

Rozhledy matematicko-fyzikální

Jan Frýbort

Monte Carlo není jenom hazard

Rozhledy matematicko-fyzikální, Vol. 86 (2011), No. 3, 4–12

Persistent URL: <http://dml.cz/dmlcz/146427>

Terms of use:

© Jednota českých matematiků a fyziků, 2011

Institute of Mathematics of the Czech Academy of Sciences provides access to digitized documents strictly for personal use. Each copy of any part of this document must contain these *Terms of use*.



This document has been digitized, optimized for electronic delivery and stamped with digital signature within the project *DML-CZ: The Czech Digital Mathematics Library* <http://dml.cz>

Monte Carlo není jenom hazard

Jan Frýbort, FJFI ČVUT, Praha

Abstract. Monte Carlo method represents a useful tool for modelling of physical processes. It relies on direct probability simulation of individual events. If the number of repetitions of the experiment is sufficiently large (based on the properties of the process being analysed and on the dimensions of the system), the demanded value and its confidence interval can be determined by means of statistics. A reliable supply of random numbers and the knowledge of probability of individual processes are necessary conditions for successful application of Monte Carlo method.

Úvod

Každého již někdy dělilo od vítězství několik hodů kostkou. Někdy je ovšem potřeba k úspěchu několika milionů hodů. Vítejte ve světě Monte Carlo výpočtů!

Metoda Monte Carlo (MC) byla zformulována již ve 40. letech 20. století během výzkumu chování neutronů. Samotná myšlenka je, podobně jako u všech geniálních nápadů, obdivuhodně jednoduchá. Pokud známe zákonitosti dějů mezi částicemi, pak můžeme jejich chování přímo simulovat. Pokud to zopakujeme opravdu mnohokrát, tak můžeme statisticky odvodit výsledky. K aplikaci na částice se ještě vrátíme, podívejme se zatím na některé základy metody MC.

Metoda Monte Carlo využívá pseudonáhodná čísla – čísla tvořící náhodnou posloupnost, s jejichž pomocí lze vytvořit algoritmy, které umožní pomocí simulací vyřešit problémy, u kterých nejsou jiné metody efektivní. Metodu MC lze aplikovat na řešení určitých integrálů, diferenciálních rovnic a simulaci experimentů. Pokud chceme stanovit střední hodnotu zvolené veličiny, provedeme dostatečné množství simulací a statistickými metodami zjistíme hodnotu veličiny včetně její směrodatné odchylky. Směrodatná odchylka je naprosto nezbytná ve všech simulacích MC, protože určuje, v jak širokém rozmezí hodnot leží hledaná veličina.

Základem je kruh

Základní ilustrací je určení Ludolfova čísla π . Představme si kružnici vepsanou do čtverce. Jednoduchou úvahou dostaneme, že π se musí rov-

nat čtvrtině poměru obsahu čtverce k obsahu kruhu. Tento poměr pak zjistíme přímou simulací, kdy budeme náhodně umísťovat body do daného obrazce a určovat, zda leží uvnitř, či vně kružnice.

Monte Carlo může být uplatněno v kterékoliv oblasti, kde lze řešený problém převést na simulaci náhodných dějů. Přesnost metody závisí na množství náhodných pokusů a také na kvalitě použitých náhodných čísel. Chyba výsledku závisí na převrácené hodnotě odmocniny počtu pokusů. Pokud tedy chceme zvýšit přesnost simulace o řád, musíme zvýšit počet historií (neboli pokusů) o dva řády; to je jedna ze slabín této metody. Metoda MC je také velmi závislá na dostupnosti posloupnosti náhodných čísel; protože celý postup závisí na náhodné simulaci, nesmí existovat žádná vazba mezi jednotlivými čísly.

Zopakujme si, že *střední hodnota* dané veličiny se počítá podle vztahu

$$\bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N x_k$$

a *směrodatná odchylka* se počítá podle vztahu

$$s_x = \frac{1}{\sqrt{(N-1)}} \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{k=1}^N x_k^2 - \bar{x}^2} \approx \frac{1}{\sqrt{N}} \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{k=1}^N x_k^2 - \bar{x}^2},$$

kde N je celkový počet historií (pokusů) a x_k je hodnota veličiny v aktuální historii (v aktuálním pokusu).

Jak se hraje ruleta s částicemi

Myšlenka na náhodné simulování fyzikálních dějů se jistě v minulosti objevila mnohokrát, ale nebylo ji možné realizovat. Například Enrico Fermi se touto možností zabýval již ve 30. letech 20. století. Pokud se ovšem princip takové metody rozpracuje, je zřejmé, že pro věrohodné výsledky je potřeba ohromné množství historií a to nelze docílit bez výpočetní techniky. Proto se rozvoj Monte Carlo metody shoduje se zaváděním prvních počítačů. Byl to Stanislav Ulam, který jako první upozoroval potenciál, který v sobě skrýval počítač ENIAC, a navrhl Johnu von Neumannovi, aby rozpracovali metodu, která brzy dostala jméno Monte Carlo [1]. Název byl původně prozatímní a měl souvislost s náhodností metody a také snad s oblíbeným rčením jednoho z Ulamových

strýců, které pronášel, když si od příbuzných půjčoval peníze. Jak to ovšem obvykle chodí s provizorními řešeními, nakonec se ukáží jako ta nejtálejší.

První uplatnění tak metoda MC dostala při vývoji jaderných zbraní. V rámci prací na termonukleární bombě bylo nezbytné analyzovat chování neutronů při průchodu různými materiály. Přestože byly všechny interakce neutronů dobře popsány, nedala se úloha řešit analyticky. Byla to ovšem přesně vhodná situace pro statistické modelování. Při znalosti složení materiálů, pravděpodobnosti interakcí neutronů s atomy různých materiálů, výsledků daných interakcí a energií vznikajících neutronů bylo možné celý děj modelovat. Stačilo prostě do virtuálního systému pustit imaginární neutron, náhodně zjistit, kde se srazí, náhodně stanovit, zda bude pohlcen, nebo způsobí jadernou reakci, náhodně určit, jaké budou produkty případné reakce, náhodně rozhodnout, zda bude neutron po dané interakci stále existovat a jaká bude jeho energie, a konečně náhodně stanovit, že pokud dojde ke štěpení, kolik dalších neutronů vznikne, jaké budou jejich energie a kam se dále vydají. Zní to jako hodně náhod, ale to je celý princip MC metody – převést fyzikální či matematický problém na posloupnost náhodných dějů a ty pak statisticky vyhodnotit. A protože té náhody musí být opravdu hodně, musí být také dostupné velké množství náhodných čísel. To představuje větší problém, než by se mohlo zdát.

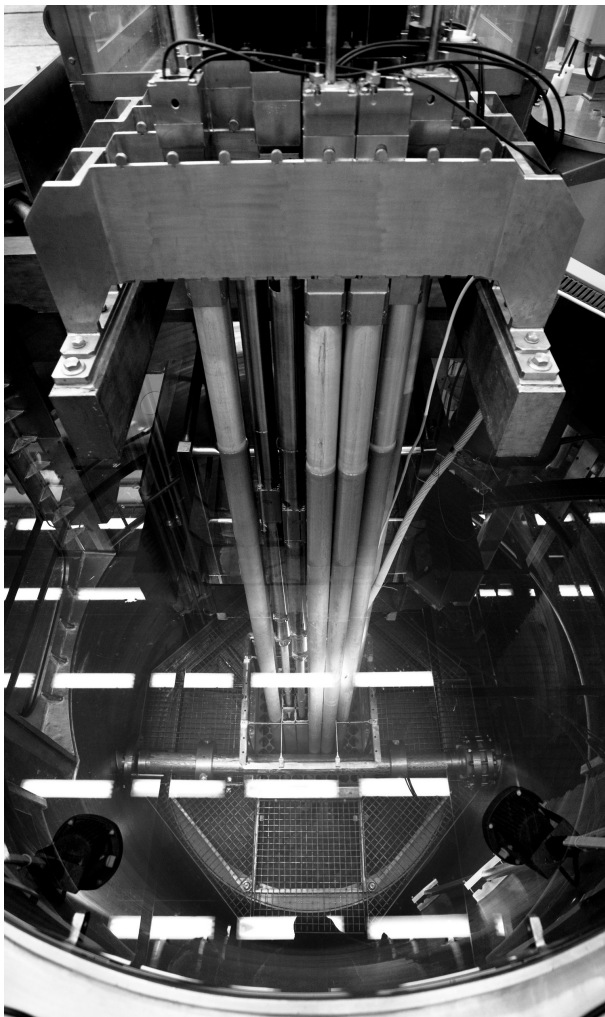
Náhody není nikdy dost

V samotných počátcích metody MC se používaly tabulky náhodných čísel, ty ovšem přestaly brzy stačit. Spotřeba náhodných čísel při výpočtech se stále zvyšovala, jak rostl výkon počítačů a požadavky na přesnost produkovaných výsledků. Skutečná náhodná čísla jsou výsledkem některých fyzikálních dějů. Nejčastěji se uvažuje radioaktivní rozpad, který má čistě statistický charakter. Fyzikální generátor náhodných čísel je ovšem v uvedeném případě závislý na detektoru, který může být ovlivněn okolím, a další slabinou je nemožnost vytvořenou sekvenci náhodných čísel opakovat. Proto se pracuje s pseudonáhodnými čísly. Hlavním znakem generátorů pseudonáhodných čísel je, že se jedná o matematický algoritmus, který produkuje čísla bez vzájemné korelace, ale vždy jen omezené množství a navíc lze vygenerovanou posloupnost zopakovat. Takový generátor má svou periodu, po které se začnou náhodná čísla opakovat. Pokud tedy náš výpočet vystačí s množstvím čísel v délce periody generátoru, tak se jedná o výpočet s náhodnými čísly [2].

Brzy po svém objevení si metoda Monte Carlo získala zaslouženou pozornost. Představovala elegantní cestu pro řešení problémů, které nebylo možné řešit analyticky. Její použití bylo ovšem vždy limitováno výpočetním výkonem. Proto teprve dnes, při řádově vyšším výkonu moderních procesů a možnosti jejich paralelizace představuje Monte Carlo možnost řešení i velmi komplexních úloh. Takovou úlohou může být jaderný reaktor. Sice je dnes možné v relativně krátkém čase získat výsledky i pro velký energetický reaktor, ale stále se nejedná o natolik pohodovou metodu, která by v rychlosti předčila speciálně připravené deterministické algoritmy. Na nasazení v pozici rychlého provozního analytického prostředku si musí metoda MC ještě počkat. Má ovšem své uplatnění v analýzách, pro které není rychlost provedení kritická. Pak se mohou plně rozvinout přednosti metody MC, které spočívají v možnosti modelovat daný systém do nejmenších podrobností a v naprosté nezávislosti na geometrii či materiálovém složení analyzovaného prostředí. Jako taková je metoda MC ideální pro výpočty Školního reaktoru VR-1 [3], kde dochází v rámci výuky k pravidelným změnám ve složení aktivní zóny (obr. 1, 2).



Obr. 1: Pracoviště Školního reaktoru VR-1



Obr. 2: Pohled do aktivní zóny reaktoru

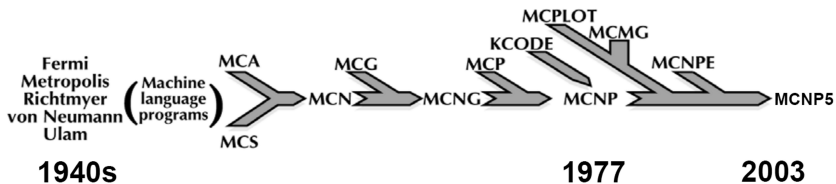
S počítačem do Monte Carla

Jistě je zřejmé, že v dnešní době již existuje množství programů integrujících metodu Monte Carlo, a usnadňujících tak tvorbu výpočetních vstupů. Obstarávají také náročné statistické vyhodnocení simulací jed-

notlivých historií. Není tak již nutné vytvářet vlastní program pro využití metody MC. Uživatel dnes píše vstupní soubor, kde pomocí prvků, kterým daný program rozumí, popíše všechny parametry počítané úlohy. V drtivé většině si to ovšem nezadá s programováním, protože takový vstup je čistě textový a plný více či méně kryptických značek, kterým rozumí jen počítač a omezený počet uživatelů. Přesto se jedná o ohromný pokrok od prvních nasazení metody Monte Carlo.

Pro aplikace v jaderné fyzice lze v současnosti vybírat například z následujících programů: KENO, MONK, Serpent, TRIPOLI, VESTA a MCNP. Posledně jmenovaný představuje prakticky standard v Monte Carlo výpočtech pro výpočty jaderných reaktorů, transportu částic materiálem a stínění záření. Je také používán na Katedře jaderných reaktorů (KJR).

MCNP (General Monte Carlo N-Particle Transport Code) je v současnosti ve verzi 5. Je vyvíjen v americké národní laboratoři v Los Alamos. Kořeny MCNP spočívají již v prvních pracích von Neumannova týmu. První výpočetní kód s názvem MCNP byl uvolněn v roce 1977. Verze MCNP5 byla připravena v roce 2003. Od té doby prochází dalším vývojem a během příštího roku se očekává příchod MCNP6 (obr. 3).

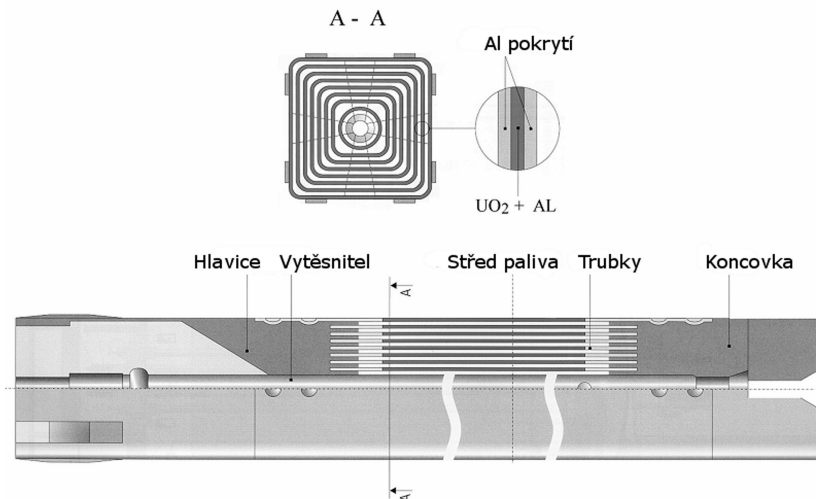


Obr. 3: Historie a návaznost Monte Carlo kódů směřující k MCNP5 [4]

MCNP umožňuje modelovat libovolnou trojrozměrnou geometrii, určit kritičnost systému (zatím se toho termínu nelekejte, bude vysvětlen později), počítat odezvy detektorů záření a poskytuje také další druhy výstupů. MCNP přímo využívá poslední dostupné knihovny jaderných dat pocházejících z USA (ENDF/B), Evropy (JEFF), Japonska (JENDL), Ruska (ROSFOND) nebo Číny (CENDL), případně další specifické databáze. Kvalitní a ověřená databáze jaderných dat je naprosto nezbytná pro korektní simulaci MC, protože určuje pravděpodobnost, že dojde k interakci mezi neutrony a prostředím a jaké budou výsledky této reakce.

Výpočet Školního reaktoru VR-1

MCNP využíváme při pravidelných změnách aktivní zóny reaktoru, které probíhají v rámci výuky studentů. MCNP umožňuje simulovat všechny komponenty reaktoru do nejmenších detailů. To je nezbytné právě pro palivo IRT-4M (obr. 4) používané v reaktoru VR-1, protože se skládá z tenkých palivových vrstev a zakřivených ploch. Představuje tak těžký oříšek pro libovolný deterministický kód.



Obr. 4: Vertikální a horizontální průřez palivem IRT-4M

Připravit model reaktoru VR-1 není jednoduchý úkol. Od první verze vytvořené v roce 1998 se neustále vyvíjí. Jsou přidávány další detaily, aby bylo dosaženo maximální shody mezi výpočtem a měřením. Základním parametrem každého reaktoru je velikost koeficientu násobení. Ten určuje, jak se mění počet neutronů v systému. Doba, která uplyne od vzniku neutronu během štěpení až do jeho pohlcení, se nazývá generace a trvá obvykle 10^{-5} – 10^{-4} s. Poměr mezi počtem neutronů v jedné generaci a generaci předcházející se nazývá koeficient násobení. Pokud se koeficient násobení rovná 1, pak se reaktor nachází v kritickém stavu. Navzdory názvu to ovšem není nic špatného. Jen trochu nezvyklé označení pro ideální stav reaktoru, ve kterém se štěpná řetězová reakce udržuje sama bez potřeby vnějších zdrojů. Energetické jaderné reaktory se nacházejí po většinu roku právě v kritickém stavu.

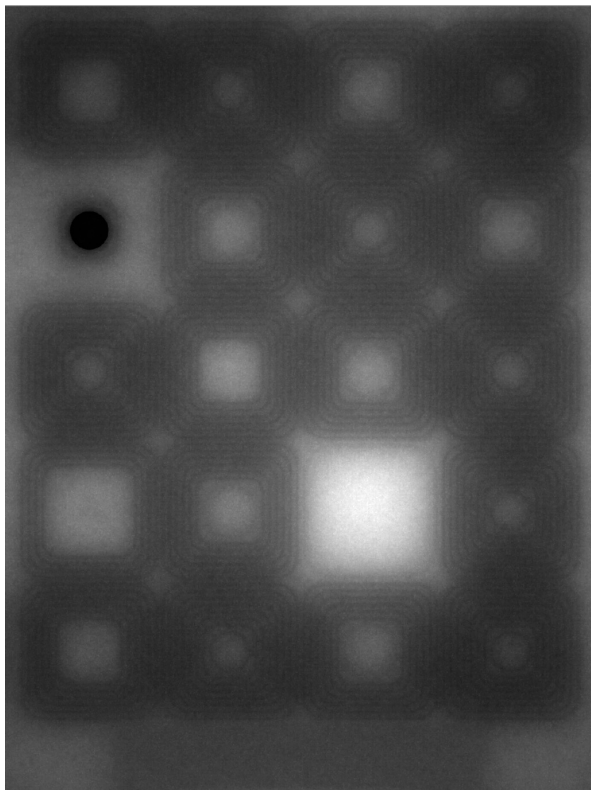
V průběhu studia na KJR připravují studenti program tzv. základního kritického experimentu (ZKE). Ten spočívá v návrhu nového složení aktivní zóny a provedení výpočtů, které prokáží před Státním úřadem pro jadernou bezpečnost (SÚJB), že nová zóna je kvalifikovaná k provozu v reaktoru. Celý postup prací skládající se z rozebírání stávající konfigurace a sestavení nové aktivní zóny, včetně všech ověřovacích výpočtů, je studenty předložen SÚJB a musí být oficiálně schválen. Během následného provádění ZKE jsou vypočítané hodnoty srovnávány s měřeními, podle kterých se sestavování nové zóny řídí. Změřené výsledky rovněž slouží k ověření, s jakou přesností je Monte Carlo model reaktoru schopen určit jeho kritičnost.

Kromě této základní bezpečnostní funkce je MC model reaktoru VR-1 využíván ve výuce studentů, protože umožňuje analyzovat prováděné experimenty. Úpravy modelu pro specifické použití nejsou snadné a vyžadují nemálo zkušeností s prací v MCNP. Vždyť samotný vstupní soubor se skládá z téměř 3 000 řádků. Aby bylo zajištěno, že také studenti budou moci kvalifikovaně pracovat s modelem reaktoru, byl připraven program APOBAB, který umožňuje automaticky sestavit MCNP model reaktoru podle jednoduše definovaných požadavků. Na dalším vývoji modelu i programu APOBAB se podílejí studenti. Tím získávají neoceňitelné zkušenosti s MCNP, které využijí při svých vlastních pracích.

Na obr. 5 je znázorněno rozložení neutronů v aktivní zóně reaktoru VR-1. Výpočet byl proveden v MCNP pro neutrony schopné dalšího štěpení. Světlá místa jsou místa nejvyššího výskytu těchto neutronů. Je to ve vodě, kde neutrony ztrácejí svou energii. Tmavá místa pak ukazují oblasti s nízkým výskytem nízkoeenergetických neutronů. Zvláště je potřeba si všimnout tmavé oblasti vlevo nahoře, kde zasahuje absorpční tyč, která tyto neutrony cíleně pohlcuje.

Závěr

Jak se vidět, náhoda může být nedocenitelnou pomůckou při analýze fyzikálních dějů. Jen musí být zaručeno, že pomyslná kostka, kterou házíme, bude správně vyvážená a čísla budou náhodná. Pak také musíme provést opravdu velký počet hodů, při každém navíc musíme rozhodnout, co se může stát. To vyžaduje podrobný popis všech možných fyzikálních dějů. Nakonec je potřeba náročného statistického vyhodnocení. Tak ve zkratce funguje metoda Monte Carlo.



Obr. 5: Podrobný výpočet rozložení neutronů s nízkou energií v reaktoru VR-1. Struktura paliva IRT-4M je dobře patrná

Literatura

- [1] Metropolis, N.: *The Beginnig of the Monte Carlo Metod*. Los Alamos Science, 1987.
- [2] Brown, F. B.: *Fundamentals of Monte Carlo Particle Transport*. Los Alamos National Lab., 2005, <http://mcnp-green.lanl.gov/resources.html> [cit. 9. 8. 2010]
- [3] Oficiální stránky Školního reaktoru VR-1, Katedra jaderných reaktorů, www.reaktorvr1.eu.
- [4] *MCNP Overview and Theory*. Los Alamos National Laboratory, 2005, <http://mcnp-green.lanl.gov/manual.html> [cit. 9. 8. 2010]