

Simulation und Fit experimenteller Daten

Computational Physics Praktikum WS24/25

Sascha Eckstein, Jannis Hollmann
Version 1 abgegeben am 30. März 2025

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	3
2	Grundlagen	3
2.1	Ausgleich von Messwerten	3
2.2	Genetische Algorithmen	3
2.3	Monte-Carlo Simulation	4
2.4	Wechselwirkung von Elektronen mit Materie	4
3	Auswertung	4
3.1	Anpassung experimenteller Daten	4
3.1.1	Aufgabe 1	4
3.1.2	Aufgabe 2	5
3.1.3	Aufgabe 3	5
3.1.4	Aufgabe 4	6
3.2	Genetische Algorithmen	7
3.2.1	Maximum der Funktionen	7
3.2.2	Lichtkurve	8
3.3	Monte-Carlo-Simulation der Elektron-Materie-Wechselwirkung	10
4	Aufgabenstellung	10
5	Fazit	11
6	Quellen	12

1 Einleitung

Für die Anpassung experimenteller Daten stehen verschiedene Methoden zur Verfügung. Eine der am häufigsten verwendeten Techniken ist die Methode der kleinsten Quadrate, bei der ein lineares Gleichungssystem gelöst werden muss. Dies kann beispielsweise mit dem Simplex-Verfahren oder dem CG-Verfahren (Conjugate Gradient) realisiert werden.

Neben klassischen Optimierungsmethoden kommen auch alternative Algorithmen zum Einsatz, wie etwa genetische Algorithmen, die von biologischen Evolutionsprozessen inspiriert sind.

Zur numerischen Berechnung von Integralen, ohne sie analytisch lösen zu müssen, kann eine Monte-Carlo-Simulation verwendet werden.

Diese werden in diesem Versuch diskutiert.

2 Grundlagen

2.1 Ausgleich von Messwerten

Bei der Auswertung physikalischer Messwerte y_i mit verschiedener Genauigkeit σ_i werden diese häufig mit einer theoretischen Vorhersage verglichen. Ziel ist es eine Modellfunktion für y anzupassen, welche von den Parametern a_j abhängt,

$$y(x) = y(x; a_1, a_2, \dots, a_N).$$

Eine Möglichkeit die Parameter zu bestimmen ist die Methode der kleinsten Quadrate. Die Wahrscheinlichkeit P_i , dass ein Messpunkt y_i mit einem Fehler σ_i durch einen theoretischen Wert y korrekt beschrieben wird, ergibt sich aus der Wahrscheinlichkeitsverteilung von y_i . Nach dem zentralen Grenzwertsatz der Statistik konvergiert die Summe beliebig verteilter Zufallsgrößen gegen eine Normalverteilung. Daher ergibt sich die Gesamtwahrscheinlichkeit P , dass eine Kurve mit den Parametern a_j alle Messpunkte y_i möglichst gut beschreibt, als das Produkt der Einzelwahrscheinlichkeiten P_i . Diese Gesamtwahrscheinlichkeit muss in Bezug auf die Parameter a_j maximiert werden, um die bestmögliche Anpassung des Modells an die Daten zu gewährleisten,

$$P \sim \prod_{i=1}^N \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{y_i - y(x_i)}{\sigma_i} \right)^2 \right] \rightarrow \max.$$

Diese Methode zur Bestimmung der optimalen Parameter wird im Englischen als Maximum Likelihood Estimation bezeichnet. Unter der Annahme, dass die Messwerte y_i normalverteilt sind, kann der wahrscheinlichste Parametersatz durch eine äquivalente Minimierungsbedingung bestimmt werden,

$$-\ln P \sim \chi^2 = \sum_{i=1}^N \left(\frac{y_i - y(x_i)}{\sigma_i} \right)^2 \rightarrow \min.$$

Dies entspricht dem Prinzip der kleinsten Quadrate, das bereits von Gauß formuliert wurde. Dabei wird die Summe der quadrierten, fehlergewichteten Abweichungen zwischen den gemessenen Werten y_i und den modellierten Werten $y(x_i)$ minimiert, um die bestmögliche Anpassung zu gewährleisten.

2.2 Genetische Algorithmen

Genetische Algorithmen sind eine Klasse von Optimierungsverfahren, die sich an der natürlichen Evolution orientieren. Sie werden insbesondere zur Lösung komplexer Optimierungsprobleme eingesetzt, bei denen klassische Methoden ineffizient sind. Ein genetischer Algorithmus basiert auf den folgenden Grundprinzipien.

Populationsbasierte Suche: Anstelle einer einzelnen Lösung wird eine Population von möglichen Lösungen betrachtet.

Selektion: Lösungen mit besserer Fitness haben eine höhere Wahrscheinlichkeit, sich in die nächste Generation fortzupflanzen.

Crossover: Neue Lösungen werden durch die Kombination von Eigenschaften bereits bestehender Lösungen erzeugt.

Mutation: Durch zufällige Änderungen werden neue Lösungsvarianten eingeführt, um die Vielfalt zu erhalten.

Fitness-Funktion: Eine Bewertungsfunktion bestimmt die Qualität einer Lösung im Hinblick auf das Optimierungsziel.

2.3 Monte-Carlo Simulation

Monte-Carlo-Simulationen sind numerischen Verfahren, die auf der wiederholten Zufallssimulation beruhen. Sie werden eingesetzt, um komplexe Probleme zu lösen, bei denen eine analytische Berechnung schwierig ist.

Eine Monte-Carlo-Simulation basiert auf den folgenden Grundprinzipien.

Zufallszahlen: Die Methode nutzt Zufallszahlen, um verschiedene Szenarien zu simulieren.

Wiederholte Stichproben: Eine große Anzahl an Zufallsexperimenten führt zu einer Annäherung an die tatsächliche Lösung.

Statistische Analyse: Die Ergebnisse der Simulation werden statistisch ausgewertet, um Wahrscheinlichkeiten oder Erwartungswerte zu bestimmen.

Konvergenz durch Anzahl der Simulationen: Je mehr Durchläufe durchgeführt werden, desto genauer wird das Ergebnis.

2.4 Wechselwirkung von Elektronen mit Materie

Elektronen können auf verschiedene Weise mit Materie interagieren, wobei die Art der Wechselwirkung von der Energie der Elektronen und den Eigenschaften des durchdrungenen Materials abhängt. Elektronen gehören zur Kategorie der direkt ionisierenden Strahlung, da sie als geladene Teilchen (e^- , β^- oder β^+) direkt mit den Atomen des Materials wechselwirken. Im Gegensatz dazu steht die indirekt ionisierende Strahlung, wie γ -Strahlung oder Neutronen, die zunächst sekundäre geladene Teilchen erzeugen müssen, um ionisierend zu wirken. Der Energieverlust von Elektronen beim Durchgang durch Materie wird durch die Bethe-Bloch-Formel beschrieben,

$$-\frac{dE_k}{dx} = \text{const.} \cdot \frac{NZz^2}{v^2} \ln \frac{2m_e v^2}{I}.$$

Mit N der Atomdichte im Absorber, Z der Ordnungszahl des Absorbers, z der Ladung des gebremsten Teilchens, v der Teilchengeschwindigkeit, m_e der Masse des Elektrons und I der mittleren Ionisierungsarbeit pro Stoß.

Die Streuung von Elektronen an der Kernladung wird durch den Rutherford-Wirkungsquerschnitt beschrieben,

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_R = \frac{\text{const.}}{T^2 \sin^4 \frac{\theta}{2}}.$$

Die Berücksichtigung des Elektronenspins führt zu einer Modifikation des Rutherford-Querschnitts, die sogenannte Mott-Streuung,

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{Mott} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_R \cdot (1 - \beta \sin^2 \frac{\theta}{2}).$$

Die Streuung von Elektronen an Hüllenelektronen (Møller-Streuung) spielt ebenfalls eine wichtige Rolle,

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{Møller} = \frac{r_e^2}{4} \left(\frac{m_e c}{p}\right)^2 \cdot \frac{(3 + \cos \theta)^2}{\sin^4 \theta}$$

Der Energieverlust von Elektronen in Materie kann durch die Continuous Slowing Down Approximation (CSDA) beschrieben werden,

$$-\left(\frac{dT}{dx}\right)_c = \text{const.} \cdot \frac{Zp}{\beta^2 A} \left[\ln \frac{T(T + mc^2)^2 \beta^2}{2I^2 mc^2} - (2\sqrt{1 - \beta^2} - 1 + \beta^2) \ln 2 + \frac{1}{8}(1 - \sqrt{1 - \beta^2})^2 + (1 - \beta^2) \right]$$

Die Reichweite der Elektronen ergibt sich durch Integration dieses Bremsvermögens.

3 Auswertung

3.1 Anpassung experimenteller Daten

3.1.1 Aufgabe 1

Mit der Methode der kleinsten Quadrate lässt sich der gewichtete Mittelwert für 3 unabhängige Messungen der Lichtgeschwindigkeit bestimmen. Die Ergebnisse sind in Tabelle 1 dargestellt. Den Fehler des gewichteten Mittelwerts kann man entweder als internen Fehler, d. h. allein aus der Kombination der Einzelfehler, oder als externen Fehler, der auch noch die Streuung der einzelnen Fehler berücksichtigt, angeben. Der interne Fehler folgt aus der Gaußschen Fehlerfortpflanzung

\bar{c}	χ^2	$\sigma_{int.}$	$\sigma_{ext.}$
299792.777	0.228	1.823	0.616

Tabelle 1: Ergebnisse der ersten Aufgabe

3.1.2 Aufgabe 2

Nun soll für eine Messreihe von Strom und Spannungsmessungen eine Kennlinie mit 1 bzw. 2 Parameter bestimmt werden. Dazu wird wieder die Methode der kleinsten Quadrate verwendet und das daraus resultierende lineare Gleichungssystem gelöst. In Abbildung 1 sind die Ausgleichsgeraden für 1 bzw. 2 Parameter gegeben. In Tabelle 2 sind die Parameter sowie die dazugehörigen Fehler abgebildet. Eindeutig passt eine Ausgleichsgerade mit 2 Parametern besser an die Daten, da das χ^2 etwa 4-mal kleiner ist.

	R	I_0	χ^2
Ohne Offset	3.934(877)	-	7.451
Mit Offset	3.631(45)	-0.066 04(8250)	1.7886

Tabelle 2: Parameter der linearen Regression

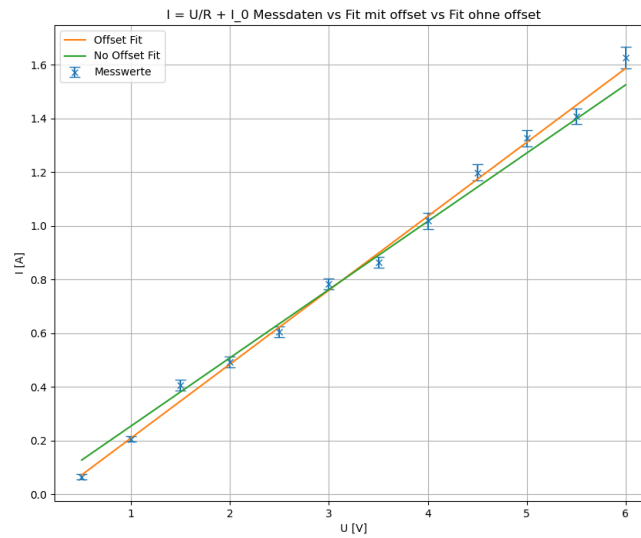


Abbildung 1: Strom-Spannung Kennlinie

3.1.3 Aufgabe 3

Als Nächstes ist die Anpassung von zwei Funktionen mit linearen Koeffizienten an eine gegebene Winkelverteilung $y(N)$ in Abhängigkeit von $\cos\theta$ durchzuführen. Dabei sollen Polynome unterschiedlicher Ordnung verwendet werden. Zunächst wird die Datenreihe nach gewöhnlichen Polynomen der Ordnung n entwickelt. Anschließend erfolgt eine Approximation mit Legendre-Polynomen $P_l(x)$, sodass die Verteilung durch

$$N = N_{\text{tot}} \sum_l a_l P_l(x)$$

Für beide Methoden wird das zugehörige lineare Gleichungssystem aufgestellt und durch Matrixinversion gelöst. Das dazugehörige χ^2 lautet

$$\chi^2 = \sum_i \left(\frac{y_i - y(x_i)}{\sigma_i} \right)^2$$

wobei die Unsicherheiten σ_i aus der Poisson-Statistik als $\sigma_i = \sqrt{N_i}$ gegeben sind. Der optimale Polynomgrad wird durch das reduzierte χ^2 bestimmt, das idealerweise nahe bei 1 liegt.

In Abbildung 2 sind die bestimmten Polynome n-ten Grades abgebildet. Links wurde die Matrixinversion verwendet und rechts der Levenberg-Marquardt Algorithmus (curve-fit). Die reduzierten χ^2 zeigen ähnliche Ergebnisse für beide Methoden, jedoch ist für ein Polynom 8ten-Grades bei dem Levenberg-Marquardt Algorithmus das red. χ^2 am nächsten bei 1. Bei der Matrixinversion scheint ein Polynom 4ten Grades am besten zu passen.

In Abbildung 3 sind die bestimmten Legendre-Polynome n-ten Grades abgebildet. Auch hier sind beide Methoden sehr ähnlich und liefern beide ein Polynom 4ten Grades als besten fit.

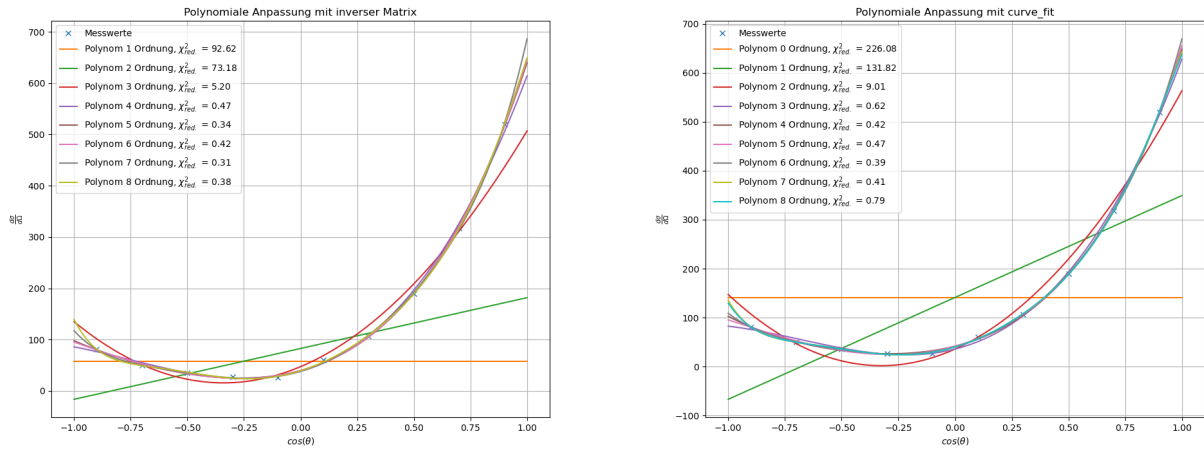


Abbildung 2: Vergleich der Matrixinversion mit dem Levenberg-Marquardt Algorithmus für Polynome

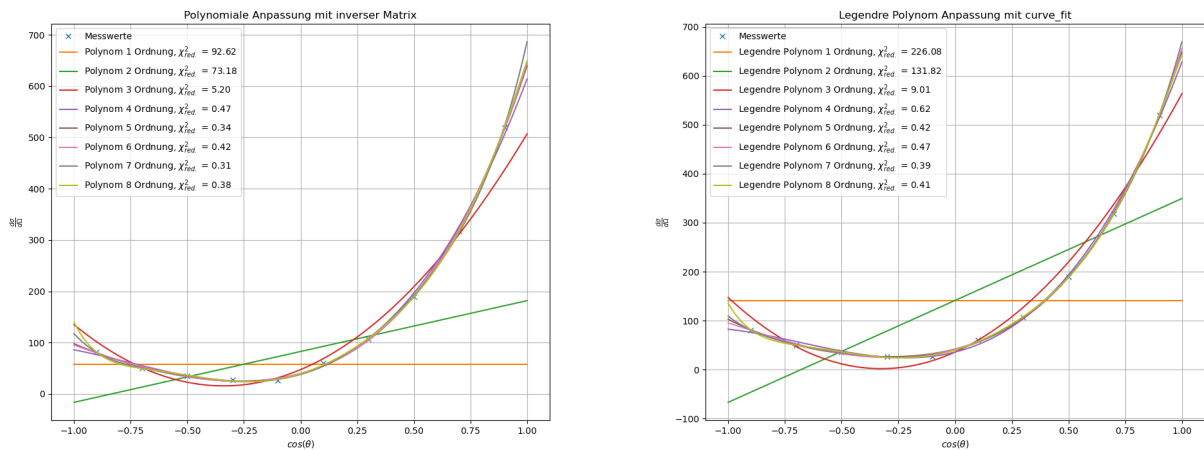


Abbildung 3: Vergleich der Matrixinversion mit dem Levenberg-Marquardt Algorithmus für Legendre-Polynome

3.1.4 Aufgabe 4

Ziel dieser Aufgabe ist die Bestimmung der Zerfallsrate aus experimentellen Messungen. Grundlage der Modellierung ist das Zerfallsgesetz

$$N(t) = N_1 \cdot e^{-\lambda_1 t} + N_2 \cdot e^{-\lambda_2 t}$$

wobei die Zerfallsrate zusätzlich um eine konstante Untergrundrate N_0 ergänzt wird.

Da die Halbwertszeiten bekannt sind, reduziert sich das Problem auf die Bestimmung der linearen Koeffizienten N_0, N_1, N_2 . Die optimale Parameterwahl ergibt sich aus der Minimierung der Chi-Quadrat-Funktion

$$\chi^2 = \sum_i \left(\frac{y_i - N(t_i)}{\sigma_i} \right)^2$$

durch Lösung des zugehörigen linearen Gleichungssystems mit drei Unbekannten.

Zur Lösung des nicht linearen Optimierungsproblems sollen zwei numerische Methoden verwendet werden, einmal das Downhill Simplex-Verfahren und das Conjugate Gradient-Verfahren. Die Ergebnisse sind in Abbildung 4 dargestellt. Betrachtet man das χ^2 , wird klar, dass das Downhill Simplex Verfahren am besten geeignet für dieses Problem ist.

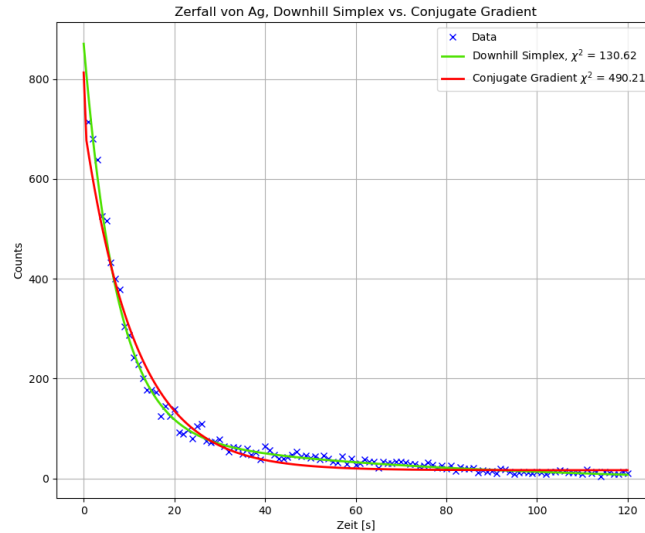


Abbildung 4: Vergleich von Downhill Simplex und Conjugate Gradient

3.2 Genetische Algorithmen

3.2.1 Maximum der Funktionen

Mit Hilfe eines genetischen Algorithmus, soll das Maximum der Funktionen f_1 (konzentrische Wellen) und f_2 (zwei 2D-Gaußverteilungen) bestimmt werden.

Die erste zu maximierende Funktion lautet:

$$f_1(x, y) = \cos^2(n\pi r) e^{-r^2/\sigma^2}$$

mit,

$$r^2 = (x - 0.5)^2 + (y - 0.5)^2.$$

Die Parameter sind gegeben durch $n = 9$ und $\sigma^2 = 0.15$.

Die zweite zu maximierende Funktion ist eine Summe zweier 2D-Gaußverteilungen:

$$f_2(x, y) = 0.8e^{-r_1^2/0.3^2} + 0.879008e^{-r_2^2/0.03^2}$$

mit,

$$r_1^2 = (x - 0.5)^2 + (y - 0.5)^2$$

$$r_2^2 = (x - 0.6)^2 + (y - 0.1)^2$$

In Tabelle 3 sind die koordinaten des Maximums dargestellt, die mithilfe eines Genetischen Algorithmus bestimmt wurden. Abbildung 5 zeigt den Verlauf von χ^2 mit erhöhung der Iteration.

	x	y	χ^2
Funktion 1	0.56511998	0.41110837	-0.9216
Funktion 2	0.49999262	0.49999984	-0.8

Tabelle 3: Minima der Funktionen

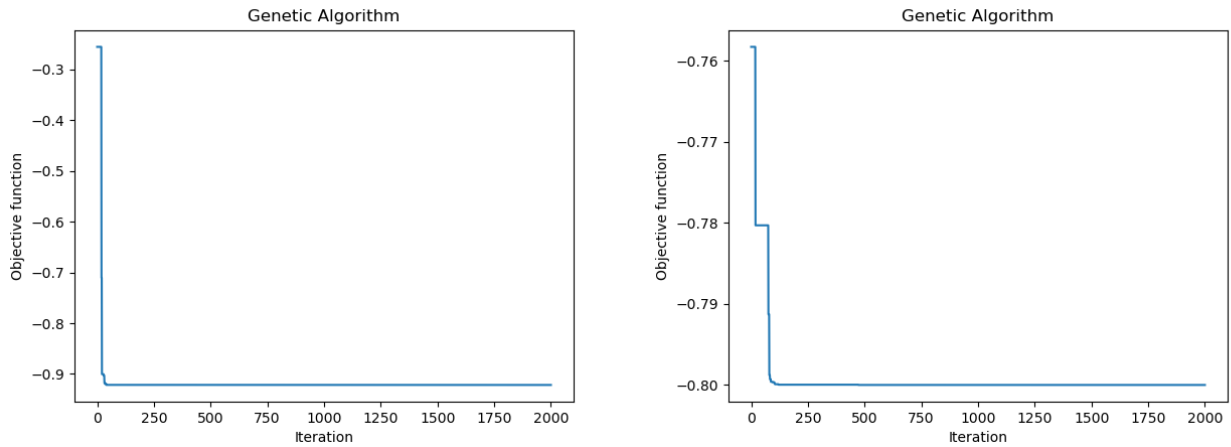


Abbildung 5: Verlauf der χ^2 Funktion mit Erhöhung der Iterationen für Funktion 1 (links) und Funktion 2 (rechts)

3.2.2 Lichtkurve

Daraufhin werden eine variablen Anzahl von Sinusfunktionen, ergänzt um eine lineare Funktion, an die Daten aus einer Lichtkurve mithilfe des genetischen Algorithmus Angepasst.

Zunächst wird eine lineare Funktion an die Daten gefittet. Diese ist in Abbildung 6 dargestellt.

Um die Anzahl der in der Lichtkurve enthaltenen Frequenzmoden zu bestimmen, wird die Anzahl der Sinuskomponenten systematisch erhöht. Dadurch soll die optimale Anzahl der Moden gefunden werden, die die Daten bestmöglich beschreibt. Abbildung 7 bis 11 zeigen die Unterschiedlichen Moden. Wenn man da χ^2 betrachtet, wird schnell klar, dass es sich hier um drei Moden handeln muss.

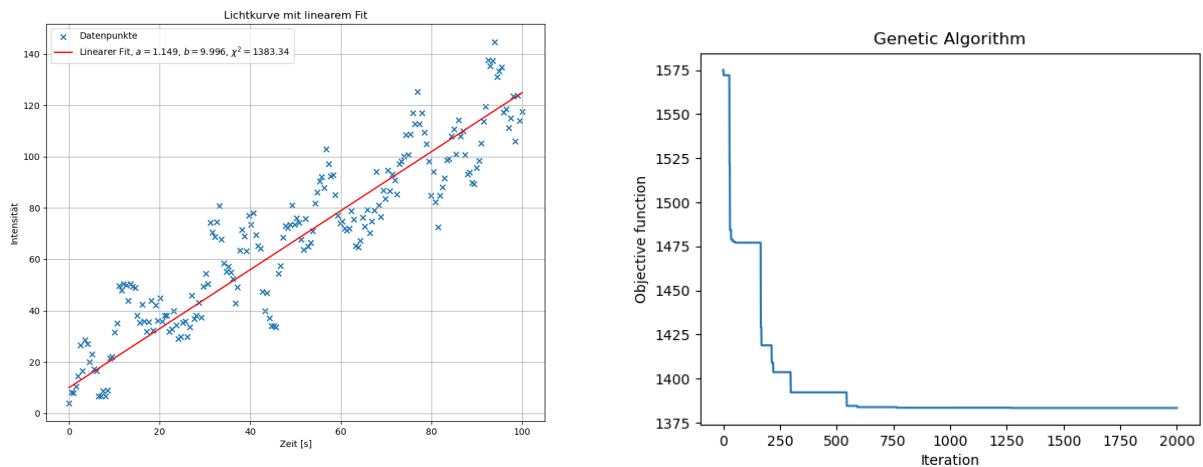


Abbildung 6: Ausgleichsgerade

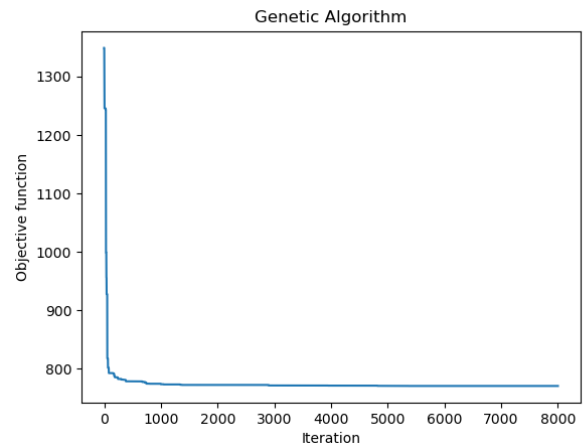
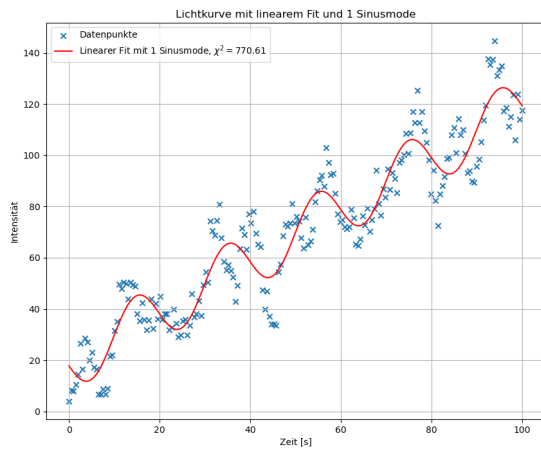


Abbildung 7: Gerade mit einer Mode

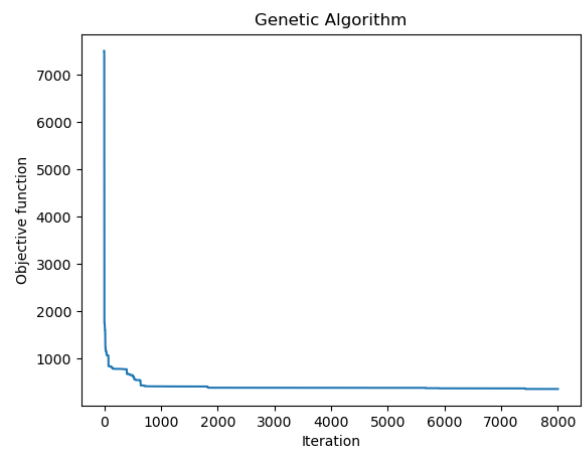
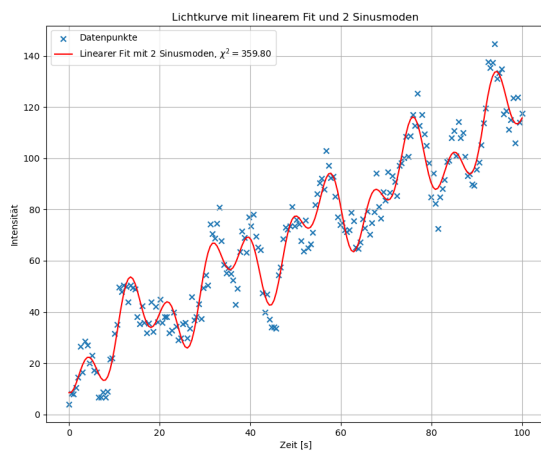


Abbildung 8: Gerade mit zwei Moden

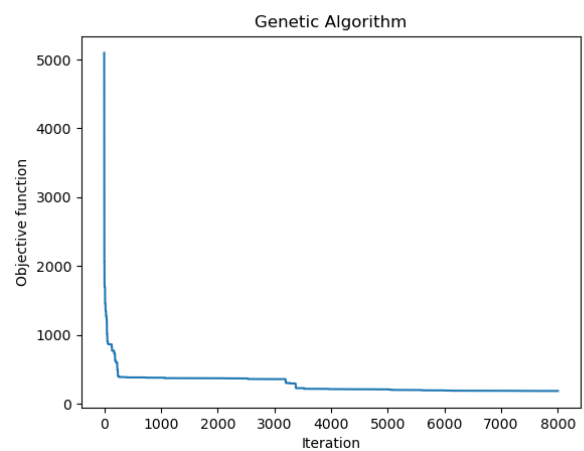
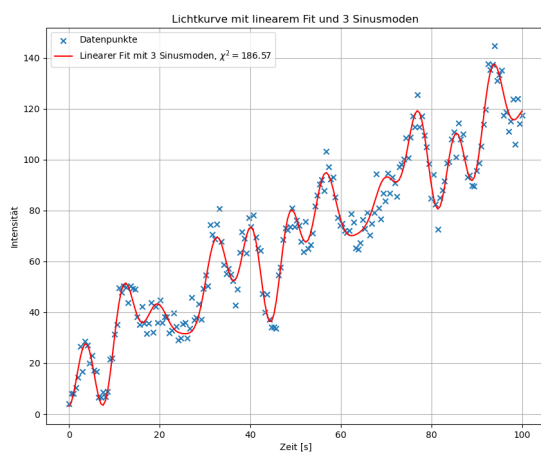


Abbildung 9: Gerade mit drei Moden

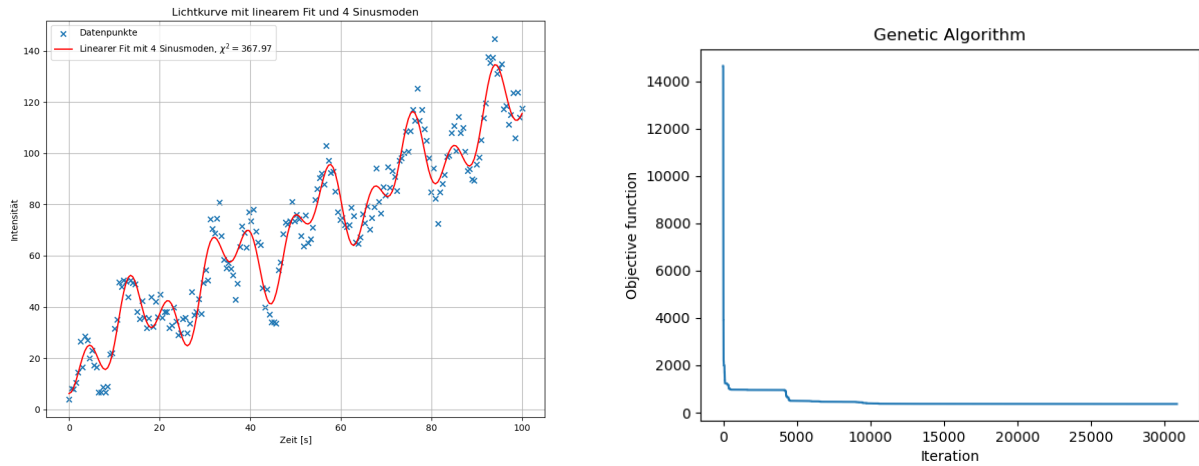


Abbildung 10: Gerade mit vier Moden

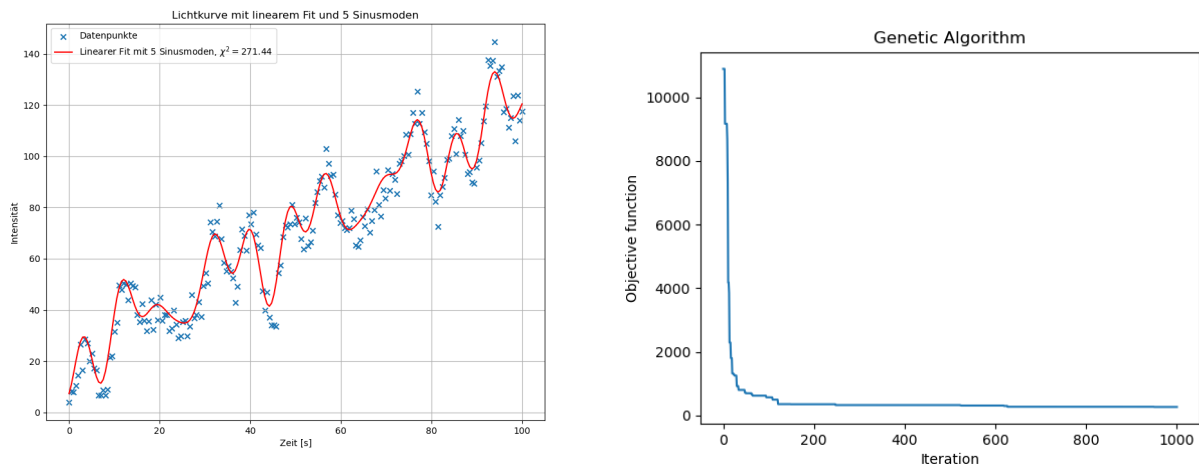


Abbildung 11: gerade mit fünf Moden

3.3 Monte-Carlo-Simulation der Elektron-Materie-Wechselwirkung

4 Aufgabenstellung

In dieser Aufgabe wird die Bewegung von Elektronen in einem Polyethylen-Zylinder simuliert. Die Startenergie der Elektronen beträgt 20 MeV. Dabei werden verschiedene Streuprozesse berücksichtigt:

- Mott-Streuung am Kernpotential
- Møller-Streuung an den Hüllenelektronen
- Kontinuierliche Abbremsung in der CSDA-Näherung

Ziel ist es, die berechneten Trajektorien der Elektronen in einer 3D-Darstellung zu visualisieren. Für 100 Elektronen sind diese in [Abbildung 12](#) und für 1000 in [Abbildung 13](#) dargestellt.

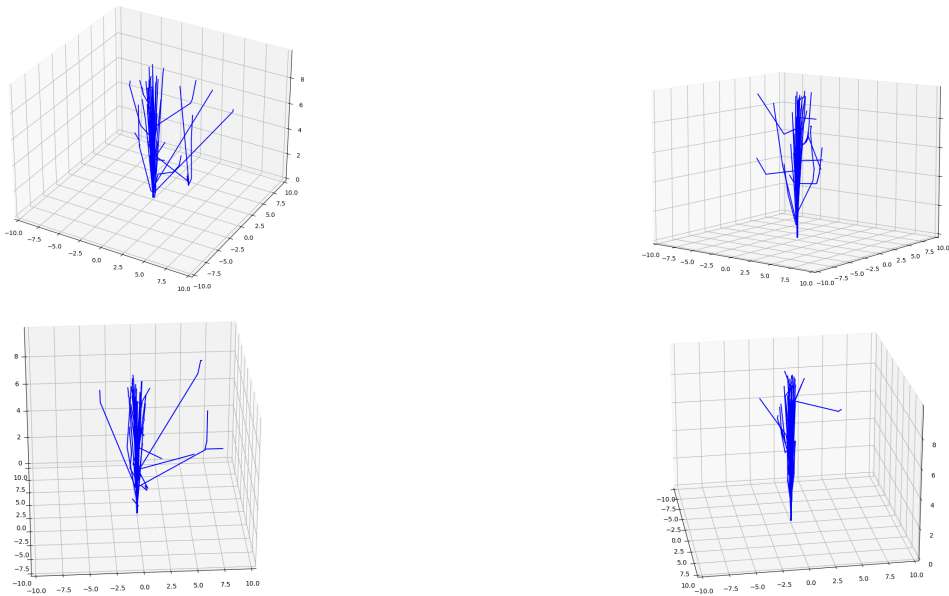


Abbildung 12: Trajektorie von 100 simulierten Elektronen

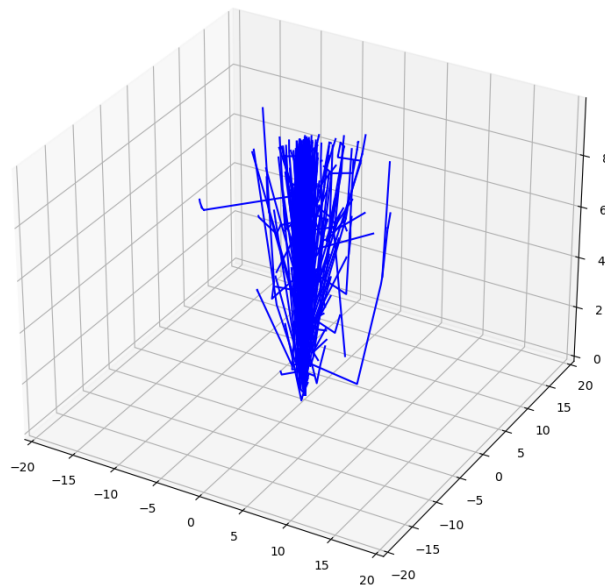


Abbildung 13: Trajektorie von 1000 simulierten Elektronen

5 Fazit

In diesem Versuch wurden verschiedene numerische Methoden zur Datenanalyse und Simulation physikalischer Prozesse untersucht. Zunächst wurde die Methode der kleinsten Quadrate zur Anpassung experimenteller Daten betrachtet, gefolgt von einer Analyse mithilfe von Legendre-Polynomen. Anschließend wurden genetische Algorithmen zur Optimierung von Modellparametern eingesetzt. Darüber hinaus wurde die Monte-Carlo-Methode zur numerischen Integration angewendet.

Zusätzlich wurde die Bewegung von Elektronen in einem Polyethylen-Zylinder simuliert, wobei verschiedene Streuprozesse und Energieverluste berücksichtigt wurden. Die resultierenden Trajektorien wurden schließlich in einer 3D-Darstellung visualisiert.

Die implementierten Verfahren zeigten sich als leistungsfähige Werkzeuge zur Lösung komplexer Probleme in der Computational Physics. Insbesondere genetische Algorithmen und Monte-Carlo-Simulationen erwiesen sich als nützlich für Optimierungs- und Integrationsaufgaben, während klassische Fit-Methoden präzise Anpassungen an experimentelle Daten ermöglichten.

6 Quellen

1. [Ausgleich von Messwerte](#), Thorsten Hehl
2. [Genetische Algorithmen für die numerische Optimierung](#); Thorsten Hehl
3. [Wechselwirkung von Elektronen mit Materie -Simulation mit der Monte-Carlo-Methode](#), Thorsten Hehl