

Метод Монте-Карло

- математические

ОСНОВЫ метода

Метод Монте-Карло – это ...

Мéтод Мóнте-Кáрло (методы Монте-Карло) — 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.

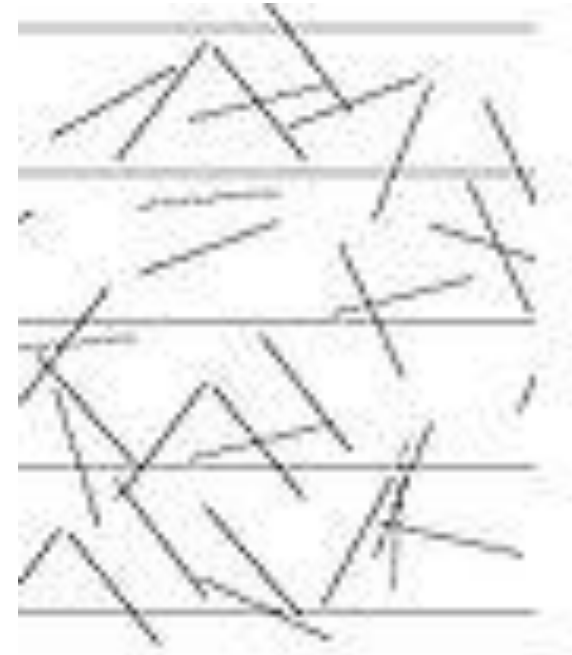
Используется для решения задач в областях физики, математики, экономики, оптимизации, теории управления, биологии и др.

Алгоритм Буффона для определения числа Пи

Случайные величины использовались для решения различных прикладных задач достаточно давно.

Примером может служить способ определения числа Пи, который был предложен Буффоном еще в 1777 году.

Суть метода была в бросании иглы длиной L на плоскость, расчерченную параллельными прямыми, расположенными на расстоянии r друг от друга.



Алгоритм Буффона для определения числа Пи

Вероятность того, что отрезок пересечет прямую, связана с числом Пи:

$$p = \int_0^{\pi} \int_0^{l \sin \theta} \frac{1}{r\pi} dA d\theta$$

где

A — расстояние от начала иглы до ближайшей к ней прямой;

θ — угол иглы относительно прямых.

Алгоритм Буффона для определения числа Пи

Этот интеграл просто взять:

$$p = \frac{2L}{r\pi}$$

(при условии, что $r > L$), поэтому подсчитав долю отрезков, пересекающих прямые, можно приближенно определить это число. При увеличении количества попыток точность получаемого результата будет увеличиваться.

Алгоритм Буффона для определения числа Пи

В 1864 году капитан Фокс, выздоравливая после ранения, чтобы как-то занять себя, реализовал эксперимент по бросанию иглы. Результаты представлены в следующей таблице:

	Число бросаний	Число пересечений	Длина иглы	Расстояние Между прямыми	Враще ние	Зн-ие Пи
Первая попытка	500	236	3	4	отсутству ет	3.1780
Вторая попытка	530	253	3	4	присутств ует	3.1423
Третья попытка	590	939	5	2	присутств ует	3.1416

Комментарии:

- Вращение плоскости применялось (и как показывают результаты — успешно) для того, чтобы уменьшить систематическую ошибку.
- В третьей попытке длина иглы была больше расстояния между линиями, что позволило не увеличивая числа бросаний эффективно увеличить число событий и повысить точность.

Создание математического аппарата стохастических методов началось в конце 19-го века.

В 1899 году лорд Релей показал, что одномерное случайное блуждание на бесконечной решётке может давать приближенное решение параболического дифференциального уравнения.

Колмогоров в 1931 году дал большой толчок развитию стохастических подходов к решению различных математических задач, поскольку он сумел доказать, что цепи Маркова связаны с некоторыми интегро-дифференциальными уравнениями.

Рождение метода Монте-Карло в Лос-Аламосе

Сначала Энрико Ферми в 1930-х годах в Италии, а затем Джон фон Нейман и Станислав Улам в 1940-х в Лос-Аламосе предположили, что можно использовать связь между стохастическими процессами и дифференциальными уравнениями «в обратную сторону». Они предложили использовать стохастический подход для аппроксимации многомерных интегралов в уравнениях переноса, возникших в связи с задачей о движении нейтрона в изотропной среде.

Рождение метода Монте-Карло в Лос-Аламосе

Идея была развита Станиславом Уламом, который, по иронии судьбы, также как и Фокс боролся с вынужденным безделием во время выздоровления после болезни, и, раскладывая пасьянсы, задался вопросом, какова вероятность того, что пасьянс «сложится».

Ему в голову пришла идея, что вместо того, чтобы использовать обычные для подобных задач соображения комбинаторики, можно просто поставить «эксперимент» большое число раз и, таким образом, подсчитав число удачных исходов, оценить их вероятность. Он же предложил использовать компьютеры для расчётов методом Монте-Карло.

Дальнейшее развитие и современность

В 1950-х годах метод использовался для расчётов при разработке водородной бомбы. Основные заслуги в развитии метода в это время принадлежат сотрудникам лабораторий BBC США и корпорации RAND.

В 1970-х годах в новой области математики — теории вычислительной сложности было показано, что существует класс задач, сложность (количество вычислений, необходимых для получения точного ответа) которых растёт с размерностью задачи экспоненциально. Иногда можно, пожертвовав точностью, найти алгоритм, сложность которого растёт медленнее, но есть большое количество задач, для которого этого нельзя сделать (например, задача определения объёма выпуклого тела в n -мерном евклидовом пространстве) и метод Монте-Карло является единственной возможностью для получения достаточно точного ответа за приемлемое время.

В настоящее время основные усилия исследователей направлены на создание эффективных Монте-Карло алгоритмов различных физических, химических и др. процессов для параллельных вычислительных систем.

Происхождение метода Монте-Карло

Для того чтобы понять, о чем пойдет речь, рассмотрим простой пример. Предположим, что нам нужно вычислить площадь плоской фигуры S . Это может быть произвольная фигура с криволинейной границей, заданная графически или аналитически, связная или состоящая из нескольких кусков. Пусть это будет фигура, изображенная на рис.1, и предположим, что она вся расположена внутри единичного квадрата.

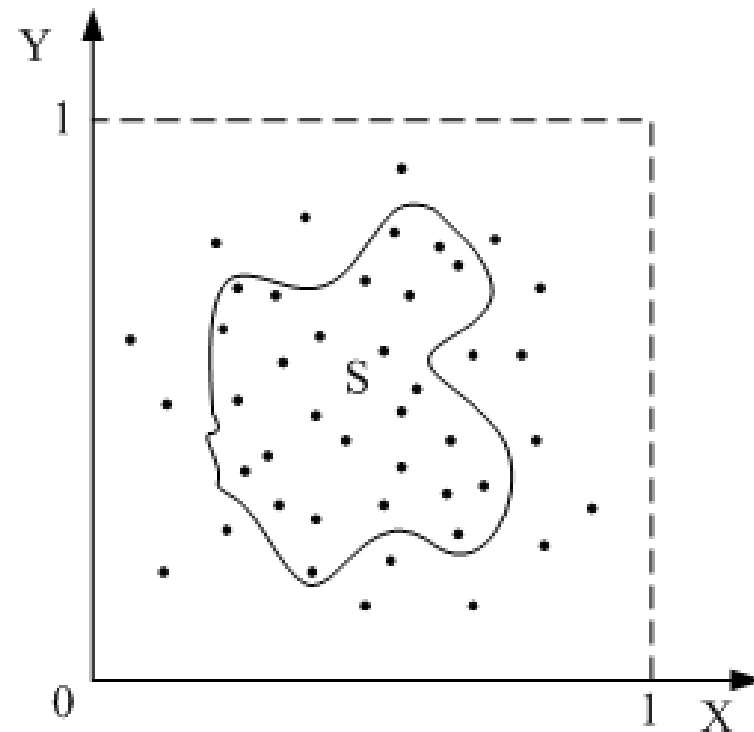


Рис.1 Вычисление площади фигуры

метод Монте-Карло

Выберем внутри квадрата множество случайных точек N .

Обозначим через N' число точек, попавших при этом внутрь S . Геометрически очевидно, что площадь S приближенно равна отношению N'/N .

Чем больше N , тем больше точность этой оценки.

Например, выберем случайным образом 44 точки.

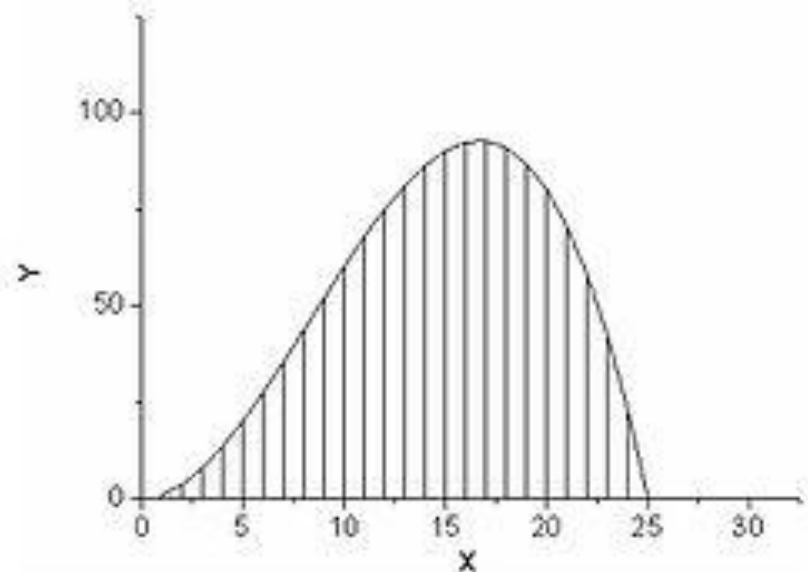
Пусть 13 из них оказались внутри S .

Отношение N'/N равно $13/44=0,30$, в то время как истинная площадь S равна $0,35$.

Интегрирование методом Монте-Карло

Предположим, необходимо взять интеграл от некоторой функции. Воспользуемся неформальным геометрическим описанием интеграла и будем понимать его как площадь под графиком этой функции.

Для определения этой площади можно воспользоваться одним из обычных численных методов интегрирования: разбить отрезок на подотрезки, подсчитать площадь под графиком функции на каждом из них и сложить.

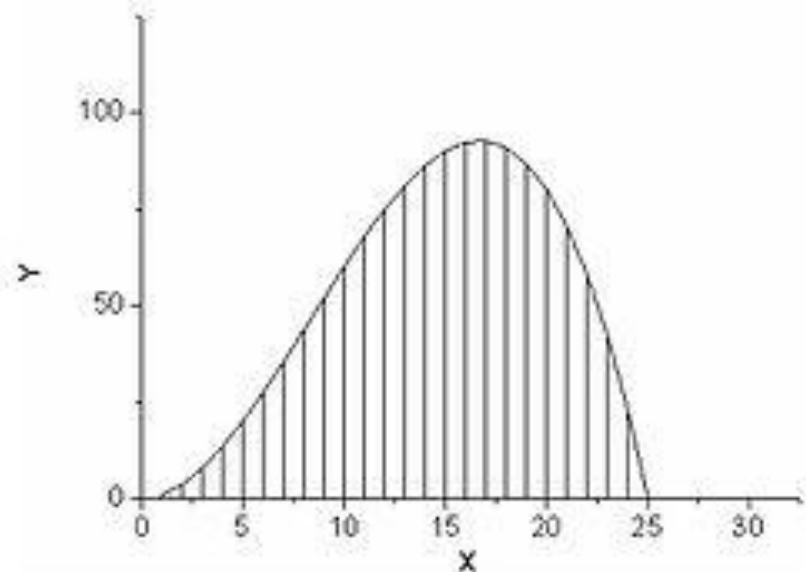


Численное интегрирование функции
детерминистическим методом

Интегрирование методом Монте-Карло

Предположим, что для функции, представленной на рисунке, достаточно разбиения на 25 отрезков и, следовательно, вычисления 25 значений функции. Представим теперь, мы имеем дело с n -мерной функцией. Тогда нам необходимо 25^n отрезков и столько же вычислений значения функции. При размерности функции больше 10 задача становится огромной.

Поскольку пространства большой размерности встречаются, в частности, в задачах теории струн, а также многих других физических задачах, где имеются системы со многими степенями свободы, необходимо иметь метод решения, вычислительная сложность которого бы не столь сильно зависела от размерности. Именно таким свойством обладает **метод Монте-Карло**.



Численное интегрирование функции
детерминистическим методом

Две особенности метода Монте-Карло

Первая особенность метода - простая структура вычислительного алгоритма.

Как правило, составляется программа для осуществления одного случайного испытания (надо выбрать случайную точку в квадрате и проверить, принадлежит ли она S).

Затем это испытание повторяется N раз, причем каждый опыт не зависит от всех остальных, и результаты всех опытов усредняются.

Поэтому иногда метод Монте-Карло называют *методом статистических испытаний*.

Две особенности метода Монте-Карло

Вторая особенность метода - погрешность вычислений, как правило, пропорциональна $\sqrt{D/N}$, где D - некоторая постоянная. N - число испытаний.

Отсюда видно, что для того, чтобы уменьшить погрешность в 10 раз (иначе говоря, чтобы получить в ответе еще один верный десятичный знак), нужно увеличить N (т. е. объем работы) в 100 раз.

Однако одну и ту же задачу можно решать различными вариантами метода Монте-Карло, которым отвечают различные значения D .

Во многих задачах удастся значительно увеличить точность, выбрав способ расчета, которому соответствует значительно меньшее значение D .

Случайные величины – повторение теории вероятностей

До некоторого времени теория вероятностей представляла собой еще не сложившуюся математическую науку, в которой основные понятия были недостаточно корректно определены. Сказанное относится к так называемой классической теории вероятностей.

В 1900 году на II Международном математическом конгрессе в Париже немецкий ученый Д. Гильберт сделал доклад, в котором указал 23 важнейшие проблемы, стоящие перед математикой.

Одна из них — аксиоматическое построение теории вероятностей. В настоящее время эта проблема успешно решена. Наиболее удачный подход к построению аксиоматической теории вероятностей предложил А. Н. Колмогоров. Этот подход тесно связывает теорию вероятностей с современной теорией меры, а также теорией множеств.

Вероятность события.

Отметим, что по принятому в теории вероятностей соглашению вероятность произвольного события полагается изменяющейся от 0 до 1.

При этом нулевая вероятность соответствует невозможному событию (которое никогда произойти не может), а единичная – достоверному событию (которое обязательно произойдет).

Дискретные случайные величины

Характеристики дискретных случайных величин

Случайная величина y называется **дискретной**, если она может принимать дискретное множество значений y_1, y_2, \dots, y_n .

В теории вероятностей рассматриваются также дискретные случайные величины, которые могут принимать бесконечное число значений.

Дискретная случайная величина Y определяется таблицей

$$y = \begin{pmatrix} y_1 & y_2 \cdots y_n \\ p_1 & p_2 \cdots p_n \end{pmatrix} \quad (3)$$

где y_1, y_2, \dots, y_n — возможные значения величины y , а p_1, p_2, \dots, p_n — соответствующие им вероятности.

Дискретные случайные величины

Точнее говоря, вероятность того, что случайная величина y примет значение y_i (обозначим ее через $P\{y = y_i\}$), равна p_i :

$$P\{y = y_i\} = p_i$$

Таблица (3) называется **распределением случайной величины**.

Числа x_1, x_2, \dots, x_n могут быть, вообще говоря, любыми. Однако вероятности p_1, p_2, \dots, p_n должны удовлетворять двум условиям:

1) все p_i положительны:

$$p_i > 0; \tag{4}$$

2) сумма всех p_i равна 1:

$$p_1 + p_2 + \dots + p_n = 1 \tag{5}$$

(это условие означает, что y обязана в каждом случае принять одно из значений y_1, y_2, \dots, y_n).

Математическое ожидание, мода, медиана

Математическим ожиданием дискретной случайной величины y называется сумма произведений всех ее возможных значений на их вероятности:

$$\langle y \rangle = M(y) = \sum_{i=1}^n y_i p_i \quad (6)$$

Чтобы выяснить физический смысл этой величины, запишем ее в следующем виде:

$$M(y) = \sum_{i=1}^n y_i p_i / \sum_{i=1}^n p_i$$

Отсюда видно, что $M(y)$ - это (генеральное) среднее значение величины y , причем более вероятные значения y входят в сумму с большими весами.

Математическое ожидание, мода, медиана

Отметим основные свойства математического ожидания.

Если c - какая-нибудь не случайная величина, то

$$M(y + c) = M(y) + c \quad (7)$$

$$M(c y) = c M(y) \quad (8)$$

Если y, z — любые случайные величины, то

$$M(y + z) = M(y) + M(z). \quad (9)$$

Математическое ожидание — важная, но не единственная характеристика "усредненного" значения случайной величины.

"Усредненное" значение может характеризоваться также **модой** и **медианой**.

Математическое ожидание, мода, медиана

Модой случайной величины называется ее наиболее вероятное значение (то, для которого вероятность достигает максимума).

Медианой случайной величины называется такое значение m из области определения случайной величины, для которого

$$P\{y < m\} \approx P\{y > m\}.$$

Из этого следует, что для случайной величины принятие значения, меньшего медианы, равновероятно принятию значения, большего медианы.

Дисперсия

Дисперсией дискретной случайной величины называется число

$$D(y) = M(y - M(y))^2 = \langle (y - \langle y \rangle)^2 \rangle \quad (10)$$

Следовательно, дисперсия $D(y)$ - это математическое ожидание квадрата отклонения случайной величины от ее среднего значения $M(y)$.

Очевидно, всегда $D(y) > 0$.

Математическое ожидание и дисперсия - важнейшие числовые характеристики случайной величины y .

Дисперсия

Если мы будем наблюдать величину y много раз и получим значения y_1, y_2, \dots, y_n , то среднее арифметическое от этих значений будет близко к $M(y)$:

$$\frac{y_1 + y_2 + \dots + y_N}{N} = M(y) \quad (11)$$

Дисперсия $D(y)$ характеризует разброс этих значений около среднего $M(y)$.

Формулу (10) для дисперсии можно преобразовать с помощью формул (7)-(9) :

$$D(y) = M[y^2 - 2M(y) \cdot y + M(y)^2] = M(y^2) - 2M(y)M(y) + M(y)^2,$$

Откуда

$$D(y) = M(y^2) - M(y)^2. \quad (12)$$

Вычислять дисперсию по этой формуле обычно проще, чем по формуле (10) .

Дисперсия

Отметим основные свойства дисперсии.

Если c - какая-нибудь не случайная величина, то

$$D(y + c) = D(y) , \quad (13)$$

$$D(cy) = c^2 D(y) . \quad (14)$$

Важную роль в теории вероятностей играет понятие **независимости случайных величин**.

В действительности это довольно сложное понятие, но в простейших случаях оно очевидно: допустим, что кроме случайной величины y мы наблюдаем еще за случайной величиной z . Если распределение величины y не меняется от того, что нам уже известно значение, которое приняла величина z , то естественно считать, что y от z не зависит.

Дисперсия

Для независимых случайных величин y и z справедливы следующие соотношения:

$$M(yz) = M(y)M(z), \quad (15)$$

$$D(y+z) = D(y) + D(z). \quad (16)$$

Рассмотрим случайную величину χ с распределением

$$\chi \sim \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ 1/6 & 1/6 & 1/6 & 1/6 & 1/6 & 1/6 \end{pmatrix}$$

Очевидно, что реализацией этой величины можно считать число очков, выпадающих на игральной кости: любое значение одинаково вероятно.

Вычислим математическое ожидание χ по формуле (6):

$$M(\chi) = 1 \cdot \frac{1}{6} + \dots + 6 \cdot \frac{1}{6} = 3,5;$$

дисперсию χ по формуле (12):

$$D(\chi) = M(\chi^2) - (M(\chi))^2 = 1^2 \cdot \frac{1}{6} + \dots + 6^2 \cdot \frac{1}{6} - (3,5)^2 = 2,917$$

Непрерывные случайные величины

Предположим, что на плоскости в начале координат расположено некоторое количество радия. При распаде каждого атома радия из него вылетает α -частица. Направление ее будем характеризовать углом φ .

Так как и теоретически, и практически возможны любые направления вылета, то эта случайная величина может принимать любое значение от 0 до 2π .

Мы будем называть случайную величину ξ **непрерывной**, если она может принимать любое значение из некоторого интервала (a, b) .

Непрерывные случайные величины

Непрерывная случайная величина ξ определяется заданием интервала (a, b) , содержащего возможные значения этой величины, и функции $p(x)$, которая называется **плотностью вероятностей случайной величины ξ** (или **плотностью распределения ξ**).

Физический смысл $p(x)$ следующий: пусть (a', b') - произвольный интервал, содержащийся в (a, b) . Тогда вероятность того, что ξ окажется в интервале (a', b') , равна интегралу

$$P\{a' < \xi < b'\} = \int_{a'}^{b'} p(x) dx \quad (17)$$

Непрерывные случайные величины

На рис. 3 заштрихованная площадь равна значению этого интеграла.

Множество значений ξ может быть любым интервалом. Возможен даже случай $a = -\infty$, а также $b = \infty$.

Однако плотность $p(x)$ должна удовлетворять двум условиям, аналогичным (4)-(5), для дискретных величин:

1. плотность $p(x)$ положительна:
$$p(x) > 0 \quad (18)$$

2. интеграл от плотности $p(x)$ по всему интервалу (a, b) равен 1:

$$\int_a^b p(x) dx = 1 \quad (19)$$

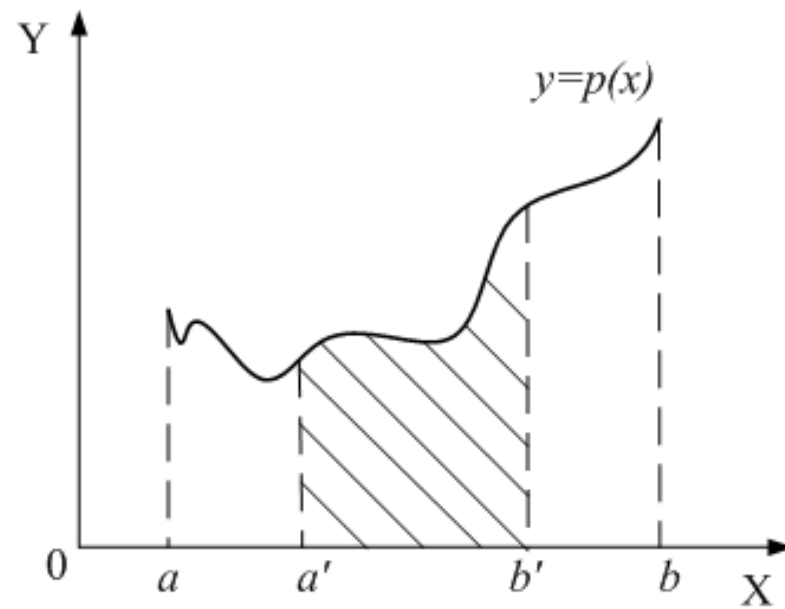


Рис. 3. Плотность вероятности непрерывной случайной величины

Непрерывные случайные величины

Математическим ожиданием непрерывной случайной величины называется число

$$M(\xi) = \int_a^b xp(x)dx \quad (20)$$

Смысл этой характеристики такой же, как в случае дискретной случайной величины.

Отметим, что для любой непрерывной случайной величины ξ при каждом x имеем

$$P\{\xi = x\} = 0.$$

Физический смысл имеет не вероятность попадания ξ в заданную точку x , а вероятность попадания в сколь угодно малый интервал:

$$P\{x \leq \xi < x+dx\} = p(x)dx.$$

Непрерывные случайные величины

Рассмотрим пример.

Случайная величина γ , определенная в интервале $(0,1)$ и имеющая плотность $p(x)=1$, называется **равномерно распределенной** в $(0,1)$.

В самом деле, какой бы интервал (a', b') внутри $(0, 1)$ мы ни взяли, вероятность того, что γ попадет в (a', b') , равна

$$\int_{a'}^{b'} p(x)dx = b' - a'$$

т.е. длине этого интервала.

В частности, если мы разделим интервал $(0,1)$ на любое число интервалов равной длины, то вероятность попадания γ в любой из них будет одна и та же.

Легко вычислить, что

$$M(\gamma) = \int_0^1 xp(x)dx = \int_0^1 xdx = \frac{1}{2} \quad D(\gamma) = \int_0^1 x^2 p(x)dx - (M\gamma)^2 = \frac{1}{3} - \frac{1}{4} = \frac{1}{12}$$

Нормальные случайные величины

Нормальной (или **гауссовской**) случайной величиной называется случайная величина ζ , определенная на всей оси $(-\infty, \infty)$ и имеющая плотность

$$p(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left\{-\frac{(x-a)^2}{2\sigma^2}\right\}, \quad (21)$$

где a и $\sigma > 0$ — числовые параметры.

Параметр a не влияет на форму кривой $y=p(x)$: изменение его приводит лишь к сдвигу кривой вдоль оси x . Однако при изменении σ форма кривой меняется.

Нормальные случайные величины

На рис. 4 построены две нормальные плотности, соответствующие $a = 0$, $\sigma = 1$ и $a=0$, $\sigma = 0,5$. Можно доказать, что

$$M(\zeta) = a, \quad D(\zeta) = \sigma^2. \quad (23)$$

Любые вероятности вида $P\{x' < S < x''\}$ легко вычисляются с помощью таблицы, в которой приведены значения функции

$$\Phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^x e^{-t^2/2} dt, \quad (24)$$

называемой **интегралом вероятностей**.

Нормальные случайные величины очень часто встречаются при исследовании самых различных по своей природе вопросов.

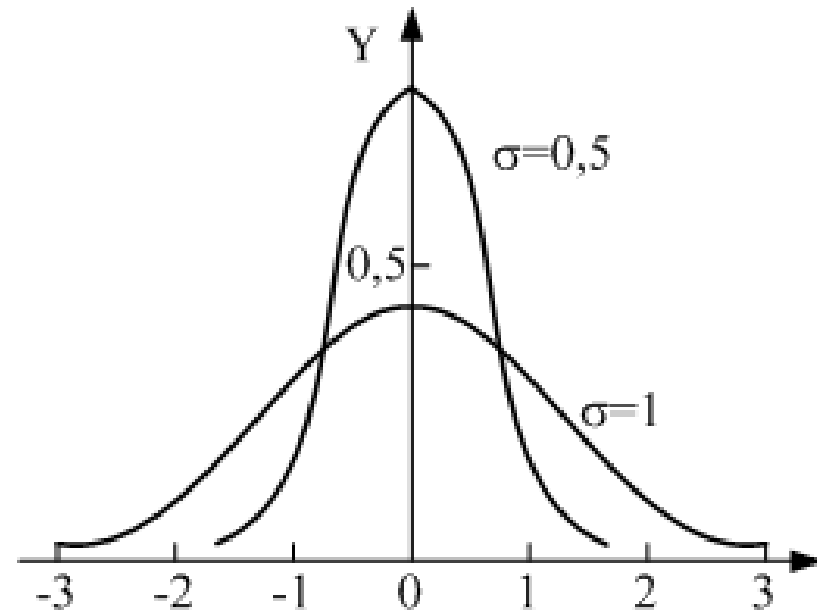


Рис 4. Нормальные распределения

Генератор псевдослучайных чисел

- псевдослучайные числа получают с помощью некоторой рекуррентной формулы $X_{i+1} = f(X_i)$

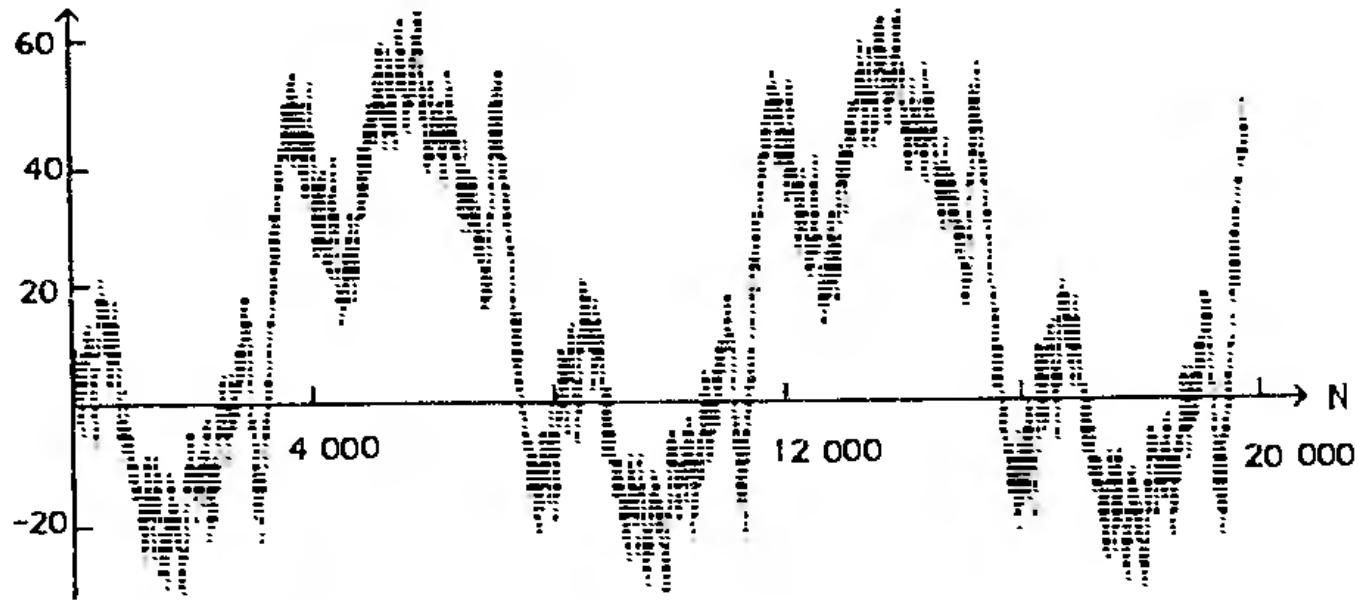
Насколько случайно случайное?

- Простой линейный генератор

$$X_{i+1} = (aX_i + c) \bmod m ; m > a, m > c, a > 0, c > 0$$

т. е. каждое случайное число – это остаток, при делении $(aX_i + c)$ на m (операция Mod - "определение остатка", термин взят от слова "modulo" – в переводе "остаток").

Насколько случайно псевдослучайное?



. Случайное блуждание, генерируемое с помощью соотношения $a = 899$, $c = 0$, $m = 32\,768$ и начальным числом $x_0 = 12$.

Как улучшить?

- Перемешивание порядка выдачи чисел. Основной генератор заполняет буфер случайными числами. Дополнительный генератор выбирает числа из буфера.
- Два основных генератора создают случайные числа $N = n_1 + n_2/z$ или $N = |n_1 - n_2|$. Можно тоже использовать буфер и дополнительный генератор.
- Можно создать другой генератор. Существует множество генераторов, например, “Xorshift”, “Lagged Fibonacci”, “Multiply-With-Carry”...
- В Geant4 – функция `G4random()`, X_0 – задается пользователем (1234876) или по компьютерному времени

Генерация случайных чисел с заданным распределением

Нужно генерировать случайные числа с
плотностью вероятности $f(x)$

и (интегральной) функцией распределения

$$F(x) = \int_{-\infty}^x f(x) dx$$

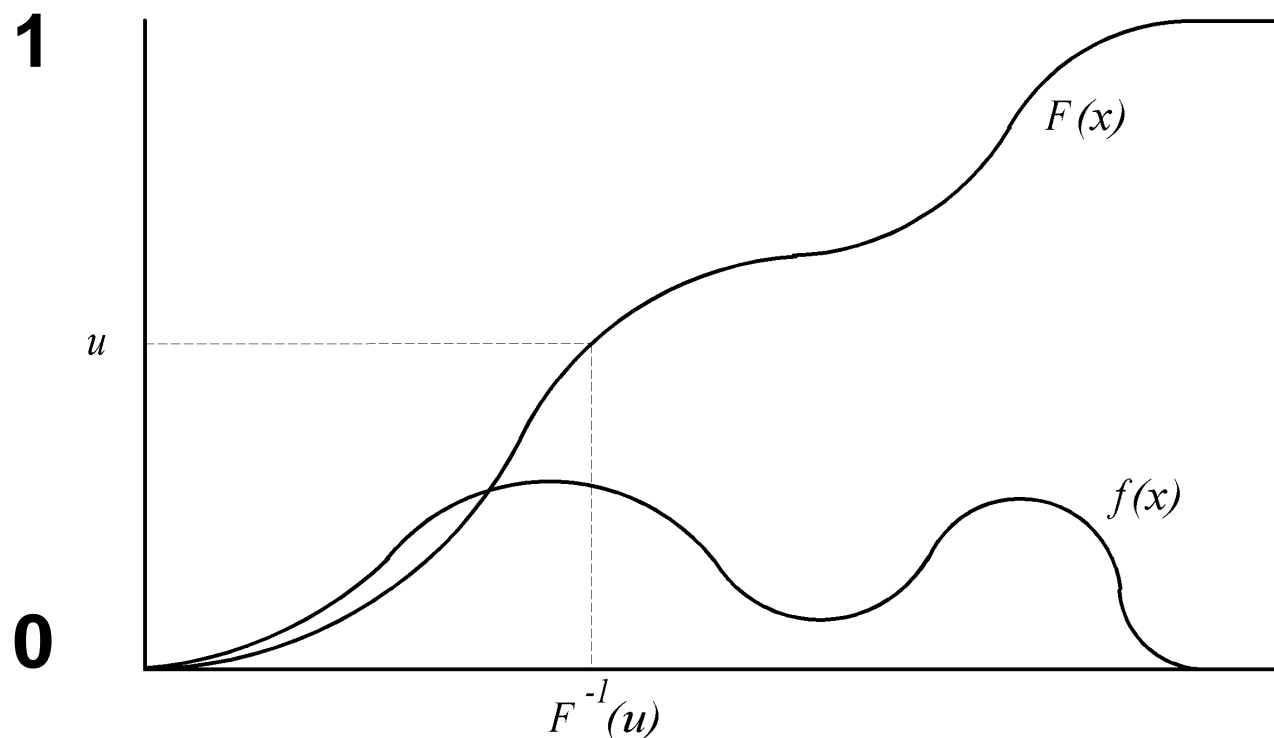
с нормировкой $F(\infty) = 1$.

Метод обратных функций

-плотность вероятности $f(x)$

-интегральная плотность вероятности

$$F(x) = \int_{-\infty}^x f(x) dx$$



Генерация случайных чисел с заданным распределением

Inverse transformation method (метод
обратного преобразования)

- Генерируется равномерное распределение x_i на интервале $[0,1]$.
- Решается обратная задача $y_i = F^{-1}(x_i)$.
- Величина y_i распределена с плотностью вероятности $f(x)$.

Пример 1:

- Генерация частиц с энергиями согласно распределению Больцмана $f(E) \sim e^{-E/kT}$.
- Энергия i -ой частицы запишется как $E_i = -kT \ln(\gamma)$, где γ - случайное число на интервале $[0,1]$.
- Во многих случаях не так просто представить $F^{-1}(x_i)$.

Пример 2:

- Генерация частиц с пробегом в среде

$$p(x) = \Sigma e^{-\Sigma x}$$

- Пробег i -ой частицы запишется как

$$\lambda = -(1/\Sigma) \ln \gamma,$$

где γ – случайная величина на интервале $(0,1)$.

Пример 3: на доске

Прохождение нейтронов сквозь пластинку - простейший пример

Вероятностные законы взаимодействия отдельной элементарной частицы (нейтрона, фотона, мезона и др.) с веществом известны. Обычно требуется найти макроскопические характеристики процессов, в которых участвует огромное количество таких частиц: плотности, потоки и т. п.

Прохождение нейтронов сквозь пластинку

Рассмотрим простейший вариант задачи о прохождении нейтронов сквозь пластинку.

Пусть на однородную бесконечную пластинку толщиной h падает поток нейтронов с энергией E_0 ; угол падения 90° .

При столкновении с атомами вещества, из которого состоит пластинка, нейтроны могут упруго рассеиваться или поглощаться.

Предположим для простоты, что энергия нейтрона при рассеянии не меняется и любое направление «отскока» нейтрона от атома одинаково вероятно (последнее иногда справедливо в веществах с тяжелыми атомами).

Прохождение нейтронов сквозь пластинку

На рис. 5 изображены различные варианты взаимодействия нейтронов с пластинкой:

a — нейтрон проходит сквозь пластинку,

б — нейтрон поглощается в пластинке,

в — нейтрон отражается пластинкой.

Требуется вычислить вероятность прохождения нейтрона сквозь пластинку p^+ ; вероятность отражения нейтрона пластин- p^- и вероятность поглощения нейтрона в пластинке p^0 .

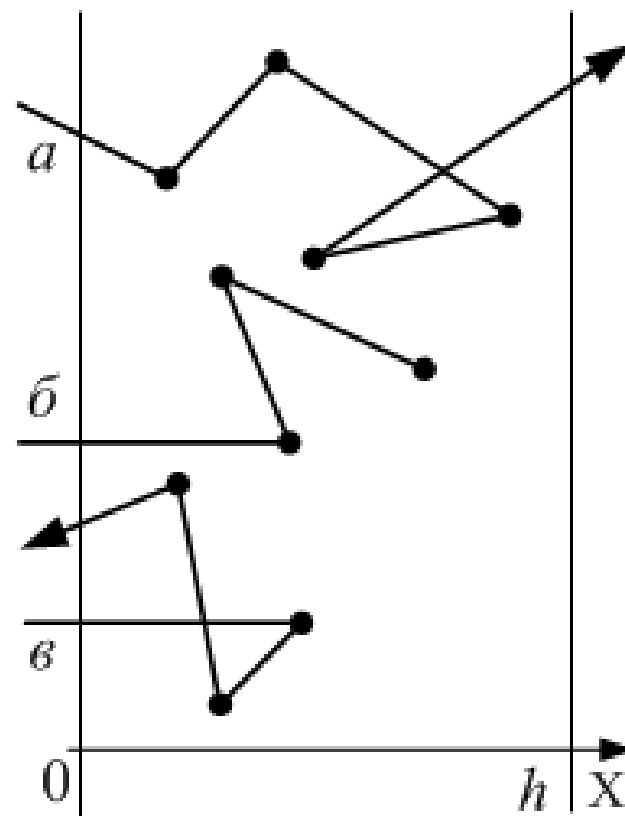


Рис. 5. Различные случаи «судьбы» нейтронов, падающих на пластинку

Прохождение нейтронов сквозь пластинку

Взаимодействие нейтронов с веществом характеризуется в рассматриваемом случае двумя постоянными Σ_c и Σ_s , которые называются **сечением поглощения и сечением рассеяния** (индексы c и s —это первые буквы английских слов capture -- захват и scattering -- рассеяние).

Сумма этих сечений $\Sigma = \Sigma_c + \Sigma_s$ называется **полным сечением**.

Физический смысл сечений следующий:
при столкновении нейтрона с атомом вещества
вероятность поглощения равна Σ_c / Σ , а
вероятность рассеяния равна Σ_s / Σ .

Прохождение нейтронов сквозь пластинку

Длина свободного пробега нейтрона λ (т. е. длина пути от столкновения до столкновения) — это случайная величина. Она может принимать любые положительные значения с плотностью вероятностей

$$p(x) = \Sigma e^{-\Sigma x}.$$

Мы можем сразу написать выражение для средней длины свободного пробега:

$$\langle \lambda \rangle = 1/\Sigma,$$

а также формулу для розыгрыша λ :

$$\lambda = -(1/\Sigma) \ln \gamma,$$

где γ — случайная величина на интервале (0,1).

Прохождение нейтронов сквозь пластинку

Остается еще выяснить, как выбирать случайное направление нейтрона после рассеяния.

Так как задача симметрична относительно оси x , то направление вполне определяется одним углом φ между направлением скорости нейтрона и осью Ox .

Можно доказать, что требование равной вероятности любого направления в этом случае равносильно требованию, чтобы косинус этого угла $\mu = \cos\varphi$ был равномерно распределен в интервале $(-1,1)$ и

$$\mu = 2\gamma - 1.$$

Схема моделирования траекторий нейтронов

Предположим, что нейтрон испытал k -е рассеяние внутри пластинки в точке с абсциссой x_k и после этого начал двигаться в направлении μ_k .

Разыграем длину свободного пробега

$$\lambda = -(1/\Sigma)\ln\gamma$$

и вычислим абсциссу следующего столкновения (рис.6)

$$x_{k+1} = x_k + \lambda_k \mu_k.$$

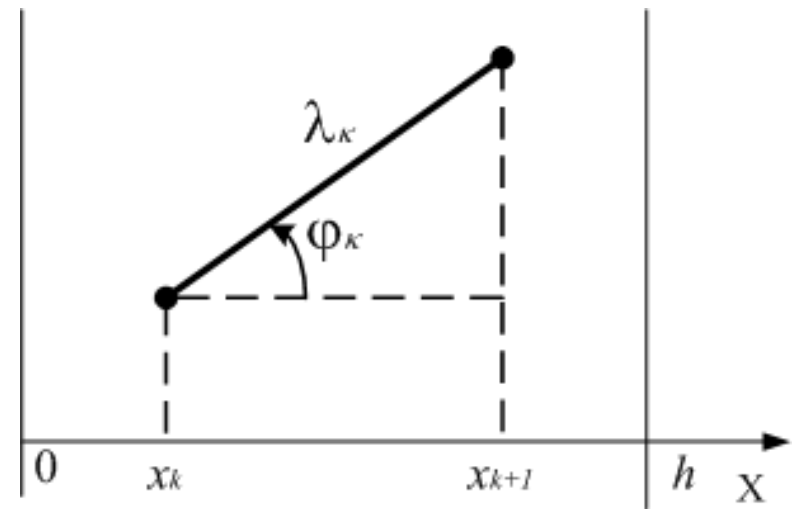


Схема моделирования траекторий нейтронов

Проверим условие прохождения сквозь пластинку:

$$x_{k+1} > h.$$

Если это условие выполнено, то счет траектории нейтрона заканчивается и добавляется единица к счетчику прошедших частиц.

В противном случае проверяем условие отражения:

$$x_{k+1} < 0.$$

Если это условие выполнено, то счет траектории заканчивается и добавляется единица к счетчику отраженных частиц.

Если же и это условие не выполнено, т. е. $0 \leq x_{k+1} \leq h$, то, значит, нейтрон испытал $k+1$ -е столкновение внутри пластинки, и надо разыграть «судьбу» нейтрона при столкновении.

Схема моделирования траекторий нейтронов

Выбираем очередное случайное значение γ и проверяем условие поглощения:

$$\gamma < \Sigma_c / \Sigma$$

Если последнее неравенство выполнено, то счет траектории заканчивается и добавляется единица к счетчику поглощенных частиц.

В противном случае мы считаем, что нейтрон испытал рассеяние в точке с абсциссой x_{k+1} . Тогда разыгрываем новое направление скорости нейтрона

$$\mu_{k+1} = 2\gamma - 1$$

и затем повторяем весь цикл снова (но, конечно, уже с другими значениями γ).

Схема моделирования траекторий нейтронов

Все γ написаны без индексов, так как имеется в виду, что каждое значение γ используется всего один раз. Для расчета одного звена траектории нужны три значения γ . Начальные значения для каждой траектории:

$$x_0 = 0, \mu_0 = 1$$

После того как будут сосчитаны N траекторий, окажется, что N^+ нейтронов прошли сквозь пластинку, N^- нейтронов отразились от нее, а N^0 нейтронов были поглощены в ней.

Схема моделирования траекторий нейтронов

Очевидно, искомые вероятности приближенно равны отношениям:

$$p^+ \approx \frac{N^+}{N}, p^- \approx \frac{N^-}{N}, p^0 \approx \frac{N^0}{N}.$$

На рис. 7 приведена блок-схема программы для расчета этой задачи.

Индекс j — это номер траектории, индекс k — номер столкновения (вдоль траектории).

Отметим, что метод Монте-Карло позволяет решать гораздо более сложные задачи об элементарных частицах: исследуемая среда может состоять из различных веществ и иметь любую геометрическую структуру; энергия частицы при каждом столкновении может меняться. Можно учитывать много других ядерных процессов (например, возможность деления атома при столкновении с нейтроном и образование при этом новых нейтронов). Можно рассчитать условие возникновения и поддержания цепной реакции и т. д.

Схема моделирования траекторий нейтронов

Рис. 7. Блок-схема программы расчета прохождения нейтронов в пластине

