Модуль 4. Метод Монте-Карло и его применение к решению задач радиационной физики (часть 2)

3. Общая схема метода Монте-Карло.
4. Разыгрывание случайных величин.
5. Моделирование координат случайных точек на плоскости.
6. Вычисление определенных интегралов методом Монте-Карло.
7. Расчет прохождения нейтронов сквозь пластинку.

4.3. Общая схема метода Монте-Карло

Пусть требуется вычислить какую-то неизвестную величину m.

Возьмем такую случайную величину ξ, чтобы

$M\xi=m$. Пусть при этом $D\xi=b^2$.

Рассмотрим N независимых случайных величин ξ_1, ξ_2,.. ξ_N, распределения которых совпадают с распределением ξ.

Если N достаточно велико, то, согласно центральной предельной теореме, распределение суммы будет приблизительно нормальным с параметрами a=Nm, $\sigma = b\sqrt{N}$.

4.3. Общая схема метода Монте-Карло

Из правила «трех сигм» следует, что

$$P(Nm - 3b\sqrt{N} < \rho_N < Nm + 3b\sqrt{N}) \approx 0{,}997 \qquad (20)$$

Это выражение легко преобразовать к виду:

$$\mathrm{P}\left\{\left|\frac{1}{\mathrm{N}}\sum_{\mathrm{i}=1}^{\mathrm{N}}\xi_{\mathrm{i}} - \mathrm{m}\right| < \frac{3\mathrm{b}}{\sqrt{\mathrm{N}}}\right\} \approx 0{,}997 \qquad (21)$$

Это – чрезвычайно важное для метода Монте-Карло соотношение. Оно дает нам и метод расчета m, и оценку погрешности.

4.4. Разыгрывание случайных величин

- Значения любой случайной величины, распределенной по некоторому закону, можно получить **путем преобразования значений одной** какой-либо (так сказать **«стандартной»**) случайной величины.
- Обычно роль «стандартной» величины играет случайная величина γ, **равномерно распределенная в (0,1).** Эту случайную величину получают с помощью различных методик, реализованных в виде компьютерных программ (генераторы случайных чисел и т.п.).
- Будем называть процесс нахождения какой-либо случайной величины ξ путем преобразования одного или нескольких значений γ **разыгрыванием случайной величины ξ.**

4.4. Разыгрывание случайных величин

● Допустим, нужно получить значения случайной величины ξ, распределенной в интервале (a,b) с плотностью вероятности p(x).

Можно доказать, что значения ξ находятся из уравнения:

$$\int_{a}^{\xi} p(x)dx = \gamma \qquad (22)$$

т.е. выбрав очередное значение «стандартной» случайной величины γ, надо решить уравнение (22) и найти очередное значение ξ.

y(x) = γ – первообразная для p(x)

4.4. Разыгрывание случайных величин

● **Разыгрывание нормальных случайных величин**

Пусть случайная величину ζ имеет нормальное распределение на некотором интервале.

В этом случае уравнение (22) при a=0, σ=1 имеет следующий вид:

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\zeta} e^{-t^2/2}dt=\gamma \qquad (23)$$

Здесь сделана замена $x-a=\sigma t$

4.4. Разыгрывание случайных величин

● **Разыгрывание нормальных случайных величин**

Для моделирования нормального распределения можно воспользоваться таблицами, составленными для разыгранных нормальных случайных величин ζ, с математическим ожиданием M ζ=0 и дисперсией D ζ=1.

Случайная величина $\zeta' = \mathrm{a} + \sigma\zeta$ будет также нормальной, причем из свойств математического ожидания и дисперсии следует, что

$$M\zeta' = \mathrm{a}, \ \ D\zeta' = \sigma^2 \tag{24}$$

4.4. Разыгрывание случайных величин

- **Моделирование случайных точек, распределенных по экспоненциальному закону**

Пусть нужно разыграть случайные величины, распределенные по экспоненциальному закону:

$$p(x) = e^{-x}, \quad 0 \le x < \infty \qquad (25)$$

Здесь первообразная для p(x) есть $y(x) = 1 - e^{-x}$.

Отсюда $x = -\ln(1-\gamma)$ или $x = -\ln\gamma$. (26)

4.5. Моделирование координат случайных точек на плоскости

- **Случайные точки, равномерно распределенные на плоскости**

Случайные числа x, равномерно распределенные в интервале (a,b), можно получить из чисел γ, равномерно распределенных в (0,1), по формуле:

$$x = a + (b - a) \cdot \gamma \qquad (26)$$

Случайные точки, равномерно распределенные в параллелепипеде большего числа измерений, можно получить, моделируя из равномерного распределения каждую координату этих точек.

4.5. Моделирование координат случайных точек на плоскости

● **Случайные точки с координатами x и y, распределенные по нормальному закону вокруг точки с координатами x_0 и y_0 с дисперсией σ^2**

Плотности вероятности, описывающие распределение координат точек по нормальному закону:

$$p_x(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp(-\frac{x^2}{2\sigma^2}), \quad -\infty < x < \infty \tag{27}$$

$$p_y(y) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp(-\frac{y^2}{2\sigma^2}), \quad -\infty < y < \infty$$

4.5. Моделирование координат случайных точек на плоскости

Выделим на плоскости площадку ds=dx dy.

Тогда вероятность того, что точка попадает в ds, равна:

$$P(\vec{r} \in ds) = P(x \in dx) P(y \in dy) = \frac{1}{2\pi\sigma^2} \exp(-\frac{x^2 + y^2}{2\sigma^2}) dxdy$$

В полярных координатах $\mathrm{x}^2 + \mathrm{y}^2 = \rho^2, \quad \mathrm{ds} = \rho \mathrm{d}\rho \mathrm{d}\varphi$

4.5. Моделирование координат случайных точек на плоскости

Это значит, что вероятность попадания точки в ds равна:

$$P(\vec{r} \in ds) = \frac{1}{\sigma^2}\exp\left(-\frac{\rho^2}{2\sigma^2}\right)\rho d\rho \cdot \frac{1}{2\pi}d\varphi,$$

Тогда плотности вероятности случайных величин ρ и φ имеют вид:

$$p_\rho(\rho) = \frac{1}{\sigma^2}\exp\left(-\frac{\rho^2}{2\sigma^2}\right)\rho, \quad 0 \le \rho < \infty \qquad (28)$$

$$p_\varphi(\varphi) = \frac{1}{2\pi}, \quad 0 \le \varphi \le 2\pi$$

4.5. Моделирование координат случайных точек на плоскости

С плотностями вероятности (28) случайная величина разыгрывается по формулам:

$$\rho = \sigma\sqrt{2\ln\gamma} \quad , \qquad \varphi = 2\pi\gamma \quad , \qquad (29)$$

где числа γ равномерно распределены в (0,1).

В декартовых координатах:

$$x = x_0 + \rho\cos\varphi \qquad y = y_0 + \rho\sin\varphi$$

будут иметь нормальное распределение со средними значениями x_0, y_0 и дисперсией σ^2.

4.6. Вычисление определенных интегралов методом Монте-Карло

- Если в прямоугольник (b-a)·h вписать кривую и заполнить его равномерно распределенными точками, то отношение количества точек под кривой N_{in} к полному количеству точек N будет приближенно равно отношению площади под кривой к площади прямоугольника.

Но площадь под кривой равна интегралу от функции f(x), поэтому

$$\int_a^b f(x)dx \approx S_0 \frac{N_{in}}{N} , \qquad (30)$$

где S_0=h(b-a) – площадь прямоугольника.

4.7. Расчет прохождения нейтронов сквозь пластинку

● **Постановка задачи**

Пусть на однородную пластинку бесконечной площади толщиной h нормально падает поток нейтронов с энергией E_0.

При столкновении с атомами вещества, из которого состоит пластинка, нейтроны могут:

- упруго рассеиваться;
- поглощаться.

Пусть при упругом рассеянии:

- энергия не меняется;
- равновероятно любое направление рассеяния

4.7. Расчет прохождения нейтронов сквозь пластинку

Возможны три варианта взаимодействия нейтрона с пластинкой:

1) нейтрон проходит сквозь пластинку,
2) нейтрон поглощается в пластинке,
3) нейтрон отражается от пластинки.

Требуется вычислить:

- вероятность прохождения нейтрона сквозь пластинку $\mathbf{P^+}$,
- вероятность отражения нейтронов от пластинки $\mathbf{P^-}$
- вероятность поглощения нейтрона в пластинке $\mathbf{P^0}$.

4.7. Расчет прохождения нейтронов сквозь пластинку

Взаимодействие нейтронов с веществом характеризуется в рассматриваемом случае сечениями поглощения (Σ_c) и рассеяния (Σ_s).

Сумма этих сечений есть полное сечение взаимодействия: $\Sigma = \Sigma_s + \Sigma_c$ **(они известны)** (31)

Длина свободного пробега нейтрона $\lambda = 1/\Sigma$ и может принимать любые положительные значения с плотностью вероятностей:

$$p(x) = \exp(-\Sigma x) \tag{32}$$

т.е. она подчиняется экспоненциальному закону, поэтому формула для разыгрывания λ:

$$\lambda = -(1/\Sigma)\ln\gamma \tag{33}$$

4.7. Расчет прохождения нейтронов сквозь пластинку

● Выбор случайного направления нейтрона после рассеяния (μ).

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

Так как по условию задачи направление отскока нейтрона при взаимодействии с атомом вещества равновероятно, то величина cosφ равномерно распределена в интервале (-1,1).

Тогда, используя формулу (26), где a=-1, b=1, получаем:

$$\mu = 2\gamma - 1 \tag{34}$$

4.7. Расчет прохождения нейтронов сквозь пластинку

- **Схема расчета путем моделирования истинных траекторий**

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:

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

и вычислим абсциссу следующего столкновения:

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

4.7. Расчет прохождения нейтронов сквозь пластинку

Проверим условие прохождения сквозь пластинку:

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

Если это условие выполнено, то счет траектории заканчивается и добавляется единица к счетчику прошедших частиц: $\mathbf{N^+ = N^+ + 1}$.

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: $\mathbf{N^- = N^- + 1}$.

4.7. Расчет прохождения нейтронов сквозь пластинку

Если же и это условие не выполнено, т.е.

$$0 \le x_{k+1} < h \quad ,$$

то нейтрон испытал (k+1)-е столкновение внутри пластинки, и надо разыгрывать «судьбу» нейтрона при столкновении.

Для этого выбираем очередное значение случайного числа γ и выбираем условие поглощения:

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

Если это неравенство выполнено, то счет траектории заканчивается и добавляется единица к счетчику поглощения частиц: $\mathbf{N^0 = N^0 + 1}$.

4.7. Расчет прохождения нейтронов сквозь пластинку

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.

Начальное значение для каждой траектории:

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

4.7. Расчет прохождения нейтронов сквозь пластинку

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.

Искомые вероятности приближенно равны отношениям:

$$P^+ \approx \frac{N^+}{N} \quad ; \qquad P^- \approx \frac{N^-}{N} \quad ; \quad P^0 \approx \frac{N^0}{N} \quad .$$