

UNIVERZA V LJUBLJANI
FAKULTETA ZA MATEMATIKO IN FIZIKO
ODDELEK ZA FIZIKO

MODELSKA ANALIZA I

7. naloga: Naključna števila in integracije z metodo Monte Carlo

Žiga Šinigoj, 28222025

Ljubljana, november 2022

1 Volumen in vztrajnostni moment telesa

S pomočjo metode Monte Carlo lahko izračunam iskani volumen in vztrajnostni moment telesa, ki ga omejuje ploskev

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

Zaradi simetrije telesa je dovolj, da izračunam volumen in vztrajnostni moment osmine telesa. V ta namen izžrebam naključne točke znotraj območja $\Omega = [0, 1] \times [0, 1] \times [0, 1]$, ki objame osmino telesa. Točke oziroma števila x_i so porazdeljena po enakomerni porazdelitvi $U_i(0, 1)$ za $i = 1, 2, 3$. Za izračun so uporabna formula

$$\int_V g(\mathbf{r}) dV = V \langle g \rangle \pm \frac{V}{\sqrt{N}} \sqrt{\langle g^2 \rangle - \langle g \rangle^2}, \quad (2)$$

kjer oceno za povprečno vrednost in povprečno vrednost kvadrata funkcije g dobimo z žrebanjem točk v območju Ω , ki obdaja telo.

1.1 Konstantna gostota

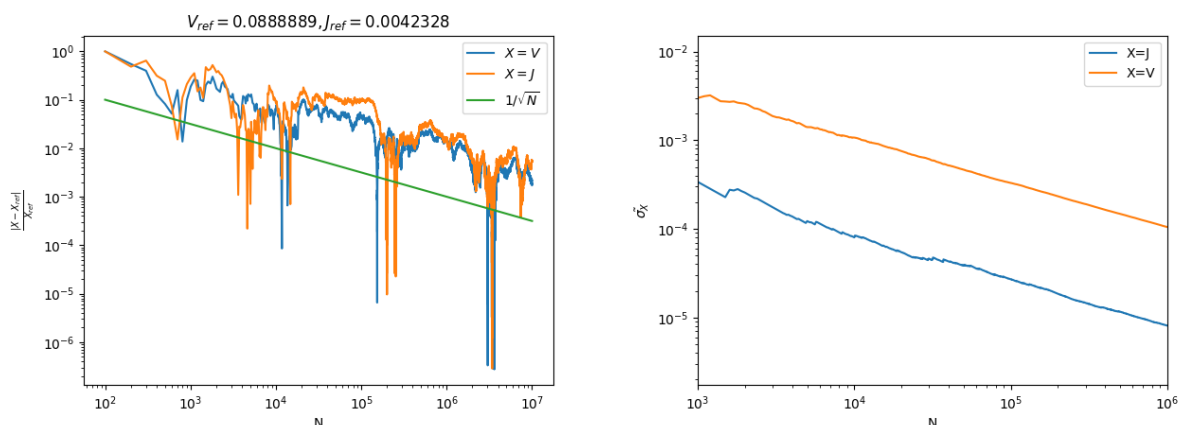
Najprej obravnavam telo s konstantno gostoto, ki jo postavim na 1. Da sem primerjal natančnost izračuna vztrajnostnega momenta in mase sem enačbi za maso in vztrajnostni moment numerično integriral z metodo *scipy.integrate.tplquad* in predstavljajo referenčno rešitev. Iskani količini dobim z metodo Monte Carlo kot

$$V = m = \frac{8}{N} \sum_{i=1}^N \delta_i \quad J_{kk} = I_{kk} = \frac{8}{N} \sum_{i=1}^N \delta_i \mathbf{r}_{i\perp}^2, \quad (3)$$

kjer je $k = x, y, z$, $\delta_i=1$, če se izžrebana točka nahaja znotraj iskanega telesa in 0 če se ne. Vztrajnostni moment je enak za vse 3 glavne osi $I_{xx} = I_{yy} = I_{zz}$. Podobno bi lahko izračunal tudi izvendiagonalne elemente tenzorja, ki so med sabo enake. Napako metode dobim kot

$$\sigma_{m=V} = \frac{8}{\sqrt{N}} \sqrt{\frac{1}{N} \sum_i \delta_i^2 - \left(\frac{1}{N} \sum_i \delta_i \right)^2} \quad \sigma_I = \frac{8}{\sqrt{N}} \sqrt{\frac{1}{N} \sum_i \delta_i \mathbf{r}_{i\perp}^4 - \left(\frac{1}{N} \sum_i \delta_i \mathbf{r}_{i\perp}^2 \right)^2} \quad (4)$$

Odstopanje mase iz vztrajnostnega momenta v odvisnosti od števila izžrebanih točk prikazuje slika 1(a). Standardni odklon oziroma napaka metode pričakovano pada kot $\frac{1}{\sqrt{N}}$ (slika 1).



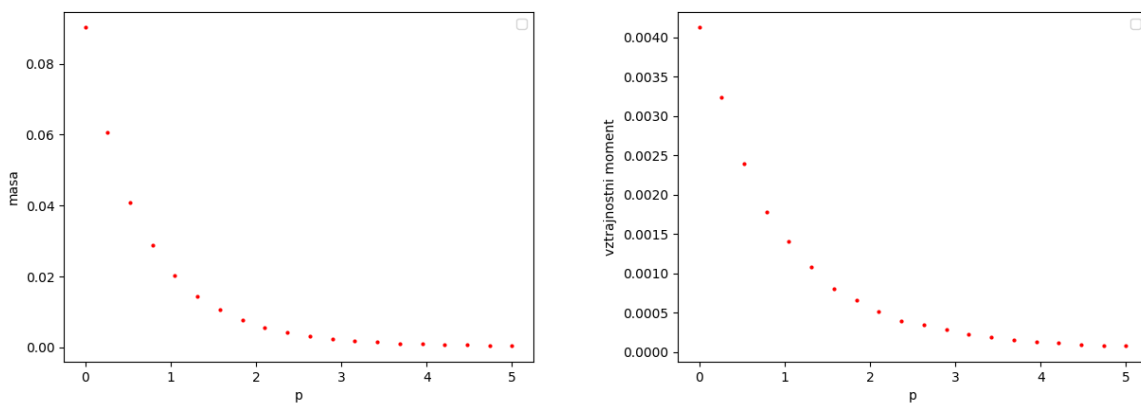
Slika 1: a) Relativno odstopanje mase in vztrajnostnega momenta od referenčnih vrednosti. b) Standardni odklon volumna in vztrajnostnega momenta v odvisnosti od števila izžrebanih točk N .

1.2 Spremenljiva gostota

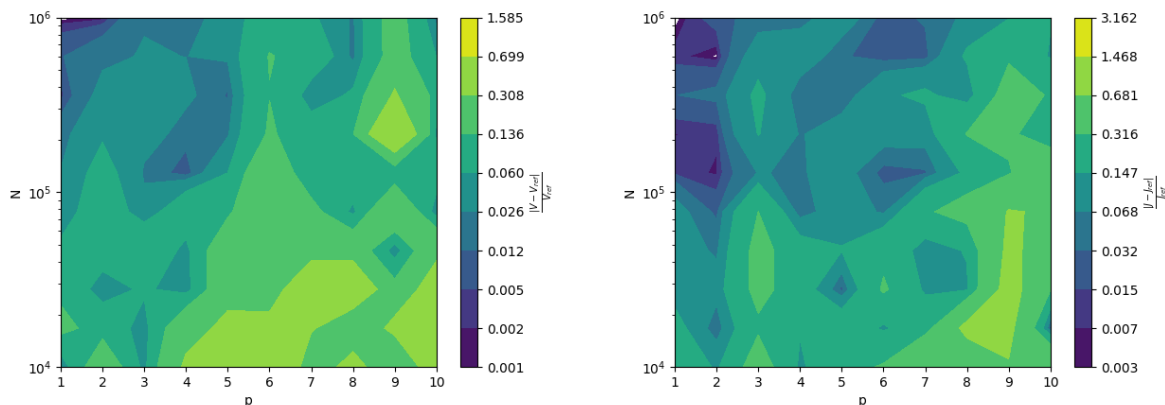
Bolj zanimiv je primer, ko gostota ni konstantna, ampak je funkcija razdalje $\rho(r) = r^p$. Zanimivo je opazovati spreminjanje mase in vztrajnostnega momenta, če spreminjam p . Enako kot v prejšnjem primeru sem referenčne vrednosti dobil z numerično integracijo. Z metodo Monte Carlo dobim iskane količine kot

$$m = \frac{8}{N} \sum_{i=1}^N \delta_i |\mathbf{r}_i|^p \quad I_{kk} = \frac{8}{N} \sum_{i=1}^N \delta_i \mathbf{r}_{i\perp}^2 |\mathbf{r}_i|^p, \quad (5)$$

in podobno za standardne odklone. Masa telesa se manjša z večanjem parametra p (slika 2(a)), enako velja tudi za vztrajnostni moment. Odstopanja od referenčnih vrednosti prikazuje slika 4. Ker vsakič izžrebam set točk, s katerim določim maso in vztrajnostni moment, ni lepo videti funkcijske odvisnosti od parametra p in števila točk N . Vseeno pa lahko vidim, da odstopanja padajo s številom točk in se večajo z večanjem parametra p . Lepšo odvisnost bi dobil, če bi povprečil nekaj takih grafov oziroma matrik. Odstopanja so večja pri računanju vztrajnostnega momenta.



Slika 2: a) Masa telesa v odvisnosti od parametra p . b) Vztrajnostni moment v odvisnosti od parametra p . $N = 10^6$.

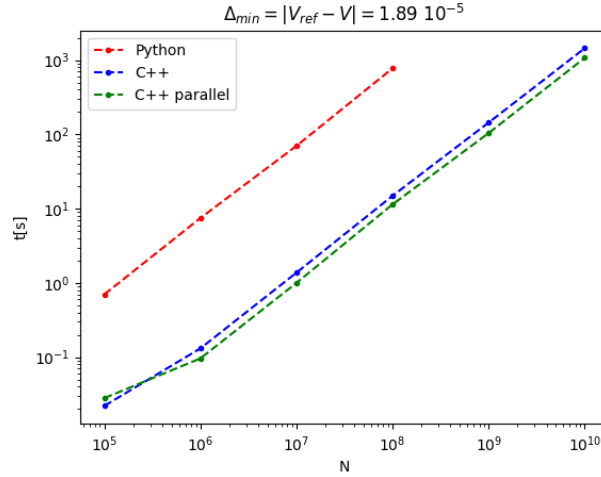


Slika 3: a) Relativno odstopanje mase v odvisnosti od parametra p in števila izžrebanih točk. b) Relativno odstopanje vztrajnostnega momenta v odvisnosti od parametra p in števila izžrebanih točk.

1.3 Maksimalna natančnost

Zanimalo me je, kako natančno lahko izračunam iskano količino. Načeloma več točk kot vzamem, boljšo vrednost iskane količine lahko dobim. Težava je seveda eksponentno naraščanje časovne zahtevnosti z

eksponentnim večanjem števila točk. Ker je *Python* precej počasen sem naredil izračun mase v *C++*, kjer sem najprej uporabil 1 jedro in nato vseh 8 (paralelizacija) za izračun najboljšega približka. Nepričakovano sem dobil najboljši približek pri $N = 10^9$ in ne pri 10^{10} in sicer na 0.02 %. Mogoče sem kaj narobe implementiral pri paralelizaciji, saj bi načeloma moral za večji N dobiti boljši približek. Paralelizacija pride do izraza ob večjih N , pri $N = 10^{10}$ potrebujem okrog 400s manj za izračun kot pri računanju z enim jedrom.



Slika 4: Časovna odvisnost pri računanju mase oziroma volumna telesa.

2 Gama žarki v krogli

V krogli z radijem $R = 1$ se rojevajo gama žarki, ki imajo prosto pot po snovi porazdeljeno po eksponentni porazdelitvi

$$f(s) = \frac{1}{\mu} e^{-s/\mu}, \quad (6)$$

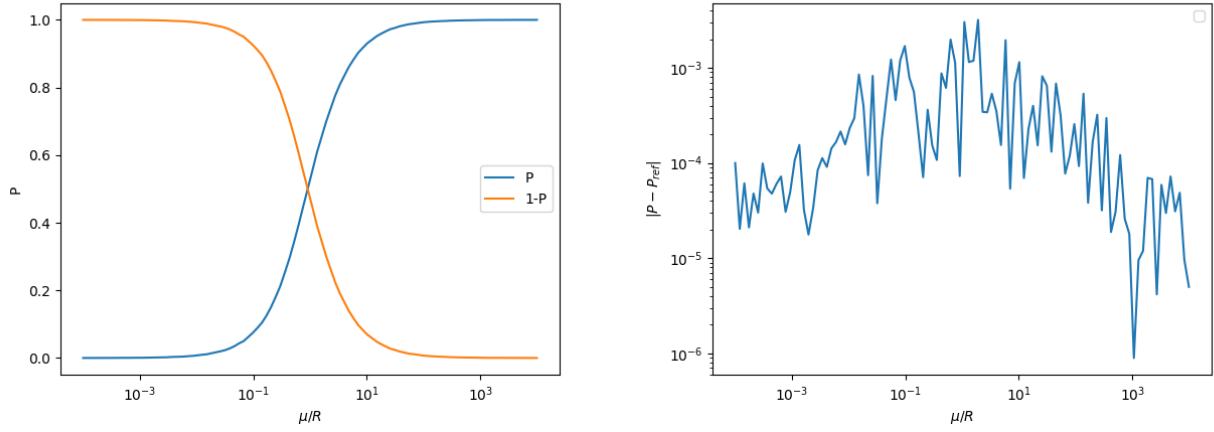
kjer je μ povprečna prosta pot žarka. Zaradi simetrije krogle se razdalja od naključne točke v krogli, ki predstavlja rojstvo žarka, do roba krogle da zapisati kot

$$d_i(\vartheta_i, r_i) = -r_i \cos(\vartheta_i) + R \sqrt{1 - \frac{r_i^2}{R^2} (1 - \cos(\vartheta_i)^2)}, \quad (7)$$

kjer je ϑ_i kot, ki definira smer gama žarka. Verjetnost za pobeg ali absorpcijo lahko dobim z Monte Carlo metodo tako, da izžrebam $r_i = \xi_1^{\frac{1}{3}}$, $\xi_1 \sim U(0, 1)$ in $\vartheta_i = \arccos(2\xi_2 - 1)$, $\xi_2 \sim U(0, 1)$. Če je prosta pot žarka gama $s_i = -\mu \ln(\xi)$, $\xi \sim U(0, 1)$, večja od razdalje do roba krogle d_i , potem žarek pobegne iz krogle, če je prosta pot s_i manjša od razdalje d_i se žarek absorbira. Za referenčno rešitev sem vzel numerično izračunano verjetnost za pobeg

$$P = \int \int \int e^{-d(r,\vartheta)/\mu} dV = \frac{3}{2} \int_0^1 r^2 dr \int_0^\pi e^{-d(r,\vartheta)/\mu} \sin(\vartheta) d\vartheta. \quad (8)$$

Za numerično integriranje zgornjega izraza sem uporabil funkcijo *scipy.integrate.dblquad*. Verjetnost za pobeg in absorpcijo kot funkcijo povprečne proste poti prikazuje slika 5(a). Ko je povprečna prosta pot majhna, večina žarkov v krogli ne uspe pobegniti. Ko je razmerje $\mu/R = 1$ je verjetnost za pobeg približno 50 %. Odstopanja Monte Carlo verjetnosti za pobeg od referenčne verjetnosti v odvisnosti od razmerja μ/R prikazuje slika 5(b). Največja odstopanja se pojavijo okrog razmerja $\mu/R = 1$.



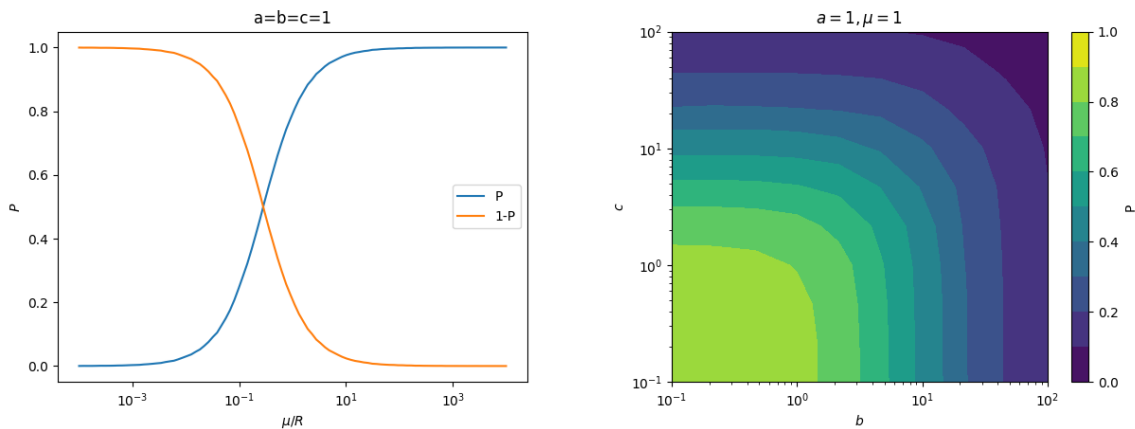
Slika 5: a) Verjetnost za pobeg P in absorpcijo ($1-P$) kot funkcija razmerja μ/R . b) Absolutna odstopanja med verjetnostjo po metodi Monte Carlo in numerično izračunano verjetnostjo za pobeg. $N=10^6$.

2.1 Poenostavljena obravnava žarkov v elipsoidu

V primeru ko obravnavam elipsoid je položaj rojstva žarka odvisen tudi od kota in ni mogoče rotirati točke. Formula za razdaljo naključne točke do roba elipsoida mora obstajati, ampak mi je ni uspelo izpeljati. Drug način izračuna, ki bi ga poskusil implementirati, če bi imel več časa, je sledeč. Vsaka izžrebana točka in naključna izžrebana smer tvorita premico. Za vsako premico bi poiskal presečišče na elipsoidu in iz tega izračunal dolžino med točko in robom elipsoida. Mislim, da je ta način nekoliko lažji kot izpeljava splošne formule za oddaljenost. Oba načina reševanja bi vzela kar nekaj časa, zato sem se odločil pa poenostavitev. Poenostavitev, ki jo bom naredil je ta, da vsak rojen žarek v elipsoidu leti samo v radialni smeri navzven. V tem primeru je razdalja od točke do roba

$$d_i = R_i - r_i, \quad R_i = \sqrt{(c \cos \vartheta_i)^2 + (a \cos \varphi_i \sin \vartheta_i)^2 + (b \sin \varphi_i \sin \vartheta_i)^2}, \quad (9)$$

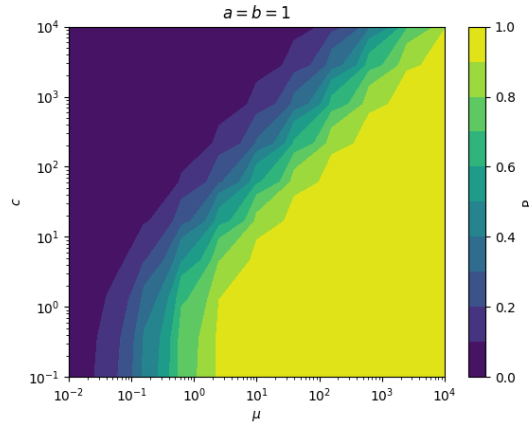
kjer so a, b, c dolžine polosi elipsoida. Enako kot prej izžrebam r_i , ϑ_i in $\varphi_i = 2\pi\xi_3$, $\xi_3 \sim U(0, 1)$. Najprej lahko pogledam, kako se verjetnost za pobeg razlikuje v primeru ko $a = b = c = 1$ (slika 6(a)) od zgornjega primera, kjer lahko žarki letijo v vse smeri. V primeru ko žarki letijo samo radialno navzven iz krogle, se krivulji zamakneta v smeri manjših prostih poti. Pri razmerju $\mu/R = 1$ je verjetnost za pobeg približno 60%. Bolj zanimivo je pogledati kako sprememba geometrije elipsoida vpliva na verjetnost za pobeg žarka (slika 6(b)). Verjetnost za pobeg najhitreje pada, ko se obe polosi hkrati večata.



Slika 6: a) Verjetnost za pobeg P in absorpcijo ($1-P$) kot funkcija razmerja μ/R . b) Verjetnost za pobeg v odvisnosti od velikosti polosi elipsoida.

Če spreminjam velikost samo ene polosi in dolžino proste poti (slika 7) se, v območju dovolj majhnih velikosti

ene polosi (sploščen elipsoid), verjetnost za pobeg kot funkcija dolžine proste poti ne spreminja veliko. Ko se polos veča pa se krivulja pomika v smeri večanja povprečne proste poti.



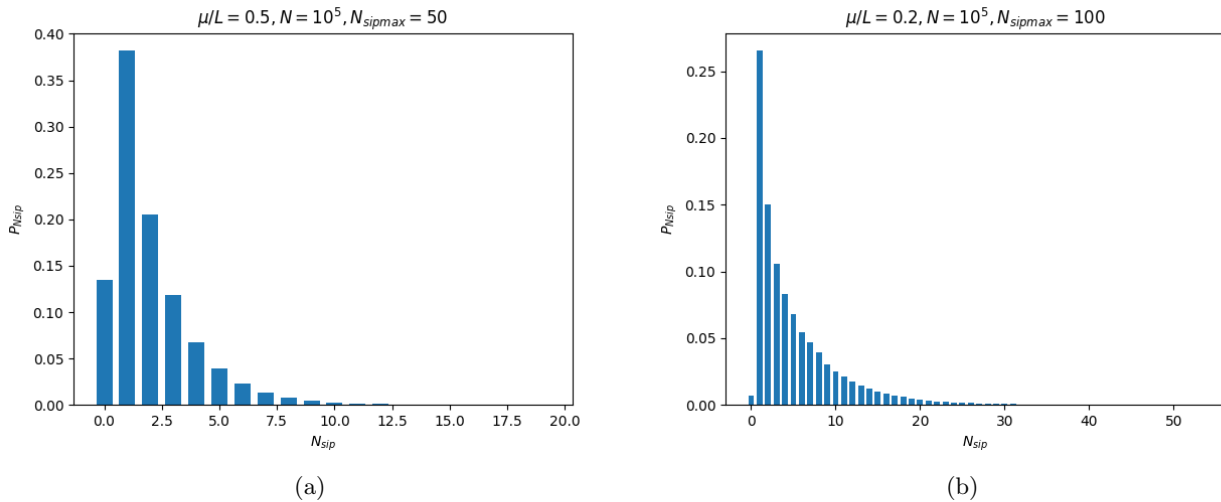
Slika 7: a) Verjetnost za pobeg v odvisnosti od velikosti polosi in dolžine proste poti.

3 Nevtronski reflektor

Tok nevtronov pada pravokotno na ploščo debeline $L = 1$, v kateri se nevtroni samo sipljejo. Zanima nas porazdelitev sipanj, prepustnost, odbojnost.

3.1 Poenostavljen model

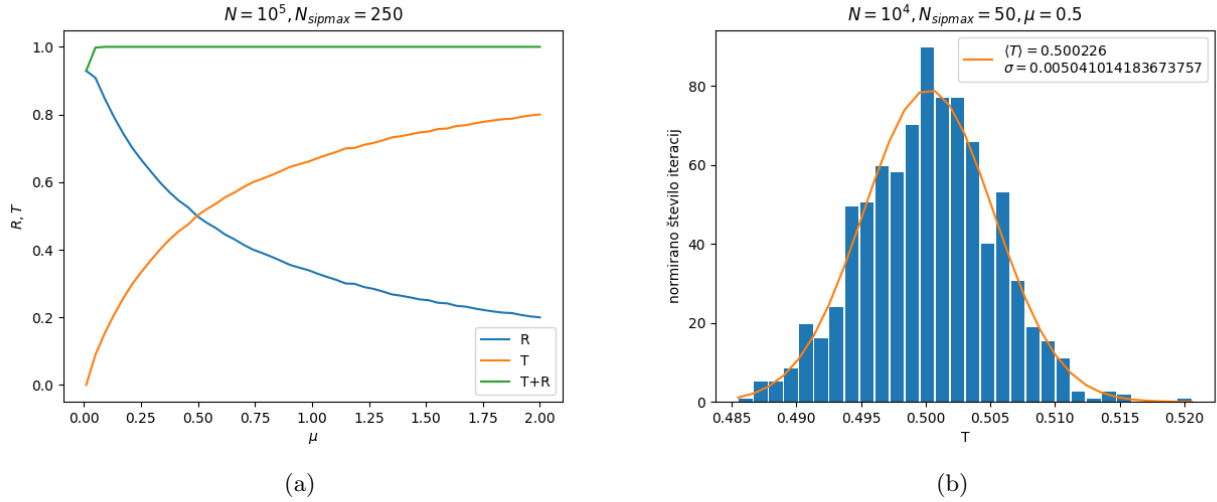
Najprej obravnavamo primer, ko se nevtron lahko siplje samo naprej ali nazaj. Prosto pot nevtrona izžrebam kot $s_i = -\mu \ln(\xi)$, $\xi \sim U(0, 1)$ smer naprej ali nazaj prav tako izžrebam $\xi_1(0, 1)$, kjer je smer negativna, če je $\xi < 0.5$. Porazdelitev sipanj za 2 različni povprečni prosti poti prikazuje slika 8. Večja kot je povprečna prosta pot, večja je verjetnost, da bo delec prešel pregrado brez sipanja. Manjša kot je prosta pot delca, več sipanj bo doživel v povprečju. Zanima nas odbojnost in prepustnost v odvisnosti od povprečne proste poti (slika 9(a)) in ocena napake (9(b), 10). Odbojnost in prepustnost se za zelo majhne vrednosti povprečnih prostih poti ne seštevata v 1, saj pride do zelo velikega števila sipanj preden delec zapusti ploščo. Število sipanj sem omejil na N_{sipmax} , ki je zapisan nad vsakim grafom.



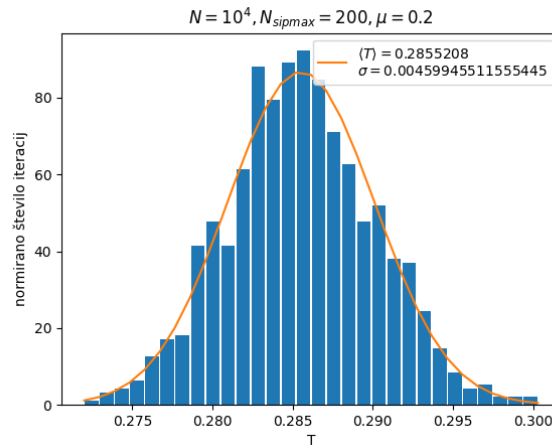
Slika 8: Histograma porazdelitev nevtronov po številu sipanj za dve različni vrednosti povprečne proste poti.

Napako za prepustnost sem dobil tako, da sem 1000 krat pognal simulacijo in naredil histogram za dano

povprečno prosto pot. Nanj sem prilagodil Gaussovo krivuljo in tako določil standardni odklon. Ocena napake prepustnosti (in reflektivnosti) oziroma širina Gaussove krivulje je odvisna od števila delcev, če bi vzel več delcev bi dobil ožjo krivuljo.



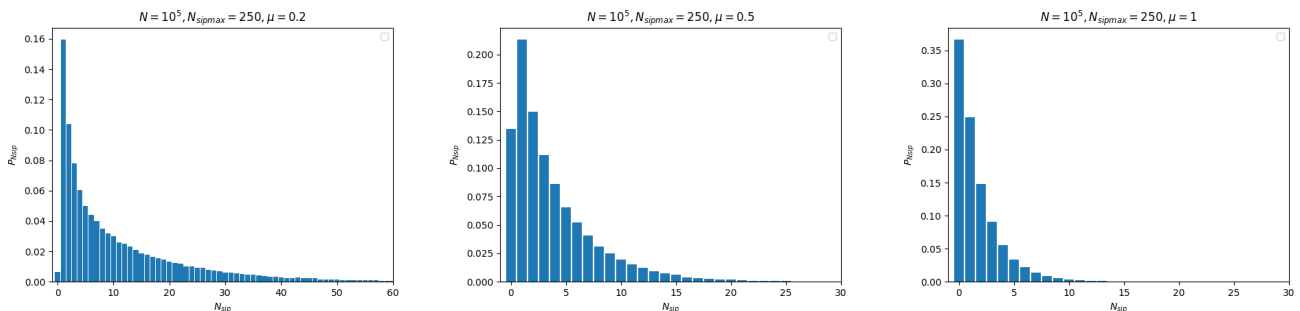
Slika 9: a) Prepustnost in reflektivnost kot funkcija povprečne proste poti. b) Določanje napake prepustnosti pri $\mu = 0.5$



Slika 10: Določanje napake prepustnosti pri $\mu = 0.2$

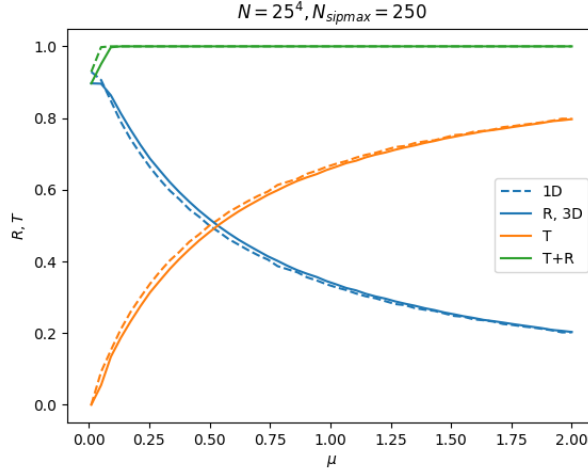
3.2 3D Izotropen model

Žarek še vedno prileti pravokotno na ploščo. V izotropnem modelu ima nevtron pri vsakem sipanju prosto pot s_i in naključno smer leta po prostoru $\Theta_i = \arccos(2\xi_2 - 1)$, $\xi_2 \sim U(0,1)$, $\varphi_i = 2\pi\xi_1$, $\xi_1 \sim U(0,1)$. Porazdelitev sipanj za različne proste poti prikazuje slika 11.



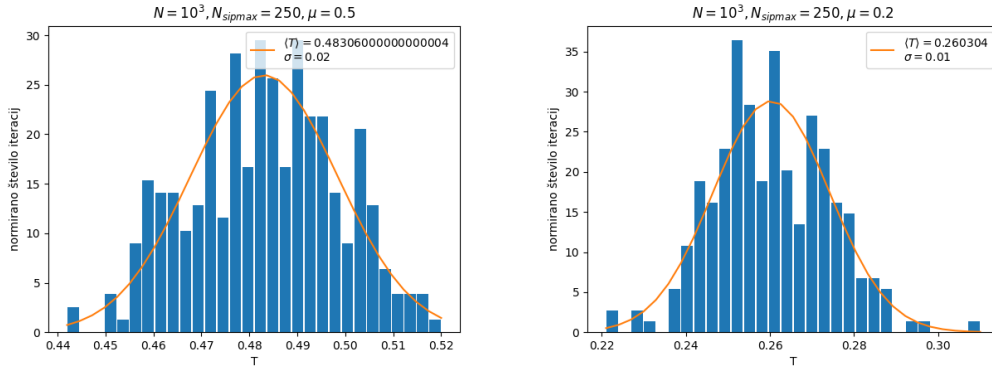
Slika 11: Histogrami porazdelitev nevtronov po številu sipanj za tri različne vrednosti povprečne proste poti.

Zaradi izotropnosti je v povprečju več sipanj kot v 1D primeru, saj imamo na voljo še 2 dodatni prostostni stopnji, kamor se lahko nevtron premakne. Prepustnost in odbojnost v odvisnosti od povprečne proste poti (slika 12) je v 3D primeru malo zamaknjena v smeri večjih μ . To je zaradi dodanih 2 prostostnih stopenj. Povprečna prosta pot mora biti malo večja, da je dogodek enako verjeten kot v 1D primeru. Vidim lahko, da so rezultati iz 1D približka tudi uporabni, saj so odstopanja majhna. Ocene napak prepustnosti sem dobil podobno kot v 1D modelu (slika 13).



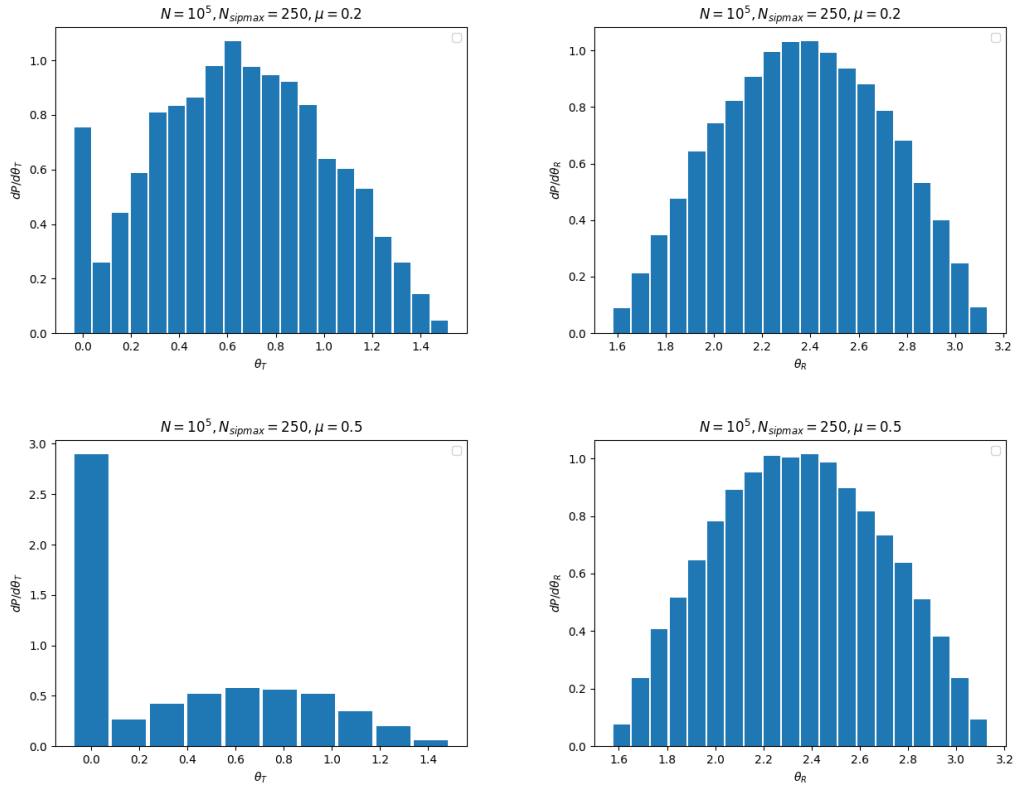
(a)

Slika 12: Prepustnost in odbojnost kot funkcija povprečne proste poti. Črtkana črta predstavlja 1D model.



Slika 13: Določanje napake prepustnosti pri dveh različnih povprečnih prostih poteh.

Zanimivo je tudi pogledati kotno porazdelitev odbitih in prepuščenih nevtronov (slika 14). To sem naredil za 2 vrednosti povprečne proste poti ($\mu = 0.2, \mu = 0.5$). Ker imamo rotacijsko simetrijo okrog osi pravokotno na ploščo sta zanimiva samo prepuščeni kot $\Theta_T \in [0, \pi/2]$ in odbiti kot $\Theta_R \in [\pi/2, \pi]$. Porazdelitev po kotu Θ_R ni veliko odvisna od proste poti. Porazdelitev po kotu Θ_T pa se zelo spreminja s povprečno prosto potjo. Ob povprečni prosti poti, ki je polovica debeline, velik delež nevtronov preleti plast brez sipanja in posledično je $\Theta_T = 0$. Ko se prosta pot manjša se nevtroni v povprečju več sipljejo in histogram gre proti podobni porazdelitvi kot $\frac{dP}{d\Theta_R}$.



Slika 14: Porazdelitev odbitih in prepuščenih nevtronov po odbitem ϑ_R in prepuščenem θ_T kotu za dve vrednosti povprečne proste poti.

4 Zaključek

Z metodo Monte Carlo lahko rešimo množico zanimivih problemov. Določili smo maso in vztrajnostni moment telesa, statistiko gama žarkov in nevtronov v nevtronskem reflektorju. Pri nevtronskem reflektorju bi bilo zanimivo pogledati tudi statistiko v primeru ko pade nevtron na ploščo pod določenim kotom. V primeru bolj resne uporabe metode Monte Carlo je priporočljivo uporabiti hitrejšje programske jezike.