

Univerza v Ljubljani  
Fakulteta *za matematiko in fiziko*



# Naključna števila in integracija z metodo Monte Carlo

**Avtor: Simon Perovnik**

Predavatelj: prof. dr. Simon Širca

Asistent: doc. dr. Miha Mihovilovič

Sedma naloga pri Modelske analizi I

Ljubljana, november 2021

# 1 Integracija z metodo Monte Carlo

Obravnavajmo telo, ki ga omejuje ploskev

$$\sqrt{|x|} + \sqrt{|y|} + \sqrt{|z|} = 1 \quad (1)$$

na način, da določimo njegovo maso, lego težišča in vztrajnostni moment. Problema se lahko lotimo bodisi numerično, bodisi analitično, ko je to seveda mogoče. V sklopu te naloge se bomo poslužili numerične integracije z metodo Monte Carlo (MC).

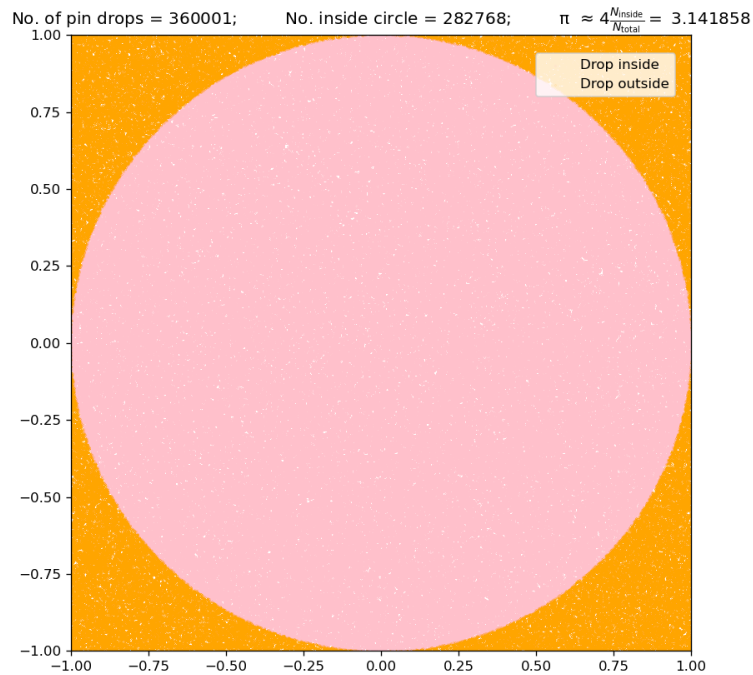
## 1.1 Metoda Monte Carlo

Metoda MC sloni na žrebanju naključnih števil in je zelo uporabna za numerično integracijo. Za demonstracijo si poglejmo, s to metodo izračunamo število  $\pi$ . Osnovna ideja: izračunajmo površino enotskega kroga in iz nje preko zveze  $S_{krog} = \pi 1^2 = \pi$  določimo število  $\pi$ .

1. Poiščimo ploskev, ki zaobjema enotski krog in ima enostavno izračunljivo površino. Najenostavnejši primer je kar očrtan kvadrat z dolžino stranice 2. Prostornina bo tako enaka  $S_{kvadrat} = d^2 = 4$ .
2. Generiramo naključno točko, ki leži znotraj kvadrata.
3. Pogledamo, ali se točka nahaja na krogu.
4. To ponovimo za veliko število točk (npr.  $N = 10^6$ ) in pri tem skrbno beležimo, koliko točk se je nahajalo znotraj kroga.
5. Če so bila števila res naključno generirana bo veljalo  $n/N = S_{krog}/S_{kvadrat}$ , oziroma

$$S_{krog} = \pi = S_{kvadrat} \frac{n}{N} \quad (2)$$

kjer smo z  $n$  označili število točk, ki se nahajajo na krogu.



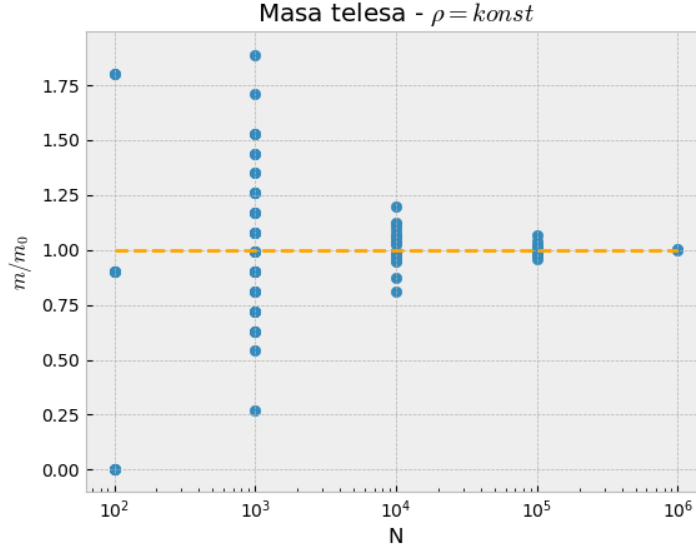
Slika 1: Izračun števila  $\pi$  z metodo MC. Pri 360001 točkah smo  $\pi$  izračunali na 3 decimalna mesta natančno.

## 1.2 $\rho = 1$

Za primer, ko je gostota telesa po vsem volumnu enaka, se izkaže, da je problem izračuna mase tudi analitično enostavno rešljiv. Pomagamo si lahko namreč z dejstvom da je telo osno simetrično in simetrično na ravnino  $xy$ , zato je za integracijo dovolj že izračun v enem kvadrantu.

$$m_0 = \int dm = \int \rho dV = 8 \int_0^1 dx \int_0^{(1-\sqrt{x})^2} dy \int_0^{(1-\sqrt{x}-\sqrt{y})^2} dz = \frac{8}{90} \quad (3)$$

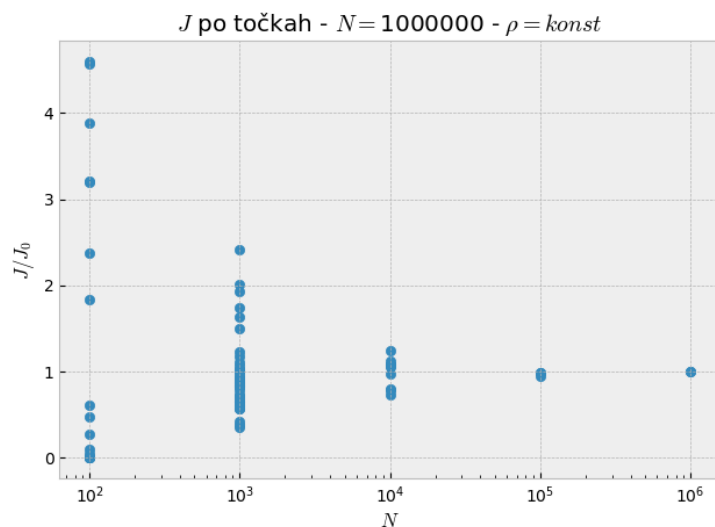
Rezultat nam bo služil kot referenčna vrednost, s katero bomo preverili, kako dobro deluje metoda MC.



Slika 2: Izračun mase telesa z metodo MC.

- Za izračunane mase pri  $N = 10^2$  lahko vidimo, da so si točke med seboj precej različne, in da so očitno 'močno kvantizirane' (seveda so vse točke kvantizirane, le da je ta lastnost s prostim očesom bolj izrazita za majhne  $N$ ). Pri tako majhnem vzorcu, se namreč pokaže, da v povprečju le ena ali morda dve točki 'padeta' znotraj našega telesa. Vrednost pri samo eni točki je tako enaka  $m_1 = 8 \frac{1}{100} = 0.8$ , kar vidimo tudi na grafu.
- Zaradi malega števila točk znotraj telesa pri majhnih  $N$  sklepamo, da bi dobili boljše rezultate, če bi namesto kvadrata očrtali telesu kroglo, saj bi s tem povečali relativno verjetnost, da se bo točka nahajala znotraj telesa, saj bi imeli manj preostalega možnega prostora, kamor lahko točka 'pade'.
- Podoben efekt se pojavi tudi še pri  $N = 10^3$ , potem pa dobimo že (zgolj na oko) zvezen nabor vrednosti.
- Za velike vrednosti  $N$  vidimo, da metoda MC odlično napove maso telesa.

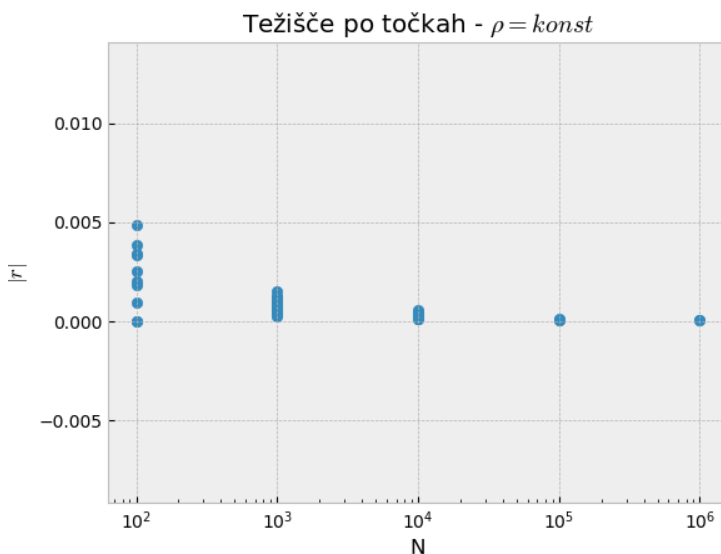
Izračunamo lahko tudi vztrajnostni moment. Tu bomo spet vnaprej izračunali  $J_0$ , ki pa ga bomo tokrat določili z referenčno numerično integracijo. Tako sedaj razmerje  $J/J_0$  ne bo več čisto pravi odraz natančnosti MC, ampak bolj mera za velikost  $N$ , da dobimo 'dovolj dobre' rezultate.



Slika 3: Izračun vztrajnostnega momenta telesa z metodo MC.

Opazimo lahko podobne efekte kot pri računanju mase in spet potrdimo, da metoda za  $N = 10^6$  vrne vrednost praktično enako referenčni.

Pogledamo si lahko tudi, kje se nahaja težišče telesa, tako da izračunamo vsoto posamezne koordinate po vseh točkah.



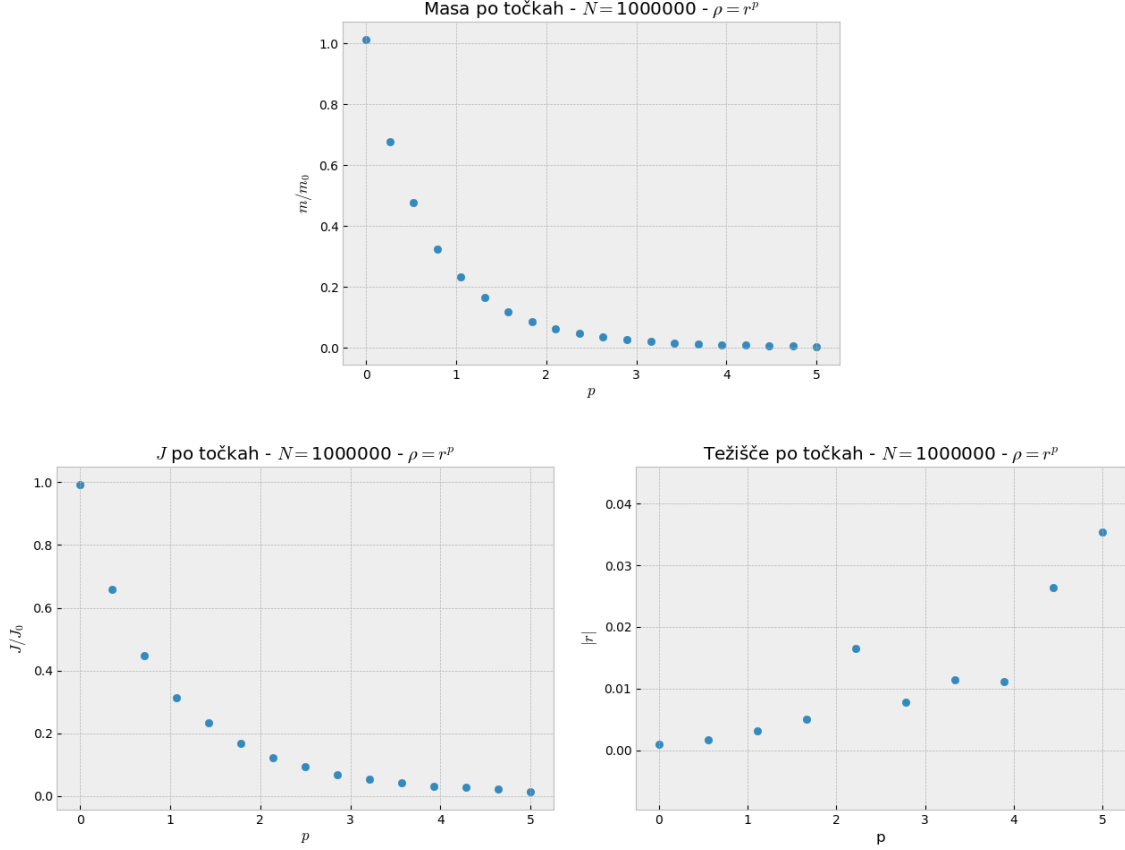
Slika 4: Izračun velikosti vektorja težišča telesa z metodo MC.

- Pri majhnih vrednostih  $N$  še ne pride do izraza simetrija telesa, saj je težišče določeno le s peščico točk, za katere bi bilo veliko naključje, če bi imele težišče v izhodišču. To da je velikost vektorja težišča tudi pri  $N = 10^2$  za eno točko na grafu enaka 0 je najverjetneje posledica tega, da nismo našli nobene točke znotraj prostornine telesa.
- Ko povečujemo  $N$  se vse bolj bližamo pravi vrednosti 0.
- Opomba ob pisanju poročila: ordinata je verjetno napačno skalirana, saj bi morale vrednosti

pri  $N = 10^2$  verjetno nahajati tudi bližje skrajni vrednosti 1.

### 1.3 $\rho = r^p$

Za dano gostoto telesa ne moremo več analitično izračunati mase telesa. Vse vrednosti v tem razdelku bom tako normiral na te za  $\rho = 1$ , ki je obenem tudi limitni primer, ko je  $p = 0$ .



Slika 5: Masa, vztrajnostni moment in težišče telesa z gostoto  $\rho = r^p$ .

- Masa telesa glede na  $m_0$  izračunano v prejšnjem razdelku je pri  $p = 0$  praktično enaka slednji, kot smo napovedali. Ko pa povečujemo  $p$  začne masa padati, kar nas ne preseneča, saj vse točke ležijo znotraj kroga z radijem 1, in je tako  $|r_i| \leq 1$ . Na tem intervalu za vsako točko velja  $\rho = r^p \leq 1$ . Analogno si lahko predstavljamo, da se večina mase takšnega telesa nahaja na robu, kjer imamo bolj malo točk, saj je tam volumen majhen.
- Podoben efekt lahko opazimo tudi pri izračunu vztrajnostnega momenta, kar nas ne preseneča saj je  $J \propto m$ .
- Pri izračunu težišča pa sem verjetno storil kakšno napako, saj vrednosti z višjim  $p$  ne bi smele naraščati, ker je telo še vedno osno simetrično in se njeno težišče nahaja v izhodišču.

## 2 Pobeg fotona iz krogle

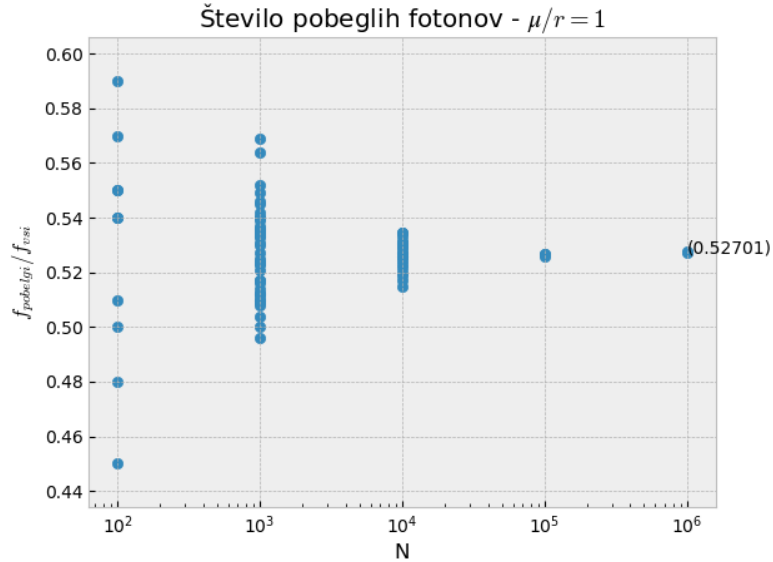
Obravnavajmo problem pobega novonastalega fotona iz krogle z radijem  $R = 1$ , če je povprečna prosta pot  $\mu = 1$ . Privzemimo, da se fotoni prosto 'rojevajo' v krogli. Vsako rojstvo bomo para-

metrizirali z razdaljo od izhodišča  $r_i$  in kotom pod katerim se seva  $\theta_i$ . Z nekaj znanja geometrije lahko izračunamo pot, ki jo mora delec prepotovati, da pride do površja krogle

$$d_i = r_i \cos \theta_i + R \sqrt{1 - \left(\frac{r_i}{R}\right)^2 (1 - \cos \theta_i^2)}. \quad (4)$$

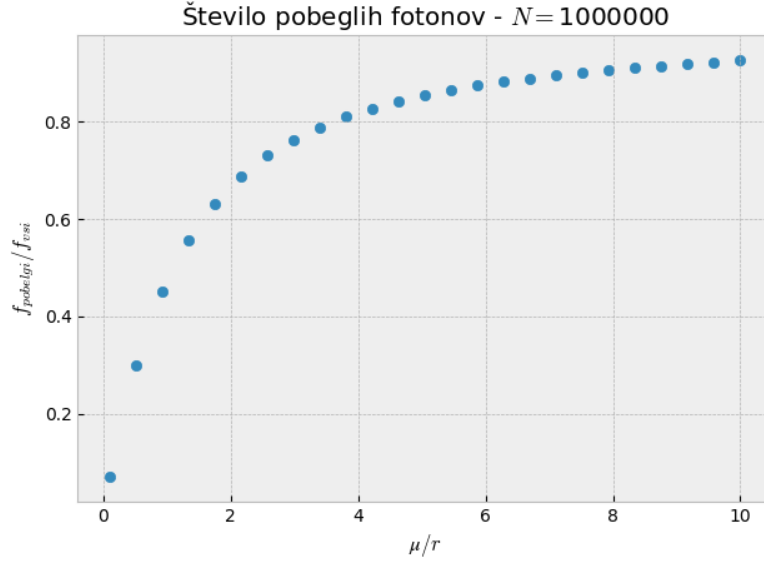
Z metodo MC bomo sedaj simulirali izsevanje fotonov in beležili, koliko fotonov pobegne iz krogle. Postopek lahko strnemo v nekaj korakov.

1. Žrebamo naključni  $r_i = U_1^{\frac{1}{3}}$  in  $\cos \theta_i = 2U_2 - 1$ , kjer sta  $U_1$  in  $U_2$  dve naključni števili z intervala  $[0, 1)$ . Takšen način izbire naključnih vrednosti je posledica tega, da moramo zadostiti pogoju, da ima vsak volumski elementi enako verjetnost, da nanj 'pade' točka.
2. Sedaj moramo upoštevati, da je verjetnost za pobeg porazdeljena z eksponentno funkcijo  $P \propto e^{d(r, \theta)/\mu}$ . Ali je delec prišel iz krogle bomo tako določili z žrebom iz eksponentne porazdelitve. Izkaže se, da žreb izvedemo z  $s_i = -\mu \log(1 - U_3)$ , kjer je  $U_3$  pravtako naključno število z intervala  $[0, 1)$ .
3. Če je  $d_i > s_i$  rečemo, da je foton uspešno pobegnil iz krogle. V nasprotnem primeru pa privzamemo, da se je absorbiral v krogli.
4. Simuliramo za veliko število rojenih fotonov in pri tem skrbno beležimo vsoto teh, ki jim je uspel pobeg.



Slika 6: Verjetnost za pobeg pri  $\mu/R_{krogla} = 1$ .

Podobno kot pri prejšnjih nalogah, spet vidimo, da lahko pri vrednostih  $N = 10^5, 10^6$  že precej dobro napovemo rezultat problema. Najboljša ocena za verjetnost za pobeg je enaka 0.527.



Slika 7: Odvisnost deleža pobeglih fotonov glede na razmerje  $\mu/R$ .

- V limiti  $\mu/R \rightarrow 0$  vidimo, da ne pobegne praktično noben foton, kar je smiselno, saj je takrat povprečna prosta pot tako kratka, da se vsi fotoni absorbirajo preden pridejo do površine. Analogen premislek velja tudi za limito  $\mu/R \rightarrow \infty$  kjer je prosta pot sedaj tako dolga, da praktično vsak delec pobegne iz krogle, preden bi se absorbiral.
- Z ostrim pogledom lahko vidimo, da bi tudi točka pri  $\mu/R = 1$  ležala znotraj navidezne trajektorije, kar nam pove, da je slika konsistentna s (6)

### 3 Model nevtronskega reflektorja

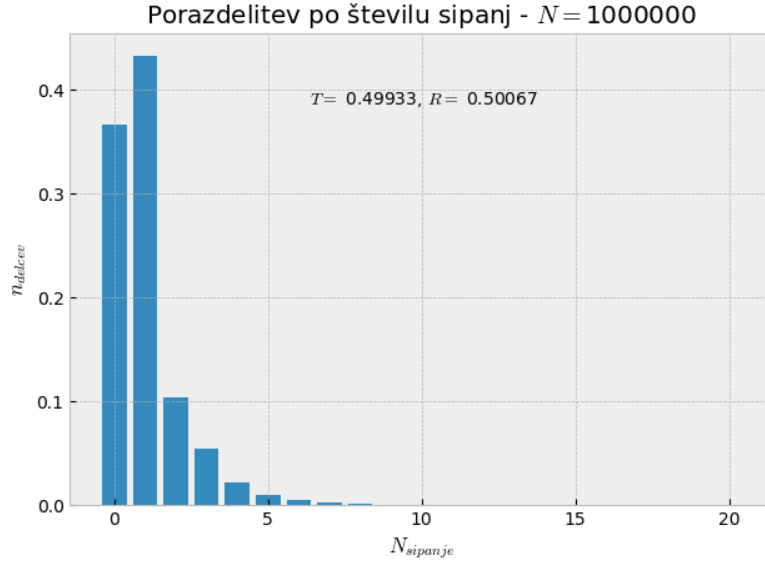
Zamislimo si poenostavljen model nevtronskega reflektorja, kjer tok nevtronov pada pravokotno na ploščo debeline  $L$ , v kateri se nevtroni sipljejo, a nič ne absorbirajo. Privzeli bomo, da se delec v povprečju sipa vsakič, ko prepotuje povprečno prosto pot  $l_p$ . Obravnavali bomo dva režima sipanja - 1D primer, ko se delcu ob sipanju vektor gibalne količine točno nasprotno obrne in pa 2D primer, ko se delec ne siplje zgolj na premici, pač pa po celotnem prerezu plošče in se ob vsakem sipanju odkloni za kot  $\theta$ .

#### 3.1 Sipanje v eni dimenziji

Pri obravnavi nas bosta zanimali predvsem dve lastnosti takšnega reflektorja - kakšna je njegova prepustnost  $T$  in pa kolikokrat se fotoni sipajo v plošči, preden se izsevajo ven. Celoten postopek lahko ponovno strnemo v par korakov.

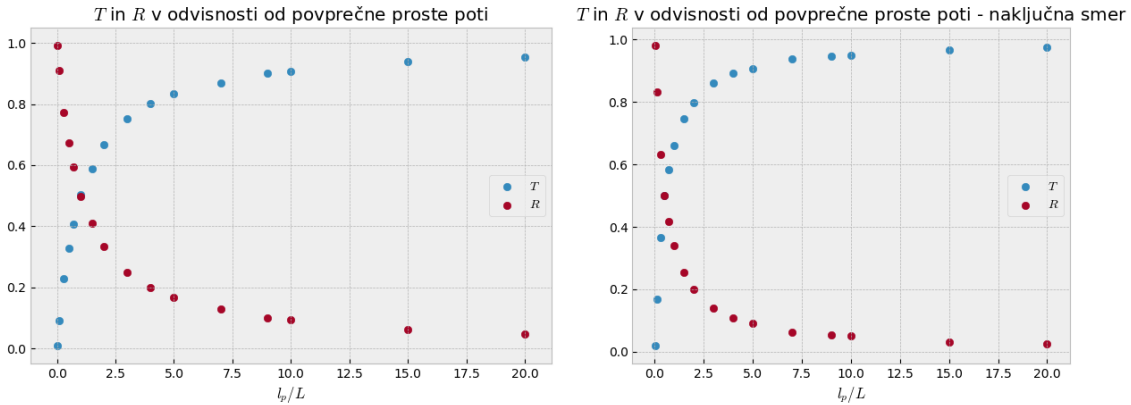
1. Podobno kot v prejšnjem razdelku žrebamo pot, ki jo delec opravi glede na eksponentno porazdelitev  $s_i = -\mu \log(1 - U_1)$ , kjer je  $U_1$  naključno število z intervala  $[0, 1)$ .
2. Preverimo ali se delec še nahaja znotraj plošče kar zapišemo s pogoje  $x < L$  in  $x > 0$ . Če smo še vedno znotraj plošče obrnemo smer gibanja in žrebamo novo naključno pot  $s_i$ .
3. Postopek ponavljamo dokler se delec ne sipa izven plošče.
4. Generiramo mnogo sipajočih se delcev in za vsakega zabeležimo na kateri strani plošče je prišel ven.





Slika 8: Porazdelitev po številu sipanje za  $l_p/L = 1$ .

- Največ delcev se siplje zgolj enkrat, potem pa zapustijo ploščo.
- Vrh pri 0 sipanjih pripišemo delcem, ki že v prvem preletu zapustijo ploščo.
- Ko sta povprečna prosta pot in debelina plošče ravno enaki, sta tudi transmisivnost in reflektivnost praktično enaki, kar je smiselno. V primeru, ko je  $l_p$  zelo kratka pa bomo pričakovali večjo reflektivnost, saj takrat delci 'težko' prepotujejo celotno pot po plošči ker vsakemu premiku naprej sledi tudi premik nazaj. Če bi imeli model, ki bi omogočal, da imajo delci poljubno smer, bi najverjetneje pri enakem razmerju imeli manjšo reflektivnost.



Slika 9: Transmisivnost in reflektivnost stene za primera izmenične smeri in naključne smeri potovanja delcev.

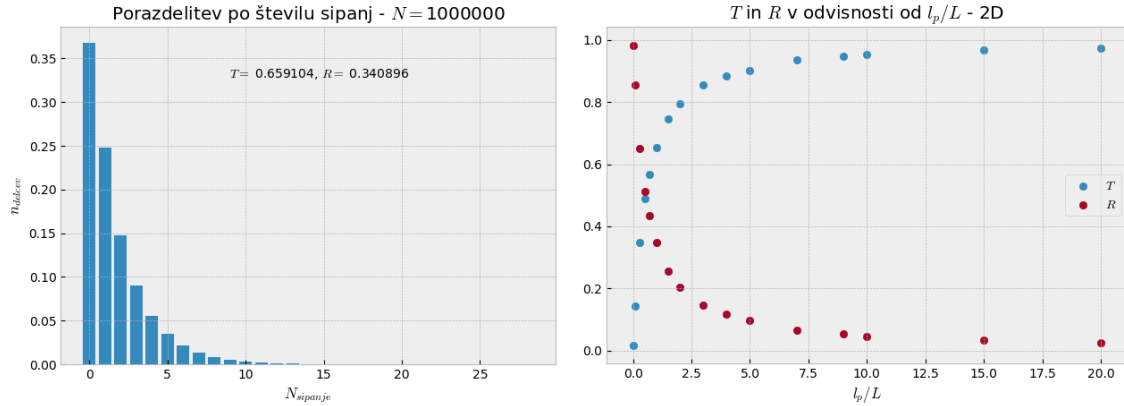
Kot vidimo, sta si grafa precej podobna, bistvena razlika med njima pa nastopa ravno v lastnosti opisani v zadnji točki prejšnjega komentarja - ko je smer gibanja naključna (žrebamo, ali se bo delec po sipanju premikal naprej ali nazaj) je reflektivnost za majhne vrednosti  $l_p$  manjša, saj imajo delci sedaj boljše možnosti, da prepotujejo na drugo stran stene. Kar je bilo prej nemogoče (dva premika

v isto smer) je sedaj zgolj manj verjetno. Pogledamo si lahko tudi obe limiti - ko gre  $l_p$  proti 0 bo reflektivnost praktično enaka ena, saj bo veliko bolj verjetno, da se bo delec, ki se po prvem preletu nahaja na recimo  $x \sim l_p$  sipa za  $l_p$  nazaj, kot pa za približno  $1000l_p$  naprej. Druga limita je na las podobna tej iz prejšnje naloge, ko je  $R$  za zelo velike  $l_p$  enak 1. Obraten a analogen razmislek lahko naredimo tudi glede transmisivnosti.

### 3.2 Sipanje v dveh dimenzijah

Model lahko nadgradimo, tako da dopustimo, da se delec v steni sipa pod poljubnim kotom. To posplošitev uvedemo z žrebanjem kota, ki ga opravimo hkrati z žrebanjem razdalje  $s_i$  po eksponentni porazdelitvi. Enako kot v prejšnji nalogi bomo kot žrebali po porazdelitvi  $\cos\theta_i = 2U_1 - 1$ , kjer je  $U_1$  naključno število z intervala  $[0, 1)$ . Predpostavili bomo, da je debelina stena veliko manjša od njenih ostalih velikosti, in s tem privzeli, da je edini možen način, da delec zapusti steno, skozi eno izmed stranskih ploskev (torej da se ne more izsevati skozi vrh ali dno stene). Na ta način bodo pogoji, da se delec po sipanju nahaja znotraj plošče, enaki kot prej. Spremenila pa se bo relativna velikost poti, ki jo bo delec prepotoval med sipanji. Ker se bo sipal pod nekim kotom  $\theta_i$  se bo vzdolž osi  $x$  premaknil za  $\Delta x = s_i \cos\theta_i$ .

Sedaj lahko na enak način kot prej spet pogledamo kakšna bo porazdelitev po številu sipanj in pa kako se spreminjata  $R$  in  $T$  glede na razmerje  $l_p/L$ .



Slika 10: Model nevtronski reflektorja s sipanjem v dveh dimenzijah. Razmerje  $l_p/L$  na prvem grafu je enako 1.

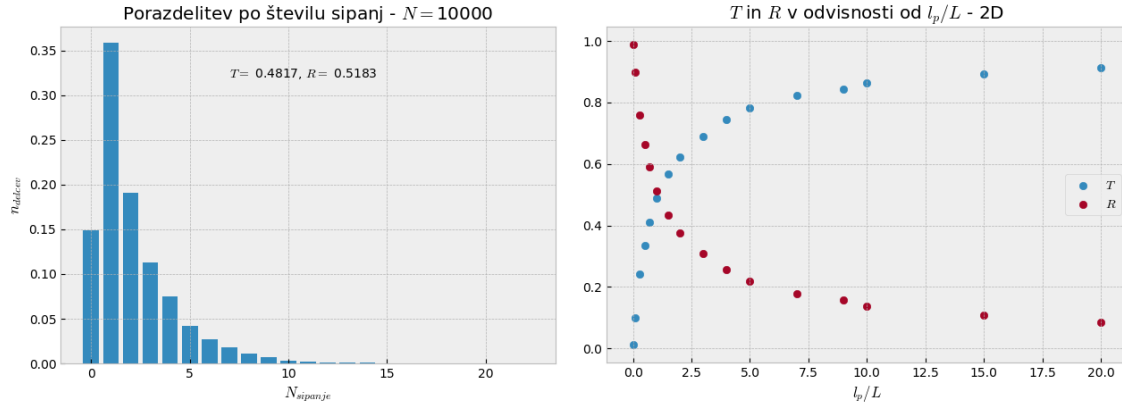
Z grafa, ki prikazuje porazdelitev po sipanjih lahko takoj opazimo, da sedaj nimamo več vrha pri enem sipanju. To je najverjetneje posledica tega, da je sedaj povprečen  $s_i$  manjši kot prej. Prej je večino delcev, ki se je sipalo zgolj enkrat, s prvim letom priletelo nekam ob enega izmed robov, nato pa so 'razmeroma enostavno' zapustili ploščo. Sedaj ko se učinkovito za manj premaknejo ob vsakem koraku, je tako tudi izsevanje po enem sipanju manj verjetno kot prej. Analogno lahko pojasnimo tudi, zakaj so sedaj bolj verjetna sipanja z več koraki.

Vidimo tudi, da je sedaj transmisivnost precej večja od reflektivnosti. To je posledica tega, da naš model še vedno predpostavlja pravokotni vpad nevtronov. Prvi prelet  $s_0$  je tako poravnan z osjo  $x$  in tako daljši od povprečnega  $s_i$ . Kar pomeni, da se bo delec po prvem preletu nahajal bližje izhodni strani in bo bolj verjetno, da jo tam tudi zapusti.

Tudi graf transmisivnosti in reflektivnosti je zelo podoben temu s prejšnjega razdelka. Glavna razlika je zagotovo ta, da ima tak model reflektorja v splošnem večjo transmisivnost, kar lahko vidimo po tem, da se graf hitreje vzpne.

### 3.2.1 Vpad delcev pod poljubnim kotom

Kot zanimivost si lahko ogledamo še primer, ko v modelu ne zagotovimo, da nevtroni vpadajo pravokotno na ploščo, pač pa privzamemo, da bo v steno vstopil pod izžrebanim kotom  $\theta_i$

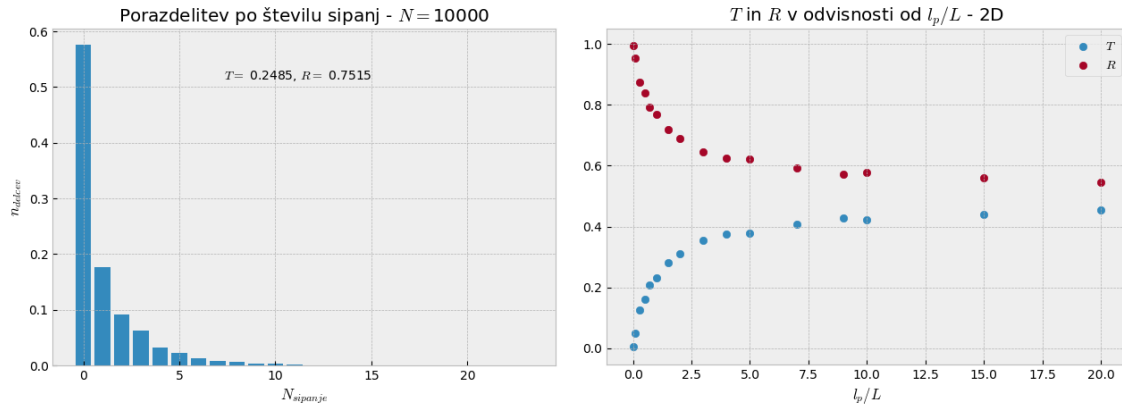


Slika 11: Model nevtronski reflektorja s sipanjem v dveh dimenzijah in poljubnim vstopnim kotom. Razmerje  $l_p/L$  na prvem grafu je enako 1.

Z levega grafa lahko vidimo, da je sedaj daleč najbolj verjeten potek, da delec zapusti ploščo po prvem sipanju, ko je še najbližje vstopnega roba. Zanimivo pa je, da pri razmerju  $l_p/L = 1$  transmisivnost in reflektivnost nista enaki, pač pa je reflektivnost nekoliko večja. Kar je drugače kot pri sipanju v eni dimenziji.

### 3.2.2 Izotropno sevanje na površini plošče

Lahko pa si zamislimo tudi primer, ko se delci rojevajo izotropno ob plošči in se lahko sipajo v vse smeri. Takšen model je prikazan na spodnji sliki.



Slika 12: Model nevtronski reflektorja s sipanjem v dveh dimenzijah z izotropnim sevanjem na vstopni plošči. Razmerje  $l_p/L$  na prvem grafu je enako 1.

Ta primer je nekoliko manj zanimiv, saj je v tem primeru zelo verjetno, da se bo delec izseval stran od plošče, kar lahko vidimo tudi na obeh grafih. Zanimiva pa je limita ko gre  $l_p \rightarrow \inf$ , saj je takrat  $T = R = 0.5$  (na grafu zaradi preglednosti nisem risal točke še pri npr.  $l_p/L = 500$ , a je limita zagotovo prava) kar je pravzaprav mera za to, kako dober je naš generator naključnih števil

za določitev vstopnega kota  $\theta_i$  - za tako velike  $l_p$  lahko praktično zanemarimo da je tam kakršnakoli plošča in zgolj gledamo, v katero smer je odfrčal delec.