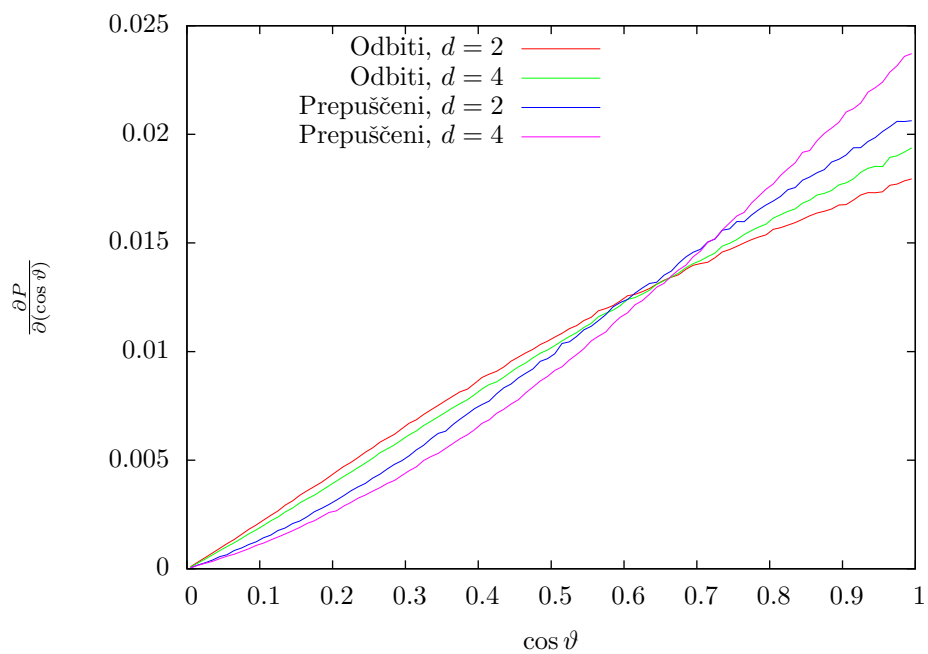
Vsako sipanje je izotropno, torej je tudi pri zadnjem sipanju verjetnost, da bo delec odletel v določeno smer, neodvisna od te smeri. Če spet vpeljemo substitucijo  $u = \cos \vartheta$ , je porazdelitev po  $u$  enakomerna. Verjetnost, da bo določeno sipanje zadnje, pa je odvisna tudi od razdalje, ki jo še mora prepotovati. Večja kot je komponenta hitrost v smeri proti robu pregrade, lažje jo bo nevtron zapustil, zato bo večja verjetnost, da bo to sipanje zadnje. Po takšnem razmisleku lahko zaključimo, da bodo koti v bližini  $\vartheta = 0$  bolj verjetni. Za kotno porazdelitev odbitih nevtronov velja enaka odvisnost, le da bodo sedaj najbolj verjetni koti v bližini  $\vartheta = \pi$ .

No obeh straneh pregrade vidimo približno linearno odvisnost verjetnosti





Slika 5: Prepustnost pregrade za oba modela



Slika 6: Kotna porazdelitev odbitih in prepuščenih nevtronov

$\frac{dP}{du} \propto u$ , kljub temu pa je med obema jasno vidna asimetrija, ki je ne moremo pripisati statistični napaki. Pri debelejši pregradi se porazdelitev proti majhnim kotom, asimetrija med odbitimi in prepuščenimi nevtroni pa ostane.