

7. naloga - Integracije z metodo Monte Carlo

Tina Klobas

28. november 2019

1 Opis problema

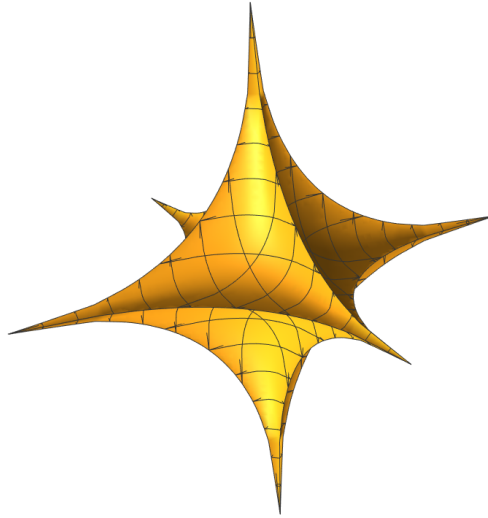
Metoda Monte Carlo sloni na vzorčenju naključnih dogodkov s čimer potem dobimo dober numerični približek za izbrano količino. Za različne probleme je potek metode enak: najprej omejimo območje možnih vnosov, naključno izberemo elemente iz omejene domene, ki sledijo določeni verjetnostni porazdelitvi, obdelamo podatke in pogledamo ugodne in neugodne izide. V tej nalogi se ukvarjamo predvsem z numeričnim integriranjem, za kar uporabimo približek

$$\theta = \int_{\Omega} g(x)f(x) \, dV = V\hat{\theta} \pm V \frac{\sigma_{\hat{\theta}}}{\sqrt{N}} \quad (1)$$

kjer je V volumen območja Ω in $\sigma_{\hat{\theta}}^2 = \hat{\theta}^2 - \hat{\theta}^2$. Velja

$$\hat{\theta} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N g(x_i), \quad \hat{\theta}^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N g^2(x_i) \quad (2)$$

kjer so naključna števila x_i z območja Ω porazdeljena po verjetnostni gostoti $f(x)$.



Slika 2.1: Slika telesa, ki ga omejuje podana ploskev.

2 Omejeno telo

Telo omejimo s ploskvijo

$$\sqrt{|x|} + \sqrt{|y|} + \sqrt{|z|} = 1 \quad (3)$$

in določimo njegov vztrajnostni moment ter maso v dveh primerih:

- če je gostota $\rho = \rho_0$,
- če je gostota $\rho = r^p$, kjer je r razdalja od središča telesa, p pa poljuben parameter.

2.1 Računanje volumna

Volumen izračunamo z integralom po območju volumnu V' Ω , ki predstavlja kar volumen telesu očrtane kocke

$$V = \int_{\Omega} h(x, y, z) dV' \approx V' \hat{V} \pm V' \frac{\sigma_{\hat{V}}}{\sqrt{N}} \quad (4)$$

kjer je h funkcija kombinacij naključnih števil x_i, y_i, z_i iz kocke $\Omega = [-1, 1] \times [-1, 1] \times [-1, 1]$ ali pa iz krogle z radijem $R = 1$:

$$h(x, y, z) = \begin{cases} 1; & \text{če } x^2 + y^2 \leq 1, y^2 + z^2 \leq 1 \text{ in } z^2 + x^2 \leq 1, \\ 0; & \text{sicer,} \end{cases} \quad (5)$$

s čimer lahko nadalje poenostavimo

$$\hat{V} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N h(x_i, y_i, z_i) = \frac{n}{N}, \quad (6)$$

$$\hat{V}^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N h^2(x_i, y_i, z_i) = \frac{n}{N}, \quad (7)$$

kjer je n število vseh ugodnih kombinacij. Iz tega lahko izračunamo še varianco $\sigma_{\hat{V}}$:

$$\sigma_{\hat{V}}^2 = \hat{V}^2 - \hat{V}^2 = \frac{n(N-n)}{N^2} \quad (8)$$

in končno lahko za prostornino 4 zapišemo približek:

$$V = V' \hat{V} \pm V' \frac{\sigma_{\hat{V}}}{\sqrt{N}} = V' \frac{n}{N} \left(1 \pm \sqrt{\frac{1}{n} - \frac{1}{N}} \right). \quad (9)$$

($V' = 8$ za kocko in $V' = \pi$ za kroglo.)

2.2 Računanje vztrajnostnih momentov

Tenzor vztrajnostnega momenta zapišemo kot

$$J = \iiint_{\Omega} \rho(\mathbf{r}) (r^2 \mathbb{1} - \mathbf{r} \otimes \mathbf{r}) \, dV. \quad (10)$$

Diagonalne komponente v našem primeru so zaradi simetričnosti telesa enake

$$J_{xx} = J_{yy} = J_{zz} = \int \rho(y^2 + z^2) \, dV, \quad (11)$$

za izvendiagonalne komponente pa velja $J_{ij} = J_{ji}$ kjer je npr.

$$J_{xy} = - \int \rho(-xy) \, dV. \quad (12)$$

Po enačbi 2 lahko potem zapišemo

$$J_{xx} = \frac{V'}{N} \sum_{i=1}^N (y_i^2 + z_i^2) \rho(\mathbf{r}) h(x_i, y_i, z_i) \quad (13)$$

in analogno za ostale integrale.

2.2.1 Izbira koordinat

Komponente x_i, y_i, z_i izžrebamo enakomerno z intervala $[-1, 1]$:

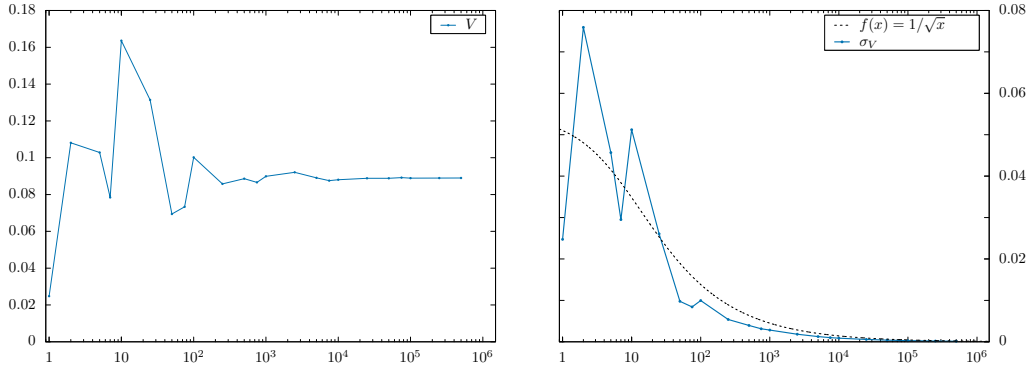
$$\begin{aligned} x &\sim u(-1, 1), \\ y &\sim v(-1, 1), \\ z &\sim w(-1, 1). \end{aligned} \quad (14)$$

Če želimo uporabiti sferične koordinate, moramo upoštevati pretvorbo spremenljivk - velja:

$$\frac{dP}{dV} = \frac{d^3P}{d\varphi d(\cos \vartheta) r^2 dr} = \frac{1}{4\pi r^2}, \quad (15)$$

oziroma po posameznih spremenljivkah

$$\begin{aligned} \frac{dP}{d\varphi} &= \frac{1}{2\pi}, \\ \frac{dP}{d(\cos \vartheta)} &= \frac{1}{2}, \\ \frac{dP}{dr} &= \frac{dP}{dm} \frac{dm}{dr} = \frac{\rho(r) 4\pi r^2}{M}. \end{aligned} \quad (16)$$



Slika 2.2: Spreminjanje prostornine in njene napake s številom točk N .

Če upoštevamo še enakomerno porazdelitev $dP/du_i = 1$ dobimo recept za izbor enakomerne porazdelitve v sferičnih koordinatah:

$$\begin{aligned}\varphi &\sim 2\pi u_1, \\ \vartheta &\sim \arccos(2u_2 - 1), \\ r &\sim \sqrt[3+p]{u_3}.\end{aligned}\tag{17}$$

kjer so u_1, u_2, u_3 enakomerno izbrane z intervala $(0, 1)$. V tem primeru moramo paziti saj integriramo po volumnu krogle ($V' = 4\pi$).

2.3 Rezultati

2.3.1 Volumen

Volumen telesa izračunan z $n = 10^5$ točkami:

$$V = 0,0891 \pm 0,0003.$$

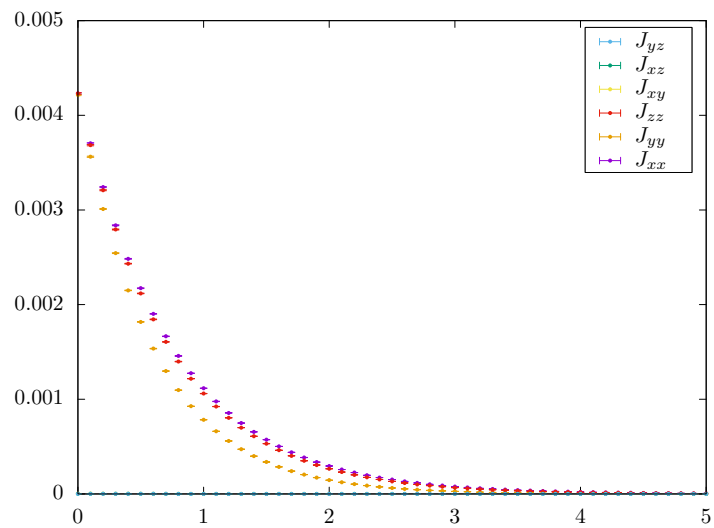
Da je 10^5 točk dovolj lahko razberemo tudi z grafa 2.2, kjer vidimo, da se rezultat že okoli tisoč točk ustali; njegova relativna napaka je takrat reda 10^{-2} pri deset tisoč točkah pa samo še 10^{-3} . Narisana je še krivulja $f(N) = 1/\sqrt{N}$, ki se ji točke (razen začetnih nekaj) zelo lepo prilagajajo.

2.3.2 Vztrajnostni moment

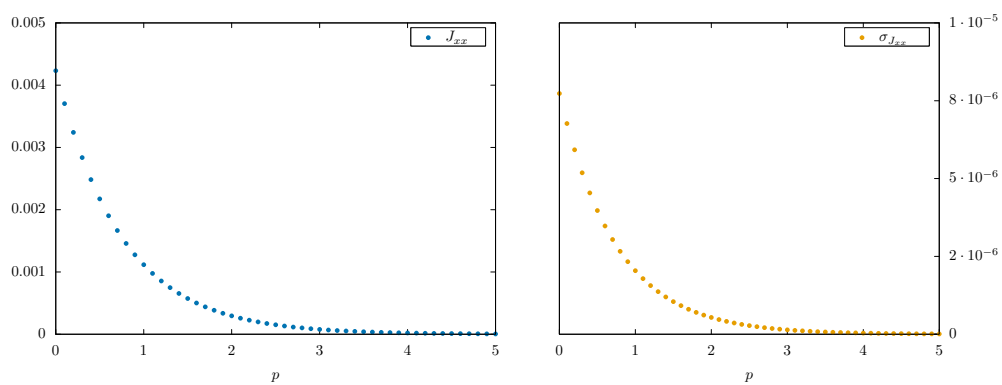
Za izračun tenzorja vztrajnostnega momenta

$$J = \begin{bmatrix} J_{xx} & J_{xy} & J_{xz} \\ J_{xy} & J_{yy} & J_{yz} \\ J_{xz} & J_{yz} & J_{zz} \end{bmatrix}\tag{18}$$

izračunamo njegove diagonalne in izvedialne komponente, skupno torej šest integralov. Na grafu 2.3 vidimo, da diagonalne komponente vztrajnostnega momenta padajo po predvideni funkciji $a^{1/p}$ z naraščanjem parametra p . Izvedialne so ves čas približno enake nič. Poleg tega so, tako kot smo predvideli že zaradi simetričnega telesa, diagonalne in izvedialne komponente, med sabo bolj ali manj enake, razlika ki se med njimi pojavi je računske narave, ki bi se je znebili z večkratnimi izračuni.



Slika 2.3: Spreminjanje komponent J s parametrom p .



Slika 2.4: Spreminjanje J_{xx} in njegove napake s parametrom p .

2.3.3 Višji momenti

Izračunamo lahko še na primer povprečje sfernih harmonikov in lego težišča telesa. Slednjega izračunamo po enačbi:

$$r_t = \frac{1}{M} \int_{\Omega} r \rho dV \quad (19)$$

kjer je masa M :

$$M = \int_{\Omega} \rho(r) dV. \quad (20)$$

Da lahko nekaj povemo o sfernih harmonikih izračunamo njihovo povprečje po površini:

$$\langle Y_l^m \rangle = \frac{1}{S'} \int_{\partial\Omega} Y_l^m(x, y, z) dS. \quad (21)$$

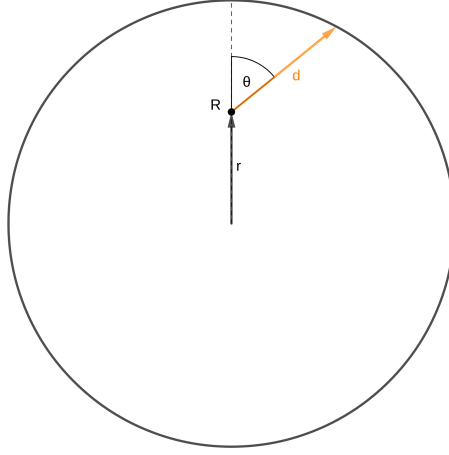
Prvih nekaj funkcij:

$$\begin{aligned} Y_0^0 &= \sqrt{\frac{1}{4\pi}}, & Y_1^0 &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \vartheta, & Y_1^1 &= -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{i\varphi} \cos \vartheta, \\ Y_2^0 &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \vartheta - 1), & Y_2^1 &= -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} e^{i\varphi} \sin \vartheta \cos \vartheta, & Y_2^2 &= \sqrt{\frac{15}{8\pi}} e^{2i\varphi} \sin^2 \vartheta. \end{aligned}$$

Za vse harmonike in koordinate težišča pričakujemo, da bojo enake 0 zaradi simetričnosti telesa. V spodnji tabeli so izračunane vrednosti za $n = 10^5$ točk.

	$x_t \cdot 10^{-5}$	$y_t \cdot 10^{-5}$	$z_t \cdot 10^{-5}$	$Y_1^0 10^{-4}$	$Y_1^1 10^{-4}$	$Y_2^0 10^{-4}$	$Y_2^1 10^{-4}$	$Y_2^2 10^{-4}$
$p = 0$	-3.03	-4.75	-2.84	1.3	-0.18	-4.2	-0.88	-1.3
$p = 4$	-0.42	0.22	-0.06	-0.31	0.0021	0.59	-0.019	-0.18

Z naraščanjem p tudi vrednosti višjih momentov padajo in se precej dobro ujemajo s pričakovanim rezultatom.



Slika 3.1: Pobeg žarka gama iz sfere z radijem R .

3 Žarki gama

V krogli se rojevajo žarki gama, njihova prosta pot v snovi, iz katere je krogla, je enaka radiju krogle (R). Zanima nas kolikšen delež fotonov uide iz krogle in kako se verjetnost tega pobega spreminja, če spreminjamo razmerje med prosto potjo in radijem krogle.

Zopet gremo v sferične koordinate in s parametrom r označimo trenutno lokacijo žarka gama, s θ pa kot med vektorjem poti in osjo z . Dolžina d predstavlja pot, ki jo bo moral foton prepotovati, da bo ušel iz krogle. Primer pobega žarka je prikazan na sliki 3.1. Pri reševanju bomo naključno žrebali dolžine poti d (oziroma njihovo lokacijo in smer v krogli), ki jo žarek mora prepotovati, da uide iz krogle, kar preko kosinusnega izreka zapišemo kot:

$$d = -r \cos \theta + \sqrt{R^2 - r^2 \sin^2 \theta} \quad (22)$$

kjer r in θ generiramo na že znan način:

$$r = \sqrt[3]{u}, \quad (23)$$

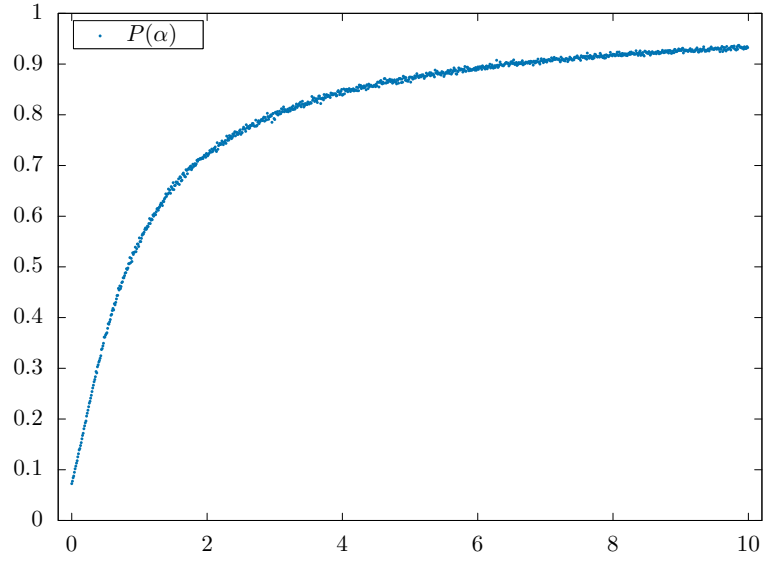
$$\theta = \arccos(2v - 1), \quad (24)$$

kjer sta u, v uniformno porazdeljena na intervalu $[0, R]$ oziroma $[0, 1]$. Porazdelitev poti žarkov po poti, ki jo pa žarek dejansko prepotuje preden se sipa je podana s funkcijo:

$$\frac{dP}{ds} = f(s) = \frac{1}{\mu} e^{-s/\mu} \quad (25)$$

kjer je parameter μ absorpcijska dolžina. To lahko obrnemo, da dobimo ven enačbo po kateri moramo generirati dolžino poti:

$$\frac{dP}{dt} = \frac{dP}{ds} \frac{ds}{dt} = \frac{1}{\mu} e^{-s/\mu} \frac{ds}{dt} = 1 \quad (26)$$



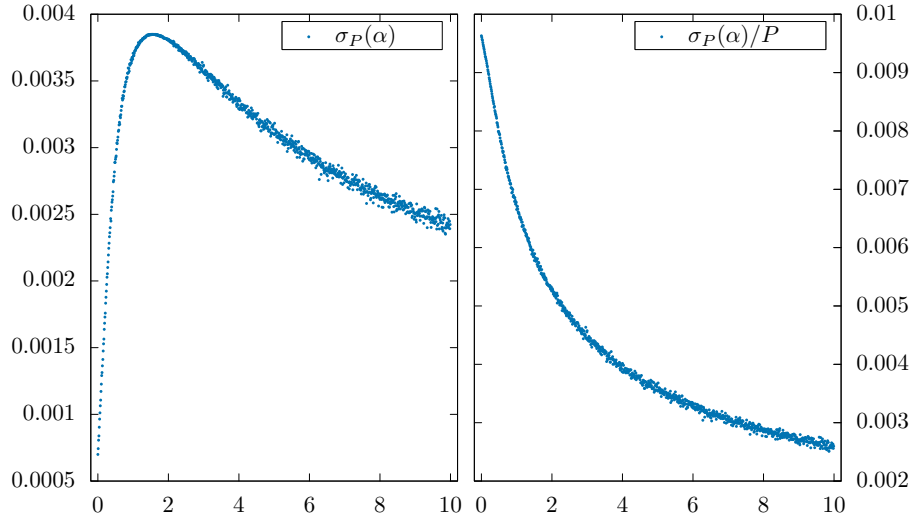
Slika 3.2: Spreminjanje verjetnosti za pobeg z večanjem razmerja μ/R .

kar pointegriramo in dobimo

$$t = 1 - e^{-s/\mu} \rightarrow s = -\ln(1 - t) \quad (27)$$

kjer je t enakomerno izžrebana z intervala $[0, 1]$.

Pri računanju zdaj na vsakem koraku generiramo pot d , preverimo, če je manjša od s (če bo žarek ušel iz krogle preden se bo sipal) in preštejemo vse žarke, ki so ustrezali temu pogoju. Iz takega računanja bomo ven dobili verjetnost za pobeg v odvisnosti od razmerja med $\alpha = R/\mu$. Za to razmerje lahko že iz zapisa vidimo, da ko bo radij veliko večji od proste poti šlo proti nič in obratno za veliko manjše radij šlo razmerje proti ena. To lahko potrdimo tudi z grafom 3.2. Na grafu 3.3 zraven tudi vidimo, kako se spreminja varianca z naraščanjem razmerja α in medtem ko zglada, da ima absolutna napaka nek maksimum, relativna napaka ves čas korensko pada.



Slika 3.3: Spreminjanje absolutne oziroma relativne napake verjetnosti za pobeg.

4 Prepustna plošča

Tok nevtronov vpada pravokotno na ploščo v kateri se nevtroni sipajo, njihova povprečna dolžina μ pa je enaka polovici razdalje med ploščama d . Primer poteka potovanja enega žarka skozi tako ploščo je prikazan na sliki 4.1. Omejimo se na različna primera:

- nevtron se lahko sipa le naprej/nazaj (enodimenzionalen problem),
- nevtron se lahko sipa poljubno v vse smeri.

Zanima nas odbojnost oziroma prepustnost take plošče in kolikokrat se žarek siplje na taki poti.

1D

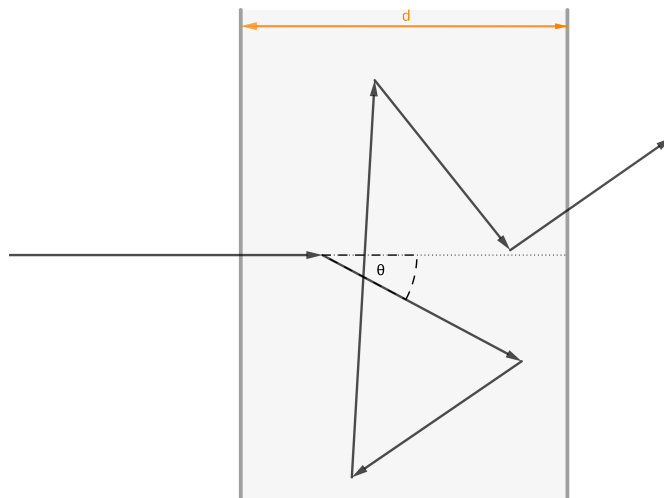
Enako kot pri prejšnji nalogi imamo generator poti s , ki ga delec opravi preden se siplje

$$s = -\ln(1 - t), \quad (28)$$

kjer je t enakomerno izžrebana z intervala $[0, 1]$. Žarku sledimo ob vsakem sipanju in njegovo celotno pot izračunamo na slednji način:

$$x_{i+1} = x_i \pm s_i. \quad (29)$$

Ali bo $+$ ali $-$ določimo z naključnim celim številom n : $\pm = 2(n\%2) - 1$. Za vsake žarek si shranjujemo koliko trkov je preстал v plošči in ali je šel ven skozi isto ploščo kot je prišel noter ali na nasprotni strani, iz česar bomo izračunali prepustnost in odbojnost.



Slika 4.1: Pot žarka nevtronov skozi ploščo debeline d .

3D

Zdaj moramo spet preiti na sferične koordinate, ki jih generiramo na že večkrat uporabljen način (namesto r zdaj vzamemo s):

$$\phi = 2\pi u, \quad (30)$$

$$\theta = \arccos(2v - 1), \quad (31)$$

$$s = -\ln(1 - t). \quad (32)$$

Podobno opazujemo posamezen žarek:

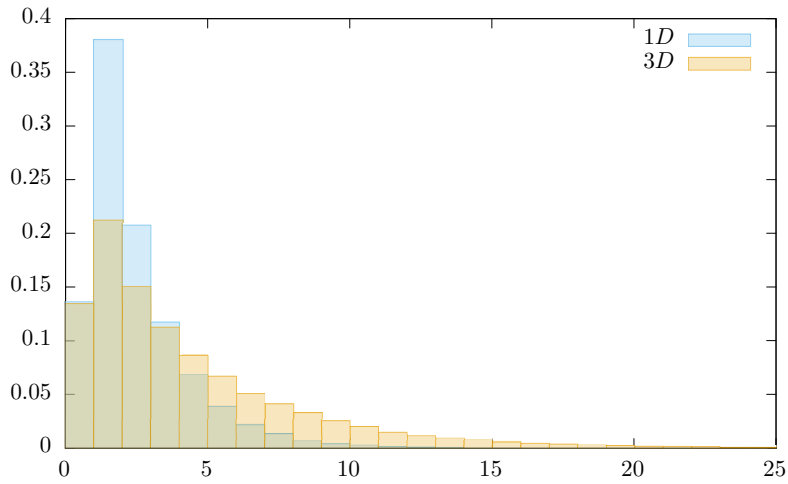
$$x_{i+1} = x_i + s_i \sin \theta_i \cos \phi_i. \quad (33)$$

4.1 Rezultati

Dobljena prepustnost in odbojnost sta predstavljena v naslednji tabeli:

	T	R
1D	$0,494302 \pm 10^{-6}$	$0,505698 \pm 10^{-6}$
3D	$0,482966 \pm 10^{-6}$	$0,517034 \pm 10^{-6}$

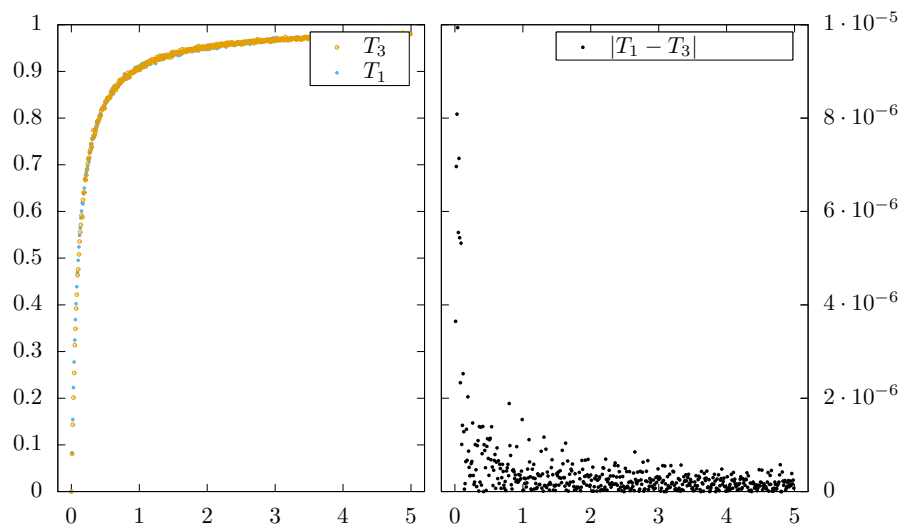
Vidimo, da sta rezultata precej podobna, razlika pa verjetno izhaja iz preveč poenostavljenega problema v eni dimenziji. Na grafu 4.2 lahko tudi vidimo, da je pri obeh procesih število trkov enako porazdeljeno. Nazadnje si lahko še pogledamo, kako se prepustnost žarkov spreminja z debelino stene (tako kot v prejšnji nalogi spreminjamo razmerje $\alpha = \mu/d$). Z grafa 4.3 lahko vidimo, da ta odvisnost eksponentno raste, razlika med različnima metodama izračuna pa je zanemarljivo majhna. Na histogramu 4.4 vidimo kako z večanjem razmerja α , se pravi z manjšanjem debeline plošče, števila trkov za posamezen žarek dobiva bolj izrazit maksimum pri dveh/treh trkih in jih



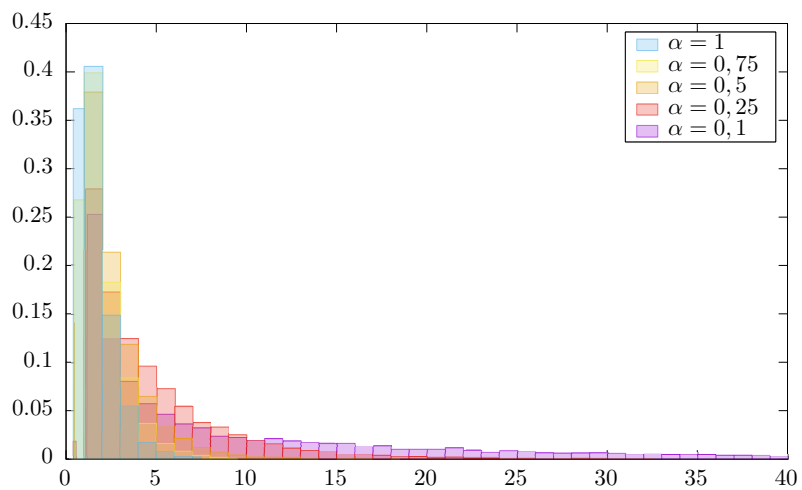
Slika 4.2: Porazdelitev po številu sipanj za oba primera.

veliko več preleti ploščo, ne da bi se sipali, kar tudi pojasni obliko grafa 4.3.

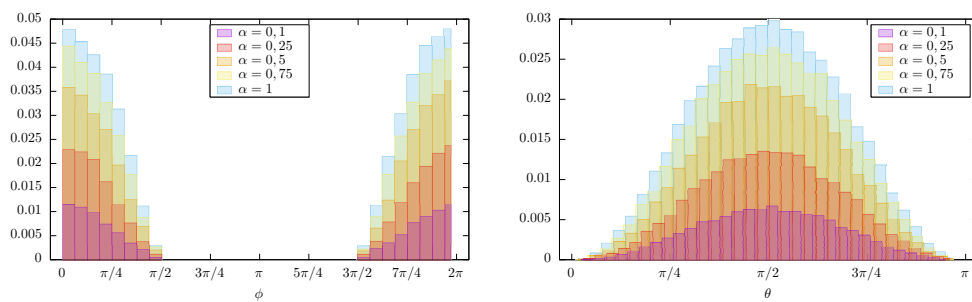
Na grafu 4.5 sta prikazani porazdelitvi prepuščenih žarkov po kotu ϕ in po kotu θ . Porazdelitev po θ odbitih oziroma prepuščenih žarkov se nič ne spremeni s tem, ko smo v sistem dodali ploščo. Spremembo vidimo pri porazdelitvi po kotu ϕ kjer nam pri odbitih in prepuščenih kotih *zmanjka* območje pri $\phi = \pi/2$ oziroma $\phi = 3\pi/2$, se pravi ravno v smeri, ko imamo neskončno dolgo ploščo. Spet lahko vidimo, kar smo že prej opazili, da z večanjem parametra α povečujemo število prepuščenih in zmanjšujemo število odbitih nevtronov.



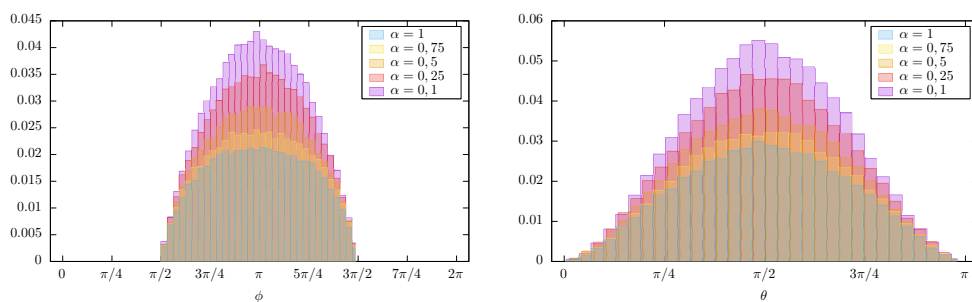
Slika 4.3: Spreminjanje prepustnosti in njene napake z večanjem parametra α .



Slika 4.4: Porazdelitev števil sipanj za različna razmerja α z enodimenzionalnim približkom.



Slika 4.5: Kotna porazdelitev prepuščenih žarkov.



Slika 4.6: Kotna porazdelitev odbitih žarkov.