Integracije z metodo Monte Carlo

Miha Čančula

4. 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 kota

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

$$x^2 + y^2 > x \tag{2}$$

$$r^2 \sin^2 \vartheta > r \sin\vartheta \cos\varphi \tag{3}$$

$$r \sin\vartheta > \cos\varphi \tag{4}$$

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.

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.

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

$$\mathrm{d}m = \rho_0 \,\mathrm{d}V = \rho_0 r^2 \,\mathrm{d}r \,\mathrm{d}\varphi \sin\vartheta \,\mathrm{d}\vartheta = \frac{\rho_0}{3} \,\mathrm{d}(r^3) \,\mathrm{d}\varphi \,\mathrm{d}(\cos\vartheta) \tag{5}$$

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

$$r = \sqrt[3]{\xi_1} \tag{6}$$
$$\varphi = 2\pi\xi_2 \tag{7}$$
$$\vartheta = \arccos(2\xi_3 - 1) \tag{8}$$

Pri tem moramo paziti, da za ξ_1 in ξ_3 dovolimo obe mejni vrednosti, medtem ko mora biti za ξ_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 transformarati.

$$\mathrm{d}m = \rho_0 (r/R)^3 \,\mathrm{d}V = \frac{\rho_0}{R^3} r^5 \,\mathrm{d}r \,\mathrm{d}\varphi \sin\vartheta \,\mathrm{d}\vartheta = \frac{\rho_0}{6R^3} \,\mathrm{d}(r^6) \,\mathrm{d}\varphi \,\mathrm{d}(\cos\vartheta) \tag{9}$$

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

$$r = \sqrt[6]{\xi_1} \tag{10}$$
$$\varphi = 2\pi\xi_2 \tag{11}$$
$$\vartheta = \arccos(2\xi_3 - 1) \tag{12}$$

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 ϑ med središčem krogle, točko nastanka in smerjo fotona. S tema dvema podatkoma 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.

$$1^2 = r^2 + l^2 + 2rl\cos\vartheta \tag{13}$$

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

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

Povsod nastopa le kosinus kota ϑ, 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 integritati po vseh takih r in ϑ, ki nam data razdaljo l.

2.1.1 Analitični pristop

$$
\begin{aligned}
w(l) &= \int_{l(r,u)=l} \mathrm{d}V\,\mathrm{d}\Omega = \int \delta(l(r,u)-l)\,\mathrm{d}V\,\mathrm{d}\Omega && (15)\\
&= 8\pi^2 \iint \delta(l(r,u)-l) r^2\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}u && (16)
\end{aligned}
$$

V ta namen moramo iz enačbe (13) izraziti zvezo med r in ϑ 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.

$$
\begin{aligned}
u(r,l) &= \frac{1-r^2-l^2}{2rl} && (17)\\
\frac{\partial u(r,l)}{\partial l} &= \frac{-4rl^2+2r(r^2+l^2-1)}{4r^2l^2} = \frac{r^2-l^2-1}{2rl^2} && (18)\\
\delta(l(r,u)-l) &= \delta(u(r,l)-u)\cdot\left|\frac{\partial u}{\partial l}\right| = \delta(u(r,l)-u)\cdot\left|\frac{r^2-l^2-1}{2rl^2}\right| && (19)\\
w(l) &= 8\pi^2\iint \delta(u(r,l)-u)\cdot\frac{1+l^2-r^2}{2rl^2}\cdot r^2\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}u && (20)
\end{aligned}
$$

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.

Zgorji izrazi veljajo le, ko je $u \in [-1,1]$, saj je le takrat ϑ definirana. Zato integriramo le po tistih r, da bo $r+l \geq 1$, torej $r \in [r_0, 1]$, kjer je $r_0 = \max(0, 1-l)$. Obravnavamo torej dva ločena primera, ko je $l \leq 1$ in $l > 1$.

$$
\begin{aligned}
r^2-l^2-1 &> 0 && (21)\\
r^2-1 & && (22)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
w(l>1) &= \frac{8\pi^2}{2l^2}\int_0^1 (1+l^2-r^2)r\,\mathrm{d}r = \frac{8\pi^2}{2l^2}\left(\frac{1}{2}+\frac{l^2}{2}-\frac{1}{4}\right) && (23)\\
&= 2\pi^2+\frac{\pi^2}{l^2} && (24)\\
w(l\leq 1) &= \frac{8\pi^2}{2l^2}\int_{1-l}^1 (1+l^2-r^2)r\,\mathrm{d}r = \frac{8\pi^2}{2l^2}\left(\frac{r^2}{2}+\frac{l^2r^2}{2}-\frac{r^4}{4}\right)\Bigg|_{1-l}^1 && (25)\\
&= \frac{8\pi^2}{2l^2}\left(-\frac{-2l+l^2}{2}-\frac{-2l^3+l^4}{2}+\frac{-4l+6l^2-4l^3+l^4}{4}\right) && (26)\\
&= \pi^2\left(-l^2+4\right) && (27)
\end{aligned}
$$

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

$$p(l) = \frac{\partial P}{\partial l} = \frac{\int_{l(r,u)=l} \mathrm{d}V\,\mathrm{d}\Omega}{\int \mathrm{d}V\,\mathrm{d}\Omega} = \frac{w(l)}{V \cdot 4\pi} = \frac{3}{16\pi^2} w(l) \tag{28}$$

$$p(l) = \begin{cases} \frac{3}{16}(4 - 8l - l^2), & l \leq 1 \\ \frac{3}{16}(2 + l^{-2}), & l > 1 \end{cases} \tag{29}$$

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.

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.

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

$$\eta = \int_0^2 p(l) e^{-\mu l}\,\mathrm{d}l \tag{30}$$

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 μ, tako da sem z istimi naključnimi števili dobil celotno odvisnost $\eta(\mu)$. Postopek je možno pospešiti, če so μ urejeni po vrsti in ob vsakem koraku izračunamo največ kolikšen je lahko μ, da bo foton še ušel iz krogle.

3 Nevtronski reflektor

3.1 Porazdelitev po številu odbojev

Verjetnost, da bo posamezen nevtron ušel iz pregrade po točno N odbojih lahko izračunamo z integralom po $2N$ spremenljivkah: ob vsakem odboju naključno izberemo smer odboja in dolžino, ki jo delec preleti do naslednjega odboja. Vse do zadnjega odboja mora biti ta dolžina premajhna, da bi delec ušel, po zadnjem odboju pa mora biti večja od razdalje do. Dodatna omejitev je še ta, da mora biti zadnje sipanje vedno naprej.

V primeru, izotropnega sipanja moramo ob vsakem odboju dodati še en parameter, saj pot v smeri, pravokotni na steno, ni več enaka poti, ki nastopa v izrazu za prosto pot $e^{-\mu s}$.

Za enostavnejši zapis privzemimo, da je debelina plošce enaka 1, povprečna prosta pot nevtronov pa $1/\mu$.

3.1.1 Sipanje naprej in nazaj

Najenostavnejši izraz je za verjetnost, da gre delec skozi steno brez interakcije

$$P(0) = e^{-\mu} \tag{31}$$

Če zahtevamo natančno en odboj, moramo integrirati po vseh možnih položajih tega odboja. Verjetnost za odboj na mestu x je eksponentna, torej je enaka z $\frac{1}{\mu}e^{-\mu x}$

$$P(1) = \frac{1}{\mu}\int_0^1 e^{-\mu x}\cdot\frac{1}{2}\cdot e^{-\mu(1-x)}\,\mathrm{d}x = \frac{1}{2\mu}\int_0^1 e^{-\mu}\,\mathrm{d}x = \frac{e^{-\mu}}{2\mu} \tag{32}$$

Polovica v integralu predstavlja verjetnost, da se bo delec ob odboju sipal naprej. V verjetnosti za dva odboja moramo integrirati po položajih obeh odbojev. Ločimo primera, ko se delec ob prvem odboju siplje naprej ali nazaj.

$$\begin{aligned}
P(2) =& \frac{1}{2\mu^2}\int_0^1 \mathrm{d}x_1 e^{-\mu x_1}\left(\frac{1}{2}\int_0^{x_1}\mathrm{d}x_2 e^{-\mu(1-x_2)}e^{-\mu(x_1-x_2)}\right. && (33)\\
&+\left.\frac{1}{2}\int_{x_1}^1 \mathrm{d}x_2 e^{-\mu(1-x_2)}e^{-\mu(x_2-x_1)}\right) && (34)\\
=&\frac{1}{(2\mu)^2}\int_0^1 \mathrm{d}x_1 e^{-\mu x_1}\left(\int_0^{x_1} e^{-\mu(1+x_1-2x_2)} + \int_{x_1}^1 e^{-\mu(1-x_1)}\right) && (35)\\
=&\frac{1}{(2\mu)^2} && (36)
\end{aligned}$$

3.2 Simulacija

Podobno kot pri drugi nalogi se da tudi tukaj porazdelitev po številu sipanj določiti numerično. Za dovolj veliko število delcev spremljamo njihovo pot in si za vsak deleč zapišemo, kolikokrat se je sipal.

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 μ sem zaradi enostavnosti postavil na 1. Simulacijo za posemezen delec sem ustavil, ko je delec zapustil zadnjo pregrado ali se vrnil nazaj do prve pregrade.