

Учреждение образования
“Гомельский государственный университет
имени Франциска Скорины”

Кафедра теоретической физики

СТАТИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Специальность 1-31 04 01 Физика (по направлениям)
(1-31 04 01-02 производственная деятельность)

Лекции: 26 часов

Практические занятия: 4 часа

Лабораторные занятия: 34 часа

Подготовил:
Андреев
Виктор Васильевич
д.ф.-м.н., доцент

Гомель, 2017

Содержание I

- 1 Компьютерный эксперимент и его основные составляющие
- 2 Основные понятия теории вероятности и мат. статистики
 - Интегральный закон распределения вероятности.
 - Дифференциальный закон распределения вероятности.
 - Моменты распределения.
 - Математическое ожидание. Дисперсия.
 - Оценки параметров распределений.
- 3 Определение гистограммы, ее назначение.
- 4 Оптимальное число интервалов для получения гистограммы
- 5 Критерии согласия
- 6 Центральная предельная теорема
- 7 Метод Монте-Карло (метод статистических испытаний)
- 8 Получение случайных и псевдослучайных чисел
- 9 Методы генерации псевдослучайных чисел
 - Розыгрыш дискретной случайной величины
 - Метод обратной функции
 - Метод Неймана
 - Метод суперпозиции

Содержание II

- Метод Батлера
- Моделирование специальных распределений
- 10 Метод Монте-Карло в задаче переноса элементарных частиц
 - Задача переноса частиц в среде
 - Типы взаимодействий элементарных частиц
 - Взаимодействие фотонов с веществом
 - Взаимодействие заряженных частиц с веществом
 - Электрон-фотонный ливень
- 11 Системы отсчета
- 12 Сечение процессов взаимодействия элементарных частиц
- 13 Математическая модель прохождения частиц через вещество
- 14 Система уравнений задачи переноса частиц в среде на атомарном уровне
 - Решение кинетических уравнений
- 15 Схема использования ММК в задаче переноса.
 - Общая схема моделирования
- 16 Алгоритмы для решения задачи переноса частиц в веществе.
 - Моделирование пробега фотонов
 - Моделирование пробега электронов и позитронов

Содержание III

- Выбор канала взаимодействия
- Алгоритм моделирования энергии вторичных частиц в ЛСО

17 Моделирование комптоновского рассеяния

18 Пакет моделирования Geant4

19 Рекомендуемая литература

1. Компьютерный эксперимент и его основные составляющие

Использование персональных компьютеров в моделировании физических процессов. Компоненты компьютерного эксперимента. Назначение численных экспериментов. Преимущества и недостатки компьютерных экспериментов.

Определение 1.1

Под моделью (от лат. *modulus* — мера, образец, норма) понимают такой материальный или мысленно представляемый объект, который в процессе познания (изучения) замещает объект-оригинал, сохраняя некоторые важные для данного исследования типичные его черты.

Определение 1.2

Процесс построения и использования модели называется моделированием. Или замещение одного объекта другим с целью получения информации о важнейших свойствах объекта-оригинала с помощью объекта-модели называется моделированием.



Рисунок 1: Виды моделирования

Появление ЭВМ позволило не только упростить расчет разных трудоемких задач, но и открыло новые возможности, одной из которых является компьютерный эксперимент. Получен ряд сильных результатов в различных областях физики (ядерная энергетика, термоядерный синтез), а также в биологии, в медицине и т.д.

Рассмотрим схему компьютерного эксперимента.

Определение 1.3

Компьютерный (численный) эксперимент - это эксперимент над математической моделью объекта исследования на ЭВМ, который состоит в том что, по одним параметрам модели вычисляются другие ее параметры и на этой основе делаются выводы о свойствах объекта, описываемого математической моделью.

(см. <http://dic.academic.ru/dic.nsf/ruwiki/4638>)

В настоящее время нет области знания, где бы ни использовался вычислительный эксперимент (ВЭ). Впечатляющие результаты получены с помощью ВЭ при прогнозировании поведения экологических систем, в

исследованиях по аэродинамике, управляемому термоядерному синтезу и в традиционной области применения - ядерной энергетике.

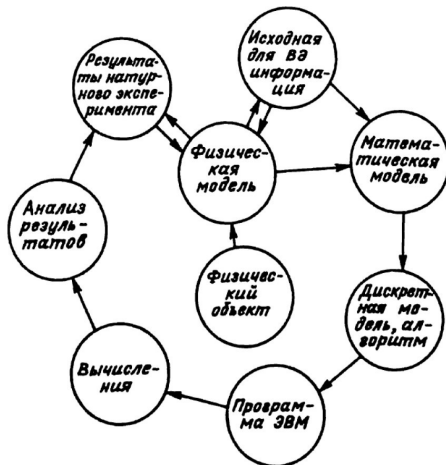


Рисунок 2: Схема компьютерного эксперимента

Схема компьютерного эксперимента аналогична схеме физического эксперимента, за исключением того, что роль физического прибора играет компьютерный эксперимент.

Данный вид эксперимента можно лишь условно отнести к эксперименту, потому как он не отражает природные явления, а лишь является численной реализацией созданной человеком математической модели. Действительно, при некорректности в мат. модели - ее численное решение может быть строго расходящимся с физическим экспериментом.

Успехи компьютерного эксперимента бывают настолько велики, что считают, что компьютерный эксперимент заменяет физический эксперимент. Однако, следует отметить, что это возможно лишь тогда, когда в результате тщательного сопоставления результатов компьютерного эксперимента произошла апробация (тестирование) физической и математической модели и экспериментальных данных. Тогда с помощью компьютерного эксперимента можно получить более-менее достоверную информацию, где нет экспериментальных данных.

Иногда компьютерный эксперимент можно использовать для проведения идеализированного эксперимента в целях уточнения одного или нескольких параметров, зависимость от которых определяет суть физического явления или эффекта т.е. компьютерный эксперимент предваряя физический эксперимент позволяет планировать последний. Такая ситуация наиболее ярко проявляется в физике элементарных частиц и высоких энергий, где моделирование процессов взаимодействия частиц является предварительным обязательным шагом для постановки экспериментов на коллайдерах.

2. Основные понятия теории вероятности и математической статистики

Частота попадания случайной величины.

Для исследования свойств объекта проводят измерения, позволяющие количественно дать характеристики свойств этого объекта. На практике производится ограниченное число измерений n при одинаковых условиях. В результате получаем множество событий (значений) исследуемой величины X : $\{x_1, x_2, \dots, x_n\}$, которое представляет собой выборку объема n . Таким образом, возможные исходы некоторого эксперимента (измерения) представляют собой множество точек, которые можно сочетать разными способами. **Такие сочетания называют событиями.**

В том случае, (т.е. когда одна и та же характеристика объекта принимает различные значения) говорят о том, что величина X является **случайной величиной**. Случайная величина - это действительное число (или набор действительных чисел), которое заключено между $-\infty$ и $+\infty$, которое сопоставляется каждой возможной точке из числа значений этой характеристики. При соответствующих условиях для каждое событие можно характеризовать **частотой появления** ν_n .

2. Основные понятия теории вероятности и математической статистики

Частота попадания случайной величины.

Для исследования свойств объекта проводят измерения, позволяющие количественно дать характеристики свойств этого объекта. На практике производится ограниченное число измерений n при одинаковых условиях. В результате получаем множество событий (значений) исследуемой величины X : $\{x_1, x_2, \dots, x_n\}$, которое представляет собой выборку объема n . Таким образом, возможные исходы некоторого эксперимента (измерения) представляют собой множество точек, которые можно сочетать разными способами. **Такие сочетания называют событиями.**

В том случае, (т.е. когда одна и та же характеристика объекта принимает различные значения) говорят о том, что величина X является **случайной величиной**. Случайная величина - это действительное число (или набор действительных чисел), которое заключено между $-\infty$ и $+\infty$, которое сопоставляется каждой возможной точке из числа значений этой характеристики. При соответствующих условиях для каждое событие можно характеризовать **частотой появления** ν_n .

2. Основные понятия теории вероятности и математической статистики

Частота попадания случайной величины.

Для исследования свойств объекта проводят измерения, позволяющие количественно дать характеристики свойств этого объекта. На практике производится ограниченное число измерений n при одинаковых условиях. В результате получаем множество событий (значений) исследуемой величины X : $\{x_1, x_2, \dots, x_n\}$, которое представляет собой выборку объема n . Таким образом, возможные исходы некоторого эксперимента (измерения) представляют собой множество точек, которые можно сочетать разными способами. **Такие сочетания называют событиями.**

В том случае, (т.е. когда одна и та же характеристика объекта принимает различные значения) говорят о том, что величина X является **случайной величиной**. Случайная величина – это действительное число (или набор действительных чисел), которое заключено между $-\infty$ и $+\infty$, которое сопоставляется каждой возможной точке из числа значений этой характеристики. При соответствующих условиях для каждое событие можно характеризовать **частотой появления** ν_n .

Частотой появления ν_n события A называется отношение числа m появления данного события к общему числу проведенных одинаковых испытаний, в каждом из которых могло появиться или не появиться данное событие:

$$\nu_n = \frac{m}{n} . \quad (2.1)$$

Если число испытаний n велико, то, как правило, частоты появления данного события A в различных сериях измерений отличаются мало друг от друга. Это утверждение записывают следующим образом:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \nu_n = p . \quad (2.2)$$

Число p называются вероятностью (англ.-probability) случайного события A . Отметим, что существуют такие события у которых частота появления может сильно отличаться от вероятности, даже при большом числе испытаний.

Частотой появления ν_n события A называется отношение числа m появления данного события к общему числу проведенных одинаковых испытаний, в каждом из которых могло появиться или не появиться данное событие:

$$\nu_n = \frac{m}{n} . \quad (2.1)$$

Если число испытаний n велико, то, как правило, частоты появления данного события A в различных сериях измерений отличаются мало друг от друга. Это утверждение записывают следующим образом:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \nu_n = p . \quad (2.2)$$

Число p называются вероятностью (англ.-probability) случайного события A . Отметим, что существуют такие события у которых частота появления может сильно отличаться от вероятности, даже при большом числе испытаний.

Частотой появления ν_n события A называется отношение числа m появления данного события к общему числу проведенных одинаковых испытаний, в каждом из которых могло появиться или не появиться данное событие:

$$\nu_n = \frac{m}{n} . \quad (2.1)$$

Если число испытаний n велико, то, как правило, частоты появления данного события A в различных сериях измерений отличаются мало друг от друга. Это утверждение записывают следующим образом:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \nu_n = p . \quad (2.2)$$

Число p называются вероятностью (англ.-probability) случайного события A . Отметим, что существуют такие события у которых частота появления может сильно отличаться от вероятности, даже при большом числе испытаний.

Частотой появления ν_n события A называется отношение числа m появления данного события к общему числу проведенных одинаковых испытаний, в каждом из которых могло появиться или не появиться данное событие:

$$\nu_n = \frac{m}{n} . \quad (2.1)$$

Если число испытаний n велико, то, как правило, частоты появления данного события A в различных сериях измерений отличаются мало друг от друга. Это утверждение записывают следующим образом:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \nu_n = p . \quad (2.2)$$

Число p называются вероятностью (англ.-probability) случайного события A . Отметим, что существуют такие события у которых частота появления может сильно отличаться от вероятности, даже при большом числе испытаний.

Как видим из вышеприведенного примера, для описания случайного поведения величины необходима совокупность, содержащая неограниченное число значений измеряемой величины ($n = \infty$). Такая выборка называется генеральной совокупностью. Генеральная совокупность часто используется как важное абстрактное понятие, необходимое в теоретических расчетах, связанных с исследованием поведения физической величины как случайной величины.

Различают два основных типа случайных величин: дискретные случайные величины и непрерывные случайные величины. Если величина X имеет **конечное** число (счетное множество) из последовательности возможных значений $\{x_1, x_2, \dots, x_k, \dots\}$ то такая величина называется *дискретной случайной величиной*. Если случайная величина может принимать любое значение из интервала возможных значений, то такая величина называется *непрерывной случайной величиной*.

Как видим из вышеприведенного примера, для описания случайного поведения величины необходима совокупность, содержащая неограниченное число значений измеряемой величины ($n = \infty$). Такая выборка называется генеральной совокупностью. Генеральная совокупность часто используется как важное абстрактное понятие, необходимое в теоретических расчетах, связанных с исследованием поведения физической величины как случайной величины.

Различают два основных типа случайных величин: дискретные случайные величины и непрерывные случайные величины. Если величина X имеет **конечное** число (счетное множество) из последовательности возможных значений $\{x_1, x_2, \dots, x_k, \dots\}$ то такая величина называется *дискретной случайной величиной*. Если случайная величина может принимать любое значение из интервала возможных значений, то такая величина называется *непрерывной случайной величиной*.

Как видим из вышеприведенного примера, для описания случайного поведения величины необходима совокупность, содержащая неограниченное число значений измеряемой величины ($n = \infty$). Такая выборка называется генеральной совокупностью. Генеральная совокупность часто используется как важное абстрактное понятие, необходимое в теоретических расчетах, связанных с исследованием поведения физической величины как случайной величины.

Различают два основных типа случайных величин: дискретные случайные величины и непрерывные случайные величины. Если величина X имеет **конечное** число (счетное множество) из последовательности возможных значений $\{x_1, x_2, \dots, x_k, \dots\}$ то такая величина называется **дискретной случайной величиной**. Если случайная величина может принимать любое значение из интервала возможных значений, то такая величина называется **непрерывной случайной величиной**.

Интегральный закон распределения вероятности.

Для характеристики частоты появления различных значений случайной величины X теория вероятностей предлагает пользоваться указанием **закона распределения вероятностей** различных значений этой величины.

При этом различают два вида описания законов распределения:

- 1) **интегральный**
- 2) **дифференциальный.**

Определение 2.1

Интегральным законом, или функцией распределения вероятностей $F(x)$ случайной величины X , называют функцию, значения которой представляют вероятность того, что значения x_k случайной величины X меньше некоторого значения x (x – некоторое произвольное число).

Данное утверждение символически записывается в виде

$$F(x) = \text{Prob}(x_k < x) , \quad (2.3)$$

где $\text{Prob}(x_k < x)$ и представляет собой вероятность события в вышеприведенном определении.

Очевидно, что

$$F(a) < F(b) , \quad \text{при} \quad a \leq b \quad (\text{неубывающая функция}) \quad (2.4)$$

$$F(-\infty) = 0 , \quad F(\infty) = 1 . \quad (2.5)$$

Данное утверждение символически записывается в виде

$$F(x) = \text{Prob}(x_k < x) , \quad (2.3)$$

где $\text{Prob}(x_k < x)$ и представляет собой вероятность события в вышеприведенном определении.

Очевидно, что

$$F(a) < F(b) , \quad \text{при} \quad a \leq b \quad (\text{неубывающая функция}) \quad (2.4)$$

$$F(-\infty) = 0 , \quad F(\infty) = 1 . \quad (2.5)$$

Данное утверждение символически записывается в виде

$$F(x) = \text{Prob}(x_k < x) , \quad (2.3)$$

где $\text{Prob}(x_k < x)$ и представляет собой вероятность события в вышеприведенном определении.

Очевидно, что

$$F(a) < F(b) , \quad \text{при} \quad a \leq b \quad (\text{неубывающая функция}) \quad (2.4)$$

$$F(-\infty) = 0 , \quad F(\infty) = 1 . \quad (2.5)$$

Дифференциальный закон распределения вероятности.

Для случайной величины с непрерывной и дифференцируемой функцией распределения $F(x)$ можно найти **дифференциальный закон распределения вероятностей**:

$$p(x) = \frac{dF(x)}{dx} . \quad (2.6)$$

$p(x)$ называют кривой плотности распределения вероятностей (или просто **плотность вероятности**).

Свойства $p(x)$: 1) $p(x) \geq 0$

2) Из (2.6) следует, что

$$F(x) = \int_{-\infty}^x p(\xi) d\xi . \quad (2.7)$$

3) Условие нормировки:

$$\int_{-\infty}^{\infty} p(x) dx = 1 . \quad (2.8)$$

Дифференциальный закон распределения вероятности.

Для случайной величины с непрерывной и дифференцируемой функцией распределения $F(x)$ можно найти **дифференциальный закон распределения вероятностей**:

$$p(x) = \frac{dF(x)}{dx} . \quad (2.6)$$

$p(x)$ называют кривой плотности распределения вероятностей (или просто **плотность вероятности**).

Свойства $p(x)$: 1) $p(x) \geq 0$

2) Из (2.6) следует, что

$$F(x) = \int_{-\infty}^x p(\xi) d\xi . \quad (2.7)$$

3) Условие нормировки:

$$\int_{-\infty}^{\infty} p(x) dx = 1 . \quad (2.8)$$

Дифференциальный закон распределения вероятности.

Для случайной величины с непрерывной и дифференцируемой функцией распределения $F(x)$ можно найти **дифференциальный закон распределения вероятностей**:

$$p(x) = \frac{dF(x)}{dx} . \quad (2.6)$$

$p(x)$ называют кривой плотности распределения вероятностей (или просто **плотность вероятности**).

Свойства $p(x)$: 1) $p(x) \geq 0$

2) Из (2.6) следует, что

$$F(x) = \int_{-\infty}^x p(\xi) d\xi . \quad (2.7)$$

3) Условие нормировки:

$$\int_{-\infty}^{\infty} p(x) dx = 1 . \quad (2.8)$$

Дифференциальный закон распределения вероятности.

Для случайной величины с непрерывной и дифференцируемой функцией распределения $F(x)$ можно найти **дифференциальный закон распределения вероятностей**:

$$p(x) = \frac{dF(x)}{dx} . \quad (2.6)$$

$p(x)$ называют кривой плотности распределения вероятностей (или просто **плотность вероятности**).

Свойства $p(x)$: 1) $p(x) \geq 0$

2) Из (2.6) следует, что

$$F(x) = \int_{-\infty}^x p(\xi) d\xi . \quad (2.7)$$

3) **Условие нормировки:**

$$\int_{-\infty}^{\infty} p(x) dx = 1 . \quad (2.8)$$

Примеры законов распределений:

Нормальное распределение:

$$p(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{(x-a)^2}{2\sigma^2} \right], \quad (2.9)$$

a и σ -параметры нормального распределения.

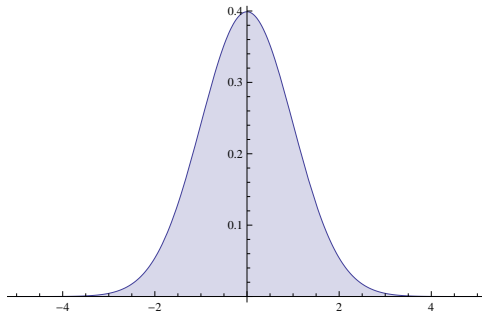


Рисунок 3: Нормальное распределение с $a = 0$ и $\sigma = 1$

Примеры законов распределений:

Нормальное распределение:

$$p(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{(x-a)^2}{2\sigma^2} \right], \quad (2.9)$$

a и σ -параметры нормального распределения.

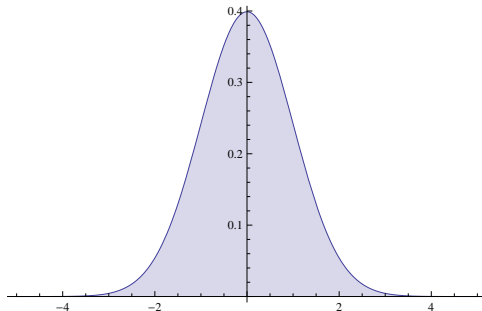


Рисунок 3: Нормальное распределение с $a = 0$ и $\sigma = 1$

Примеры законов распределений:

Нормальное распределение:

$$p(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{(x-a)^2}{2\sigma^2} \right], \quad (2.9)$$

a и σ -параметры нормального распределения.

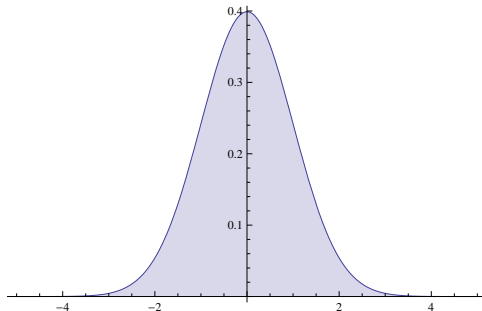


Рисунок 3: Нормальное распределение с $a = 0$ и $\sigma = 1$

Примеры законов распределений:

Нормальное распределение:

$$p(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{(x-a)^2}{2\sigma^2} \right], \quad (2.9)$$

a и σ -параметры нормального распределения.

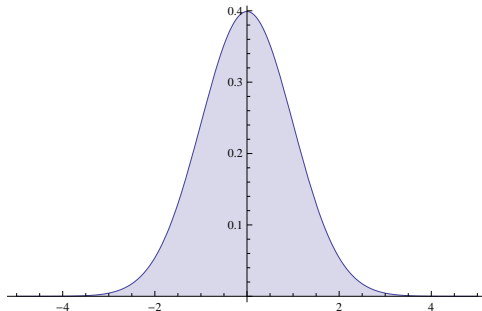


Рисунок 3: Нормальное распределение с $a = 0$ и $\sigma = 1$

Примеры законов распределений:

Распределение χ^2 с n степенями свободы:

$$p(\chi^2) = \frac{(\chi^2)^{(\frac{n}{2}-1)} e^{-\frac{\chi^2}{2}}}{2^{\frac{n}{2}} \Gamma(\frac{n}{2})}, \quad (\chi^2 > 0), \quad (2.10)$$

n – параметры χ^2 распределения.

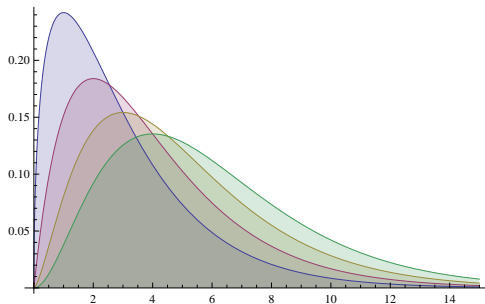


Рисунок 4: Распределение χ^2 с $n = 3, 4, 5, 6$ степенями свободы

Примеры законов распределений:

Распределение χ^2 с n степенями свободы:

$$p(\chi^2) = \frac{(\chi^2)^{(\frac{n}{2}-1)} e^{-\frac{\chi^2}{2}}}{2^{\frac{n}{2}} \Gamma(\frac{n}{2})}, \quad (\chi^2 > 0), \quad (2.10)$$

n – параметры χ^2 распределения.

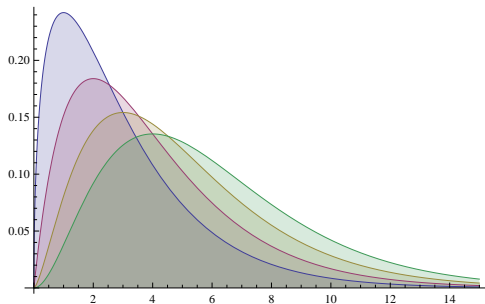


Рисунок 4: Распределение χ^2 с $n = 3, 4, 5, 6$ степенями свободы

Примеры законов распределений:

Распределение χ^2 с n степенями свободы:

$$p(\chi^2) = \frac{(\chi^2)^{(\frac{n}{2}-1)} e^{-\frac{\chi^2}{2}}}{2^{\frac{n}{2}} \Gamma(\frac{n}{2})}, \quad (\chi^2 > 0), \quad (2.10)$$

n – параметры χ^2 распределения.

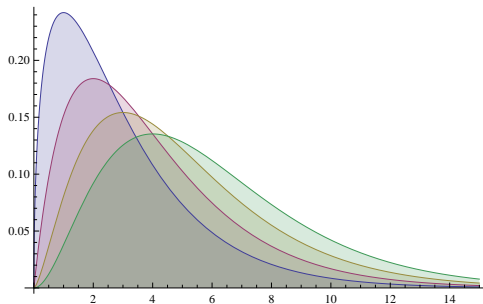


Рисунок 4: Распределение χ^2 с $n = 3, 4, 5, 6$ степенями свободы

Примеры законов распределений:

Распределение χ^2 с n степенями свободы:

$$p(\chi^2) = \frac{(\chi^2)^{(\frac{n}{2}-1)} e^{-\frac{\chi^2}{2}}}{2^{\frac{n}{2}} \Gamma(\frac{n}{2})}, \quad (\chi^2 > 0), \quad (2.10)$$

n – параметры χ^2 распределения.

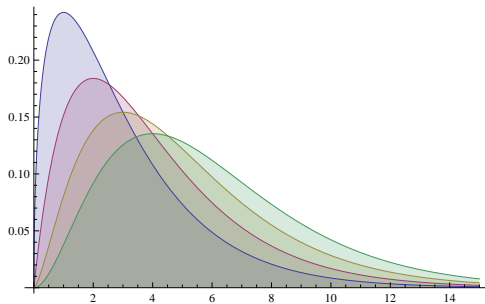


Рисунок 4: Распределение χ^2 с $n = 3, 4, 5, 6$ степенями свободы

Примеры законов распределений:

Равномерное распределение:

$$p(x) = \frac{1}{b-a}, \quad (b > a), \quad (2.11)$$

a, b - параметры распределения.

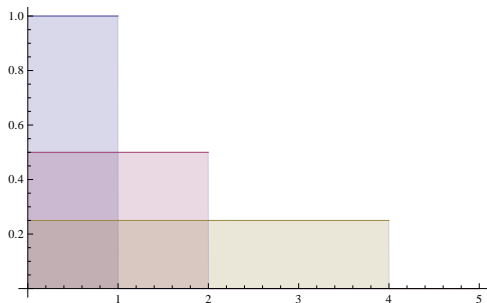


Рисунок 5: Равномерное распределение с $a = 0$ и $b = 1, 2, 4$

Примеры законов распределений:

Равномерное распределение:

$$p(x) = \frac{1}{b-a}, \quad (b > a), \quad (2.11)$$

a, b - параметры распределения.

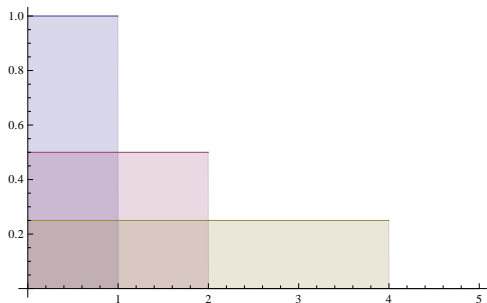


Рисунок 5: Равномерное распределение с $a = 0$ и $b = 1, 2, 4$

Примеры законов распределений:

Равномерное распределение:

$$p(x) = \frac{1}{b-a}, \quad (b > a), \quad (2.11)$$

a, b - параметры распределения.

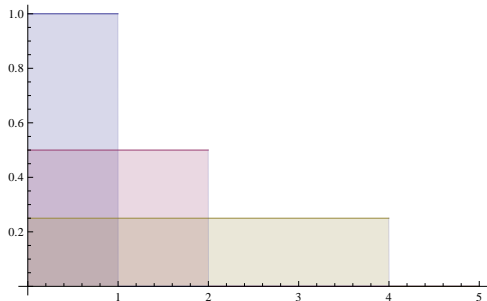


Рисунок 5: Равномерное распределение с $a = 0$ и $b = 1, 2, 4$

Моменты распределения

Моменты k -того порядка для непрерывной случайной величины записываются в виде:

$$\mu_k = \int_{-\infty}^{\infty} x^k p(x) dx , \quad (2.12)$$

где μ_k – алгебраический момент k -того порядка.

И

$$\nu_k = \int_{-\infty}^{\infty} (x - \mu_1)^k p(x) dx . \quad (2.13)$$

где ν_k – центральный момент k -того порядка.

Моменты распределения

Моменты k -того порядка для непрерывной случайной величины записываются в виде:

$$\mu_k = \int_{-\infty}^{\infty} x^k p(x) dx , \quad (2.12)$$

где μ_k – алгебраический момент k -того порядка.

и

$$\nu_k = \int_{-\infty}^{\infty} (x - \mu_1)^k p(x) dx . \quad (2.13)$$

где ν_k – центральный момент k -того порядка.

Моменты распределения

Моменты k -того порядка для непрерывной случайной величины записываются в виде:

$$\mu_k = \int_{-\infty}^{\infty} x^k p(x) dx , \quad (2.12)$$

где μ_k – алгебраический момент k -того порядка.

И

$$\nu_k = \int_{-\infty}^{\infty} (x - \mu_1)^k p(x) dx . \quad (2.13)$$

где ν_k – центральный момент k -того порядка.

Первый алгебраический момент называют **математическим ожиданием**:

Определение 2.2

Математическим ожиданием непрерывной случайной величины с плотностью вероятности $p(x)$ называется величина Mx , определяемая соотношением:

$$Mx = \int_{-\infty}^{\infty} x p(x) dx . \quad (2.14)$$

Математическое ожидание характеризует центр распределения $p(x)$. Однако следует отметить, что не для всех распределений существует математическое ожидание.

Наиболее общей характеристикой центра распределения следует считать медиану. Медиана - прямая, параллельная оси Y , проходящая через точку на оси X , слева и справа от которой вероятности появления различных значений случайной величины равны между собой и составляют $p_1 = p_2 = 0,5$.

Определение 2.3

Дисперсией непрерывной случайной величины с плотностью вероятности $p(x)$ называется величина Dx , определяемая соотношением:

$$Dx = \int_{-\infty}^{\infty} (x - Mx)^2 p(x) dx . \quad (2.15)$$

Дисперсия характеризует рассеяние отдельных значений случайной величины от центра распределения. Дисперсия имеет размерность квадрата случайной величины и выражает как бы мощность рассеяния, поэтому для более наглядной характеристики используют среднеквадратичное отклонение σ :

$$\sigma = +\sqrt{Dx} . \quad (2.16)$$

которое имеет размерность самой случайной величины.

1) Точечные оценки.

Пусть дана выборка объема n .

Точечная оценка для математического ожидания (центра распределения) дается выражением:

$$\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i, \quad (2.17)$$

Для дисперсии $D = \sigma^2$ такая оценка дается выражением:

$$S^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2. \quad (2.18)$$

Величины \bar{x} и S сами являются случайными величинами и, следовательно, они тоже могут иметь разброс, который характеризуется дисперсией.

Для \bar{x} :

$$S_{\bar{x}}^2 = \frac{S^2}{n} . \quad (2.19)$$

Для дисперсии:

$$D[S^2] = \frac{\mu_4}{n} - \frac{\sigma^4(n-3)}{n(n-1)} , \quad (2.20)$$

где μ_4 – четвертый алгебраический центральный момент, а σ – с.к.о.

2)

Интервальные оценки.

Точечные оценки параметров случайных величин не позволяют судить о степени близости выборочных значений к оцениваемому параметру. Более содержательны процедуры оценивания параметров, связанные с построением интервала с известной степенью доверительности. Для того, чтобы перейти к тому как найти эти доверительные интервалы, рассмотрим понятие квантиля распределения.

Квантилем случайной величины x уровня значимости α , называется величина x_α , для которой имеем:

$$P(x_\alpha) = \text{Prob}(x \leq x_\alpha) = \int_{-\infty}^{x_\alpha} p(x) dx = 1 - \alpha \quad (2.21)$$

или

$$\text{Prob}(x > x_\alpha) = \int_{x_\alpha}^{\infty} p(x) dx = \alpha \quad (2.22)$$

Доверительный интервал для м.о. $\mathbf{M}x$.

$$\left[\bar{x} - \frac{S \times t_{N,(1+\alpha)/2}}{\sqrt{n}} \leq \mathbf{M}x \leq \bar{x} + \frac{S \times t_{N,(1+\alpha)/2}}{\sqrt{n}} \right], \quad N = n - 1, \quad (2.23)$$

где $t_{N,\alpha}$ определяется соотношением:

$$\int_{t_{n,\alpha}}^{\infty} p(t) dt = \alpha,$$

с

$$p(t) = \frac{\Gamma\left(\frac{n+1}{2}\right)}{\sqrt{\pi n} \Gamma\left(\frac{n}{2}\right)} \left[1 + \frac{t^2}{n} \right]^{-\frac{n+1}{2}} \quad (2.24)$$

Функция это t – распределение с n степенями свободы (распределение Стьюдента).

Коэффициенты $t_{N,\alpha}$ носят название коэффициентов Стьюдента.

Для дисперсии (с.к.о.)

$$\left[\frac{N S^2}{\chi_{N;(1+\alpha)/2}^2} \leq Dx \leq \frac{N S^2}{\chi_{N;(1-\alpha)/2}^2} \right], \quad N = n - 1$$

$\chi_{n;\alpha}^2$ - квантиль распределения χ^2 .

$$\int_{\chi_{n;\alpha}^2}^{\infty} P(\chi^2) d\chi^2 = \alpha$$

и

$$P(\chi^2) = \frac{(\chi^2)^{(\frac{n}{2}-1)} e^{-\frac{\chi^2}{2}}}{2^{\frac{n}{2}} \Gamma(\frac{n}{2})}, \quad (\chi^2 > 0) -$$

распределение χ^2 .

Значения Mx и Dx лежат в интервале с доверительной вероятностью $1 - \alpha$.

3. Определение гистограммы

Полученные экспериментальные данные представляют, как правило, в виде таблиц. Полученные таблицы удобно представить графически. Используя частность n (отношение числа событий, попавших в данный интервал, к общему числу событий) и положение середины интервала можно построить полигон частот.

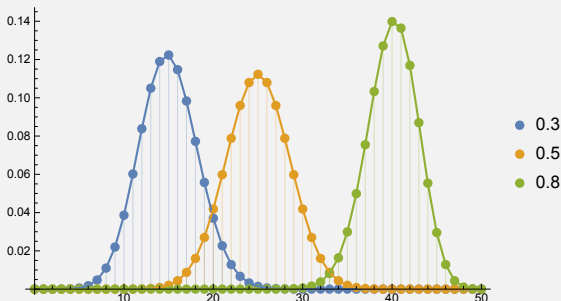


Рисунок 6: Пример полигона частот

Это же распределение можно представить в виде гистограммы. Для построения гистограммы необходимо над каждым отрезком оси абсцисс, соответствующим интервалу значений измеряемой величины, построить прямоугольник, площадь которого пропорциональна плотности или частоте попадания в этот интервал. Обычно выбирают интервалы одинаковой ширины, поэтому высота прямоугольников различна.

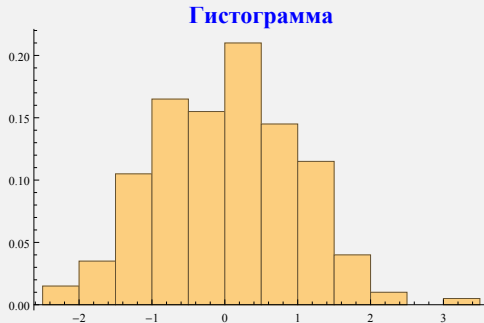


Рисунок 7: Пример гистограммы

Цель обработки данных заключается в выявлении вида распределений случайных величин и оценки параметров установленного распределения.

Для определения оценок математического ожидания, с.к.о., эксцесса не требуется какого-либо группирования данных.

Для определения медианы, сгибов, использования критерия согласия Колмогорова-Смирнова или для обнаружения промахов, экспериментальные данные необходимо расположить в порядке возрастания, т.е. построить вариационный ряд (упорядоченную выборку).

Для определения формы распределения, для использования критериев согласия Пирсона и др., для сопоставления гипотез о форме распределения и т.д. простого упорядочения выборки уже недостаточно, а выборка должна быть представлена в виде гистограммы, состоящей из m столбцов с определенной протяженностью d соответствующих им интервалов.

4. Оптимальное число интервалов для получения гистограммы

Как выбрать m и d .

Общепринято делать интервалы одинаковыми. Хотя в дальнейшем увидим, что это условие необязательно. Условие равновеликости интервалов удобно с практической точки зрения. Во-первых, очевидно, что существует оптимальное число интервалов группирования, когда ступенчатая огибающая гистограммы наиболее близка к плавной кривой распределения.

К примеру, при группировании данных в большое число меньших интервалов, некоторые из них окажутся пустыми или малозначительными. Гистограмма будет отличаться от плавной кривой распределения вследствие изрезанности многими всплесками и провалами.

Т.е. 1-е требование:

Размер интервала (ячейки) должен быть достаточно широким для обеспечения хороших статистических свойств будущей гистограммы (достаточно большая пуассоновская статистика, минимальные корреляции (связи) с соседними ячейками). При слишком малом числе m интервалов, гистограмма отличается от действительной кривой распределения вследствие слишком крупной ступенчатости.

Из-за чего будут потеряны характерные особенности. Например, если взять $m = 1$, т.е. d равно размаху экспериментальных данных, то любое распределение сводится к равномерному, а если $m = 3$, то любое колоколообразное распределение сведется к треугольному. В примере для обработки линейчатых спектров большая ячейка может привести к потере спектральной линии.

Т.о. 2-е требование:

Размер ячейки должен быть достаточно узким для того, чтобы прорисовывалась “тонкая структура” исследуемой величины. Как видим, требования являются противоречивыми. Укрупнение интервалов группирования является методом “фильтрации различных случайных выбросов и провалов”, но слишком протяженные интервалы сглаживают особенности искомого закона распределения. Таким образом, задача выбора оптимального числа интервалов при построении гистограммы – это задача оптимальной фильтрации, а оптимальным числом m интервалов является максимальное возможное сглаживание случайных флуктуаций данных, которое сочетается с минимальным искажением от сглаживания самой кривой искомого распределения.

Рекомендации по выбору m .

I группа: эвристические критерии (без доказательства).

1) Формула Старджеса

$$m = \log_2 n + 1 .$$

2) Формула Брукса и Каррузера

$$m = 5 \lg n .$$

3) $m = \sqrt{n}$.

Эти три формулы являются часто встречающимися в литературе по математической статистике.

II группа: с использованием χ^2 .

В ней используется рассмотрение интервалов не с равной длиной, а с равной вероятностью в соответствии с принимаемой моделью (т.е. предположением о законе распределения).

Число интервалов с равной вероятностью, которые мы обозначили как K , отличаются от числа m с равной длиной d (в несколько раз).
Г. Манн и А. Вальд установили, что при $n \rightarrow \infty$ оптимальное число K равновероятных интервалов задается соотношением

$$K \sim 4 \sqrt[5]{2} \left(\frac{n}{Z_\alpha} \right)^{0.4},$$

Z_α – квантиль нормального распределения, соответствующий вероятности $P = 1 - \alpha$, α – принятый уровень значимости.

$$Z_\alpha = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{Z_\alpha} e^{-\frac{x^2}{2}} dx = 1 - \alpha.$$

На практике часто берут $\alpha = 0.1$, тогда

$$K \simeq 1.9 n^{0.4}$$

III группа.

Поскольку для K интервалы получаются не равной длины, то это приводит к ряду неудобств при построении гистограмм, но зато при этом мы неявно закладываем при использовании χ^2 выбор K в зависимости от формы распределения.

III группа рекомендаций "устраняет" недостаток II группы возвращаясь к интервалам m с равной длиной d , но при этом и учитывает, в отличие от I группы, форму распределения (форма характеризуется эксцессом ε и контрэксцессом κ).

Примером является соотношение, полученное в работе Алексеевой:

$$m = \frac{4}{\kappa} \lg \frac{n}{10} .$$

На практике эту формулу в зависимости от n при $\kappa = \text{const}$ удобнее аппроксимировать выражением

$$m = \frac{\varepsilon + 1.5}{6} n^{0.4}$$

или

$$m = \frac{1}{3} \sqrt[5]{\varepsilon^4 n^2} = \frac{1}{3} \sqrt[5]{\frac{n^2}{\kappa^8}} .$$

Предпоследняя формула более точна, а последняя более удобна в аналитических вычислениях, из нее четко видно, что зависимость от формы (κ^8) существенно сильнее от объема выборки (n^2).

Трудность использования III группы состоит в том, что число интервалов часто приходится выбирать прежде, чем будут найдены оценки κ , \bar{x} , и т.д.

Эту трудность обходят следующим образом: наиболее часто встречаются распределения с ε от 1.8 до 6 (от равномерного до Лапласа, включая нормальное $\varepsilon=3$). Для этих граничных точек имеем

$$m_{min} = 0.55 n^{0.4}$$

и

$$m_{max} = 1.25 n^{0.4}$$

Искомое m можно выбрать близким к этому интервалу, при этом m лучше выбрать нечетным, т.к. при четном m для островершинных распределений в центре гистограммы оказывается два столбца равных по высоте и середина распределения принудительно утолщается.

“Практические” рекомендации:

- 1) Для практического определения числа интервалов воспользоваться формулами для m_{max} и m_{min} , выбрав при этом m нечетным.
- 2) Так как крайние точки могут располагаться несимметрично, то ширина d столбца гистограммы определяется по отклонению от центра ΔX_m наиболее удаленной точки.

$$d = \frac{2\Delta X_m}{m}.$$

- 3) При этом полученное значение d необходимо округлять в большую сторону, чтобы крайняя точка не оказалась за пределами крайнего столбца.
- 4) Величину d при этом удобно выбирать так, чтобы она делилась на 2 так, чтобы потом центральный столбец можно было бы поделить пополам для уточнения центра распределения.

5. Критерии согласия

Постановка задачи.

Одной из задач первичной обработки экспериментальных наблюдений является выбор закона распределения, который наиболее хорошо описывающего случайную величину, выборку которой наблюдают.

Рассмотрим любой эксперимент, в котором измеряется некоторая случайная величина X и мы получаем некоторую выборку объема n . Наша задача описать поведение этой случайной величины. Из теории мы знаем о большом количестве функций распределения вероятностей (нормальное, равномерное распределения, распределение Стьюдента и т.д.).

И у нас возникает мысль: А что если одно из известных теоретических (модельных) распределений подходит для описания поведения измеряемой величины? Как быть? Подойдет ли выбранное нами теоретическое распределение или не подойдет? Такая задача в математической статистике называют проверкой гипотезы.

Определение 5.1

Под статистической гипотезой понимают всякое высказывание о случайной величине (генеральной совокупности), проверяемое по выборке (по результатам наблюдений).

Соответственно, процедура сопоставления высказанной гипотезы с выборочными данными называется **проверкой гипотезы**.

Таким образом, **целью проверки гипотезы о согласии** опытного распределения с теоретическим является стремление удостовериться в том, что данная модель теоретического закона не противоречит наблюдаемым данным и использование ее не приведет к существенным ошибкам при вероятностных расчетах.

Ответ, который должен быть получен в конечном итоге выглядит следующим образом: Данная (“экспериментальная”) выборка с вероятностью p соответствует теоретическому распределению с параметрами (например, нормальному распределению с параметрами $\mu = 3$ и $\sigma = 1$).

Поэтому основная задача на практике состоит в определении вероятности принятия модели (гипотезы) p (или более точно вероятности, что данная выборка не соответствует данной гипотезе $\alpha = 1 - p$).

Что нужно знать о процессе проверки гипотез:

Этап 1. Выбор модели (теоретической функции распределения)

Располагая выборочными данными и руководствуясь конкретными условиями рассматриваемой задачи, формулируют гипотезу H_0 , которую называют **основной** или нулевой, и гипотезу H_1 конкурирующую с гипотезой H_0 .

Термин “конкурирующая” означает, что являются противоположными следующие два события: по выборке будет принято решение о справедливости для генеральной совокупности гипотезы H_0 ; и по выборке будет принято решение о справедливости для генеральной совокупности гипотезы H_1 . Гипотезу H_1 называют также альтернативной.

Например, если нулевая гипотеза такова: данная выборка имеет нормальное распределение с параметрами $a = 3$ и $\sigma = 1$, то альтернативная гипотеза может быть следующей: данная выборка имеет нормальное распределение, но с параметрами $a < 3$ и $\sigma = 1$ или

$$H_0 : p(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{(x-a)^2}{2\sigma^2} \right], \text{ где} \\ a = 3 \text{ и } \sigma = 1, \quad (5.1)$$

и

$$H_1 : p(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{(x-a)^2}{2\sigma^2} \right], \text{ где} \\ a < 3 \text{ и } \sigma = 1. \quad (5.2)$$

Этап 2. Расчет вероятности принятия гипотезы p или вероятности не соответствия данной модели $\alpha = 1 - p$.

Вероятность α часто называют уровнем значимости и если выборка соответствует выбранной нами модели (теоретическому распределению), то уровень значимости относительно мал ($\alpha < 0,05$) Поясним ее смысл.

Решение о том, можно ли считать высказывание H_0 справедливым для генеральной совокупности, принимается по выборочным данным, т. е. по ограниченному ряду наблюдений, следовательно, это решение может быть ошибочным.

При этом может иметь место ошибка двух родов: отвергают гипотезу H_0 , или, иначе, принимают альтернативную гипотезу H_1 , тогда как на самом деле гипотеза H_0 верна; это **ошибка первого рода**; принимают гипотезу H_0 , тогда как на самом деле высказывание H_0 неверно, т. е. верной является гипотеза H_1 это **ошибка второго рода**.

Так вот уровень значимости α – это вероятность ошибки первого рода, т. е. вероятность того, что будет принята гипотеза H_1 , если на самом деле в генеральной совокупности верна гипотеза H_0 (или отклонение проверяемой гипотезы H_0 при её справедливости).

Вероятность ошибки второго рода часто обозначают β , т. е. вероятность того, что будет принята гипотеза H_0 , если на самом деле верна гипотеза H_1 (или не отклонении H_0 при справедливости H_1).

О мощности критерия.

При использовании критериев согласия, как правило на практике, не задают конкурирующих гипотез: рассматривается принадлежность выборки конкретному закону. А в качестве конкурирующей гипотезы — принадлежность любому другому.

Естественно, что способность критерия отличать закон, соответствующий H_0 , от других, близких к закону, соответствующему H_0 , и далёких от него, отличаются.

Определение 5.2

Мощностью критерия по отношению к конкурирующей гипотезе H_1 называется величина $1 - \beta$. Критерий тем лучше распознаёт пару конкурирующих гипотез H_0 и H_1 , чем выше его мощность.

Один из возможных вариантов проверки гипотез являются **критерии согласия**.

Критерий χ^2 (критерий Пирсона).

Рассмотрим этапы необходимые для проверки гипотез на примере критерия χ^2 .

Процедура проверки гипотез с использованием критериев типа χ^2 предусматривает группирование наблюдений.

1. Выбираем “модель”: обычно это теоретическое дифференциальное распределение вероятностей $p(x, \theta)$, где θ – один (или несколько) параметров распределения.
2. Область определения случайной величины разбивают на m непересекающихся интервалов граничными точками $x_0, x_1, \dots, x_{m-1}, x_m$, где $x_0 < x_1 < \dots < x_{m-1} < x_m$.

В соответствии с заданным разбиением подсчитывают число n_i выборочных значений, попавших в i -й интервал и вероятности попадания в i -й интервал

$$\begin{aligned} p_i &= \int_{x_{i-1}}^{x_i} p(x, \theta) dx = \\ &= F(x_i) - F(x_{i-1}) \end{aligned} \quad (5.3)$$

соответствующие теоретическому закону с интегральной функцией распределения $F(x, \theta)$ для всех m интервалов.

При этом $\sum_{i=1}^m n_i = n$ и $\sum_{i=1}^m p_i = 1$.

Проводим расчет статистики критерия согласия χ^2 Пирсона с помощью соотношения

$$\chi_{\text{exp}}^2 = n \sum_{i=1}^m \frac{(n_i/n - p_i)^2}{p_i} \quad (5.4)$$

При проверке гипотезы при $n \rightarrow \infty$ для которой известны, как вид закона $p(x, \theta)$, так и все его параметры θ (простая гипотеза) функция χ_{exp}^2 подчиняется распределению χ_r^2 с $r = m - 1$ степенями свободы (доказано в Pearson, Karl (1900). On the criterion that a given system of deviations from the probable in the case of a correlated system of variables is such that it can be reasonably supposed to have arisen from random sampling. Philosophical Magazine Series 5 50 (302): 157—175.).

Поэтому вероятность ошибки 1-го рода α (вероятность отбросить гипотезу(модель)) находим из уравнения

$$\int_{\chi_{\text{exp}}^2}^{\infty} p(s)ds =$$

$$\int_{\chi_{\text{exp}}^2}^{\infty} \frac{(s)^{(\frac{r}{2}-1)}e^{-\frac{s}{2}}}{2^{\frac{r}{2}}\Gamma(\frac{r}{2})}ds = \alpha ,$$

$$1 - F_r(\chi_{\text{exp}}^2) = \alpha , \quad (5.5)$$

где $F_r(x)$ – интегральная функция вероятности распределения χ_r^2 с r степенями свободы.

5 После вычисления α получаем ответ: **Данная выборка с вероятностью $p = 1 - \alpha$ соответствует теоретическому распределению $p(x, \theta)$ с параметрами θ .**

Или: **Данная выборка с вероятностью α не соответствует теоретическому распределению $p(x, \theta)$ с параметрами θ**

Примечания.

★ На практике (например с помощью точечных оценок) удается оценить(рассчитать) все или часть параметров распределения. Тогда статистика χ^2_{exp} при справедливости проверяемой гипотезы подчиняется χ^2_r -распределению с $r = m - k - 1$ степенями свободы, где k количество оцененных по выборке параметров.

★ Некорректное использование критериев согласия (не построен вариационный ряд для выборки, неверно выбрано число интервалов) может приводить к необоснованному принятию (чаще всего) или необоснованному отклонению проверяемой гипотезы.

★ Существуют и другие критерия согласия : критерий Колмогорова-Смирнова, критерий Мизеса и т.д.

Существует несколько более удобный способ понимания критерия χ^2 . Введем понятие приведенного значения $\tilde{\chi}^2$ (или $\tilde{\chi}^2$ на одну степень свободы), которое определим как

$$\tilde{\chi}^2 = \frac{\chi^2}{r} \quad (5.6)$$

Тогда, каким бы ни было число степеней свободы, наш критерий можно сформулировать следующим образом: если мы получаем значение $\tilde{\chi}^2$ порядка 1 или меньше, то у нас нет оснований сомневаться в нашем ожидаемом распределении; если мы получаем значение $\tilde{\chi}^2$ много большее, чем единица, то невероятно, чтобы наше ожидаемое распределение было верным.

Т.е. если

$$\tilde{\chi}^2 \leq 1, \quad (5.7)$$

то наша выборка соответствует теоретическому распределению.

6. Центральная предельная теорема

В основе моделирования любой величины с помощью случайных чисел лежит одна из центральных предельных теорем.

Пусть имеется N одинаковых независимых случайных величин $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N$, так что распределения вероятностей этих величин совпадают (они могут быть как дискретные, так и непрерывные). Значит их математические ожидания и дисперсии совпадают:

$$M\xi_1 = M\xi_2 = \dots = M\xi_N = m ,$$

$$D\xi_1 = D\xi_2 = \dots = D\xi_N = b^2 .$$

Введем случайную величину ρ_N , которая является суммой случайных величин $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N$

$$\rho_N = \xi_1 + \xi_2 + \dots + \xi_N \quad (6.1)$$

Так как для произвольных независимых случайных величин ξ и ν выполняются соотношения

$$\mathbf{M}(\xi + \nu) = \mathbf{M}\xi + \mathbf{M}\nu \quad \text{и} \quad \mathbf{D}(\xi + \nu) = \mathbf{D}\xi + \mathbf{D}\nu \quad ,$$

то

$$\mathbf{M}\rho_N = \mathbf{M}(\xi_1 + \xi_2 + \dots + \xi_N) = N m \quad ,$$

$$\mathbf{D}\rho_N = \mathbf{D}(\xi_1 + \xi_2 + \dots + \xi_N) = N b^2 \quad .$$

Центральная предельная теорема.

При больших N (т.е. при $N \rightarrow \infty$) случайная величина ρ_N (6.1) описывается нормальным распределением с математическим ожиданием равным Nm и дисперсией $D = Nb^2$ т.е. плотность распределения $p(x)$ равна

$$p(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{(x-a)^2}{2\sigma^2} \right], \quad (6.2)$$

где

$$a = Nm, \quad \sigma = \sqrt{Nb^2} = b\sqrt{N}. \quad (6.3)$$

Следовательно, вероятность найти случайную величину ρ_N (6.1) в пределах от α до β можно рассчитать с помощью соотношения

$$\text{Prob}(\alpha < \rho_N < \beta) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \int_{\alpha}^{\beta} \exp \left[-\frac{(x-a)^2}{2\sigma^2} \right] dx \quad (6.4)$$

или

$$\text{Prob}(\alpha < \rho_N < \beta) = 1/2 \left(\text{erf} \left(\frac{\beta - a}{\sqrt{2}\sigma} \right) - \text{erf} \left(\frac{\alpha - a}{\sqrt{2}\sigma} \right) \right), \quad (6.5)$$

где

$$\text{erf}(x) = \int_0^x e^{-t^2} dt \quad (6.6)$$

является интегралом вероятностей.

Эта теорема эта справедлива и для более широких условий: все слагаемые не обязательно должны быть независимыми и одинаковыми; существенно чтобы отдельные слагаемые не играли слишком большой роли в сумме. Эта теорема объясняет почему нормальные распределения часто встречаются при описании физических явлений.

7. Метод Монте-Карло (метод статистических испытаний)

Метод Монте-Карло. Происхождение метода Монте-Карло. Общая схема ММК. Особенности метода Монте-Карло.

Метод Монте-Карло (ММК) – это численный метод решения математических (физических) задач при помощи моделирования случайных чисел.

Или

Определение 7.1

Метод Монте-Карло (метод статистических испытаний) – общее название группы численных методов, основанных на получении большого числа реализаций стохастического (случайного) процесса, который формируется таким образом, чтобы его вероятностные характеристики совпадали с аналогичными величинами решаемой задачи.

Используется для решения задач в различных областях физики, химии, математики, экономики, оптимизации, теории управления и др.

Происхождение метода Монте-Карло.

Создателями метода статистических испытаний (метода Монте-Карло) считают американских математиков *Неймана, С. Улама, Н.Метрополиса*, а также *Г.Кана и Э.Ферми*. В 1944 году, в связи с работами по созданию атомной бомбы Нейман предложил широко использовать аппарат теории вероятностей для решения прикладных задач с помощью ЭВМ. Первая работа, где этот вопрос систематически излагался, принадлежит *Метрополису и Уламу*. Принято считать 1949 г., когда появилась их работа (*Metropolis N., Ulam S.M., The Monte Carlo method. J.Am.Statistical assoc. 1949 № 247 v.44 p.335-341*) датой рождения метода.



Рисунок 8: Монте-Карло, Монако



Рисунок 9: Казино в Монте-Карло

Теоретическая основа метода была известна уже давно, однако возникновение метода Монте-Карло как весьма универсального численного метода стало возможным только благодаря появлению компьютеров.

Общая схема метода Монте-Карло

Сущность метода статистического моделирования заключается в следующем. Выбирается определенная модель, описывающая исследуемый процесс, явление, систему. На основании математического описания модели и численных методов разрабатывается моделирующий алгоритм, имитирующий внешние воздействия на систему, поведение ее элементов, их взаимодействие и последовательное изменение состояний всей системы во времени.

Затем осуществляется одна случайная реализация моделируемого явления, например: один “распад” радиоактивного атома, один “процесс” прохождения элементарной частицы через вещество, один “обстрел” цели, один “день работы” транспорта, и т.п..

После осуществления единичной реализации моделируемого явления эксперимент многократно повторяется, и по результатам моделирования определяются различные характеристики модели. При этом полнота и достоверность полученной путем моделирования информации о свойственных системе закономерностях зависят от того, насколько точно использованная математическая модель описывает реальную систему, от точности вычислительных методов, использованных при разработке моделирующего алгоритма, и от числа проведенных испытаний.

Суть решения физических задач методом Монте-Карло заключается в следующем:

- Физическому явлению или описывающим его уравнениям сопоставляется имитирующий вероятностный процесс.
- Величинам, являющимся решением задачи, сопоставляются математические ожидания случайных величин вероятностного процесса.
- На основе специального алгоритма псевдослучайных чисел производится расчет реализаций случайных величин имитирующего процесса и решение (вместе со стандартной погрешностью) находится в виде средних значений, соответствующих математическим ожиданиям.

Рассмотрим эту схему несколько более детально. Допустим, нам необходимо вычислить некоторую неизвестную величину со значением m (если она случайная, то m - среднее значение этой величины).

Попытаемся придумать такую случайную величину ξ , для которой

$$M\xi = m \quad \text{и} \quad D\xi = b^2.$$

Рассмотрим N независимых случайных величин $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N$, для которых функции распределения совпадают с распределением случайной величины ξ . Если N достаточно велико, то согласно центральной предельной теореме (см. раздел “Центральная предельная теорема”) распределение суммы $\rho_N = \xi_1 + \xi_2 + \dots + \xi_N$ будет приблизительно нормальным с параметрами $a = N m$, $\sigma = N \sqrt{b}$.

Используя правило “ 3σ ” для нормального распределения

$$\text{Prob}(a - 3\sigma < \xi < a + 3\sigma) = \text{erf}(3) = 0,997 \quad (7.1)$$

в нашем случае имеем:

$$\text{Prob}\left(N m - 3b\sqrt{N} < \rho_N < N m + 3b\sqrt{N}\right) \approx 0,997 \quad (7.2)$$

или

$$\text{Prob}\left(m - \frac{3b}{\sqrt{N}} < \frac{\rho_N}{N} < m + \frac{3b}{\sqrt{N}}\right) \approx 0,997 \quad (7.3)$$

$$\text{Prob} \left(\left| \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \xi_j - m \right| < \frac{3b}{N} \right) \approx 0,997. \quad (7.4)$$

Из этого соотношения следует метод расчета m и оценка погрешности метода.

Итак для получения значения некоторой величины с помощью случайных чисел, найдем N значений случайной величины ξ (т.к. все ξ_i имеют одно распределение, то это эквивалентно нахождению одного значения каждой из ξ_i).

Из соотношения (7.4) следует, что среднее значение (среднее арифметическое) этой величины равно с большой вероятностью величине m , т. е.

$$m = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \xi_j, \quad (7.5)$$

а погрешность вычисления σ не превышает $3b/\sqrt{N}$.

Иногда для оценки погрешности используют вероятностную ошибку r_N

$$r_N = 0,6745 \frac{b}{\sqrt{N}} .$$

Очевидно, эта ошибка стремится к нулю с ростом N .

Отметим две особенности метода статистического моделирования.

Первая – относительная простота вычислительного алгоритма. Как правило, составляется программа для одной реализации, а затем эта процедура N раз повторяется.

Вторая – погрешности вычислений обычно пропорциональны $1/\sqrt{N}$, т. е. метод нецелесообразно применять там, где требуется очень высокая точность вычислений.

Таким образом, единичная реализация является основным элементом метода статистического моделирования и представляет один случай осуществления моделируемого процесса (явления) со всеми присущими ему случайностями. Каждый раз, когда в ход моделируемого процесса вмешивается случайность, должен быть реализован какой-то механизм случайного выбора (бросание монет, костей, вынимание жетона из вращающегося барабана, числа из набора чисел, и т.д.), называемый “единичным жребием”.

Единичный жребий должен давать ответ на один из вопросов: произошло или не произошло некое событие A ? Какое из возможных событий A_1, A_2, \dots, A_k произошло? Какое значение приняла случайная величина X ? какую совокупность значений приняла система случайных величин X_1, X_2, \dots, X_k ? и т.п..

Например, при моделировании прохождения элементарной частицы через вещество единичный жребий должен отвечать на вопросы: произошло или не произошло взаимодействие частицы с веществом (событие A)? Какой процесс произошел при взаимодействии . поглощение или рассеяние (события A_1, A_2, \dots, A_k)?

Если произошло рассеяние, то на какой угол частица рассеялась (случайная величина X)? Какие координаты точки взаимодействия частицы с веществом (система случайных величин X_1, X_2, \dots, X_k)? и т.д..

Каждая реализация случайного явления методом Монте-Карло рассматривается как последовательность конечного числа элементарных случайных событий (единичных жребиев), перемежающихся обычными расчетами. Расчетами учитывается влияние исхода единичного жребия на ход моделирования (в частности, на условия, в которых будет осуществляться следующий единичный жребий).

Для того, чтобы реализовать единичный жребий, необходимо получать на ЭВМ последовательности значений случайных величин (скалярных или векторных) с заданными законами распределения. Поскольку при решении конкретных задач могут потребоваться случайные величины с самыми разнообразными распределениями (пуассоновское, гауссовское, биномиальное, равномерное, экспоненциальное и т.д.), то задача моделирования необходимой случайной величины может показаться невероятно сложной. Однако, все эти задачи могут быть разрешены с помощью одного стандартного механизма, позволяющего решить одну единственную задачу . получить случайную величину, распределенную с равномерной плотностью от 0 до 1.

8. Получение случайных и псевдослучайных чисел

Случайные числа и их применение при решении физических задач. Методы генерации случайных чисел. Недостатки использования случайных чисел в компьютерных экспериментах. Псевдослучайные числа.

При решении многих физических (и не только физических) необходимы случайные числа. И следовательно, нам необходим механизм получения случайных чисел или *генератор случайных чисел*.

Различают три способа получения случайных величин: таблицы случайных чисел, генераторы случайных чисел и метод псевдослучайных чисел.

Табличный метод основан на использование заранее созданных таблиц случайных чисел с различными распределениями. В ходе расчета, когда требуется значение случайной величины, берется значение из таблицы. Необходимо отметить, что составить хорошую таблицу случайных чисел не так просто, как это может показаться. Поэтому составленные таблицы тщательно проверяются с помощью специальных статистических тестов. Такой метод ввиду низкой скорости вычислений в настоящее время практически не используется.

В качестве генераторов случайных величин используют различные приборы. Наиболее известным прибором для получения равномерно распределенных случайных чисел является рулетка. В настоящее время используют электронные приборы. Так например, случайные числа с распределением типа орел-решка можно получить измеряя уровень шумов электронных приборов. Однако и этот метод не свободен от недостатков, так как трудно проверить "качество" полученных чисел.

Отметим недостатки и достоинства датчиков случайных чисел.

Недостатки:

- Необходимо специальное устройство.
- Неповторимость результатов.

Достоинства:

- Числа, получаемые при помощи этих генераторов являются действительно случайными.

В настоящее время при расчетах используют не случайные величины, а числа имитирующие их поведение. Такие числа называются **псевдослучайными числами**. Имитировать поведение случайных чисел можно с помощью формул. Большинство алгоритмов для получения псевдослучайных чисел γ имеют вид

$$\gamma_{k+1} = \Phi(\gamma_k) . \quad (8.1)$$

В качестве, элементарного примера, рассмотрим **метод середины квадратов** (предложен Дж.Нейманом) для получения равномерно распределенной величины в промежутке от 0 до 1.

Выберем произвольное действительное число γ_0 с 4 знаками после запятой, которое лежит от 0 до 1 и возведем его в квадрат:

$$\gamma_0 = 0,9876 \quad (\gamma_0)^2 = 0,97\boxed{5353}76 \quad (8 \text{ знаков}) .$$

Из середины $(\gamma_0)^2$ берем 4 цифры и получаем число γ_1 и возводим его также в квадрат

$$\gamma_1 = 0,5353 \quad (\gamma_1)^2 = 0,28\boxed{6546}09 \rightarrow$$

Аналогично процедуре получения γ_1 находим число

$$\gamma_2 = 0,6546 .$$

Выполняя эту процедуру N раз получим набор чисел

$$\{\gamma_0, \gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_N\} = \{0,9876, 0,5353, 0,6546, \dots\}$$

имитирующих поведение случайной величины равномерно распределенной в промежутке $(0,1)$. Отметим сразу, что от этого метода вычислители отказались, так как в последовательностях, построенных таким образом, получается больше чем нужно малых чисел.

Известно, что случайные числа, равномерно распределенные в интервале $(0,1)$, могут быть получены из трансцендентных чисел, таких, как $\pi = 3.14159265358\dots$ "разрезанием" мантиссы этого числа на части, содержащие определенное количество цифр, если каждую из них считать мантиссой очередного случайного числа: 0.141, 0.592, 0.653, В микрокалькуляторах последовательность случайных чисел часто получают с помощью рекуррентной формулы: $\gamma_{k+1} = M(37 \gamma_k)$, где символ $M(x)$ означает мантиссу числа x . Встроенные программы в ЭВМ используют близкую идею.

Отметим, достоинства и недостатки псевдослучайных чисел.

Достоинства:

- Скорость генерирования псевдослучайных чисел очень большая.
- Затрачивается мало памяти.
- Данную последовательность случайных чисел можно легко воспроизвести.

Недостатки:

- Ограниченность количества случайных чисел $\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_k$. Ибо, если последовательность вычисляется по формуле $\gamma_{k+1} = \Phi(\gamma_k)$, то эта последовательность обязательно периодическая.

Происходит это из-за того, что в ячейках памяти ЭВМ можно записать конечное число нулей и единиц и рано или поздно одно из значений γ , например γ_L совпадает с одним из предыдущих γ_k и тогда:

$$\gamma_{L+i} = \gamma_{k+i} \quad , \quad i = 1, 2, \dots \quad (L > k) \quad ,$$

где $P = L - k$ — длина периода .

9. Методы генерации псевдослучайных чисел

Розыгрыш дискретной случайной величины. Метод обратной функции. Метод Неймана. Метод суперпозиции. Метод Батлера. Комбинированный метод. Методы тестирования генераторов псевдослучайных чисел.

При решении различных задач приходится моделировать различные распределения вероятностей случайных величин. Поэтому возникает задача: как это сделать наиболее экономным способом.

Для решения этой задачи предложена идея конструктивного задания случайных процессов (Н.Винер, П.Леви). Идея состоит в том, чтобы моделировать все распределения исходя из одной “стандартной” случайной величины. Таким распределением является равномерное распределение случайной величины γ на интервале $(0, 1)$. Значения же других случайных величин можно получить путем преобразования из “стандартной”.

Определение 9.1

Процесс получения некоторой случайной величины ξ путем преобразования одного или нескольких значений “стандартного” случайной величины γ называют **розыгрышем случайной величины ξ** .

Рассмотрим несколько методов розыгрыша ξ для разных видов распределений.

Дискретная случайная величина χ , как правило, задается законом распределения в виде таблицы

$$\chi = \begin{pmatrix} x_1, x_2, \dots, x_n \\ p_1, p_2, \dots, p_n \end{pmatrix} \quad (9.1)$$

где x_1, x_2, \dots, x_n — значения случайной величины χ , а p_1, p_2, \dots, p_n — вероятности появления этих значений. Другими словами $\text{Prob}(\chi = x_i) = p_i$.

Наша задача состоит в воспроизведении значений x_1, x_2, \dots, x_n случайной величины χ , с вероятностями появления равными p_1, p_2, \dots, p_n соответственно.

Алгоритм розыгрыша дискретной случайной величины

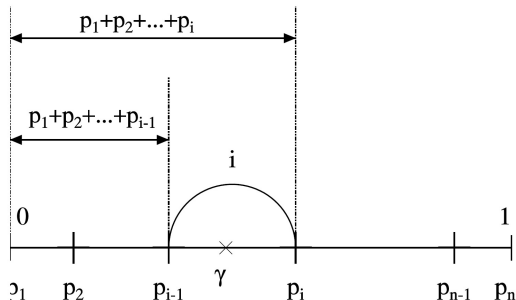
- 1 Необходимо разбить интервал $(0, 1)$ на n - интервалов, длины которых равны p_1, p_2, \dots, p_n соответственно.
- 2 Разыгрываем значение стандартной случайной величины γ .
- 3 Проверяем условие попадания значения γ в i -тый интервал длиной p_i :

$$p_1 + p_2 + \dots + p_{i-1} < \gamma < p_1 + p_2 + \dots + p_i . \quad (9.2)$$

Если неравенство верно, то приписываем случайной величине χ значение, соответствующее данному интервалу т.е. x_i .

- 4 При необходимости повторяем шаги 1 – 3 несколько раз с помощью новых значений стандартной величины γ для получения других значений дискретной случайной величины с законом распределения вероятностей (9.1).

На рисунке 10 представлено графическая иллюстрация алгоритма розыгрыша дискретной величины.



$$p_1+p_2+\dots+p_{i-1} < \gamma < p_1+p_2+\dots+p_i$$

Рисунок 10: Схема розыгрыша дискретной величины

Для экономии времени выгодно расположить значения дискретной случайной величины x_i , так чтобы выполнялось соотношение $p_1 < p_2 < \dots < p_n$.

Метод обратной функции

Метод обратной функции основан на теореме

Теорема 9.2

Если случайная величина ξ имеет плотность распределения вероятности $p(x) > 0$ на интервале (a, b) ($a < x < b$), то случайная величина ξ удовлетворяющая уравнению

$$F(\xi) = \gamma \quad (9.3)$$

где $F(x)$ функция распределения

$$F(x) = \int_a^x p(x') dx' ,$$

а γ стандартная равномерно распределенная величина на интервале $(0, 1)$ величина имеет плотность распределения $p(x)$.

Как следует из этой теоремы, с помощью генератора случайных чисел γ уравнение

$$\gamma = F(x) = \int_a^x p(x') dx' \quad (9.4)$$

позволяет воспроизвести значения случайной величины ξ с плотностью распределения $p(x)$ на интервале (a, b) путем обращения (инверсии) уравнения (9.4):

$$x = F^{-1}(\gamma) . \quad (9.5)$$

Такой метод получения называют **методом обратной функции** (или **методом инверсии**).

Рассмотрим примеры:

Пример 1.

Пусть случайная величина ξ имеет плотность распределения вероятности $p(x) = Ce^{-\alpha x}$ на интервале (a, b) , где константа C определяется из условия нормировки.

Пример 2.

Аналогично легко получить, если γ равномерно распределенная случайная величина на $(0, 1)$, то значения случайной величины, рассчитанной по формуле

$$x = (b - a)\gamma + a$$

равномерно распределены на (a, b) т.е. имеют плотность распределения вероятности

$$p(x) = \frac{1}{b - a} .$$

Пример 3. Выбор случайного направления в пространстве.

Когда говорят о случайном направлении, подразумевают выбор в ситуации, когда все направления равновероятны. Направление в трехмерном пространстве удобно задать с помощью единичного вектора $\vec{\Omega}$:

$$\vec{\Omega} = \{\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta\}, \quad (9.6)$$

где углы сферические углы θ, ϕ изменяются в пределах: $0 \leq \theta < \pi, 0 \leq \phi < 2\pi$.
Формулы для выбора случайного направления имеют вид

$$\cos \theta = 2\gamma_1 - 1, \quad \phi = 2\pi\gamma_2. \quad (9.7)$$

Как видно, из примеров, этот метод применим, если удастся решить уравнение (9.4) относительно значения случайной величины x . Однако, для большого класса распределений это сделать не удастся. Тогда используются другие методы.

Метод Неймана

Метод Неймана (метод отбраковки) основан на следующей теореме из математической статистики и теории вероятностей.

Теорема 9.3

Пусть ξ —случайная величина, с плотностью распределения $p(x) \leq c$ (— некоторое положительное число) на интервале $a < x < b$. Если γ_1 и γ_2 — независимые случайные величины и

$$\xi' = a + \gamma_1(b - a) \quad , \quad \nu' = c \gamma_2 \quad (9.8)$$

то случайная величина ξ , определяемая условием:

$$\xi = \xi' \quad , \quad \text{если} \quad \nu' < p(\xi') \quad (9.9)$$

имеет плотность вероятности равную $p(x)$.

Исходя из этой теоремы метод получения значений случайной величины ξ с плотностью распределения $p(x) \leq c$ на интервале (a, b) состоит в следующем:

- 1 Получаем пару значений γ_1, γ_2 с помощью стандартного генератора.
- 2 С их помощью строим два случайных числа

$$\xi' = a + \gamma_1(b - a) \quad (9.10)$$

равномерно распределенное на интервале (a, b) и

$$\nu' = c \gamma_2 \quad (9.11)$$

равномерно распределенное на интервале $(0, c)$

- 3 С помощью чисел ξ' и ν' проверяем выполнение условия

$$\nu' < p(\xi') \quad (9.12)$$

- 4 Если условие (9.12) выполняется, то считаем, что значение случайной величины ξ равно ξ' , если условие не выполняется, то повторяем процедуру начиная с шага 1.

Графическая иллюстрация метода Неймана представлена на рисунке 11.

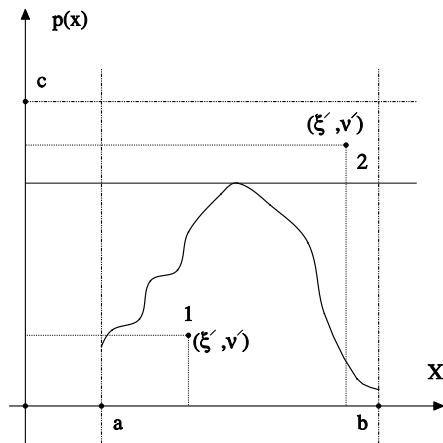


Рисунок 11: Графическое представление метода Неймана

Как видим, в отличие от метода обратной функции здесь возможна ситуация, когда случайное значение полученное с помощью чисел γ_1, γ_2 может быть отброшено. Для характеристики таких ситуаций введем понятие эффективности метода розыгрыша случайных величин.

Определение 9.4

Эффективность метода называется вероятность того, что случайное значение полученное с помощью набора стандартных случайных чисел $(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n)$ будет принято, а не отброшено.

Для метода Неймана несложно найти

$$\text{Эффективность} \sim \frac{1}{c(b-a)} . \quad (9.13)$$

Так как a, b являются константами для заданной плотности вероятности, следовательно, чтобы повысить эффективность метода Неймана лучше всего принять $c = \max p(x)$ на (a, b) .

Метод суперпозиции

Первая версия этого метода получения случайных чисел с заданным законом распределения вероятностей была предложен *Дж.Батлером*.

Предположим, что функция распределения $F(x)$ может быть представлена в виде:

$$F(x) = \sum_{k=1}^n C_k F_k(x) , \quad (9.14)$$

так, что все значения $C_k > 0$ и $C_1 + \dots + C_n = 1$, причем $F_k(x)$ достаточно "простые" функции (например, могут быть разыграны методом обратной функции).

Введем дискретную величину ν с помощью числа слагаемых в (9.14) и коэффициентов C_k

$$\nu = \begin{pmatrix} 1, 2, \dots, n \\ C_1, C_2, \dots, C_n \end{pmatrix}, \quad (9.15)$$

т. е. значения случайной величины ν представляют собой номер слагаемого в ряде (9.14), а значения коэффициентов этого разложения представляют собой вероятности появления соответствующих номеров слагаемых.

Тогда алгоритм розыгрыша случайной величины ξ с функцией распределения $F(x)$ (9.14) методом суперпозиции состоит в следующем:

- ❶ Получаем пару значений γ_1, γ_2 с помощью стандартного генератора.
- ❷ С помощью γ_1 проведем розыгрыш дискретной величины ν (9.15) посредством алгоритма, изложенного ранее. Результатом розыгрыша будет **число** k , нумерующее соответствующее слагаемое в разложении функции распределения (9.14).
- ❸ С помощью полученного числа k выбираем соответствующую функцию $F_k(x)$ и проводим розыгрыш значения ξ методом обратной функции, используя число γ_2 :

$$x = F_k^{-1}(\gamma_2). \quad (9.16)$$

- ❹ При необходимости повторяем шаги 1 – 3 несколько раз с помощью значений стандартной величины γ для получения новых значений случайной величины с законом распределения вероятностей $F(x)$ (9.14).

Модифицированный метод суперпозиции

Оказывается при реализации метода суперпозиции можно ограничиться одним случайным числом γ (Г.А.Михайлов Ж. вычисл. матем. и матем. физ., 1966 Т.6. № 2, с.380-384.)

В отличие от алгоритма метода суперпозиции вместо числа розыгрыша γ_2 можно использовать число η , которое можно рассчитать с помощью числа γ_1 и коэффициентов разложения C_k

$$\eta = \frac{\gamma_1 - \sum_{j=1}^{k-1} C_j}{C_k} . \quad (9.17)$$

Пример.

Пусть необходимо получить значения случайной величины с плотностью распределения вероятности $p(x) = \frac{3}{8}(1 + x^2)$ для $-1 < x < 1$ (закон Релея в оптике или угловое распределение фотонов в комптоновском рассеянии). Представим $p(x)$ в виде

$$\begin{aligned} p(x) &= \frac{3}{8}(1 + x^2) = \\ &= 3/4 p_1(x) + 1/4 p_2(x) \end{aligned} \quad (9.18)$$

где

$$p_1(x) = 1/2 \quad p_2(x) = 1,5x^2.$$

тогда соответствующая функция распределения $F(x)$ представима в виде суммы

$$F(x) = 3/4 F_1(x) + 1/4 F_2(x) \quad (9.19)$$

где

$$F_1(x) = \frac{x+1}{2}, \quad F_2(x) = \frac{x^3}{2}.$$

Тогда процесс получения значений случайной величины с заданным интегральным законом распределения состоит в выполнении следующих шагов

- 1 Разыгрываем номер как значение дискретной величины

$$\nu = \begin{pmatrix} 1, & 2 \\ 3/4, & 1/4 \end{pmatrix}, \quad (9.20)$$

используя число γ_1

- 2 Затем, получаем значение случайной величины из уравнений

$$x = F_1^{-1}(\gamma_2), \text{ если } k = 1 \text{ или}$$

$$x = F_2^{-1}(\gamma_2), \text{ если } k = 2,$$

используя число γ_2 . В итоге имеем значение x случайной величины

$$x = \begin{cases} 2\gamma_2 - 1, & \text{если } \gamma_1 < 0,75 \\ \sqrt[3]{2} \gamma_2, & \text{если } \gamma_1 > 0,75. \end{cases} \quad (9.21)$$

Пусть функцию плотности распределения можно представить в виде:

$$p(x) = \sum_{i=1}^n \alpha_i f_i(x) g_i(x) \quad (9.22)$$

где $\alpha_i > 0$; $0 \leq g_i(x) \leq 1$.

Функции $f_i(x)$ являются плотностями распределений т.е. $f_i(x) \geq 0$ для всех x из области определения ($a < x < b$) и

$$\int_a^b f_i(x) dx = 1 \quad (9.23)$$

Обозначим функции распределений вероятностей как $F_i(x)$ для соответствующих $f_i(x)$:

$$F_i(x) = \int_a^x f_i(x') dx' . \quad (9.24)$$

Тогда алгоритм розыгрыша случайной величины x подчиняющейся закону распределения с плотностью вероятности $p(x)$ (9.22) выглядит следующим образом:

- 1 Получаем пару значений γ_1, γ_2 с помощью стандартного генератора.
- 2 С помощью γ_1 выбираем случайное число j ($1 \leq j \leq n$) нумерующее соответствующее слагаемое в разложении функции распределения (9.22) с вероятностью пропорциональной α_i посредством алгоритма, изложенного в (??) т.е. такое для которого выполняется условие

$$\left(\sum_{i=1}^{j-1} \alpha_i \right) / \left(\sum_{i=1}^n \alpha_i \right) < \gamma_1 < \left(\sum_{i=1}^j \alpha_i \right) / \left(\sum_{i=1}^n \alpha_i \right). \quad (9.25)$$

- 3 Разыгрывается случайная величина x с плотностью распределения $f_j(x)$ методом обратной функции т.е.

$$x = F_j^{-1}(\gamma_2)$$

- 4 Далее, отбирается такая случайная величина x для которой

$$g_j(x) \leq \gamma_2$$

В противном случае величина x бракуется и процедура повторяется вновь.

Этот метод удобен, если число слагаемых n в разложении (9.22) невелико, а розыгрыш плотностей распределений $f_i(x)$ производится методом обратной функции. Для повышения эффективности важно, чтобы значение $g_i(x)$ не сильно отличаются от 0 для всех x (т.е. пункт 3 выполнялся бы достаточно редко).

Среднее число попыток для розыгрыша одной случайной величины:

$$\bar{k} = \sum_{i=1}^n \alpha_i$$

Данный метод активно используется при моделировании характеристик процессов взаимодействия элементарных частиц.

Моделирование специальных распределений

Пусть имеется случайная величина ξ с нормальным распределением, которое имеет математическое ожидание a и дисперсию D :

$$a = 0, \quad \sigma = \sqrt{D} = 1 \quad (9.26)$$

Тогда для ее розыгрыша можно использовать:

Метод с использованием центральной предельной теоремы

$$\xi^{(n)} = \sqrt{\frac{12}{n}} \sum_{i=1}^n \left(\gamma_i - \frac{1}{2} \right) \quad (9.27)$$

при $n \rightarrow \infty$ случайная величина $\xi^{(n)}$ имеет нормальное распределение с параметрами (9.26). Обычно, для удобства выбирают $n = 12$ т.е.

$$\xi^{(12)} = \sum_{i=1}^{12} (\gamma_i) - 6$$

В ряде случаев для улучшения свойств применяют специальное преобразование, которое дает случайную величину $\nu^{(n)}$ с нормальным распределением:

$$\nu^{(n)} = \xi^{(n)} + \frac{1}{20n} ((\xi^{(n)})^3 - 3\xi^{(n)}) . \quad (9.28)$$

Двумерное нормальное распределение

$$p(x, y) = \frac{1}{2\pi} e^{-(x^2+y^2)/2} .$$

Величины ξ, ν имеют нормальное стандартное распределение:

$$\xi = \sqrt{-2 \ln \gamma_1} \cos (2\pi \gamma_2) , \quad \nu = \sqrt{-2 \ln \gamma_1} \sin (2\pi \gamma_2) . \quad (9.29)$$

Заметим, что ξ и ν подчиняются совместно распределению (9.28).

Отметим, что для получения значений случайной величины x , имеющего нормальное распределение с произвольными значениями параметров a , σ используют преобразование

$$x = a + \sqrt{2}\sigma\xi . \quad (9.30)$$

где ξ – значения стандартизированного нормального распределения

Метод Монте-Карло в задаче переноса элементарных частиц

Рассмотрим применение компьютерного эксперимента в моделировании процессов взаимодействия заряженных, нейтральных частиц со средой.

Почему выбран именно раздел физики: взаимодействие части с веществом? Дело в том, что эта область имеет массу прикладных аспектов:

- 1 Моделирование физического эксперимента на ускорителях и с космическим излучением.
 - 2 Радиационная защита ускорителей и космических аппаратов.
 - 3 Пучковая терапия.
 - 4 Радиобиология.
 - 5 Рентгеновский анализ в медицине и в технике.
 - 6 Микродозиметрия.
- и т.д.

Первым этапом как следует из схемы КЭ является формулировка **физической модели**.

Задача переноса частиц в среде

Нашим объектом исследования являются частицы (заряженные, нейтральные) движущие в среде. Когда речь идет о переносе этих частиц в некоторой среде, то основная масса задач ставится при следующих достаточно общих сведениях об объекте исследования:

- 1 Рассеивающие центры среды (атомные электроны, ядра) расположено случайным образом, хотя и не обязательно с постоянной плотностью.
- 2 Падающие частицы (любые элементарные частицы) взаимодействуют только с одним рассеивающим центром. В данном случае мы пренебрегаем процессами когерентного рассеяния на нескольких центрах, когда проявляются волновые свойства элементарных частиц.
- 3 Падающие частицы не взаимодействуют друг с другом. Такое предположение является достаточно хорошим приближением, если плотность потока падающих частиц достаточно мала. Однако, если эффекты взаимодействия в пучке достаточно важны в какой-либо ситуации то можно и учитывать такое взаимодействие.

Предположения 1 — 3 позволяют нам построить следующую картину прохождения частиц через вещество: частицы движется в среде по прямолинейной траектории (естественно понятие траектории можно ввести в пределах принципа неопределенности Гейзенберга) до рассеивающего центра, где происходит взаимодействие частицы и рассеивающего центра. Далее в точке взаимодействия происходит изменение траектории частицы, меняется состояние падающей частицы, возникают новые частицы, а также изменяется состояние рассеивающих центров.

Графически картину распространения частицы в среде можно представить следующим образом (см. рисунок 12):

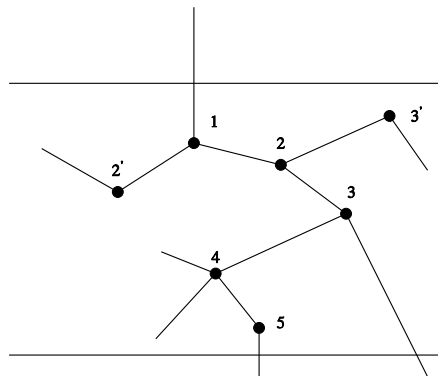


Рисунок 12: Картина прохождения частицы в веществе

Типы взаимодействий элементарных частиц

Итак проведем детализацию физической модели прохождения элементарных частиц через вещество, состоящего из атомов. И начнем с взаимодействий которые должны определять картину продвижения частиц в среде.

В настоящее время физикам известно четыре фундаментальных (основных) взаимодействия: сильные взаимодействия, электромагнитные взаимодействия, слабые взаимодействия и гравитационные взаимодействия (см. таблицу 1)

№	Виды взаимодействий	Отн. интенсивность	R
1	Сильные	1	10^{-13}
2	Электромагнитные	10^{-4}	∞
3	Слабые	10^{-24}	10^{-11}
4	Гравитационные	10^{-40}	∞

Таблица 1: Взаимодействия элементарных частиц.

Как видно из таблицы роль гравитационного взаимодействия на атомном масштабе очень мала и поэтому мы не будем учитывать этот вид взаимодействия. Основную роль играют сильные и электромагнитные взаимодействия.

Рассмотрим какие процессы определяют картину прохождения элементарных для **электромагнитных взаимодействий**.

Взаимодействие фотонов с веществом

Характерные особенности взаимодействия γ -квантов состоят в следующем: Во-первых, γ -квант - частица нейтральная и поэтому в газах обладает гораздо меньшей ионизирующей способностью по сравнению с α и β -излучением. Во-вторых, γ -кванты не тормозятся, как заряженные частицы, а либо поглощаются, либо рассеиваются в результате взаимодействия с атомами вещества.

При прохождении слоя вещества dx интенсивность γ -излучения уменьшается на dI , причем имеет место следующее соотношение:

$$dI = -\mu I dx , \quad (10.1)$$

где μ - линейный коэффициент поглощения. Интегрирование (10.1) дает

$$I(x) = I_0 \exp(-\mu x) , \quad (10.2)$$

Ослабление пучка фотонов происходит в основном за счет трех процессов:
 1 процесс - атомарный фотоэффект. Этот процесс аналогичен оптическому фотоэффекту, но при этом ядерный γ -квант может выбивать электрон не только с внешней оболочки, с любой другой. Энергия поглощенного кванта передается электрону, который покидает атом, имея энергию $E_e = E_\gamma - I_{\text{ион}} - E_{\text{отд}}$, где $I_{\text{ион}}$ - энергия ионизации уровня, с которого был выбит электрон, а $E_{\text{отд}}$ -энергия отдачи ядра, которая обычно мала.

Существенной особенностью фотоэффекта является то, что он не может происходить на свободном электроны. Его вероятность тем больше, чем ближе значение энергии γ -кванта E_γ к значению $I_{\text{ион}}$. Полное эффективное сечение этого процесса сильно зависит от порядкового номера поглотителя Z и E_γ :

$$\sigma_{\text{фот}}(\varepsilon) = \left(\frac{32\pi r_e^2}{3} \right) \alpha^4 Z^5 \sqrt{\frac{2}{\varepsilon^7}} \quad \text{при} \quad \varepsilon_{\text{ион}} < \varepsilon < 1$$

и

$$\sigma_{\text{фот}} = \frac{4 \pi r_e^2 \alpha^4 Z^5}{\varepsilon} \quad \text{при} \quad \varepsilon > 1 \quad (10.3)$$

Здесь
 $\varepsilon_{\text{ион}} = I_{\text{ион}}/(m_e c^2)$, $\varepsilon = E_\gamma/(m_e c^2)$, $r_e = 2,8 \text{ Фм}$ - классический радиус
электрона, $\alpha = 1/137$ - постоянная тонкой структуры.

Процесс фотоэффекта дает основной вклад при энергиях γ - кванта до 100 КэВ.

2 процесс- эффект Комптона или неупругое (т. е. с потерей энергии) или рассеяние γ -кванта на электронах. При этом происходит изменение направления движения γ -кванта и потеря им энергии. Электрон, с которым взаимодействовал фотон, выбивается с оболочки. Для случая $E_\gamma \gg I_{\text{ион}}$ электрон можно считать свободным, и поэтому этот процесс легче анализировать. Полное сечение рассеяния на один электрон при очень низких энергиях дается классической формулой Томпсона:

$$\sigma_T = \frac{8 \pi r_e^2}{3}. \quad (10.4)$$

Для релятивистских энергий γ -квантов квантово- механические вычисления приводят к формуле Клейна - Нишишимы -Тамма:

$$\begin{aligned} \sigma_K(\varepsilon) = (2\pi r_e^2) \left[\left(\frac{1+\varepsilon}{\varepsilon^2} \right) * \left[\frac{2(1+\varepsilon)}{1+2\varepsilon} - \frac{1}{\varepsilon} \ln(1+2\varepsilon) \right] + \right. \\ \left. + \left(\frac{1}{2\varepsilon} \right) \ln(1+2\varepsilon) - \frac{1+3\varepsilon}{(1+2\varepsilon)^2} \right] \quad (10.5) \end{aligned}$$

Для двух предельных случаев это соотношение сильно упрощается:

$$\sigma_K(\varepsilon) = \sigma_T (1 - 2\varepsilon) \quad \text{для } \varepsilon \ll 1, \quad (10.6)$$

$$\sigma_K(\varepsilon) = \left(\frac{3}{8\varepsilon}\right) \sigma_T \left(\frac{1}{2} + \ln(2\varepsilon)\right) \quad \text{для } \varepsilon \gg 1. \quad (10.7)$$

Основной вклад в ослабление пучка фотонов эффект Комптона вносит при энергии E_γ порядка 1 МэВ.

Наконец, третьим основным процессом, ответственным за ослабление пучка фотонов при прохождении через вещество, является процесс Рождения Электрон-Позитронной Пары (РЭПП).

Процесс *РЭПП* энергетически возможен, когда $E_\gamma > 2m_e c^2 = 1,02$ МэВ и происходит в кулоновском поле заряженной частицы. Такой частицей в веществе является ядро. *РЭПП* на электронах происходит с меньшей вероятностью, чем на ядре, и только при энергиях $E_\gamma > 4 m_e c^2$. Зависимость сечения от E_γ и Z достаточно сложна и приближенно может быть записана в следующем виде:

$$\sigma_{ph}(\varepsilon) = (4\alpha r_e^2 Z^2) \left[\frac{7}{9} \ln(2\varepsilon) - \frac{109}{54} \right] \quad \text{для} \quad 1 < \varepsilon < \frac{137}{Z^{1/3}}$$

$$\sigma_{ph}(\varepsilon) = (4\alpha r_e^2 Z^2) \left[\frac{7}{9} \ln\left(\frac{183}{Z^{1/3}}\right) - \frac{1}{54} \right] \quad \text{для} \quad \varepsilon \gg \frac{137}{Z^{1/3}} \quad (10.8)$$

Этот процесс начинает играть доминирующую роль по сравнению с фотоэффектом и Комптон эффектом, начиная с $E_\gamma > 2$ МэВ.

Таким образом, полное сечение взаимодействия γ -квантов со средой может записана как сумма трех слагаемых:

$$\sigma = \sigma_{\Phi} + \sigma_K + \sigma_h \quad (10.9)$$

Кроме перечисленных трех механизмов взаимодействия γ -излучения с веществом имеются и другие процессы: когерентное рассеяние на электронах, рассеяние на атомных ядрах, фоторасщепление ядер. Однако при прохождении гамма-квантов с энергией порядка одного или нескольких МэВ все эти процессы не играют заметной роли в ослаблении интенсивности пучка.

Коэффициент поглощения μ связан с полным сечением σ соотношением:

$$\mu = \frac{\sigma N_A \rho}{A}, \quad (10.10)$$

где N_A – число Авогадро, ρ – плотность вещества, A – атомная масса.

Взаимодействие заряженных частиц с веществом. Многократное кулоновское рассеяние

Проходя через конечный слой вещества заряженная частица взаимодействует с атомными электронами и ядрами посредством электромагнитных сил. В большинстве случаев изменение направления движения происходит на небольшие углы. Однако из-за высокой частоты столкновений частица после прохождения слоя вещества может заметно изменить направление своего движения. Такой процесс называют *многократным кулоновским рассеянием*.

Таким образом, в процессе многократного кулоновского рассеяния точка выхода заряженной частицы смещается относительно точки B , получаемой простым продолжением первоначального направления движения частицы до границы вещества. На выходе частица характеризуется координатами $\Delta x, \Delta y, t$, описывающие смещение точки выхода относительно точки B и направлением движения, которое можно описать сферическими углами θ, ϕ . Очевидно, что частица проходит расстояние l , которое больше чем толщина слоя t (см. рисунок 13).

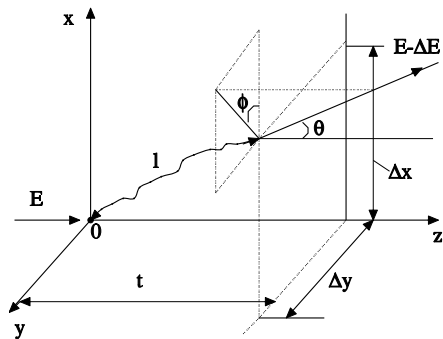


Рисунок 13: Картина прохождения частицы в веществе

Во время прохождения через вещество заряженная частица передает часть своей энергии атомам среды в основном за счет следующих процессов взаимодействия:

- Возбуждение атомов: переход атомных электронов из состояния с низкой энергии в состояние с более высокой.
- Ионизация атомов: выбивание электронов из атомов с образованием положительного заряженного иона и отрицательно заряженных электронов.
- Тормозное излучение: испускание заряженной частицей фотона за счет изменения направления движения при взаимодействии с ядром и атомным электроном
- Процесс рождения электрон-позитронной пары $e^- e^+$ в поле атомного электрона или ядра
- Образование мюон-антимюонной пары $\mu^- \mu^+$ в поле атомного электрона или ядра. Последний процесс, как правило не учитывается, так как вероятность образования пары $\mu^- \mu^+$ в 10^4 раза меньше, чем вероятности рождения пары $e^- e^+$.

Прохождение любых частиц через вещество, как уже отмечали, сопровождается потерей энергии. Поэтому для характеристики процесса потери энергии частицы вводят среднюю потерю энергии этой частицы на единицу длины dE/dx . Для заряженных частиц такие потери делят на две части: ионизационные потери энергии и радиационные потери (за счет тормозного излучения)-

$$dE/dx = (dE/dx)_{\text{иониз}} + (dE/dx)_{\text{рад}} . \quad (10.11)$$

Во некоторых случаях можно получить аналитические выражения для этих потерь. Так для релятивистских электронов, движущихся с энергией E_e можно записать:

$$-\left(\frac{dE}{dx}\right)_{\text{иониз}} = \frac{4\pi \rho Z N_A e^4 (E_e + m_e c^2)}{A (E_e - m_e c^2) (E_e + 2 m_e c^2)} \ln \left(\frac{1.166 E_e}{I_{\text{иониз}}} \right), \quad (10.12)$$

где N_A -число Авогадро, ρ -плотность вещества, A -атомная масса, Z - атомный номер ядра изотопа, из которого состоит данное вещество. Величины e, c физические константы: заряд электрона и скорость света соответственно. Параметр $I_{\text{иониз}}$ представляет собой средний ионизационный потенциал вещества (средняя энергия необходимая для отрыва атомного электрона). В частности, значения ионизационного потенциала можно рассчитать по эмпирической формуле

$$I_{\text{иониз}} = (9.76 + 58.8 Z^{-1.19}) Z \text{ эВ}. \quad (10.13)$$

Радиационные потери на единицу длины вычисляются в аналитическом виде, если пренебречь эффектами экранировки заряда ядра атомными электронами. Тогда

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_{\text{рад}} = \frac{4 r_E \alpha \rho N_A Z (Z + 1) E}{A} \ln \left(183 Z^{-1/3} + 1/18 \right), \quad (10.14)$$

где $r_e = 2,8$ Фм - классический радиус электрона, $\alpha = 1/137$ - постоянная тонкой структуры.

Расчеты показывают, что потери на излучение доминируют над потерями на ионизацию для электронов, начиная с энергии $E \geq 700/(Z + 1)$ МэВ. Для тяжелых заряженных частиц эта граница при которой потери энергий сравниваются увеличивается. Так мюонов ($m_\mu \approx 200m_e$), проходящих через вещество с $Z = 1$ такая граница приблизительно равна 350 ГэВ (для электронов 350 МэВ).

Также с помощью расчетов можно установить, что потери энергии на образование $e^- e^+$ пары приблизительно в $\alpha^{-1} = 137$ раз меньше потерь на тормозное излучение.

Электрон-фотонный ливень

Если энергия первичной частицы, скажем фотона достаточно велика, то после первого этапа, в котором за счет процессов фотоэффекта, комптоновского рассеяния или рождения $e^- e^+$ пары будут образовываться электроны и позитроны. Энергия этих образовавшихся электронов и позитронов достаточно, чтобы образовать после реакций взаимодействий (например, тормозного излучения или двухфотонной аннигиляции позитрона и электрона) следующее поколение высокоэнергетических фотонов.

Эти процессы происходят поочередно, и число частиц растет, пока их энергия не окажется слишком малой чтобы образовывать новые частицы. В ходе такого каскадного процесса все большее число электронов попадает в область где радиационные потери (т.е. когда появляются новые фотоны) не могут конкурировать с потерями на ионизацию. В конце концов, вся энергия первичного фотона (электрона) не окажется полностью растраченной на возбуждение и ионизацию атомов. Описанное явление называют *электрон-фотонным ливнем (ЭФЛ)* (см. рисунок 14).

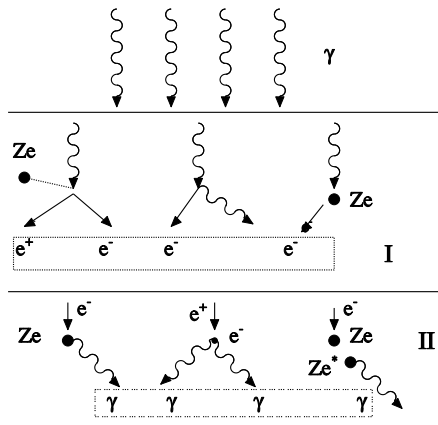


Рисунок 14: Электрон-фотонный ливень

Системы отсчета

Для начала рассмотрим некоторые понятия необходимые при описании процессов взаимодействия элементарных частиц: системы отсчета и сечение процесса взаимодействия.

Реакции взаимодействия частиц изучают в различных системах отсчета. В двухчастичном процессе соударения сталкиваются две частицы 1 и 2 с 4-импульсами $p_1 = (E_1, \vec{p}_1)$ и $p_2 = (E_2, \vec{p}_2)$ соответственно. Величины p_1 и p_2 обычно фиксированы условиями эксперимента в пределах ошибок измерения. Система отсчета определяется требованиями, чтобы \vec{p}_1 или \vec{p}_2 имело то или иное значение.

Чаще всего употребляются:

Лабораторная система (ЛС) – система, в которой проводится эксперимент и измеряются все энергии и импульсы. Это может быть либо система отсчета, в которой пучок частиц налетает на неподвижную мишень(см. рисунок 15):

$$\vec{p}_2 = 0 . \quad (11.1)$$

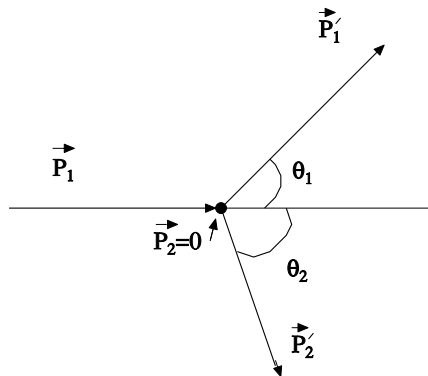


Рисунок 15: Лабораторная система отсчета

Система центра инерции (СЦИ) – система, в которой (см. рисунок 16)

$$\vec{p}_1 + \vec{p}_2 = 0 \quad (11.2)$$

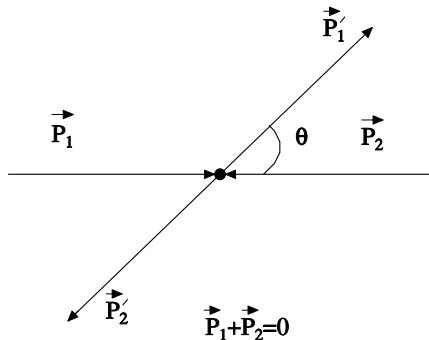


Рисунок 16: Система центра инерции

В результате столкновения частиц могут рождаться новые частицы. Их количество и состав определяются законами сохранения и динамикой взаимодействий. Наиболее простой случай столкновения- это бинарные реакции:

$$1 \ (E_1, \vec{p}_1, m_1) + 2 \ (E_2, \vec{p}_2, m_2) \rightarrow 1' \ (E'_1, \vec{p}'_1, m'_1) + 2' \ (E'_2, \vec{p}'_2, m'_2) . \quad (11.3)$$

Рассмотрим основные кинематические соотношения для бинарных реакций, которые следуют из закона сохранения 4-импульса. Такие соотношения играют важную роль при моделировании характеристик вторичных частиц. Рассмотрим для начала лабораторную систему отсчета.

Запишем систему для импульсов и энергий частиц участвующих в такого рода взаимодействиях:

$$\vec{p}_1 = \vec{p}'_1 + \vec{p}'_2 , \quad (11.4)$$

$$E_1 + m_2 = E'_1 + E'_2 . \quad (11.5)$$

Из закона сохранения энергии имеем, что

$$E'_2 = E'_1 - E_1 - m_2 \quad (11.6)$$

т.е. для определения энергий E'_1, E'_2 вторичных частиц достаточно знать энергию одной из них (конечно мы считаем что характеристики начальных частиц известны).

Прим моделировании характеристик процесса удобно ввести долю переданной энергии ϵ :

$$\epsilon = \frac{E'_1}{E_1 + m_2} \quad (11.7)$$

для которой $0 < \epsilon < 1$

Возводя в квадрат уравнение (11.4) и учитывая, что $\vec{p}^2 = E^2 - m^2$ получаем:

$$\cos \theta_{12} = \frac{E_1^2 - E_1'^2 - E_2'^2 - m_1^2 + m_1'^2 + m_2'^2}{2\sqrt{(E_1'^2 - m_1'^2)(E_2'^2 - m_2'^2)}} \quad (11.8)$$

где $\theta_{12} = \theta_1 + \theta_2$ - угол между частицами с импульсами p'_1 и p'_2 . С помощью вышеизложенного способа несложно рассчитать углы $\theta_{1,2}$. И после аналогичных преобразований получим:

$$\cos \theta_1 = \frac{E_2'^2 - E_1^2 - E_1'^2 - m_2^2 + m_1'^2 + m_2'^2}{2\sqrt{(E_1^2 - m_1^2)(E_1'^2 - m_1'^2)}} \quad (11.9)$$

Как следует из соотношения (11.8), углы разлета вторичных частиц в лабораторной системе отсчета полностью определяются массами покоя частиц реакции и энергиями вторичных частиц и начальных частиц. А с учетом соотношения (11.6) для вычисления угловых характеристик достаточно только значения энергии одной из вторичных частиц.

Рассмотрим основные кинематические соотношения для бинарных реакций для системы центра инерции.

$$\vec{p}_1 + \vec{p}_1 = 0 = \vec{p}'_1 + \vec{p}'_2, \quad (11.10)$$

$$E_1 + E_2 = E'_1 + E'_2. \quad (11.11)$$

Используя уравнения (11.10), (11.11) несложно найти, что энергии вторичных частиц определяются

$$\begin{aligned} E'_1 &= \frac{s + m_1'^2 - m_2'^2}{2\sqrt{s}}, \\ E'_2 &= \frac{s + m_2'^2 - m_1'^2}{2\sqrt{s}}, \end{aligned} \quad (11.12)$$

где $s = (E_1 + E_2)^2$.

Как следует из соотношений (11.12), энергии вторичных частиц в системе центра инерции фиксируются массами покоя и энергиями начальных частиц и следовательно их не надо разыгрывать как случайные величины. А угол между частицами 1 и 1' θ (см. рисунок 16) не фиксирован и может находиться в пределах от 0 до π . Второй угол ϕ , который фиксирует направление движения частицы 1' может принимать значения в пределах $0 \leq \phi \leq \pi$ с равной вероятностью (при отсутствии поляризации).

Углы, определяющие направление движения частицы 2', как следует из рисунка 16 можно найти, если известны, сферические углы частицы 1':

$$\theta' = \pi - \theta, \quad \phi' = \pi + \phi. \quad (11.13)$$

Сечение процессов взаимодействия элементарных частиц

Основной характеристикой реакций взаимодействия частиц является эффективное сечение (дифференциальное и полное). Рассмотрим как экспериментально вводится понятие сечения. Пусть пучок частиц с плотностью n_1 и скоростью v_2 сталкивается с мишенью объема dV и плотностью n_2 в поперечном сечении dS (см. рисунок 17)

Тогда количество частиц i -того сорта dN_i , родившихся в результате взаимодействия частиц пучка и мишени с энергией в промежутке $[E, E + dE]$ и двигающихся в телесном угле $d\Omega = \sin\theta d\theta d\phi$ будет определяться соотношением

$$dN_i = d\sigma_i (n_1 v_1 dt) (n_2 dV) , \quad (12.1)$$

где $(n_2 dV)$ – число частиц в объема dV , а $(n_1 v_1 dt)$ – число частиц пучка 1, прошедших чрез поперечное сечение dS за время dt .

Определение 12.1

Множитель $d\sigma_i$ в (12.1) называют дифференциальным сечением реакции рождения частиц i -того сорта с энергией в промежутке $[E, E + dE]$ и направлением движения, определяемым углом $d\Omega$ в результате взаимодействия пучка 1 и мишени 2.

Можно положить в самом общем случае

$$d\sigma = \sigma(E, \theta, \phi) dE d\Omega \quad (12.2)$$

или

$$\sigma(E, \theta, \phi) = \frac{d\sigma}{dE d\Omega} \quad (12.3)$$

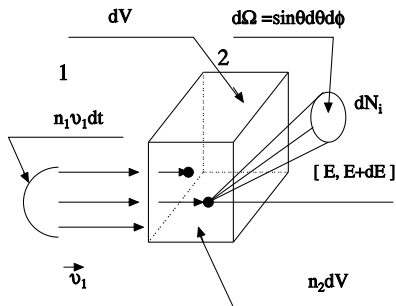
Если проинтегрировать по одной из переменных E, θ, ϕ можно получить одно из дифференциальных сечений. Например $\sigma(\theta, \phi)$,

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \sigma(\theta, \phi) = \int \frac{d\sigma}{dE d\Omega} dE \quad (12.4)$$

является *угловым дифференциальным сечением*. А сечение σ

$$\sigma = \int \int_{4\pi} \frac{d\sigma}{dE d\Omega} dE d\Omega \quad (12.5)$$

называется *эффективным (полным) сечением*.



$$dN_i = (n_2 dV)(n_1 v_1 dt) d\sigma_i$$

Рисунок 17: Столкновение пучка с мишенью

Сумма эффективных сечений всевозможных процессов, которые осуществляются путем взаимодействия частиц 1 и 2 называют *полным сечением*:

$$\sigma_{total} = \sum_i \sigma_i . \quad (12.6)$$

Тогда относительная вероятность w_j рождения частиц рождения частиц j -того сорта в результате взаимодействия частиц 1 и частиц 2 является отношением:

$$w_j = \frac{\sigma_j}{\sigma_{total}} . \quad (12.7)$$

Как видно из примера (12.7) сечение связано с вероятностью того или процесса взаимодействия и поэтому при моделировании процессов столкновения (энергий вторичных частиц, углов вылета и др.) сечение играет роль функции распределения вероятности соответствующих процессов. Поэтому знание поведения дифференциальных сечений от параметров сталкивающихся и образовавшихся частиц являются важнейшей информацией.

Единицей сечения в системе СИ являются м^2 . Однако для реакций взаимодействия м^2 является очень большой единицей и поэтому используют единицу *барн* – 1 барн = 10^{-28} м^2 и ее производные – фемтобарны, пикобарны и т.д.

Математическая модель прохождения частиц через вещество

Прохождение элементарных частиц через вещество, как видно из физической модели (см. ??) представляет собой процесс многократных актов взаимодействия с ядрами или атомарными электронами. Математическая модель этой задачи основана на формализме статистической физики, называемого *теорией переноса*.

При построении математической модели движения частиц в веществе учитываются предположения физической модели (смотри 1-3 положения в ??). Так линейность уравнений переноса следует из-за независимости последовательных актов взаимодействия.

При составлении уравнений переноса (УП) вводится баланс числа частиц в элементарном объеме фазового пространства $(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$, где \vec{r} - радиус вектор точки, где находится частица, E - энергия частицы, а $\vec{\Omega}$ - вектор направления скорости частицы, который задается сферическими углами θ и φ .

При выводе уравнений переноса рассматривается баланс числа частиц dN_j сорта j :

$$dN_j = \Phi_j(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) d\vec{r} dE d\vec{\Omega} , \quad (13.1)$$

где в объеме $d\vec{r} = d^3r$ в окрестности точки \vec{r} , энергия которых в интервале $[E, E + dE]$, а направление скоростей в телесном угле $d\Omega$; $[\vec{\Omega}, \vec{\Omega} + d\vec{\Omega}]$, ($\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi$).

Функция $\Phi_j(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$ называется *дифференциальной плотностью потока частиц j - того сорта в точке \vec{r}* , иногда Φ_j называют плотностью углового потока.

Для того, чтобы получить уравнение для дифференциальной плотности потока $\Phi_j(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$ рассмотрим баланс частиц, который возникает при прохождении частиц j -того сорта через фазовый объем $d\vec{r}dEd\vec{\Omega}$. Изменение числа частиц обусловлено:

Утечкой частиц из объема $d\vec{r}$ при тех же самых $E, \vec{\Omega}$. Данный процесс описывается в стационарном случае слагаемым

$$(\vec{\Omega} \vec{\nabla}) \Phi_j \quad (13.2)$$

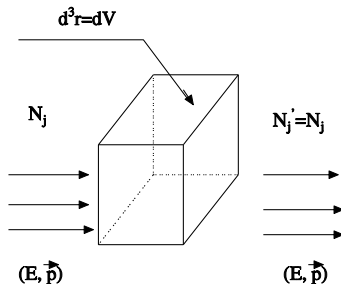


Рисунок 18: Утечка частиц

Убылью в результате взаимодействия с атомными ядрами и атомными электронами, которая определяется через макроскопическое сечение взаимодействия $\Sigma_j(\vec{r}, E)$ частиц сорта j с энергией E с ядрами среды в окрестности точки \vec{r} :

$$\Sigma_j(\vec{r}, E) = \frac{n(\vec{r}) \sigma_j(\vec{r}, E)}{\rho(\vec{r})}, \quad (13.3)$$

где $\sigma_j(\vec{r}, E)$ -микроскопическое сечение; $n(\vec{r})$ - плотность числа ядер в веществе; $\rho(\vec{r})$ - плотность вещества.

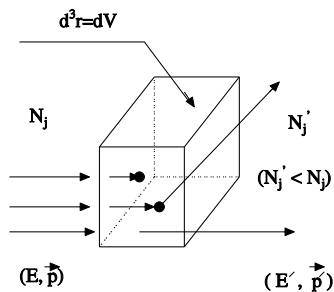
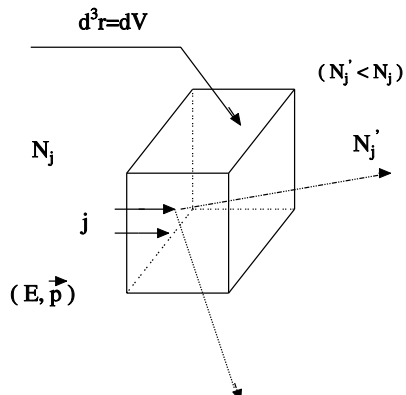


Рисунок 19: Убыль в результате взаимодействия

Распадом нестабильных частиц. Аналогично убыли частиц в фазовом объеме слагаемое в уравнении переноса будет определяется с помощью макроскопического сечения распада нестабильных частиц $\Sigma_{jDecay}(\vec{r}, E)$ частиц сорта j с энергией E . Это сечение распада определяет величину

$$\lambda_{jDecay} = \frac{1}{\Sigma_{jDecay}} = c \tau_j \frac{p_j}{m_j} \rho(\vec{r}) , \quad (13.4)$$

которая дает пробег до распада частицы с временем жизни τ_j , импульсом p_j и массой m_j .



Непрерывными потерями энергии заряженных частиц в результате электромагнитных взаимодействий с малыми передачами энергии (так называемое непрерывное замедление).

Функция

$$\beta_j(\vec{r}, E) = -\frac{1}{\rho(\vec{r})} \frac{dE_j}{dx}(\vec{r}, E) \quad (13.5)$$

определяет так называемую *тормозную способность вещества* для заряженных частиц в точке j с потерей энергии на единицу dE_j/dx длины.

Прирост частиц, вызванный упругим или неупругим взаимодействием, при котором частица сорта j с фазовыми координатами $(E_i, \vec{\Omega}_i, \vec{r}_i)$ рождает частицу j в интервале $]E, E + dE[$ и с $] \vec{\Omega}, d\vec{\Omega} + \vec{\Omega}[$ (в частном случае $i = j$). Такой прирост описывается слагаемым связанным с макроскопическим сечением реакции $i + A \rightarrow j + X$

$$\Sigma_i^s j(\vec{r}, E_i \rightarrow E, \vec{\Omega}_i \rightarrow \Omega)$$

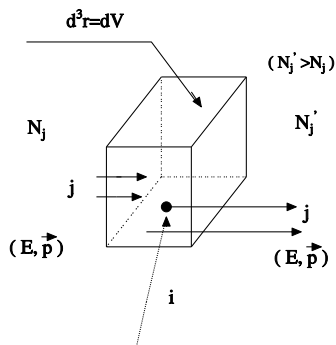


Рисунок 21: Прирост в результате взаимодействия

Может существовать внешний источник, характеризуемый функцией плотности $G_j(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$, прямо испускающий частицы сорта j в рассматриваемый элемент фазового объема.

Составляя баланс числа частиц j -того сорта получаем систему уравнений (уравнений Больцмана)

$$\hat{L}_j \Phi_j = Q_j + G_j, \quad (14.1)$$

где оператор \hat{L}_j обусловлен пунктами 1-4 баланса частиц:

$$\hat{L}_j = \left(\vec{\Omega} \vec{\nabla} \right) + \Sigma_j(\vec{r}, \vec{E}) + \Sigma_{j, D}(\vec{r}, E) - \frac{\partial \beta_j(\vec{r}, \vec{E})}{\partial E}, \quad (14.2)$$

а слагаемое Q_j пунктом 5 баланса частиц в фазовом объеме $d\vec{r}dEd\vec{\Omega}$

$$Q_j = \sum_i \int d\vec{\Omega} \int dE' \Sigma_{i, j}^s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \Phi_i(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') \quad (14.3)$$

Если же у нас нестационарный случай, то в левой части(14.1) необходимо добавлять слагаемое

$$\frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} \Phi_j(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t), \quad (14.4)$$

где v - скорость частицы j - того сорта. Индексы i, j - пробегают в этой системе одинаковые значения (нумеруют все сорта частиц задачи).

Чтобы система была замкнутой задаются граничные условия, которые должны определять излучение частиц нужного сорта в область, где рассматривается перенос от внешних источников, а также отраженных частиц от границы среды, окружающей область. В общем случае можно граничные условия записать в виде:

$$\Phi_j(\vec{r}, E, \vec{\Omega})|_s = \Phi_0 j(E, \vec{\Omega}), \vec{\Omega} \vec{n} < 0, \quad (14.5)$$

где \vec{n} - нормаль к поверхности s ,

j - плотность потока частиц попадающих от внешних источников.

Решение общей краевой задачи одновременно для всех сортов частиц в широком диапазоне энергий в случае произвольной геометрии и систем произвольных размеров **не представляется возможным**.

Поэтому необходимы приближения. В первую очередь, необходимо учесть какие процессы взаимодействия вносят вклад в уравнение переноса. Так для ЭФЛ, индуцированного фотоном или электроном средних и низких энергий (низкие 0.025 - 15 МэВ, средние 15 МэВ - 1 ГэВ, больше 1 ГэВ - высокие энергии), сложно отбросить член с $\sum_j D =$, поскольку участвуют только стабильные частицы (e^\pm, γ), а рождением μ^\pm пренебрегаем.

А если взять низкие энергии меньше 1.2 МэВ, то для фотонов достигается еще большее упрощение.

В ряде случаев кинетические уравнения могут быть существенно упрощены например, за счет следующих предположений:

- ❶ Часто пренебрегают потерями энергий при рассеянии.
- ❷ При высоких энергиях часто используют малоугловое приближение, когда ограничиваются первым порядком малости по угловой переменной.
- ❸ Часто используется симметрия задачи. Так для случая одномерных задач оператор $(\vec{\Omega}\vec{\nabla})$ сводится к операторам

$$(\vec{\Omega}\vec{\nabla}) = \begin{cases} \mu \frac{\partial}{\partial x} & \text{— плоская геометрия} \\ \mu \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1-\mu^2}{r} \frac{\partial}{\partial \mu} & \text{— сферически симметричная геометрия} \end{cases}, \quad (14.6)$$

где $\mu = \cos\theta$

Отметим задачи, как правило решаются для бесконечной среды. Включение геометрических границ среды представляет само по себе исключительно трудную задачу.

В заключении определим некоторые наиболее часто используемые на практике функционалы дифференциальной плотности потока излучения (индекс j опущен):

- ❶ Дифференциальная плотность потока энергии частиц:

$$I(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = E\Phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) .$$

- ❷ Пространственно-угловая плотность потока частиц:

$$\Phi(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \int_0^{E_{max}} \Phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) dE .$$

- ❸ Пространственно-энергетическая плотность потока частиц:

$$\Phi(\vec{r}, E) = \int_{(4\pi)} \Phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) d\vec{\Omega} .$$

- ❹ Пространственное распределение плотности потока частиц:

$$\Phi(\vec{r}) = \int_0^{E_{max}} \int_{(4\pi)} \Phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) dE d\vec{\Omega} .$$

Схема использования ММК в задаче переноса.

Бурное развитие вычислительной техники сделали метод Монте-Карло основным методом во многих приложениях. Большинство задач, связанных с прохождением электронов, фотонов, нейтронов решены методом Монте-Карло. Диапазон таких задач только в области переноса необычайно широк: от ставшего уже традиционным расчет энерговыделения и защиты от излучений до интерпретации новейших экспериментов в физике высоких энергий.

Такая гибкость метода обусловлена отсутствием ограничений, обсужденных в разделе методов решений уравнений. **Важно, что этот метод не требует записи соответствующего уравнения переноса, фактически нет проблем с формулировкой дискретной модели.**

В своем простейшем и одновременно наиболее надежном и распространенном варианте: прямом моделировании. Этот метод заключается в численном моделировании процессов взаимодействия и распространения частиц в веществе, т.е. в задаче прохождения частиц через вещество метод Монте-Карло сводится к построению большого числа траекторий частиц, представляющих некоторые ломанные линии, прямолинейные участки до которых характеризуют свободные пробеги до столкновений.

Этот пробег, а также результат столкновения, т.е. новое состояние частицы (направление движения, энергия рассеянной частицы и вторичных частиц) являются *случайными величинами*, описываемые соответствующими вероятностными распределениями. Конкретная реализация величин, определяющих состояние частиц, выполняется с помощью розыгрышей из этих распределений.

Полученные таким образом результаты конечной выборки (N -траекторий) обрабатываются статистическими методами. Результаты моделирования методом Монте-Карло содержат статистические флуктуации, сопутствующие к реальному эксперименту. Это обстоятельство сильно отличает расчеты этим методом от результатов решения кинетического уравнения, где оперируют фактически средними потоками.

Несомненным достоинством метода Монте-Карло, кроме его простоты, – возможность учета даже самых сложных геометрических границ. Метод максимально приближен к использованию на ЭВМ. Единственным ограничением является, как правило, большие затраты машинного времени для получения результата с необходимой точностью. Особенно это проявляется для частиц, имеющих небольшой свободный пробег (прежде всего заряженные частицы).

Эффективность метода оценивают по величине $(tD)^{-1}$, где t и D соответственно время счета и дисперсия оценки в расчете на одну историю.

Как правило $\sqrt{D} \sim N^{-1/2}$, а $t \sim N$ т.е.

$$(tD)^{-1} \sim N^{-1/2}$$

В методе Монте-Карло разработаны методы увеличения эффективности за счет уменьшения дисперсии так, что $(tD)^{-1}$ падает быстрее, чем $(\sqrt{N})^{-1}$.

Итак *вычислительный алгоритм метода Монте-Карло* должен содержать следующие этапы:

- ❶ Розыгрыш начальной энергии частицы и угла падения на мишень (если оно неопределенно).
- ❷ Розыгрыш пробега до точки взаимодействия.
- ❸ Розыгрыш типа взаимодействия, и тем или иным способом само взаимодействие;
- ❹ Моделируется число, сорт вновь рождающихся частиц.
- ❺ Моделируются энергии, углы вылета вновь родившихся частиц, а также характеристика ядра (частицы) с которым произошло взаимодействие.
- ❻ Розыгрыш пробега вновь родившихся (или тех же частиц - для упругого столкновения) частиц с учетом особенностей системы и возможно квазинепрерывного взаимодействия электромагнитных процессов.

И так далее до тех пор пока частицы покоятся (энергия частицы не станет меньше некоторой величины E_{min} , начиная с которой можно считать частицу поглощенной) или вылетом из системы: мишень, или что-нибудь в этом роде).

Затем все повторяется N раз для достижения требуемой точности функционалов Φ .

Схема слежения

Процесс моделирования ЭФЛ включает в себя моделирование процессов распространения фотонов и электронов (позитронов) в веществе и их взаимодействия с атомами среды. При этом прослеживается судьба каждой из вторичных матриц ЭФЛ. Числа, отображающие характеристики всех частиц в ливне на данном этапе моделирования его развития, хранятся в соответствующем разделе (массиве) памяти ЭВМ. Этот массив организуют как правило, следующим образом— на самом верхнем уровне хранятся характеристики **самой низкоэнергетической частицы**.

В этом случае алгоритм моделирования состоит в следующем:

в первую очередь, прослеживается судьба частицы самого верхнего уровня.

Прослеживание прекращается, если:

- 1 происходит взаимодействие;
- 2 энергия частицы оказывается меньше некоторого наперед заданного порога $E_{\text{пор.}}$;
- 3 частица попадает в определенное место пространства.

Далее, в случае взаимодействия частицы на верхний уровень помещают характеристики той вторичной частицы, энергия которой минимальна, и процедуру отслеживания повторяют вновь. То обстоятельство, что отслеживается частица с наименьшей энергией сначала, обеспечивает размеры массива в пределах $\log_2(E_0/E_{\text{пор.}})$, где E_0 – энергия частицы, вызвавшей каскад.

Если энергия частицы меньше пороговой или частица попадает в определенное место пространства, то ее прослеживание прекращают и начинают прослеживание судьбы частицы со следующего более низкого уровня, который с этого момента становится верхним.

Розыгрыш отдельного каскада (истории) заканчивают, когда из массива извлечены и прослежены все вторичные частицы. Такую схему прослеживания называют **лексикографической**. Параллельно с прослеживанием судьбы каждой из частиц, ведется накопление (и(или) вычисление) информации необходимой для соответствующих распределений для заданного сорта частиц: энергетического, углового и пространственного, а также других параметров распространения частиц в веществе.

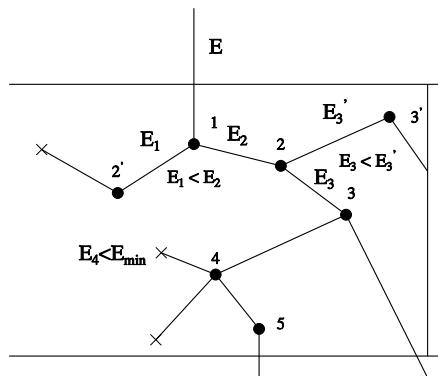


Рисунок 22: Схема слежения за прохождением частиц в веществе

Алгоритмы для решения задачи переноса частиц в веществе.

Моделирование пробега фотонов

Для фотонов, электронов и позитронов длина свободного пробега до взаимодействия λ является случайной величиной, распределенной по экспоненциальному закону

$$P(\lambda)d\lambda = \sum_{tot}(E) \exp(-\sum_{tot}(E) \lambda) \ , \quad (16.1)$$

где $\sum_{tot}(E)$ - полное макроскопическое сечение взаимодействия, которое для фотонов (с энергией E) состоит из сечений фотоэффекта, комптон-эффекта, образования пары e^-e^+ в поле ядер и атомных электронов.

Макроскопическое сечение взаимодействия $\Sigma_j(\vec{r}, E)$ частиц сорта j с энергией E с ядрами среды в окрестности точки \vec{r} определятся в виде:

$$\Sigma_j(\vec{r}, E) = \frac{n(\vec{r}) \sigma_j(\vec{r}, E)}{\rho(\vec{r})}, \quad (16.2)$$

где $\sigma_j(\vec{r}, E)$ – микроскопическое сечение; $n(\vec{r})$ – плотность числа ядер в веществе; $\rho(\vec{r})$ – плотность вещества.

В данном случае розыгрыш величины λ можно производить методом обратной функции.

$$\begin{aligned}\int P(\lambda) d\lambda &= \gamma, \\ \int P(\lambda) d\lambda &= \Sigma_{tot}(E) \exp(-\Sigma_{tot}(E) \lambda) \frac{1}{\Sigma_{tot}(E)}, \\ -\exp(-\Sigma_{tot}(E) \lambda) &= \gamma, \\ \lambda &= -\frac{\ln \gamma}{\Sigma_{tot}(E)}.\end{aligned}\tag{16.3}$$

γ – случайное число, равномерно распределенное в интервале от (0, 1).

Е

если среда состоит из нескольких слоев различных веществ и число этих слоев конечно, то алгоритм розыгрыша λ состоит из следующих шагов:

- ❶ Определяется λ по формуле (16.3) как возможный пробег фотона;
- ❷ Определяется расстояние d до ближайшей границы слоя по направлению движения фотона;
- ❸ Фотон прослеживается на расстоянии $l = \min\{\lambda, d\}$;
- ❹ Если $\lambda - l = 0$ т.е. $\lambda = l$, то произошло взаимодействие и розыгрыш пробега можно считать законченным;
- ❺ Если $\lambda - l > 0$ т.е. $\lambda = d$, то значит фотон достиг границы слоя. Если граница условная (например, для сбора информации о развитии ливня) и вещество то же самое, то процедуру повторяют вновь, начиная с пункта 2. Если вещество слоя меняется, процедуру повторяют с пункта 1.

По окончании процедуры розыгрыша свободного пробега приступают к розыгрышу взаимодействия фотона с веществом.

Моделирование пробега электронов и позитронов

Для электронов схема моделирования пробега аналогична моделированию пробегов фотонов. Но эта схема усложняется в связи с тем, что электроны взаимодействуя со средой теряют энергию за счет ионизационных потерь и испытывают многократное кулоновское рассеяние. Эти две особенности необходимо учесть при моделирование свободного пробега электронов (позитронов). Имеется несколько схем моделирования. Приведем одну из схем моделирования (“работает” хорошо при энергиях $E > 1\text{МэВ}$).

Итак пусть необходимо разыграть пробег электрона (позитрона) с энергией E и движущийся в некотором направлении, которое определяется направляющими косинусами u, v, w в трехмерном пространстве.

Тогда алгоритм моделирования имеет вид:

- Разыгрывается пробег с помощью стандартной величины γ , аналогично розыгрышу пробега фотонов

$$t = -\frac{\ln \gamma}{\sum_{j=1}^N \sigma_j(E)}, \quad \text{где} \quad (16.4)$$

N – число процессов, в которых участвует электрон (позитрон), а $\sigma_j(E)$ сечения этих процессов. Когда $\sigma_{tot}(E) = \sum_{j=1}^N \sigma_j(E)$ не зависит от энергии для больших t , то можно продолжать по следующей схеме.

Поскольку до дискретного взаимодействия электрон теряет энергию за счет процессов ионизации, то второй шаг состоит в вычислении ионизационных потерь

- Моделируются ионизационные потери путем:

$$\delta E = \int_0^{t'} \left(\frac{dE}{dx} \right) dx \quad (16.5)$$

где $\left(\frac{dE}{dx} \right)$ - ионизационные потери на единицу длины (для электронов см. формулы (10.12),(10.14)), а величина t' определяется

$$t' = \min \{t, R_0(E, E_{min})\} . \quad (16.6)$$

Длина $R_0(E, E_{min})$ средний пробег для замедления до некоторой энергии обрезания E_{min} , которая выбирается исходя из условий эксперимента т.е. $R_0(E, E_{min})$ находится из соотношения

$$E_{min} = \int_0^{R_0(E, E_{min})} \left(\frac{dE}{dx} \right) dx . \quad (16.7)$$

- За счет многократного кулоновского рассеяния происходит изменение направления движения электрона, поэтому на следующем этапе моделируется многократное кулоновское рассеяние на расстоянии t' . Результатом этого розыгрыша будут сферические углы θ, ϕ , которые определяют отклонение движения частицы от первоначального (см. рисунок 24).
- Частица переносится на расстояние t с энергией $E - \delta E$ и направлением движения, которое задается направляющими косинусами u', v', w' (см. рисунок 23). Направляющие косинусы u', v', w' можно рассчитать зная первоначальные направляющие косинусы u, v, w и углы отклонения θ, ϕ , возникающие при моделировании многократного кулоновского рассеяния:

$$(u', v', w') = (u, v, w) \cos \theta + (\vec{a} \cos \phi + \vec{b} \sin \phi) \sin \theta, \quad (16.8)$$

где компоненты векторов \vec{a}, \vec{b} задаются соотношениями

$$\begin{aligned} \vec{a} &= \left(\frac{u^2}{1+w} - 1, \frac{u v}{1+w}, u \right), \\ \vec{b} &= \left(\frac{u w}{1+w}, \frac{v^2}{1+w} - 1, v \right). \end{aligned} \quad (16.9)$$

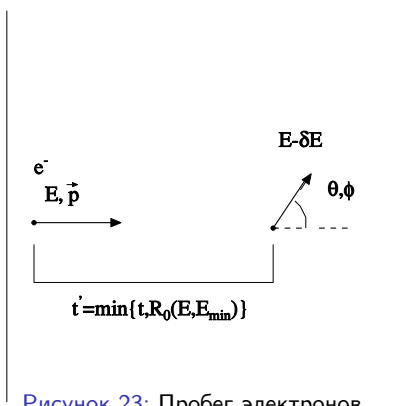


Рисунок 23: Пробег электронов

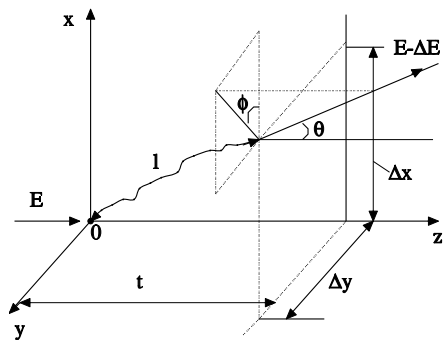


Рисунок 24: Картина прохождения частицы в веществе

Выбор канала взаимодействия

После этапа моделированию пробега до точки взаимодействия необходимо определить тип взаимодействия, если частица может испытать несколько возможных конкурирующих процессов. Так, например, фотон взаимодействие с атомом может осуществить за счет атомарного фотоэффекта, комптоновского рассеяния или путем рождения электрон-позитронной пары в поле ядра (или атомного электрона). Каждый из конкурирующих процессов характеризуется своим сечением σ значение, которого определяется энергией начальных частиц и параметров среды (плотность, атомный номер).

Для того чтобы определить тип взаимодействия составим дискретную случайную величину значения которой дают номера взаимодействий, а вероятность появления этих номеров определяется относительной вероятностью данного процесса по отношению ко всем остальным возможным.

Значения относительной вероятности $P(i)$ процесса с номером i задаются отношением сечения i -того процесса σ_i к сумме всех n конкурирующих процессов $\sigma_{tot} = \sum_{j=1}^n \sigma_j$, т. е.

$$P(i) = \frac{\sigma_i}{\sigma_{tot}} \quad (16.10)$$

В итоге имеем дискретную величину

$$\nu = \left(\begin{array}{cccc} 1, & 2, & \dots, & n \\ P(1), & P(2), & \dots, & P(n) \end{array} \right) \quad (16.11)$$

Номер типа взаимодействия i разыгрывается путем выбора случайного числа γ и определения номера i , удовлетворяющего условию

$$P(1) + P(2) + \dots + P(i-1) < \gamma < P(1) + P(2) + \dots + P(i) \quad (16.12)$$

т.е. алгоритм розыгрыша типа взаимодействия состоит из следующих шагов.

- 1 Необходимо разбить интервал $(0, 1)$ на n - интервалов, длины которого равны $P(1), P(2), \dots, P(n)$ соответственно.
- 2 Разыгрываем значение стандартной случайной величины γ
- 3 Проверяем условие попадания значения γ в i -тый интервал длиной $P(i)$:

$$P(1) + P(2) + \dots + P(i-1) < \gamma < P(1) + P(2) + \dots + P(i) . \quad (16.13)$$

Результатом розыгрыша с помощью метода Монте-Карло является процесс взаимодействия. Так для фотонов, чье взаимодействие может осуществляться за счет трех типов процессов, результатом будет одним из возможных: атомарный фотоэффект или комптон-эффект или РЭПП.

Алгоритм моделирования энергии вторичных частиц в ЛСО

Почти всегда удастся представить сечение процесса взаимодействия элементарных частиц в лабораторной системе отсчета $d\sigma(E_0, \epsilon)/d\epsilon$, где E_0 — энергия начальных частиц, а ϵ — доля переданной энергии одной из конечных частиц, в виде разложения Батлера:

$$\frac{d\sigma(E_0, \epsilon)}{d\epsilon} = \sum_{i=1}^n \alpha_i f_i(\epsilon) g_i(\epsilon) \quad (16.14)$$

где все $\alpha_i > 0$, а функции $g_i(\epsilon)$ удовлетворяют неравенству $0 \leq g_i(\epsilon) \leq 1$ для любых значений ϵ и других параметров от которых может зависеть сечение (плотность среды, атомный номер и т.д.). Часто функцию $g(\epsilon)$ называют *функцией режекции*.

Функции $f_i(\epsilon)$ являются плотностями распределений т.е. $f_i(\epsilon) \geq 0$ для всех ϵ из области определения ($a < \epsilon < b$) и

$$\int_a^b f_i(\epsilon) d\epsilon = 1 \quad (16.15)$$

Обозначим функции распределений вероятностей как $F_i(\epsilon)$ для соответствующих $f_i(\epsilon)$:

$$F_i(\epsilon) = \int_a^{\epsilon} f_i(\epsilon') d\epsilon' . \quad (16.16)$$

Тогда алгоритм розыгрыша доли энергии одной из вторичных частиц ϵ , которая является случайной величиной и подчиняющейся закону распределения с плотностью вероятности $d\sigma(E_0, \epsilon)/d\epsilon$ (16.14) выглядит следующим образом:

- ➊ Получаем пару значений γ_1, γ_2 с помощью стандартного генератора.
- ➋ С помощью γ_1 выбираем случайное число j ($1 \leq j \leq n$) нумерующее соответствующее слагаемое в разложении функции распределения (16.14) с вероятностью пропорциональной α_i , т. е. такое для которого выполняется условие

$$\left(\sum_{i=1}^{j-1} \alpha_i \right) / \left(\sum_{i=1}^n \alpha_i \right) < \gamma_1 < \left(\sum_{i=1}^j \alpha_i \right) / \left(\sum_{i=1}^n \alpha_i \right). \quad (16.17)$$

- ➌ Разыгрывается случайная величина ϵ с плотностью распределения $f_j(\epsilon)$ методом обратной функции т.е.

$$\epsilon = F_j^{-1}(\gamma_2)$$

- ➍ Далее, отбирается такая случайная величина ϵ для которой

$$g_j(\epsilon) \leq \gamma_2$$

В противном случае величина ϵ бракуется и процедура повторяется вновь.

Далее используя кинематические соотношения лабораторной системы отсчета рассчитываем энергию вторичной частицы и углы вылета вторичных частиц.

Этот метод удобен, если число слагаемых n в разложении (16.14) невелико, а розыгрыш плотностей распределений $f_i(\epsilon)$ производится методом обратной функции. Для повышения эффективности важно, чтобы значение $g_i(\epsilon)$ не сильно отличаются от 0 для всех ϵ (т.е. пункт 3 выполнялся бы достаточно часто.)

Рассмотрим в качестве примера процесс рассеяния фотона на атомном электроны.

Спасибо за внимание!!!

Моделирование комптоновского рассеяния

Дифференциальное сечение комптоновского рассеянного фотона с энергией E_0 на свободном электроне с излучением вторичного фотона с энергией $E_\gamma = \epsilon E_0$ в лабораторной системе отсчета определяется формулой *Клейна-Нишины-Тамма*:

$$\frac{d\sigma(\epsilon, E_0)}{d\epsilon} = \frac{\pi r_0^2}{b_0^3 \epsilon^2} \left[1 + (b_0^2 - 2b_0 - 2)\epsilon + (1 + 2b_0)\epsilon^2 + b_0^2\epsilon^3 \right], \quad (17.1)$$

где $b_0 = E_0/m_e$, r_0 – классический радиус электрона, m_e – масса электрона.

Кинематическая область ϵ находится в пределах:

$$\frac{1}{1 + 2 b_0} \leq \epsilon \leq 1 \quad (17.2)$$

Сечение процесса представим в виде:

$$\frac{d\sigma(\epsilon, E_0)}{d\epsilon} = \alpha_1 f_1(\epsilon) g_1(\epsilon) , \quad (17.3)$$

где

$$\alpha_1 = 2\pi r_0^2 \frac{\ln(1 + 2 b_0)}{b_0} , \quad (17.4)$$

$$f_1(\epsilon) = \frac{1}{\ln(1 + 2b_0)} \frac{1}{\epsilon} , \quad (17.5)$$

$$g_1(\epsilon) = \frac{1}{2 b_0^2 \epsilon} \left[1 + (b_0^2 - 2b_0 - 2)\epsilon + (1 + 2b_0)\epsilon^2 + b_0^2 \epsilon^3 \right] . \quad (17.6)$$

Алгоритм розыгрыша величины ϵ согласно общей схеме моделирования состоит из следующих шагов:

- 1 Розыгрывается величина ϵ из распределения $f_1(\epsilon)$ с помощью (γ_1, γ_2 - случайные числа генерируемые стандартным генератором)

$$\epsilon = \frac{1}{1 + 2 b_0 \gamma_1}$$

- 2 Вычисляем функцию режекции $g_1(\epsilon)$ и проверяем условие:
если $\gamma_2 \leq g_1(\epsilon)$, то принимаем значение ϵ полученное в пункте 1,
если $\gamma_2 > g_1(\epsilon)$, то начинаем снова с пункта 1.

После розыгрыша величины ϵ находим энергию вторичного фотона $E_\gamma = \epsilon E_0$, где E_0 -энергия начального фотона.

Далее используя кинематические соотношения лабораторной системы отсчета рассчитываем энергию вторичного (конечного) электрона E_e и углы вылета вторичного фотона $\cos \theta_\gamma$ и электрона $\cos \theta_e$:

$$E_e = E_0 + m_e - \epsilon E_0 , \quad (17.7)$$

$$\begin{aligned} \cos \theta_\gamma &= \frac{E_0^2 + \epsilon^2 E_0^2 - E_e^2 + m_e^2}{2 \epsilon E_0^2} , \\ \cos \theta_e &= \frac{E_0^2 - \epsilon^2 E_0^2 + E_e^2 - m_e^2}{2 E_0 \sqrt{E_e^2 - m_e^2}} . \end{aligned} \quad (17.8)$$

Сферические углы ϕ_γ, ϕ_e принимают значения в интервале $(0, 2\pi)$ с равной вероятностью и следовательно могут быть разыграны как равномерно распределенные величины.

Таким образом, в результате розыгрыша мы имеем угловые характеристики вторичного электрона и фотона: $\cos \theta_e, \cos \theta_\gamma$ и ϕ_γ, ϕ_e , а также их энергии $E_e, E_\gamma = \epsilon E_0$.

Пакет моделирования Geant4

Geant4 - свободно распространяемый пакет программ, составленный из инструментальных средств, которые могут использоваться для моделирования прохождения частиц через вещество. Все аспекты процесса моделирования были включены в пакет:

- геометрия системы,
- используемые материалы,
- фундаментальные частицы, представляющие интерес,
- поколение первичных событий,
- прохождение частиц через материалы и электромагнитные поля,
- процессы физики, управляющие взаимодействиями частицы,
- реакция чувствительных компонентов датчика,
- хранение событий и треков,
- визуализация датчика и траекторий частицы,
- сбор данных и анализ данных для моделирования на различных уровнях детектора.

Пользователи могут создавать объектно-ориентированные приложения, используя инструментарий Geant4 от начального определения процесса и до получения конечных результатов и графиков для публикации. Для этого, инструментарий включает:

- 1 интерфейсы пользователя,
- 2 встроенные подпрограммы регулирования, и интерпретаторы команд, которые работают на каждом уровне моделирования.

В основе Geant4 - обильный набор моделей физики, чтобы можно было работать с взаимодействиями частиц в широком диапазоне энергий. Данные и методы были получены из различных источников во всем мире и в этом отношении, Geant4 действует как архив, который включает большую часть всего, что известно о частицах взаимодействия.

Geant4 написан на языке C++ и использует расширенные методы разработки программного обеспечения и объектно-ориентированную технологию.

Серьезная проблема при моделировании процесса в пакете GEANT3 была связана с трудностью добавления новых или различных моделей физики. Развитие пакета было трудным из-за сложности исходного кода, который основывался на процедурном стиле программирования. Теперь же, объектно-ориентированный стиль программирования позволяет избавиться от сложности, определяя однородный интерфейс и обычный организационный принципы для всех моделей физики. В пределах этой структуры функциональные возможности моделей могут быть более легко распознаны и поняты, и создание и добавление новых моделей - простая процедура, которая влечет за собой небольшую или вообще никакой модификации существующего кода.

Хронология Geant4

Идея создать программный продукт, позволяющий моделировать прохождение частиц через вещество, появилась в двух лабораториях, работающих независимо в Европейском Центре Ядерных Исследований (CERN) и KEK в 1993. Обе группы исследовали, как можно используя современные вычислительные методы улучшить существующий программный продукт Geant3, написанный на языке программирования ФОРТРАН.

Действия двух групп были объединены в 1994 г. и таким образом появился проект RD44, в ходе которого должна была быть создана полностью новая программа, основанная на объектно-ориентированной технологии.

Вскоре проект стал большим международным сотрудничеством программистов в области физики и программного обеспечения из множества институтов и университетов, работающих в области физики высокой энергии в Европе, Японии, Канаде и Соединенных Штатах.

Цель состояла в том, чтобы написать программу моделирования датчика, которая имела функциональные возможности и гибкость, которые необходимы для выполнения требований следующего поколения податомных экспериментов физики. Начальные возможности быстро расширялись, когда стало очевидным, что такой инструмент также полезен для ядерных ускорителей, космической и медицинской физики и других разделов науки.

Проект RD44 был закончен в декабре 1998 с поставкой первой продукции и впоследствии переименован в Geant4. С учетом накопленного опыта многих разработчиков пакета в моделировании физических процессов и детекторов с помощью метода Монте-Карло, конечный продукт оказался очень удачным. В то время как географически распределенная разработка программного обеспечения и крупномасштабных объектно-ориентированных систем больше не новинка, Geant4 может вполне являться наибольшим и самым честолюбивым проектом из такого вида программ, созданных вне корпоративного мира, если учитывать размер и возможности кода и количество разработчиков.

Чистая полная прикладная декомпозиция вела к ясной иерархической структуре входящих библиотек. Каждому разделу Geant4 соответствует своя библиотека, которая индивидуально управляется рабочей группой экспертов. Каждую группу возглавляет координатор выпуска. Это последовательное распределение ответственности среди относительно большого количества людей позволяет создать такую структуру поддержки, когда внешние пользователи могут обратиться с вопросами непосредственно к соответствующему эксперту.

Рекомендуемая литература

1. Калиновский, А.Н. Прохождение частиц высоких энергий через вещество/ А.Н. Калиновский, Н.В. Мохов, Ю.П. Никитин. -М.: Энергоиздат, 1985 - 248 с.
2. Аккерман, А.Ф. Моделирование траекторий заряженных частиц в веществе/ А.Ф. Аккерман. - М. : Энергоиздат, 1991 - 200 с.
3. Соболев, И.М. Численные методы Монте-Карло/ И.М. Соболев. - М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. литературы, 1973. - 312 с.
4. Ермаков, С.М. Метод Монте-Карло и смежные вопросы/ С.М. Ермаков - М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. литературы, 1971. - 328 с.

5. Биндер К. Общие вопросы теории и техники статистического моделирования методом Монте-Карло: Методы Монте-Карло в статистической физике/ К.Биндер. - М.: Мир, 1982.- 400с.
6. Ермаков, С.М., Михайлов Г.А. Статистическое моделирование/ С.М.,Ермаков, Г.А. Михайлов. - М.:Наука,1982. - 296 с.
7. Гулд, Х.. Компьютерное моделирование в физике: В 2-х частях. / Х.Гулд, Я. Тобоч-ник. Часть 1 - М.: Мир, 1990. - 349 с.
8. Гулд, Х. Компьютерное моделирование в физике: В 2-х частях. / Х.Гулд, Я. Тобоч-ник. Часть 2- М.: Мир, 1990- 400 с.
9. Ивченко, Г. И. Математическая статистика/ Г.И.Ивченко, Ю. И. Медведев Учеб. пособие для вузов. - М.: Высш. шк., 1984. - 248 с.
10. GEANT4 User's Documents: Physics Reference Manual.<http://geant4.web.cern.ch/geant4>
11. Новицкий, П.В. Оценка погрешностей результатов измерений/ П.В.Новицкий, И.А..Зограф - Л.: Энергоатомиздат, 1991. - 304 с.
12. Бендат Дж., Пирсол А. Прикладной анализ случайных данных/ Дж.Бендат, А.Пирсол. -М.: Мир,1989. -504 с.

13. Лавренчик, В.Н. Постановка физического эксперимента и статистическая обработка его результатов/ В.Н. Лавренчик.. - М.: Энергоатомиздат, 1986. - 272 с.
14. Тейлор Дж. Введение в теорию ошибок/ Дж.Тейлор. - М.: Мир, 1985. - 45 с.