



UNIVERZA
V LJUBLJANI

FMF

Fakulteta za matematiko
in fiziko

Naključna števila in integracije z metodo Monte Carlo

Modelska analiza, vaja 7

Avtor: Urban Pečoler
Vpisna številka: 28242019

November 2024

Kazalo

1	Uvod	1
2	Enotska krogla v $L^{1/2}$ normi	2
2.1	Homogena gostota	2
2.2	Nehomogena gostota	9
3	Gama žarki v krogli	10
4	Model nevtronskega reflektorja	12

1 Uvod

Monte Carlo integracija je numerična metoda, ki temelji na uporabi naključnih števil za približevanje vrednosti določenih integralov. Metoda je še posebej uporabna pri obravnavi integralov v večdimenzionalnih prostorih, kjer tradicionalne metode postanejo neučinkovite ali zahtevajo preveliko računsko moč. Ključna ideja Monte Carlo integracije je ocena povprečne vrednosti funkcije na območju integracije, kjer vzorce točk generiramo z uporabo naključnih števil.

Za določen integral oblike

$$I = \int_{\Omega} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x},$$

kjer je Ω območje integracije, Monte Carlo metoda izračuna približek kot

$$I \approx V \cdot \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(\mathbf{x}_i),$$

kjer je V volumen območja Ω , \mathbf{x}_i pa so naključno izbrane točke znotraj tega območja. S povečanjem števila točk N natančnost metode narašča, saj se statistična napaka zmanjšuje s hitrostjo $\mathcal{O}(1/\sqrt{N})$.

Naključna števila v računalništvu igrajo osrednjo vlogo pri Monte Carlo metodah. V praksi se ne uporabljajo resnična naključna števila, temveč psevdonaključna števila, ki jih generirajo algoritmi. Psevdonaključna števila tvorijo determinističen niz števil, ki ustrezajo določenim statističnim lastnostim naključnih števil, kot so enakomerna porazdelitev in nizka korelacija. Kakovost generatorja psevdonaključnih števil neposredno vpliva na zanesljivost Monte Carlo metod, zato je izbira ustreznega generatorja bistvenega pomena. Pri svoji nalogi sem uporabljal *numpy*-jevo funkcijo `random.uniform`, ki generira psevdonaključna števila z enakomerno porazdelitvijo na podanem intervalu. Ta funkcija omogoča generiranje enega ali več naključnih števil hkrati, kar je zelo uporabno pri večdimenzionalnih problemih. Števila so generirana na osnovi Mersenne Twister algoritma, ki zagotavlja dobro statistično kakovost naključnih vrednosti in ima dolgo obdobje ponavljanja.

Generirana števila sem uporabil za naključno vzorčenje točk na območju integracije in s tem ocenjeval vrednosti integralov. Ključni prednosti te funkcije sta njena hitrost in preprosta integracija v *numpy*-jev ekosistem, kar omogoča učinkovito delo z velikimi množicami podatkov in vektorizacijo operacij, s čimer se občutno zmanjša čas izvajanja.

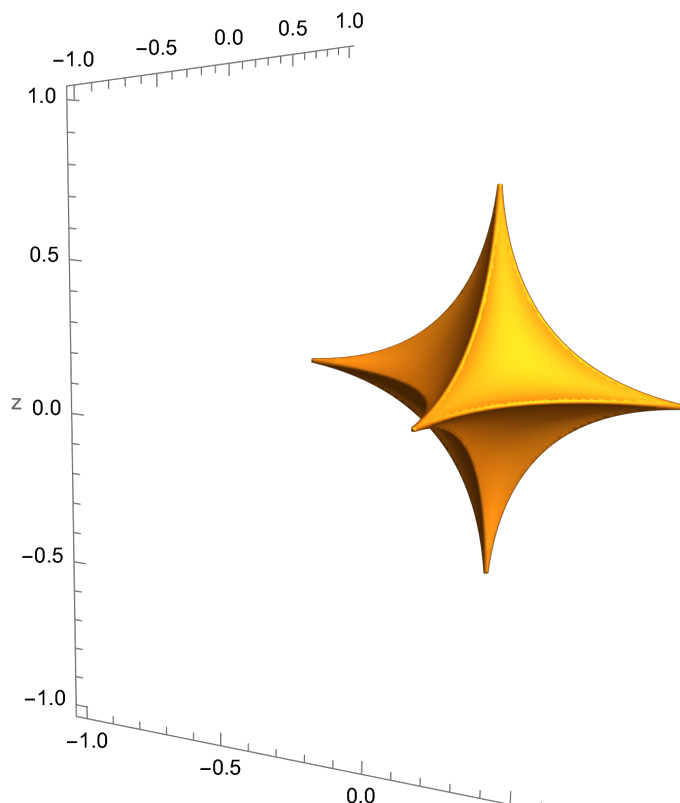
V nadaljevanju bomo podrobneje obravnavali uporabo Monte Carlo metod za različne probleme, implementacijo algoritmov in analizo natančnosti rezultatov. Posebno pozornost bomo namenili učinkovitosti metod pri kompleksnih integracijah ter vplivu gostot funkcij in geometrije integracijskega območja na končne rezultate.

2 Enotska krogla v $L^{1/2}$ normi

Pri prvi nalogi smo imeli podano telo z enačbo

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

Najprej sem si s pomočjo programa *Mathematica* pogledal kako telo sploh izgleda. Narisal in podal sem ga na sliki 1.



Slika 1: Točno narisano telo s pomočjo *Mathematice*

2.1 Homogena gostota

V *Mathematici* sem poiskoval izračunati tudi volumen in vztrajnostni moment telesa z gostoto $\rho(r) = 1$ in na moje presenečenje sem dobil rezultat.

$$\begin{aligned} V_{math} &= 0.0888 \\ I_{zz} &= I_{yy} = I_{xx} = 0.004232 \end{aligned}$$

Ko sem o telesu poiskoval zvedeti več, sem ugotovil, da gre za poseben primer telesa definiranega z L^p normo. Splošno obliko teh teles podaja enačba

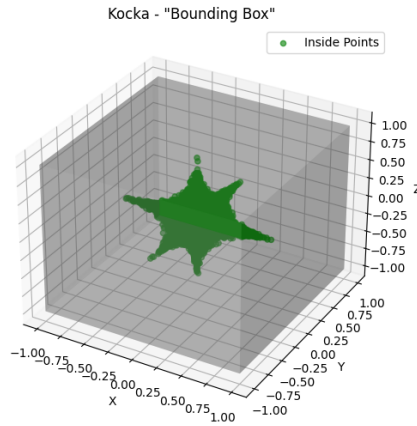
$$|x|^p + |y|^p + |z|^p = 1,$$

kjer parameter $p > 0$ določa obliko telesa. Pri $p = 2$ telo ustreza običajni sferi, saj je enačba ekvivalentna evklidski normi $\sqrt{x^2 + y^2 + z^2} = 1$.

Kot pravi naslov naloge, sem se računanja mase in vztrajnostnega momenta lotil s pomočjo Monte Carlo integracije. Najprej sem telo vdela v kocko z definicijskim območjem $[-1, 1] \times$

$[-1, 1] \times [-1, 1]$, ki predstavlja minimalni kvader, v katerem telo v celoti leži. Ta kocka omogoča numerično generiranje naključnih točk, ki jih lahko uporabimo za določitev, ali posamezna točka pripada telesu, definiranemu z enačbo

$$\sqrt{|x|} + \sqrt{|y|} + \sqrt{|z|} \leq 1.$$



Slika 2: Vizualizacija generacije naključnih točk za Monte Carlo simulacijo z omejitvijo kocke z definicijskim območjem $[-1, 1] \times [-1, 1] \times [-1, 1]$

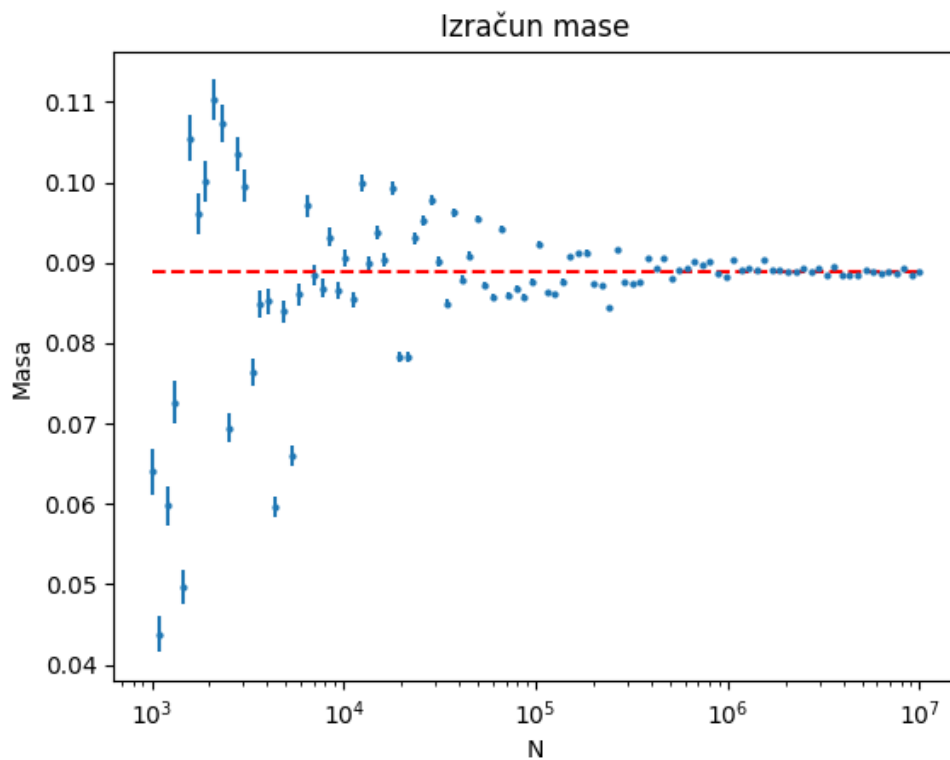
Maso sem potem določil s pomočjo enačbe (2), ki je za ta primer predelana v

$$m \approx \frac{m_k}{N} \sum_{i=1}^N \delta_i(r_i) \quad (2)$$

kjer m_k predstavlja maso kocke, ki je za naše definicijski območje in za primer, ko $\rho(r) = 1$, kar $m_k = abc = 8$, δ_i pa je 1, ko je generirana točka znotraj telesa. Negotovost izračuna pa sem dobil s pomočjo zveze

$$\sigma_m = m_k \sqrt{\frac{\hat{p}(1 - \hat{p})}{N}}, \quad (3)$$

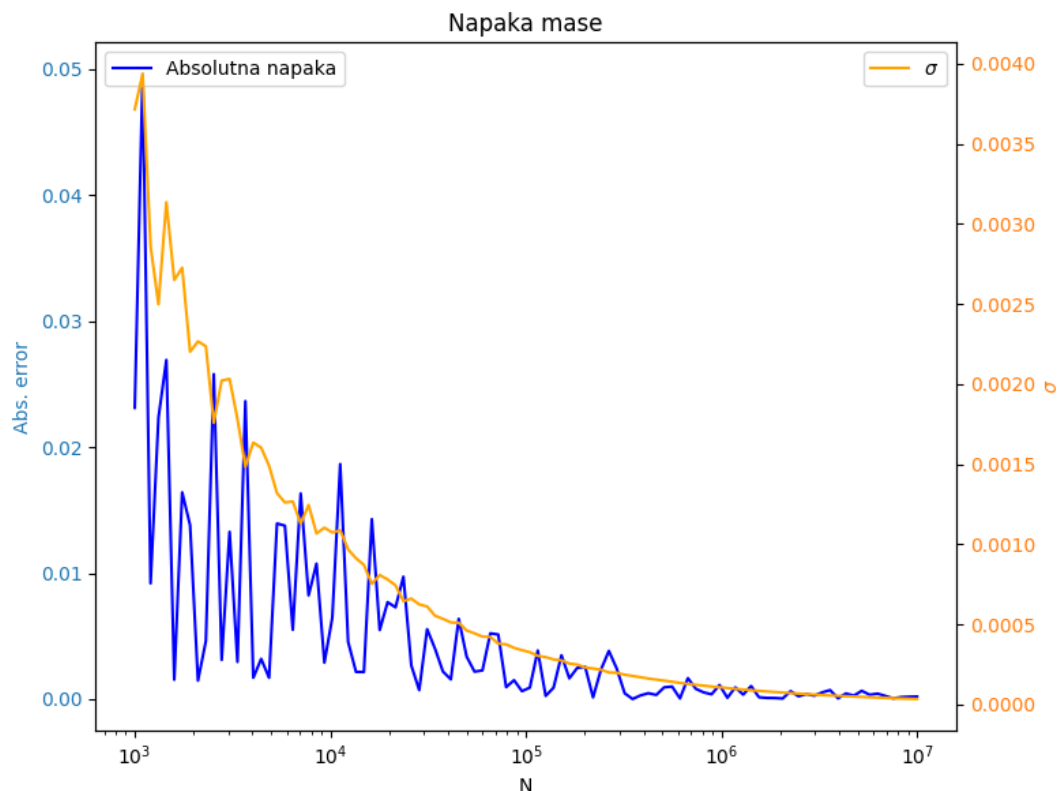
kjer je $\hat{p} = \frac{\text{število točk znotraj telesa}}{\text{skupno število generiranih točk}} = \frac{\sum_{i=1}^N \delta_i(r_i)}{N}$. Negotovost je odvisna od števila točk N , ki jih uporabimo v Monte Carlo metodi, in od deleža točk, ki ležijo znotraj telesa. Večje število N zmanjša negotovost zaradi manjše variabilnosti v oceni \hat{p} .



Slika 3: Izračun mase telesa s homogeno gostoto v odvisnosti od števila generiranih točk

Rezultate izračuna mase sem prikazal na sliki 3, kjer lahko vidimo, da se z večanjem števila točk veča tudi natančnost izračuna. Za prikazano pravo vrednost mase sem vzel rezultat, ki sem ga dobil s pomočjo programa Mathematica.

Na sliki 4 pa sem narisal še absolutno napako izračunane mase od prave vrednosti in izračunano negotovost v odvisnosti od generiranega števila točk.



Slika 4: Odvisnost izračunane negotovosti in odstopanja izračunane mase od prave vrednosti pri različnem številu naključno generiranih točk.

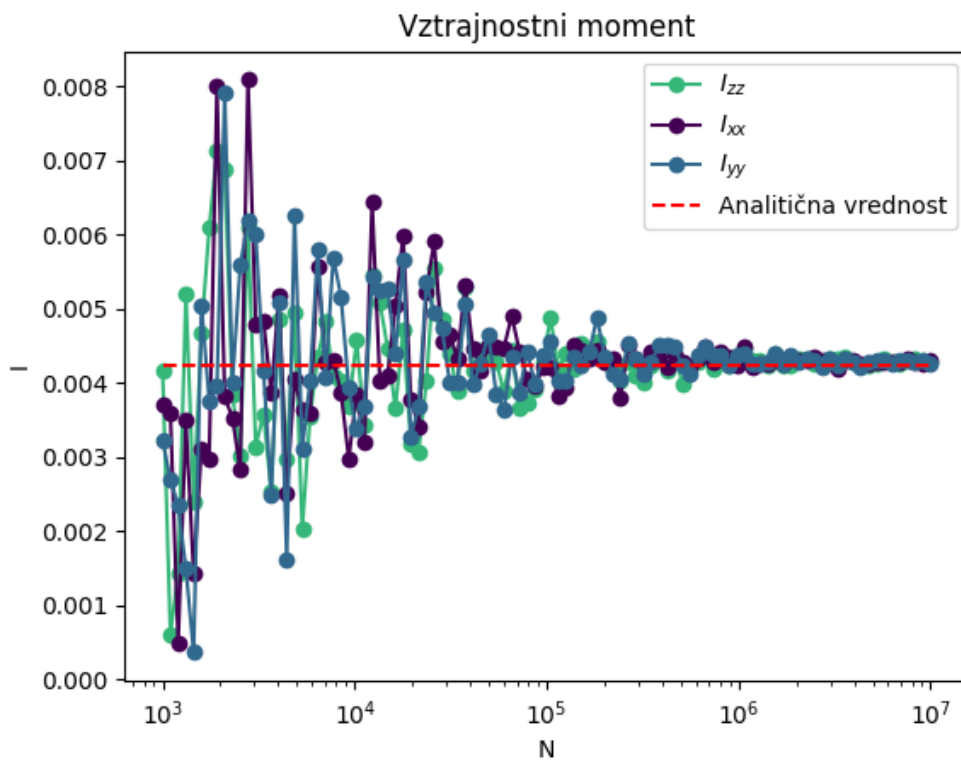
Nato pa sem z enakim postopkom izračunal še vrednost in napako vztrajnostnega momenta okoli vseh treh glavnih osi. Enačba za izračun vztrajnostnega momenta je

$$I = \int_V \rho(r)(x^2 + y^2) dV$$

Z integracijo Monte Carlo, pa se le ta prevede na

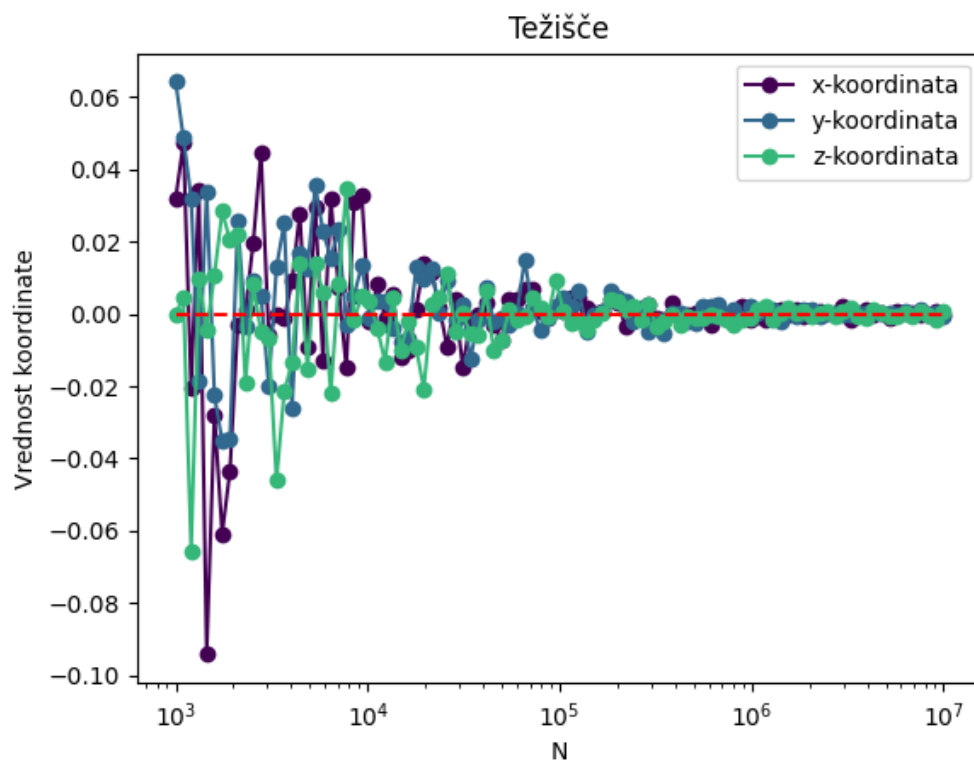
$$I_{zz} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (x_i^2 + y_i^2) \delta_i(r_i)$$

kjer so x_i, y_i, z_i naključno generirane točke. Enačbe so ekvivalentne tudi za vztrajnostni moment okrog drugih osi, z ustrezno zamenjanimi koordinatami v izrazu.



Slika 5: Izračun vztrajnostnega momenta telesa s homogeno gostoto okoli vseh treh glavnih osi v odvisnosti od števila generiranih točk

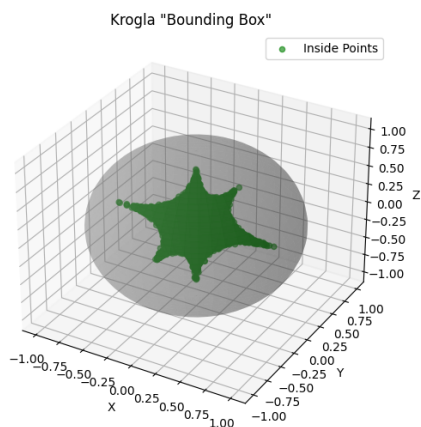
Za konec pa sem izračunal še vrednost težišča. Glede na to, da je telo simetrično na vse tri glavne osi, je trivialno, da je koordinata težišča $r_T = (0, 0, 0)$.



Slika 6: Izračun koordinat težišča telesa s homogeno gostoto v odvisnosti od števila generiranih točk

Na vseh slikah analize vidimo, da se natančnost drastično izboljša, ko povečamo število generiranih točk, vendar pa moramo biti pazljivi, saj pri večjih številih, to postane precej "drago".

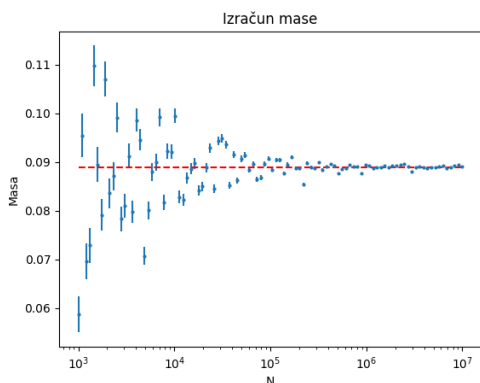
Preden sem analiziral telo z enačbo (2), kjer $\rho(r) \neq 1$, sem pogledal, če so rezultati, ki sem jih izračunal drugačni, če telo namesto s kocko obdam s kroglo.



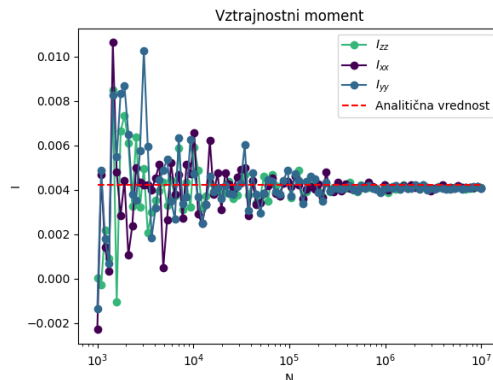
Slika 7: Vizualizacija generacije naključnih točk za Monte Carlo simulacijo z omejitvijo krogle s polmerom $R = 1$

Točke sem generiral tako, da sem spet uporabil funkcijo `numpy.random.uniform`, na enakem intervalu kot prej, vendar pa sem dodal še pogoj, da mora biti točka na polmeru 1 od koordinatnega središča, da sem jo "vzel" v analizo. S tem sem zagotovil, da so bile vse generirane točke znotraj enotske krogle.

Nato sem z enakim postopkom izračunal maso in vztrajnostni moment

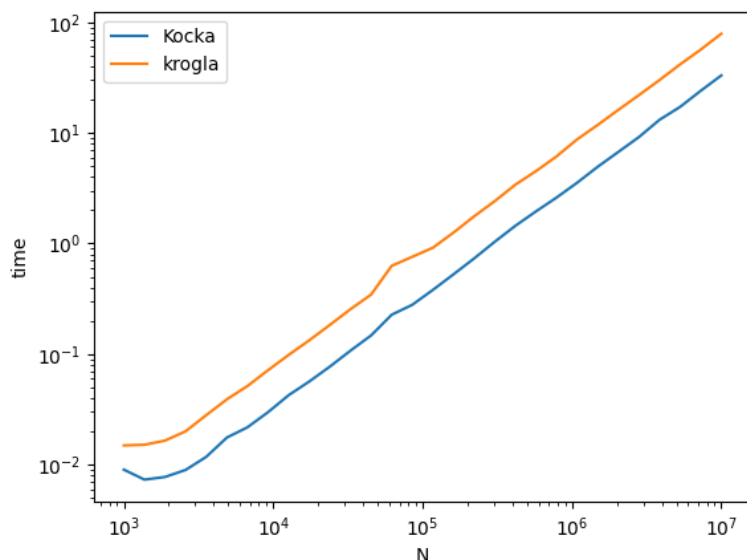


Slika 8: Izračun mase telesa s homogeno gostoto v odvisnosti od števila generiranih točk



Slika 9: Izračun vztrajnostnega momenta telesa s homogeno gostoto okoli vseh treh glavnih osi v odvisnosti od števila generiranih točk

Prav tako sem pogledal časovno zahtevnost algoritma, če šteljamo točke v kocko in kroglo in zanimivo je, da je slednja počasnejša.



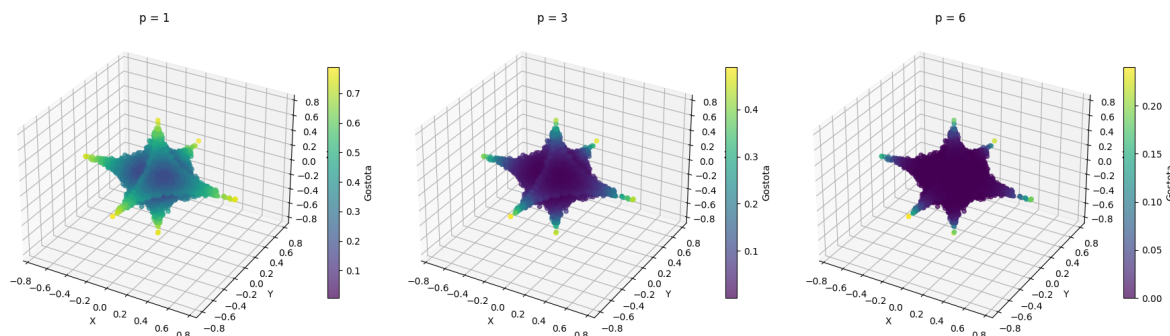
Slika 10: Časovna zahtevnost izračuna mase telesa za primer, ko generacijo točk omejimo na kocko in kroglo

2.2 Nehomogena gostota

Pogledal sem si primer, ko se je gostota večala radialno, z enačbo

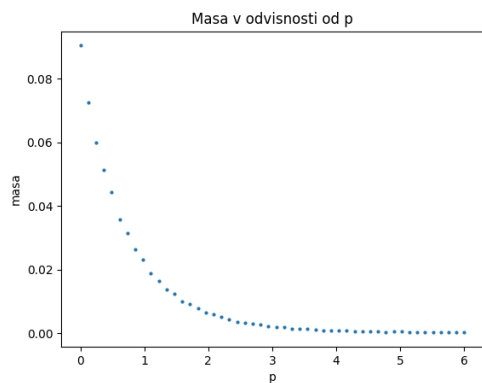
$$\rho(r) = r^p \quad (4)$$

kjer je p poljubna potenca. Najprej sem si narisal telo za različne p .

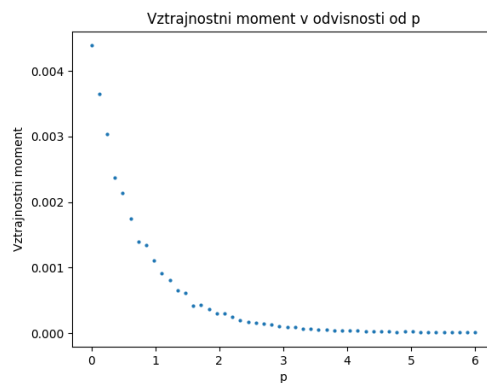


Slika 11: Narisano telo za različne vrednosti potence p

Razvidno je, da gostota z večanjem p relativno hitro šili v krake telesa. V odvisnosti od potence, sem izračunal še spreminjanje mase in vztrajnostnega momenta pri številu sampling točk $N = 10^6$. Obe funkciji konvergirata proti 0, ko večamo p , kar je logično, saj imajo sami kraki manjši volumen kot telo okoli koordinatnega središča, zato tudi ne morejo "držati" toliko mase.

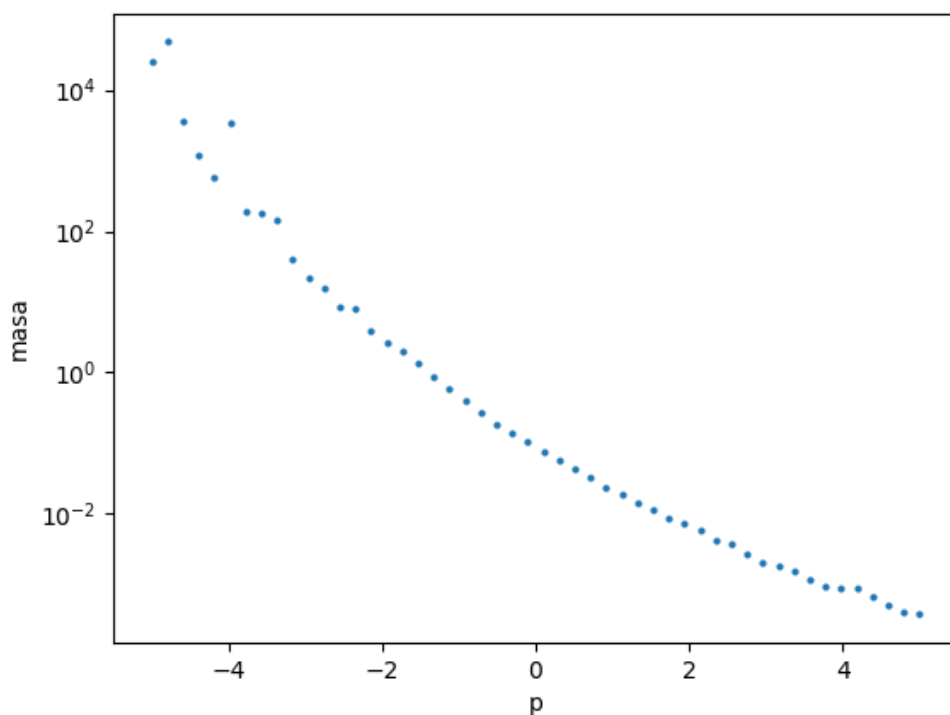


Slika 12: Izračun mase telesa z gostoto $\rho = r^p$ v odvisnosti od parametra p



Slika 13: Izračun vztrajnostnega momenta telesa z gostoto $\rho = r^p$ okoli z osi v odvisnosti od parametra p

Po enaki logiki lahko pričakujemo, da če bomo imeli negativen p , bo masa naraščala čez vse meje.



Slika 14: Izračun mase telesa z gostoto $\rho = r^p$ v odvisnosti od parametra p

Zgornji graf je narisana v logaritemski skali, kjer dobimo linearno padajočo funkcijo, ki konvergira k 0, torej lahko rečemo, da masa pada eksponentno z večanjem potence p

3 Gama žarki v krogli

V drugem delu naloge sem obravnaval rojevanje gama žarkov, ki so nastali v krogli s polmerom $R = 1$. Verjetnost za pobeg fotonov iz krogle je definirana kot

$$P = \iiint e^{-d(r,\theta)/\lambda} dV = \frac{3}{2} \int_0^1 r^2 dr \int_0^\pi e^{-d(r,\theta)/\lambda} d(\cos(\theta)).$$

Kjer je d enak:

$$d = -r \cos(\theta) + \sqrt{1 - r^2(1 - \cos^2(\theta))}.$$

Z MC algoritmom sem tako simuliral delež gama žarkov, ki uidejo iz krogle. Dolžino poti žarka žrebamo po eksponentni porazdelitvi

$$f_S(s) = \frac{1}{\lambda} e^{-s/\lambda}. \quad (5)$$

Izračunati želimo transmisivnost enotske krogle za γ žarke, ki imajo povprečno prosto pot dolžine 1 $\lambda = 1$. Za začetek nastavimo število pobeglih γ žarkov $n = 0$. Naš algoritem deluje tako, da:

1. Izžrebamo emisijski kot θ_i in začetni radij r_i .
2. Izžrebamo dolžino poti s_i po eksponentni porazdelitvi

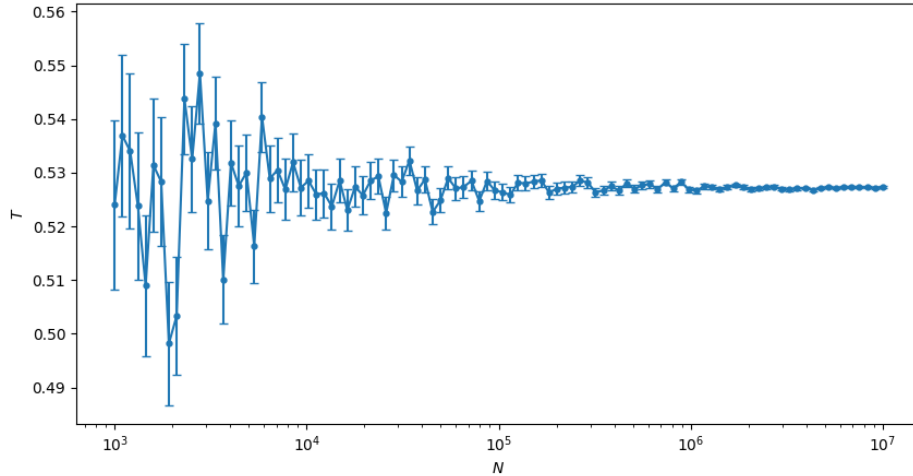
3. Preverimo ali $s_i \geq d(r_i, \theta_i)$. Če to drži je žarek ušel in število n prištejemo 1.

Točke 1., 2. in 3. N krat ponovimo. Ocena za transmisivnost je nato enaka

$$T = \frac{n}{N} \quad (6)$$

in napaka ocene

$$\sigma_T = \frac{1}{N^{3/2}} \sqrt{Nn - n^2}. \quad (7)$$

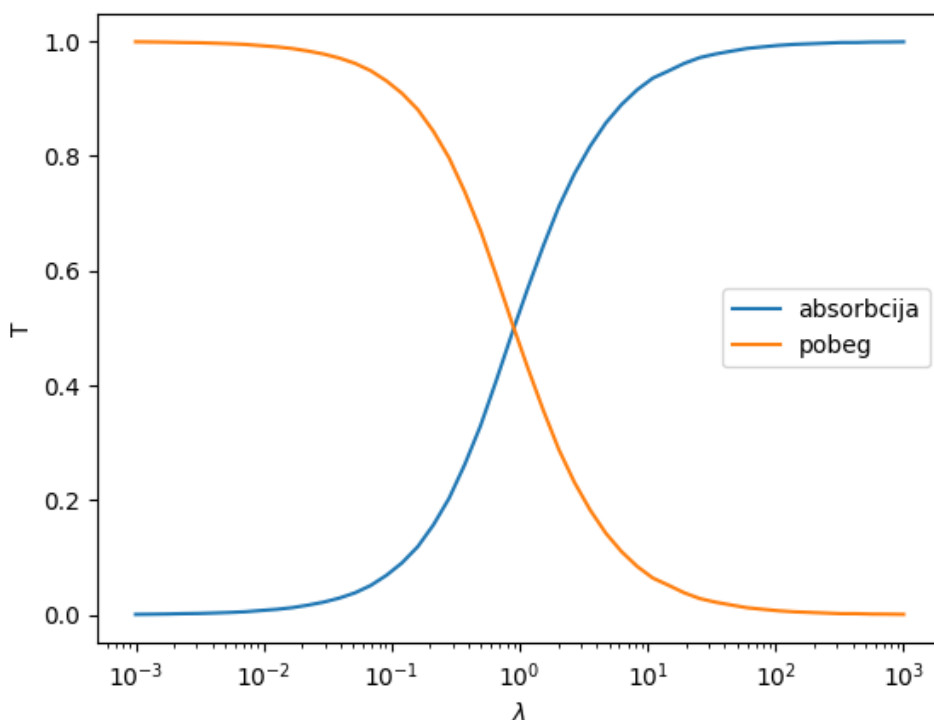


Slika 15: Izračunana transmitivnost v odvisnosti od števila generiranih točk N

Pri $N = 10^7$ simuliranih γ žarkih dobimo oceno za transmisivnost pri prosti poti γ žarkov $\lambda = 1$ oz. enako veliki prosti poti kot radiju krogle

$$T = 0.5275 \pm 0.0002.$$

Nato pa sem pogledal še transmisivnost žarkov gamma pri različno dolgih prostih poteh, pri številu šamplig točk $N = 10^6$.



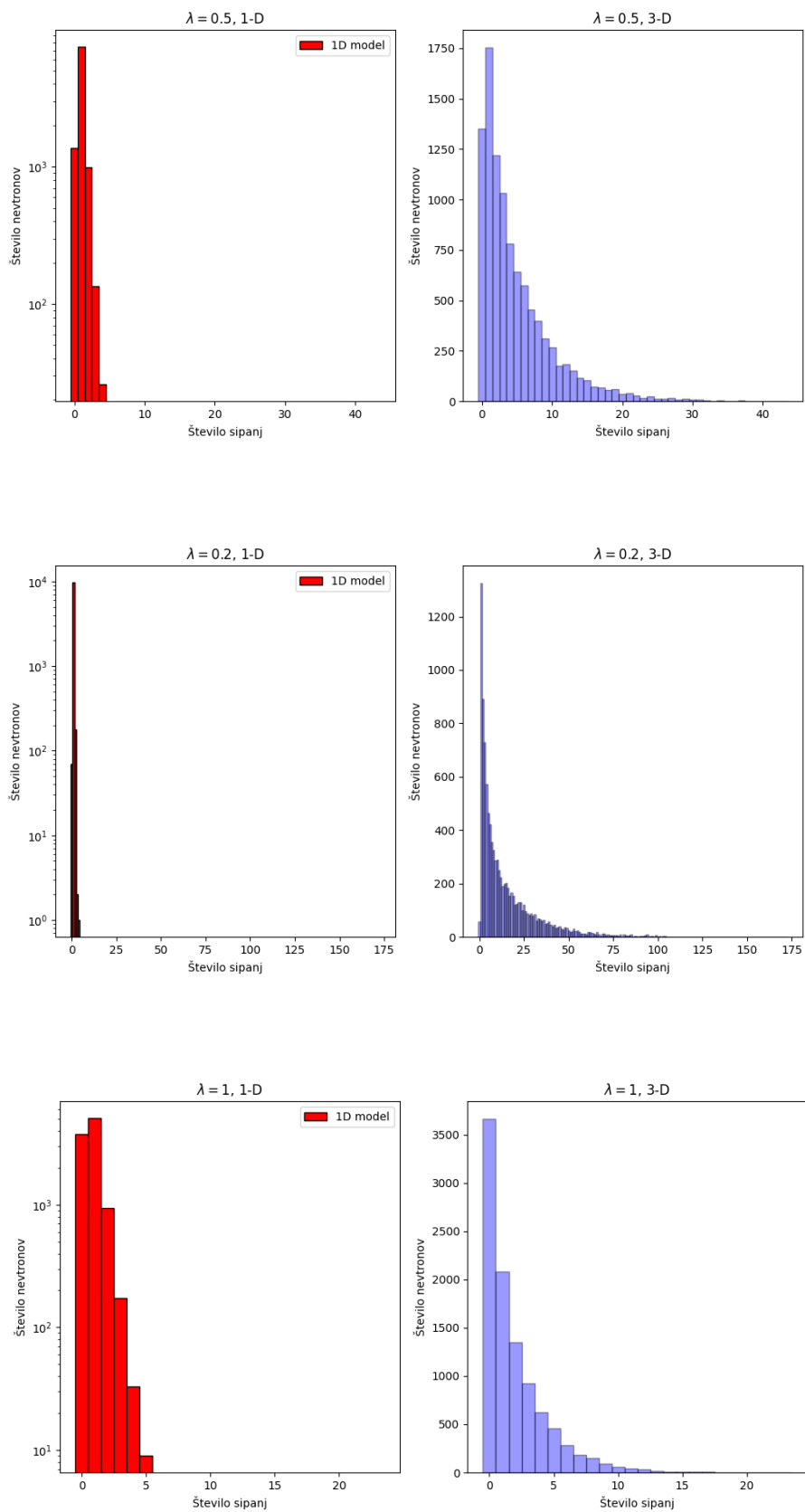
Slika 16: Verjetnost pobega fotona iz krogle in verjetnost da se v njej absorbira v odvisnosti od proste poti

Kot pričakovano, je prepustnost skoraj nič, ko je prosta pot kratka in konvergira proti 1, ko se prosta pot večja. Na graf sem narisal še absorbcijo gamma žarkov v krogli, ki je ravno $P = 1 - T$.

4 Model nevtronskega reflektorja

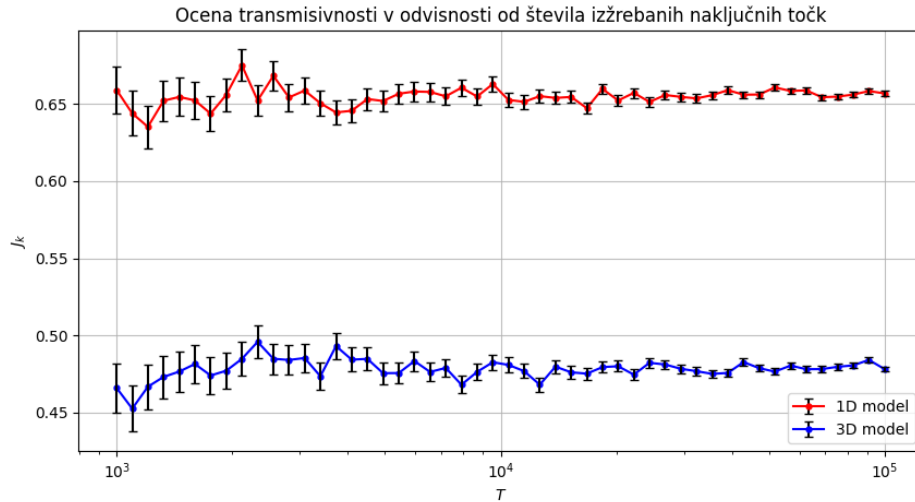
Za konec pa si pogledamo še model nevtronskega reflektorja, kjer tok nevtronov vpada pravokotno na ploščo, v kateri se nevtroni sipajo (in se nič ne absorbirajo). Njihova prosta pot je enaka polovici debeline plošče. Naloga je precej podobna nalogi v poglavju 3, le da smo tukaj pod drugačno geometrijo in da nimamo absorbcije. Najprej bom pogledal model z aproksimacijo, da se nevtroni sipajo le naprej in nazaj z enako verjetnostjo.

Ker v modelu nimamo absorbcije, sem pogledal število sipanj. Simulacijo sem naredil za enodimenzionalni primer in tridimenzionalni primer pri različnih vrednostih proste poti.



Slika 17: Porazdelitev po številu sipanj za različne vrednosti proste poti. V levem stolpcu je enodimenzionalni model, v desnem pa tridimenzionalni model.

Iz grafov je razvidno, da je število sipanj močno odvisno od proste poti. Manjša kot je prosta pot, več je sipanj. Izračunati želimo transmisivnost nevtronskega reflektorja z različno dimenzionalnimi modeli pri vrednosti povprečne proste poti nevtrona $\lambda = \frac{1}{2}$ in debelina reflektorja je $d = 1$. Na sliki 18 so prikazani rezultati transmisivnosti reflektorja na vse tri modele v odvisnosti od števila simuliranih nevtronov. Ko govorimo o transmisivnosti pri tej nalogi, mislimo seveda na nevtrone, ki so preleteli ploščo in izstopili na drugi strani.



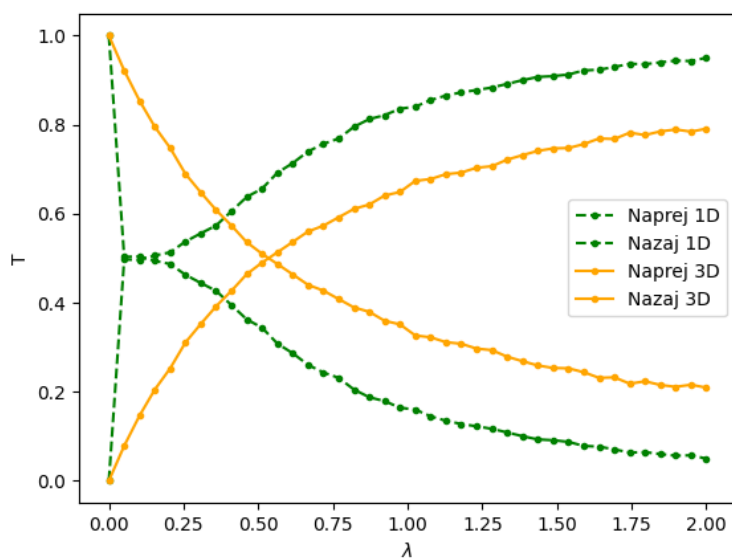
Slika 18: Caption

Za nevtrone, ki imajo povprečno prosto pot dolgo $\lambda = 1/2$ dobimo pri $N = 10^7$ simuliranih nevtronih za oceno transmisivnosti nevtronskega reflektorja rezultate

$$T_{1D} = 0.6564 \pm 0.0002 \quad T_{3D} = 0.4793 \pm 0.0002.$$

Vidimo, da transmisivnost z več dimenzijami pada.

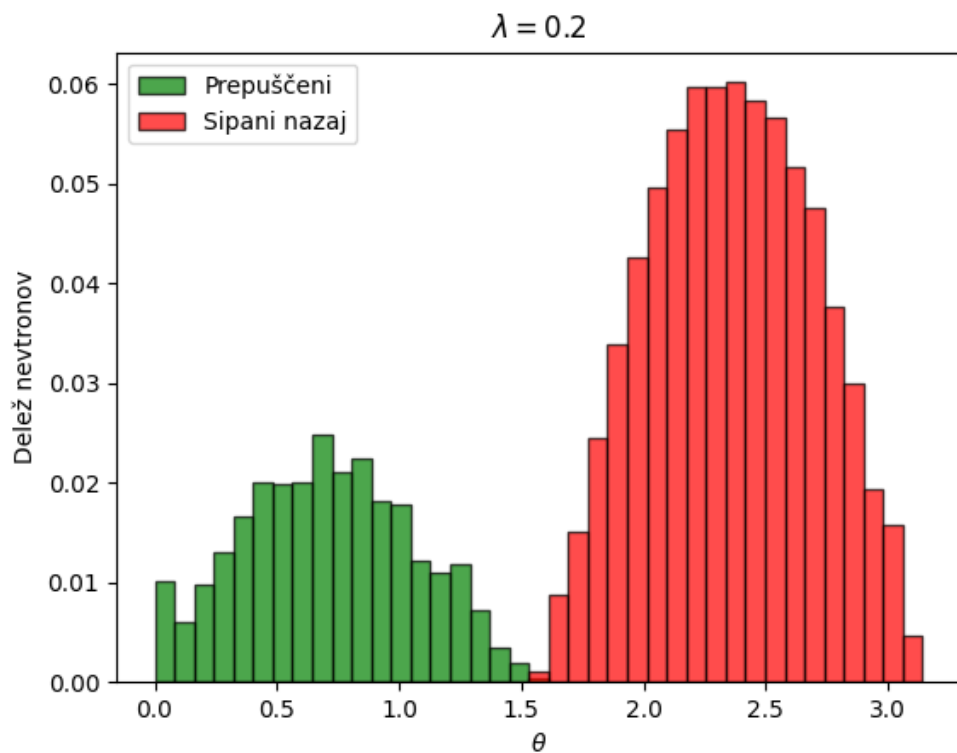
Za konec primerjave 1D in 3D modelov pa sem ocenil sipanje "naprej" in nazaj" še za različne vrednosti proste poti. V našem primeru smo vzeli debelino reflektorja enako 1, zato je razmerje med povprečno prosto potjo in debelino reflektorja kar enako vrednosti povprečne proste poti.

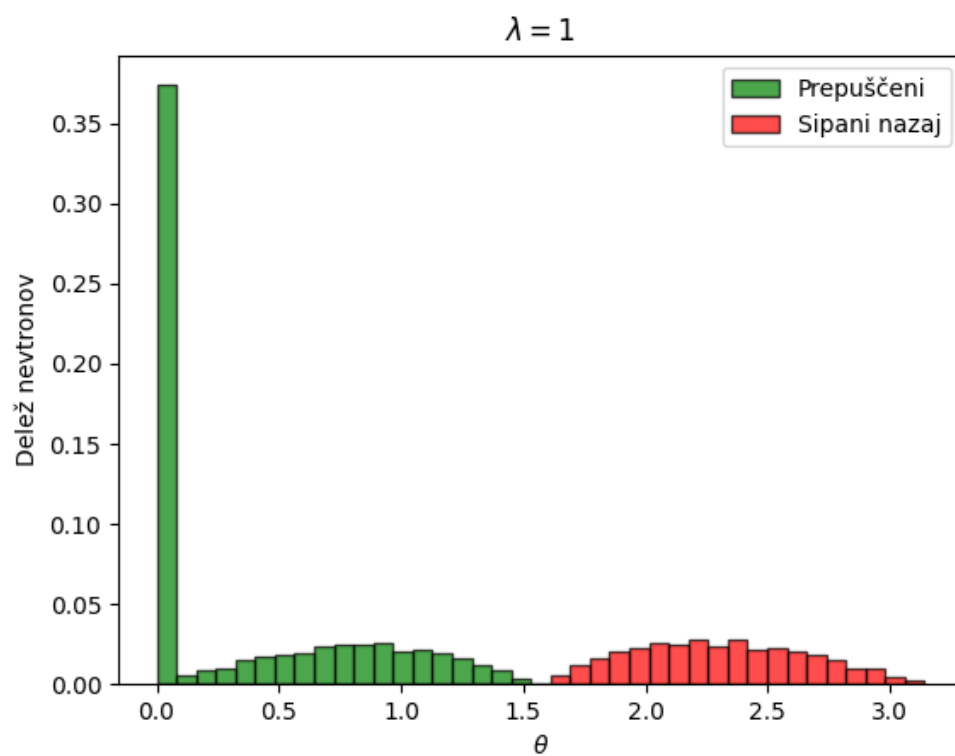
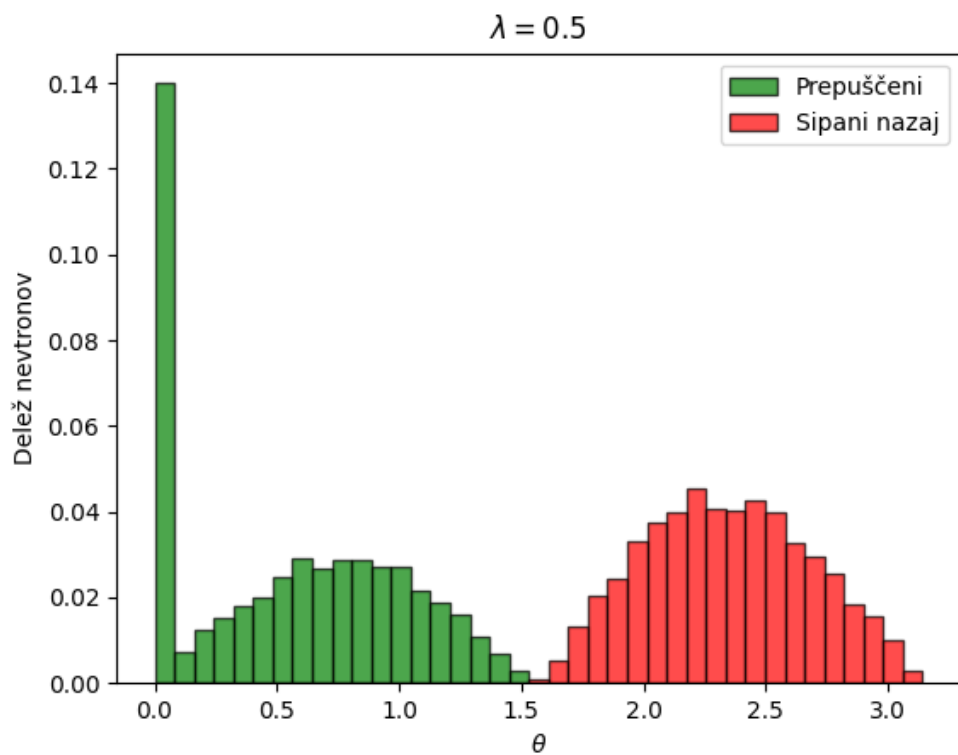


Slika 19: Ocena transmisivnosti nevtronskega reflektorja za vse oba modela v odvisnosti od števila simuliranih nevtronov N .

Nazadnje pa sem prikazal še kotno porazdelitev odbitih in prepuščenih nevtronov, koti večji od $\pi/2$ ustrezajo prepuščenim nevtronom, koti manjši od $\pi/2$ pa nevtronom ki so sipani nazaj.

Vidimo lahko, da pri večjih vrednostih proste poti dobimo izražit maksimum pri kotu 0, ki ustreza prehodu brez sipanja.





Slika 20: Kotna porazdelitev odbitih in prepuščenih nevtronov za različne vrednosti proste poti, pri številu točk $N = 10^5$