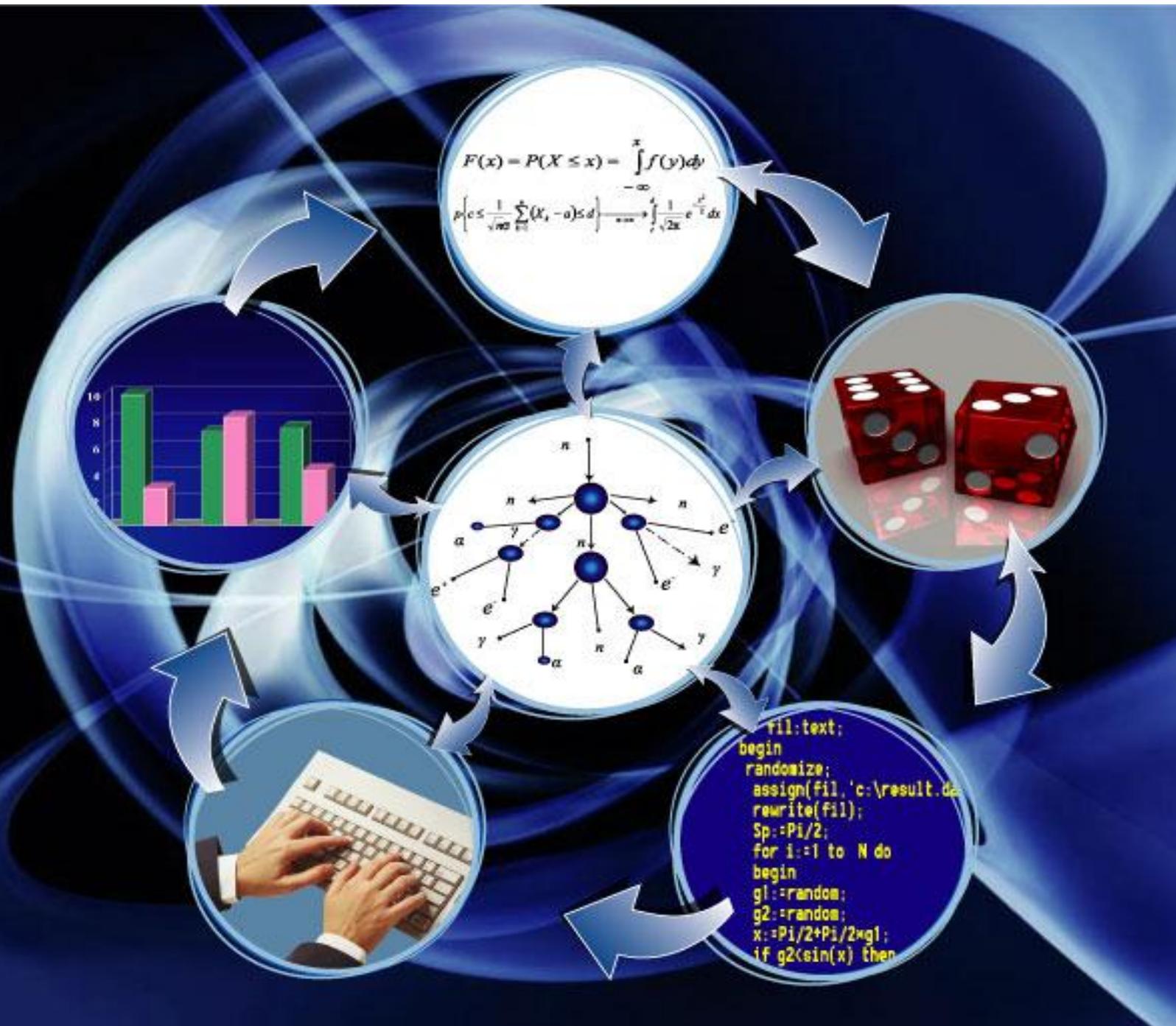


Э.Р.ЖДАНОВ,
Р.Ф.МАЛИКОВ,
Р.К.ХИСМАТУЛЛИН



КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ЯВЛЕНИЙ И ПРОЦЕССОВ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ПЕДАГОГИЧЕСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ

Э.Р.Жданов, Р.Ф.Маликов, Р.К.Хисматуллин

*КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ФИЗИЧЕСКИХ ЯВЛЕНИЙ И ПРОЦЕССОВ
МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО*

Учебно-методическое пособие

Уфа 2005

УДК 681.3
ББК 32.973.2-018
Ж 19

Печатается по решению
редакционно-издательского
совета БГПУ

Жданов Э.Р., Маликов Р.Ф., Хисматуллин Р.К. Компьютерное моделирование физических явлений и процессов методом Монте-Карло: Учебно-метод. пособие. – Уфа: Изд-во БГПУ, 2005. – 124с.

Данное пособие предназначено студентам, обучающимся по специальностям 010400 - Физика, 032200 – Физика, 030100 – Информатика, 030500.06 – Профессиональное обучение (информатика, ВТ и компьютерные технологии), по направлениям 510400 – Физика, 511800 – Математика, компьютерные науки, для отработки навыков и умений математического и компьютерного моделирования физических явлений и объектов методом Монте-Карло. Может быть использовано при проведении вычислительного практикума, при чтении лекций по математическому и компьютерному моделированию и при постановке задач по курсовому и дипломному проектированию преподавателями вузов, учителями, аспирантами.

Рецензенты: Ф.С.Насыров, д-р ф.-м. наук, профессор (УГАТУ);

С.Ю.Рудерман, д-р тех. наук, профессор (УГАТУ).

ISBN 5-87978-266-2

© Изд-во БГПУ, 2005

© Э.Р. Жданов, Р.Ф.Маликов, Р.К.Хисматуллин, 2005

© Б.Ш.Латыпов, 2005 (дизайн обложки)

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	5
ГЛАВА I. МЕТОД МОНТЕ-КАРЛО И ПОНЯТИЯ ТЕОРИИ ВЕРОЯТНОСТЕЙ	8
1.1. Классификация вероятностно-статистических методов решения прикладных задач.....	8
1.2. Некоторые понятия и теоремы теории вероятностей.....	10
1.2.1. Понятия теории вероятностей.....	11
1.2.2. Основные теоремы теории вероятностей.....	19
1.2.3. Оценка погрешности математического ожидания исследуемой величины.	22
1.3. Генераторы, алгоритмы получения и преобразования случайных чисел	24
1.3.1. Получение случайных чисел с помощью случайного эксперимента.....	24
1.3.2. Алгоритмы получения псевдослучайных чисел.....	25
1.3.3. Понятие эталонной, случайной величины γ	26
1.3.4. Преобразование случайных величин.....	27
1.3.5. Генераторы псевдослучайных чисел на ЭВМ.....	30
1.3.6. Использование таблицы дискретных случайных чисел.....	30
1.4. Недостатки и достоинства аналитических, приближенных методов решения математических задач, в том числе и метода Монте-Карло.....	32
ГЛАВА II. ВЕРОЯТНОСТНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКИХ ЗАДАЧ.....	37
2.1. Общая теория решения системы линейных уравнений.....	37
2.2. Вычисление интегралов способом среднего.....	40
2.3. Вычисление определенных интегралов способом «зонтика» Неймана.....	45
2.4. Вычисление значения числа π	47
2.5. Решение уравнений эллиптического типа (задача Дирихле) ...	50
2.6. Решение уравнений параболического типа на примере уравнения теплопроводности.....	53
ГЛАВА III. ИМИТАЦИОННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ И ЯВЛЕНИЙ.....	56
3.1. Имитационное моделирование объектов и явлений в ядерной физике.....	56
3.1.1. Задача имитационного моделирования прохождения нейтронов через пластинку	57

3.1.2. Моделирование сорта ядра и вида взаимодействия нейтрона с ядром.....	58
3.1.3. Решение задачи розыгрыша типа взаимодействия и сорта ядра имитационным моделированием.....	62
3.1.4. Определение направления и энергии частиц после рассеяния	64
3.1.5. Моделирование длины свободного пробега частиц	66
3.1.6. Имитационное моделирование траектории движения нейтронов через пластинку (двухмерный случай).....	65
3.2. Имитационное моделирование прохождения γ -излучения через вещество.....	69
3.3. Имитационное моделирование распространения упругих волн в пористых средах (задача геофизики).....	71
3.4. Имитационное моделирование явления спонтанного излучения атомов.....	76
3.5. Моделирование явления спонтанного излучения многоатомной системы (сверхизлучения Дике).....	79
ГЛАВА IV. МЕТОДЫ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ В ТЕРМОДИНАМИКЕ.....	83
4.1. Метод молекулярной динамики.....	83
4.2. Метод броуновской динамики.....	90
4.3. Имитационный метод моделирования броуновских траекторий	92
Литература.....	95
Приложения.....	97

ВВЕДЕНИЕ

Метод Монте-Карло – это численный метод решения при помощи моделирования случайных величин с целью вычисления характеристик их распределений.

Возникновение идеи использования случайных явлений в области приближённых вычислений принято относить к 1878 году, когда появилась работа Бюффона об определении числа π с помощью случайных бросаний иглы¹ на параллельные линии, нанесенные на бумаге.

В 1949 г. появилась первая работа Н.Метрополиса и С.Улама «Метод Монте-Карло» [2], в которой были изложены основы этой теории на примере определения числа π , после чего пошла лавинообразная серия работ по применению этого метода в различных областях науки и техники. Наибольшее число работ по применению данного метода приходится на середину 50-х годов.

Отечественные работы² появились в 1955-1956 годах. В настоящее время имеется более двух тысяч работ³, где исследуется теоретическая база метода или рассматривается его применение к конкретным задачам. Первоначально метод Монте-Карло использовался главным образом для решения задач молекулярной, нейтронной физики, где традиционные численные методы оказались мало пригодными. Далее его влияние распространилось на широкий класс задач статистической физики, геофизики, теории массового обслуживания, теории игр, математической экономики, теории передачи сообщений при наличии помех.

Метод Монте-Карло тесно связан с задачами теории вероятностей, математической статистики и вычислительной математики. В связи с задачей моделирования случайных величин (в особенности равномерно распределённых) существенную роль играют также методы теории чисел.

Метод Монте-Карло выделяется среди прочих своей простотой и общностью. Медленная сходимость является существенным недостатком метода, однако могут быть указаны его модификации, которые обеспечивают высокий порядок сходимости при определённых предположениях. Правда, вычислительная процедура при этом усложняется и приближается по своей сложности к другим процедурам вычислительной математики. Медленную сходимость метода Монте-Карло вряд ли следует относить к числу его недостатков, ибо вероятностные методы в достаточной мере оправдывают себя в практических приложениях.

Во многих физических задачах приходится учитывать результат взаимодействия большого числа частиц. Законы элементарных взаимодействий (мик-

¹ Игла Бюффона.

² Часто данный метод называют методом статистических испытаний

³ Список работ по методу Монте-Карло см., например, в книгах [2,5,13,23]

роскопические законы) известны из опыта или определяются теоретически. Однако для практических целей нужно знать макроскопические характеристики вещества (например, плотность).

Классический путь решения основан на уравнениях, которым удовлетворяют макроскопические характеристики. Часто для моделирования реальных процессов используются уравнения диффузии, численные методы решения которых довольно хорошо развиты. В других задачах приходится использовать уравнения переноса или кинетические уравнения, для которых численные методы решения разработаны только в простейших случаях. Наконец, немало задач, для которых макроскопические уравнения вовсе не выведены.

Методом макроскопических уравнений, вообще говоря, можно получить много различных сведений об исследуемой задаче: асимптотику, приближенные соотношения и т. п. Метод Монте-Карло позволяет приближенно вычислять нужные характеристики, не прибегая к помощи макроскопических уравнений. Метод Монте-Карло — это численный метод и его следует сравнивать не с методом макроскопических уравнений, а с численными методами решения макроскопических уравнений. Однако надо различать классические численные методы, направленные на решение дискретных аналогов математических моделей, и метод Монте-Карло, ориентированный на создание вероятностных имитационных моделей. Во многих сложных задачах метод Монте-Карло имеет ряд преимуществ относительно классических численных методов, особенно в решении тех задач, для которых макроскопические уравнения неизвестны.

Метод Монте-Карло существенно влияет на развитие методов вычислительной математики (например, на развитие методов численного интегрирования) и при решении многих задач успешно сочетается с другими вычислительными методами и дополняет их. Его применение оправдано в первую очередь в тех задачах, которые допускают вероятностное описание. Это объясняется как естественностью получения ответа с некоторой заданной вероятностью в задачах с вероятностным содержанием, так и существенным упрощением процедуры решения. Наиболее сложными этапами в применении метода Монте-Карло принято считать математическое описание исследуемого объекта или явления, необходимые упрощения при постановке задачи, выбор подходящего численного метода, исследование погрешности применяемого алгоритма.

В связи с бурным развитием вычислительной техники и информационных технологий, с появлением быстродействующих ЭВМ появилась возможность решения задач статистической физики, нейтронной физики, геофизики, квантовой физики, молекулярной физики, газовой динамики, фильтрации, задач теории передачи и защиты информации, теории массового обслуживания, игровых ситуаций, где невозможно построить детерминированные макроскопические уравнения (модели). Особые проблемы имеются в решении задач в областях статистического оценивания и прогнозирования; корреляционно-

регрессионного и многомерного статистического анализа; экономических, экологических, психологических, педагогических экспериментов и ситуаций, в которых при математическом описании реализуются задачи с большим числом переменных. Оптимизация систем, определение экстремума функций большого числа переменных, распознавание образов, обучения и самообучения не могут быть решены в рамках метода макроскопических уравнений.

Поэтому необходимость применения технологии компьютерного моделирования физических явлений и процессов методом статистических испытаний (Монте-Карло) определено временем.

В данном пособии рассмотрены основы теории случайных процессов, на задачах нейтронной и квантовой физики показаны технологии применения метода Монте-Карло. Понимание метода статистических испытаний приходит только при их решении и общении с компьютером, поэтому для некоторых задач в качестве примера приведены также алгоритмы, программы решения и результаты моделирования.

В первой главе даны краткие сведения из теории вероятности и метода Монте-Карло. Проведена условная классификация вероятностно-статистического моделирования по типу решаемых задач, анализ достоинств и недостатков математических методов, применяемых при решении математических задач.

Во второй главе приведены технологии решения линейных, обыкновенных дифференциальных уравнений, вычисление интегралов, дифференциальных уравнений в частных производных эллиптического и параболических типов методом вероятностного моделирования.

В третьей – рассмотрены задачи нейтронной, статистической, квантовой физики, а также геофизики, решаемые методами имитационного моделирования.

В четвертой главе даны технологии решения задач термодинамики методами молекулярной, броуновской динамики и методом имитационного моделирования.

В приложении представлены программы решения некоторых задач на языках программирования.

ГЛАВА I. МЕТОД МОНТЕ-КАРЛО И ПОНЯТИЯ ТЕОРИИ ВЕРОЯТНОСТЕЙ

Со случайными процессами и явлениями мы часто сталкиваемся в повседневной жизни, они наблюдаемы в различных областях науки, техники и производства, например:

- процесс бросания кубика с нанесенными на его гранях цифрами;
- процесс движения и попадания шарика в определенную ячейку в игровой рулетке;
- процесс прихода посетителей в магазин;
- процесс обслуживания заправки автомобилей на заправочной станции;
- процесс обслуживания заявок на телефонной станции;
- процесс регистрации брака детали на конвейере;
- явление движения броуновской частицы;
- явление деления радиоактивного ядра;
- явление движения нейтрона в некоторой среде;
- явление рождения девочки или мальчика и многие другие.

В основе математического описания этих процессов и явлений лежат теория вероятностей, математическая статистика и метод статистических испытаний (метод Монте-Карло). В данной главе рассмотрим некоторые понятия теории вероятностей, классификацию и идеологию применения теории статистических испытаний (метода Монте-Карло).

1.1. Классификация вероятностно-статистических методов решения прикладных задач

Понятие имитационного моделирования (соответственно и имитационных моделей) трактуется неоднозначно. Надо различать модели имитационно-вероятностные и имитационно-компьютерные. Отличие заключается в реализации случайного фактора.

- Если реальному явлению или описывающим его уравнениям сопоставляется аналогичный им (иногда совершенно непохожий) вероятностный процесс, то в этом случае мы имитируем процесс. Создание вероятностной модели, применение метода Монте-Карло для «имитации» или иногда говорят симуляции и его решение на ЭВМ для определения характеристик и параметров исследуемого реального явления называют вероятностно-имитационным моделированием. Для имитационно-вероятностных моделей стохастичность, случайность связана с самим явлением, процессом без внешнего воздействия. В конечном счете, описание объекта проводится в виде некоторого алгоритма, отражающего структуру и процессы функционирования объекта во времени, учитывающего воздействие случайных факторов в модели.

- Для имитационно-компьютерных моделей случайность связана с субъектом моделирования. Это может быть отдельной программой или программным комплексом, некоторой средой программирования или моделирования, в частности тренажеры, в которой возможно имитировать процессы функционирования реального объекта (вождение водителем автомобиля по трассе, вождение полетом самолета и др.), в котором существуют элементы случайности, внесенные самим субъектом. Причем каждый субъект, кто работает с данной моделью, вносит разный элемент случайности. К имитационно-компьютерным моделям можно отнести, все игровые компьютерные модели, в том числе обучающе-контролирующие программы.

В данном пособии мы будем рассматривать имитационно-вероятностные модели. Развитие теории статистических испытаний в явлениях с присутствием элементов случайности или полностью случайных процессов (под общим названием метода статистических испытаний или Монте-Карло) позволяет в настоящее время подразделить задачи и в какой то мере классифицировать вероятностно-статистические методы решения прикладных задач по их типу.

Теорию вероятности можно использовать для вычисления различного типа интегралов и решения математических уравнений (линейных, дифференциальных, интегральных, интегро-дифференциальных) безотносительно к каким-либо видам реальных явлений и процессов. Моделирования такого типа задач с помощью вероятностной модели в дальнейшем будем называть вероятностным моделированием.

Если реальному явлению или его математической модели в виде дифференциального уравнения сопоставляется аналогичный (иногда совершенно непохожий) вероятностный процесс, то в этом случае мы имитируем процесс. Создание вероятностной модели, применение метода Монте-Карло для «имитации», или иногда говорят симуляции, и его решение на ЭВМ для определения характеристик и параметров исследуемого реального явления называют вероятностно-имитационным моделированием. Задачи такого рода часто встречаются в молекулярной, статистической, нейтронной, квантовой физике, геофизике, газовой динамике, а также в теориях фильтрации, передачи и защиты информации, массового обслуживания и т.д.

Решение задач математической статистики статистического оценивания и прогнозирования, корреляционно-регрессионного и многомерного статистического анализа, оптимизации систем, определения экстремума функций большого числа переменных, распознавания образов в дальнейшем будем называть статистическим моделированием.

Отметим, что рассмотренная классификация является условной.



Рис.1.1. Классификация методов Монте-Карло по типу задач

§1.2. Некоторые понятия и теоремы теории вероятностей

Объект и основная задача теории вероятностей. Объектами математической теории вероятностей являются опыты и наблюдения со случайными исходами. Отметим, что теория вероятностей изучает только те случайные эксперименты и события, для которых справедлив принцип статистической устойчивости. Этот принцип является объективным законом природы и формулируется следующим образом:

Относительная частота появления какого-либо случайного события в последовательности повторяемых независимым образом в одних и тех же условиях экспериментов приближается к некоторому числу при росте числа экспериментов.

В более широкой форме его можно интерпретировать как общий принцип, согласно которому совместное действие случайных факторов в примерно одинаковых общих условиях приводит к результату, почти не зависящему от случая.

Одна из главных задач теории вероятностей состоит в том, чтобы дать математически строгие формулировки этого всеобщего закона.

1.2.1. Понятия теории вероятностей

Введем ряд понятий, которые используются в теории вероятностей.

Случайный эксперимент. Практически во всех областях знаний существуют ситуации, когда те или иные эксперименты или наблюдения могут быть повторены много раз примерно в одних и тех же условиях, при этом результат каждого эксперимента заранее предсказать нельзя. Такого рода эксперименты, как и события, которые могут происходить или не происходить, будем в дальнейшем называть случайными экспериментами.

Событие. Под термином «событие» часто понимают результаты свершившегося опыта или наблюдения (случайного эксперимента), т.е. исход, который произошел. Условлено, что события разделяются на составные (разложимые) и элементарные (неразложимые). Все события, связанные с данным опытом, могут быть описаны с помощью элементарных событий. Совокупность всех элементарных событий называется множеством (пространством) элементарных событий и обозначают через Ω , а сами элементарные события элементами (точками) этого множества и обозначают через $\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_n$.

Если мы проводим или наблюдаем случайный эксперимент, с множеством элементарных событий, должны выполняться два условия:

- 1) если опыт проводится, то какое-то из элементарных событий должно произойти;
- 2) никакие два события не могут происходить одновременно.

В дальнейшем *событием* будем называть любое подмножество A множества Ω . Поскольку любое событие – это подмножество A множества Ω , то оно состоит из элементарных событий и оно происходит тогда и только тогда, когда происходит элементарное событие ω входящее в подмножество A .

Множество Ω всегда происходит, поскольку при случайном эксперименте всегда происходит одно из элементарных событий, поэтому его называют *достоверным событием*. Пустое множество \emptyset тоже считается событием, которое никогда не происходит, и оно называется *невозможным событием*.

Понятия множества элементарных событий, события и его элементов (точек) являются исходными понятиями теории вероятностей, также подчеркнем важность условия реализации события.

Вероятность. Вероятность – это такое же базовое понятие, что и масса в механике или длина в геометрии. Введение понятия вероятности любого события в *дискретном вероятностном пространстве* производится через аксиомы. Рассмотрим их.

Пусть мы имеем $\Omega = \{\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_k, \dots\}$ множество элементарных событий.

Аксиома 1. Каждому элементарному событию ω_k соответствует число $p_k \in [0, 1]$, называемое вероятностью элементарного события ω_k .

Аксиома 2. Каждому событию A , соответствует число которое назовем вероятностью этого события, причем это число равно сумме вероятностей элементарных событий $p\{\omega_k\}$, образующих событие A .

$$P(A) = p(\omega_1) + p(\omega_2) + \dots + p(\omega_k) \quad (1.1)$$

Аксиома 3. Сумма вероятностей всех элементарных событий равна единице,

$$\text{т.е. } p_1 + p_2 + \dots + p_k = \sum_i p_i = 1. \quad (1.2)$$

Аксиома 4. Вероятность невозможного события равна нулю.

Случайная величина. Рассмотрим шестигранный кубик. Нанесем на грани цифры от 1 до 6. Тогда имеем так называемую игральную кость. В итоге подбрасывания кости выпадает одна из граней кубика, одновременно наблюдаем число, написанное на грани. Выпадение грани есть элементарное событие. Так как каждой грани поставлено в соответствие число, то тем самым мы имеем, что на множестве элементарных событий задана числовая функция, в нашем примере 1,2,3,4,5,6.

Числовую функцию, заданную на множестве элементарных событий, будем называть *случайной величиной*.

Если провести опыт, то случайная величина примет одно из возможных значений. Таким образом, мы сталкиваемся с ситуацией, когда опыт со случайными исходами заканчивается для нас получением некоторого числа.

Случайную величину с конечной или счетной совокупностью возможных значений называют *дискретной*. Случайным величинам присваивают имена (обозначения). В дальнейшем случайные величины будем обозначать большими или маленькими латинскими буквами, иногда греческими. Возможные значения случайной величины обозначим латинскими буквами с индексами, т.е.

$$X = \begin{pmatrix} x_1 x_2 x_3 \dots x_N \\ p_1 p_2 p_3 \dots p_N \end{pmatrix}, \quad P\{X = x_i\} = p_i \quad (1.3)$$

Здесь X – случайная величина⁴, x_1, x_2, \dots, x_n – возможные значения. Совокупность возможных значений и соответствующие им вероятности p_1, p_2, \dots, p_n называют законом распределения вероятностей дискретной случайной величины.

Математическим ожиданием дискретной случайной величины называют сумму произведений всех её возможных значений на их вероятность.

$$M(X) = x_1 p_1 + x_2 p_2 + \dots + x_n p_n = \sum_i p_i x_i = a, \quad (1.4)$$

$$p_i \geq 0, \quad \sum_i p_i = 1$$

где a – краткое обозначение математического ожидания случайной величины.

⁴ Случайные величины часто обозначают строчными буквами греческого алфавита.

Дисперсией (рассеянием) случайной величины называют математическое ожидание квадрата отклонения случайной величины от её математического ожидания:

$$D(X) = M[X - M(\bar{X})]^2 = M(X^2) - (M(\bar{X}))^2 \quad (1.5)$$

Свойства дисперсии

1. $D(C) = 0, C = const.$
2. $D(CX) = C^2 D(X),$
3. $D(X + Y) = D(X) + D(Y),$
4. $D(C + X) = D(X),$
5. $D(X - Y) = D(X) + D(Y),$

Дисперсия среднего арифметического n одинаково распределенных взаимно независимых случайных величин в n раз меньше дисперсии D каждой из величин

$$D(\bar{X}) = D/n \quad (1.6)$$

Средним квадратичным отклонением случайной величины X называют квадратный корень из дисперсии:

$$\sigma(X) = \sqrt{D(X)}. \quad (1.7)$$

Функция распределения случайной величины. Рассмотрим случай, когда все точки, находящиеся на числовой прямой, являются элементарными событиями. Введем понятие числовой функции $X(\omega)$ на множестве элементарных событий, где ω – текущая точка на числовой оси. Функция $X(\omega)$ называется случайной величиной. При случайном эксперименте реализуется элементарное событие ω . Если рассмотреть все элементарные события на числовой оси, то она подчиняется какому-либо закону распределения.

Закон распределения произвольной случайной величины $X(\omega)$ характеризуется вероятностью события $X(\omega) < x$ (x – любое число), которую будем называть функцией распределения $F(x)$.

Можно ввести следующее определение.

Функцией распределения называют функцию $F(x)$, определяющую вероятность того, что случайная величина X в результате случайного эксперимента примет значение, меньшее x , т.е.

$$F(x) = P(X < x). \quad (1.7)$$

Вид функции распределения зависит от условий проведения случайного эксперимента.

Функция распределения имеет следующие свойства

$$1. 0 \leq F(x) \leq 1 \quad (1.8a)$$

$$2. F(x_1) \leq F(x_2), \text{ если } x_1 < x_2 \quad (1.8б)$$

$$3. F(x_2) - F(x_1) = P(x_1 \leq X < x_2) \quad (1.8в)$$

Непрерывная случайная величина и ее плотность. Случайную величину называют непрерывной, если ее функция распределения $F(x)$ есть непрерывная, кусочно-дифференцируемая функция с непрерывной производной при каждом значении x .

Функция распределения непрерывной случайной величины – это вероятность того, что случайная величина в результате случайного опыта (эксперимента) примет значения, меньшее текущего x , и может быть выражена как

$$F(x) = P(X \leq x) = \int_{-\infty}^x f(y)dy. \quad (1.9)$$

Здесь $f(y)$ называется **плотностью распределения** вероятностей непрерывной случайной величины и определяется как

$$f(x) = \frac{dF(x)}{dx}. \quad (1.10)$$

Вероятность попадания непрерывной случайной величины в заданный интервал определяется через плотность распределения как

$$P(a \leq X \leq b) = \int_a^b f(x)dx. \quad (1.11)$$

Плотность распределения имеет следующие свойства

$$1. f(x) \geq 0 \quad (1.12a)$$

$$2. \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)dx = 1. \quad (1.12б)$$

Рассмотрим на примере понятие плотности распределения, которая появляется при проведении опытов или наблюдений случайных процессов (случайный эксперимент), и выясним, от чего зависит вид плотности функции распределения⁵.

1. Пасека. Перед ульем на подставке горизонтально лежит доска длиной L , на которую собирается садиться пчела⁶. Куда она сядет – это дело случая. После посадки пчелы мы имеем элементарное событие. Здесь мы гипотетически предполагаем, что пчелы распределились по всем точкам доски равномерно.

2. Теперь изменим условия задачи. Жаркое лето, половина нашей доски влажная. Куда сядет пчела на доске – дело случая. Но можно ожидать, что событие (посадка пчелы) более вероятно на влажной стороне доски, чем на сухой (или наоборот).

3. Изменим еще раз условие задачи. Пусть в центре доски намазан мед. Событие посадки пчелы в центре (на мед) более вероятно, чем по краям, т.е. закон распределения вероятности посадки на доску будет совершенно иным, чем в первом и втором случае.

⁵ С.Ю.Рудерман

⁶ Предполагаем, что размеры пчелы по сравнению длиной доски намного малы.

Таким образом, можно сделать вывод, что вероятность того, в каком месте доски от левого конца сядет пчела, будет зависеть от *условий опыта*.

На практике чаще всего мы имеем дело не с законом (функцией) распределения непрерывной случайной величины, а с ее плотностью (1.10). При решении задач в различных областях вид закона соответственно плотности распределения непрерывной случайной величины возникает из условий случайного эксперимента. Мы не знаем, какому виду плотности распределения подчиняется случайная величина. Можем только гипотетически предполагать, что она подчиняется той или иной модели распределения вероятностей.

Рассмотрим часто встречающиеся на практике гипотетические модели законов и плотностей распределения вероятностей непрерывных, случайных величин.

1. Закон и плотность равномерного распределения вероятностей непрерывной случайной величины в интервале $[a, b]$ имеют вид .

$$F(x) = \begin{cases} 0 & \text{при } x \leq a \\ \frac{x-a}{b-a} & \text{при } a < x \leq b \\ 1 & \text{при } x > b \end{cases}, \text{ плотность } f(x) = \begin{cases} 0 & \text{при } x \leq a \\ \frac{1}{b-a} & \text{при } a < x \leq b \\ 0 & \text{при } x > b \end{cases} \quad (1.13)$$

На рис.1.2. приведен вид закона и плотности равномерного распределения для случайных величин в интервале $[0, 1]$.

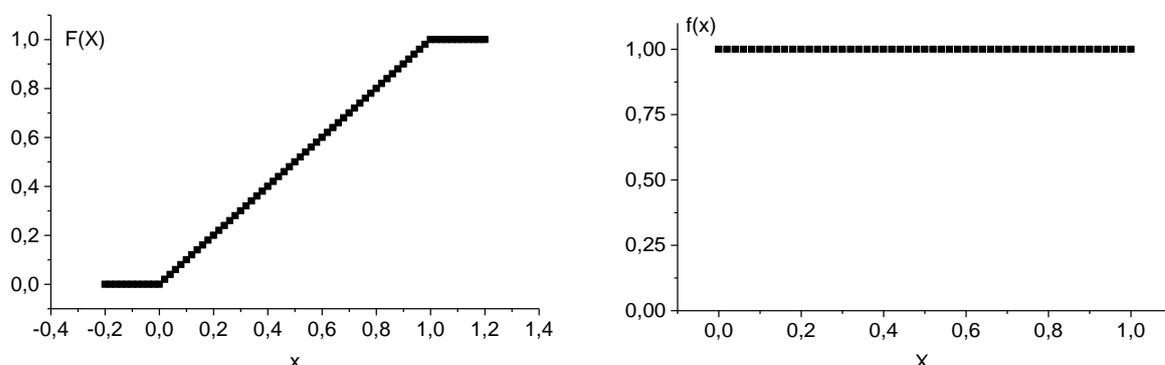


Рис.1.2.

2. Если плотность распределения вероятностей непрерывных случайных величин моделируется в виде

$$f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(x-a)^2}{2\sigma^2}\right), \quad (1.14)$$

то такое распределение называется гауссовским (нормальным), оно напоминает колокол и изображено ниже графически (рис.1.3). Этот вид распределе-

ния очень часто встречается при решении задач в статистической физике, квантовой радиофизике, теории передачи информации и т.д. Рассмотрим эту функцию более подробно. Здесь a - математическое ожидание, σ - среднее квадратичное отклонение гауссовского распределения.

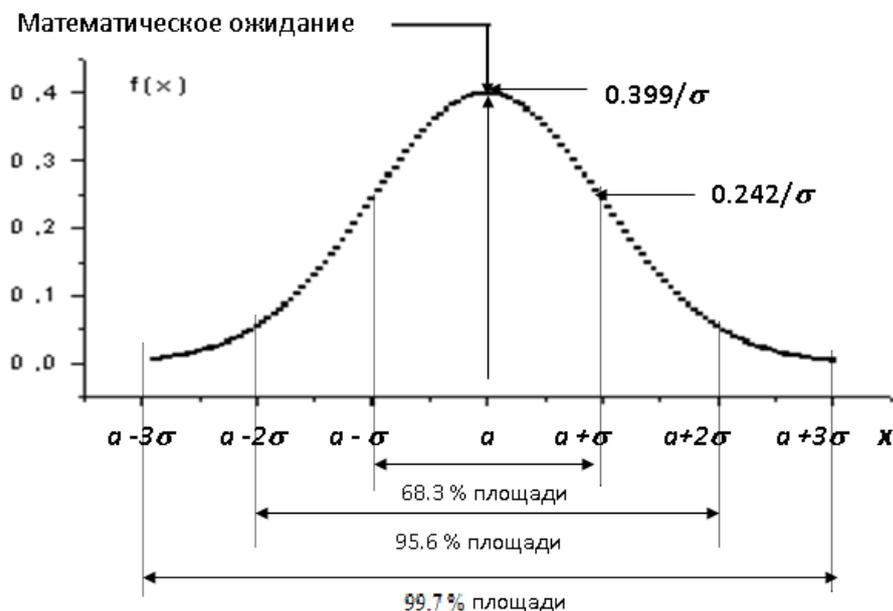


Рис.1.3. График плотности гауссовского распределения

Площадь подынтегральной функции равна единице. На графике в процентном отношении приведены значения площадей для разных интервалов и значения функции для границ интервалов. Вид функции распределения согласно формуле (1.9) имеет вид (рис.1.4).

В задачах теории вероятностей чаще всего используется величина дисперсии, равная единице $\sigma=1$ и $a=0$, так называемая нормированная функция (плотность) распределения случайной величины. Таблица значений нормированного распределения приведена в приложении.

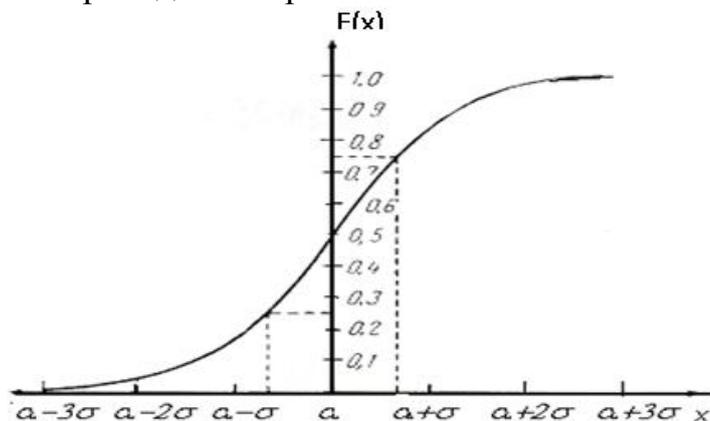


Рис.1.4. Закон гауссовского распределения вероятностей случайной величины

3. Плотность показательного распределения вероятностей имеет вид

$$f(x) = \begin{cases} 0 & \text{при } x < 0 \\ \lambda e^{-\lambda x} & \text{при } x \geq 0 \end{cases}, \quad (1.15)$$

где λ - постоянная, положительная величина. Примером непрерывной случайной величины, распределенной по данному закону, может служить время между появлениями двух последовательных случайных событий. Это распределение используется в задачах молекулярной и статистической физики, в теории массового обслуживания для описания малого потока заявок, в квантовой оптике для потока небольшого количества фотонов или атомов. Вид показательного распределения дан на рис.1.5.

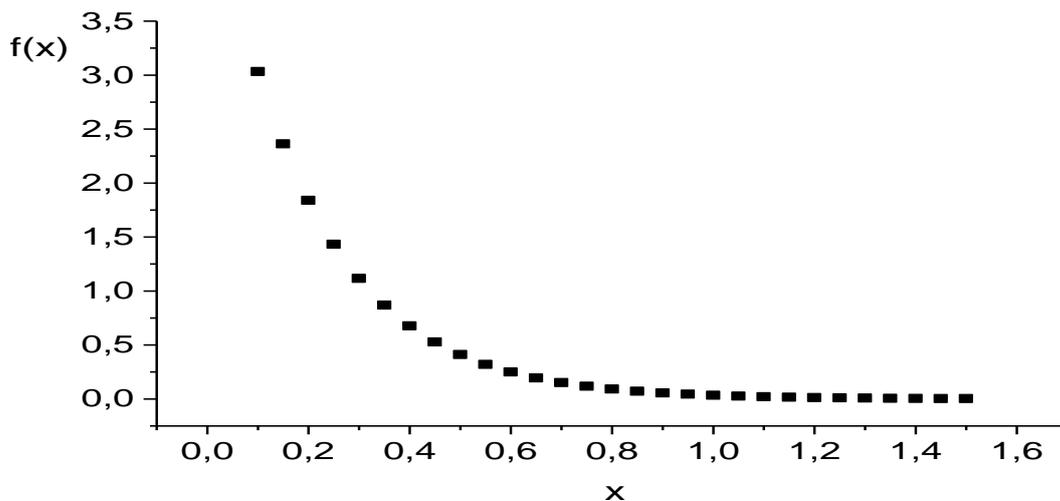


Рис. 1.5. Показательное распределение, $\lambda=5$

4. Распределение Пуассона (рис.1.6) используют для описания плотности распределения небольшого количества потока: заявок в теории обслуживания, фотонов или атомов в квантовой оптике и т.д. Плотность распределения имеет вид

$$f(x, t) = \frac{(\lambda t)^x}{x!} e^{-\lambda t}, \quad (1.16)$$

где случайная величина принимает целые значения $x = 1, 2, 3, \dots$, λt - параметр обычно, имеющий смысл времени между появлениями двух событий.

5. В молекулярной физике хорошо известно распределение Максвелла

$$f(x) = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \exp(-x^2) x^2 \quad (1.17)$$

Кроме перечисленных видов распределения, существуют распределения Парето, Райса, Релея, Бозе, Эйнштейна, Стьюдента, «Хи-квадрат», Фишера-Снедекора, биномиальное, геометрическое, гипергеометрическое и другие [4-7, 20]. Выбор гипотетического вида распределения плотности вероятности при

применении зависит от конкретной задачи и области рассматриваемого явления или процесса.

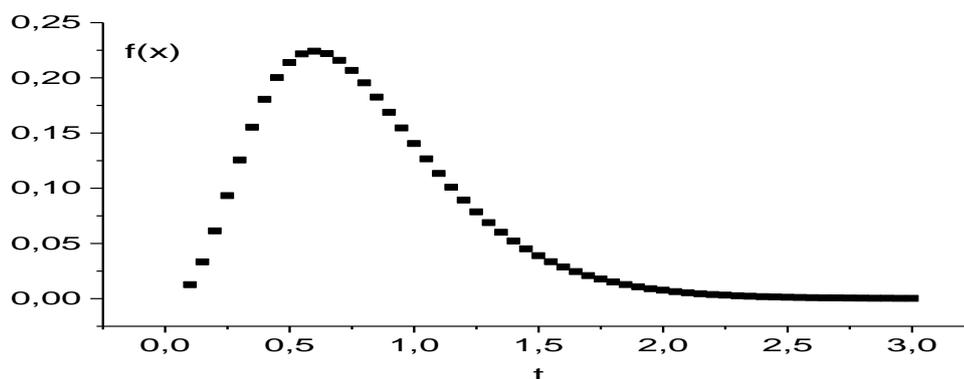


Рис.1.6. Пуассоновское распределение . $\lambda = 5, x = 3$.

Математическое ожидание и дисперсия при использовании функций плотности вероятности непрерывных случайных величин определяются следующим образом

$$M(X) = \int_a^b xf(x)dx, \quad (1.18)$$

$$D(X) = \int_a^b [x - M(X)]^2 f(x)dx, \quad (1.19)$$

где a и b – границы рассматриваемого интервала. Квадратичное отклонение σ определяется по формуле (1.6).

1.2.2. Основные теоремы теории вероятностей ⁷

Приведем без доказательства основные теоремы теории вероятностей, которые понадобятся нам в дальнейшем.

Последовательность независимых экспериментов называется **схемой Бернулли**, если в каждом эксперименте возможно только 2 исхода, условно называемые { успех } и { неуспех }, при этом

$$P \{ \text{успеха} \} = p$$

$$P \{ \text{неуспеха} \} = q$$

Вероятность k успехов в n испытаниях Бернулли равна

$$P_n(k) = C_n^k p^k (1 - p)^{n-k}, \quad k = 0, 1, 2, \dots, n \quad (1.20)$$

Соответствующее распределение вероятностей на числах $0, 1, 2, \dots, n$ обозначается $B(n, p)$ - и называется биномиальным распределением с параметрами n, p .

⁷ Из курса лекций Ф.С.Насырова

Пример. Пусть станок производит 100 изделий. Вероятность брака при производстве одного изделия равна $p = 0,01$. Какова вероятность того, что ровно 3 изделия окажутся бракованными?

По формуле (1.17) имеем

$$P_{100}(3) = C_{100}^3 (0,01)^3 (1 - 0,01)^{97}.$$

Часто на практике стоит задача об отыскании удобных асимптотических формул для вероятностей $P_n(k)$ при $n \rightarrow \infty$ и их сумм, эту задачу можно решить с помощью локальной и интегральной теорем **Муавра – Лапласа**.

Локальная теорема

Пусть $p \in [0,1]$, тогда справедливо представление :

$$P(X = k) = C_n^k p^k q^{n-k} = \frac{1}{\sqrt{2\pi pq}} e^{-\frac{(k-np)^2}{2npq}} (1 + \varepsilon(n, k)), \quad (1.21)$$

Иначе говоря, вероятность k успехов в n испытаниях Бернулли можно вычислить по данному представлению.

Пример. Пусть подбрасывается игральная кость 1000 раз. Оценим приближенно вероятность того, что в 1000 испытаниях шестерка выпадет 200 раз.

По локальной формуле Муавра-Лапласа имеем

$$P_{1000}(200) = c_{1000}^6 \left(\frac{1}{6}\right)^{200} \cdot \left(1 - \frac{1}{6}\right)^{800} \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi 1000 \frac{1}{6} \cdot \frac{5}{6}}} e^{-\frac{\left(200 - \frac{1000}{6}\right)^2}{2 \cdot 1000 \cdot \frac{1}{6} \cdot \frac{5}{6}}}$$

Отметим, что вычисления $P_n(k)$ по точной формуле (1.21) являются непростой задачей.

Интегральная теорема

В различных задачах требуется находить вероятности вида: $P\{c \leq X_n \leq d\}$ - т.е. вероятность того, что количество успехов X_n в n испытаниях Бернулли в интервале $[c, d]$, причем $c < d$.

Интегральная теорема гласит так

Для любого $c < d$ интервала $[c, d]$ для схемы Бернулли имеет место

$$P\{c \leq X_n \leq d\} = \sum_{k=c}^d C_n^k p^k q^{n-k} \approx \Phi\left(\frac{d - np}{\sqrt{npq}}\right) - \Phi\left(\frac{c - np}{\sqrt{npq}}\right), \quad (1.22)$$

для $n \gg 1$. Здесь функцию Φ можно посчитать по формуле

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

величина X_n - количество успехов в n испытаниях Бернулли.

Вероятностное распределение случайной величин X_n по локальной теореме для каждого K в интервале $[c, d]$ определяется как

$$P\{X_n = k\} = P_n(k) = C_n^k p^k (1-p)^{n-k}, \quad k = 0, 1, \dots, n \quad (1.23)$$

Здесь при определении вероятности можно использовать интегральную предельную теорему Муавра-Лапласа, согласно которой для больших n вероятность успехов X_n в интервале $[c, d]$ можно определить по предельной формуле (1.22). Для определения значений Φ можно использовать готовую таблицу (см. приложение).

Закон Больших Чисел

Это общий принцип, в силу которого суммарное действие большого количества случайных факторов при весьма общих условиях приводит к результату почти не зависящему от случая.

Первый результат в этом направлении получен Я.Бернулли (1713), его обобщение сделано П.Л.Чебышёвым (1867) и носит название теоремы Чебышева.

Пусть X_n - последовательность независимых случайных величин и $M(X) = a$, $D(X) = \sigma^2 < \infty$, тогда $\frac{X_1 + X_2 + \dots + X_n}{n} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} a$. Иначе говоря, если $\bar{X} = \frac{X_1 + X_2 + \dots + X_n}{n}$ - арифметическая средняя, то $P\{-\varepsilon \leq \bar{X} - a \leq \varepsilon\} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0$, т.е. $\bar{X} \approx a$.

Теорему Чебышева можно сформулировать следующим образом:

Если X_1, X_2, \dots, X_n - независимые случайные величины, имеющие одно и то же математическое ожидание A , дисперсии этих величин меньше некоторой константы и число случайных величин достаточно велико, то среднее арифметическое этих случайных величин примет значение, близкое к A .

Более строго, формулировка следующая

Какое бы ни было число $\varepsilon > 0$, имеет место

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P(|\bar{X} - M(\bar{X})| < \varepsilon) = \lim_{n \rightarrow \infty} P(|\bar{X} - a| < \varepsilon) = 1. \quad (1.24)$$

Обычно число ε выбирают достаточно малым, в этом случае $X_{cp} = a + \varepsilon$

Теорема Бернулли

Пусть мы имеем n независимых испытаний по реализации случайного

события A , и в результате испытаний, событий A реализовалась всего n_A раз, тогда арифметическое среднее \bar{X} есть просто относительная частота события A , т.е. $\bar{X} = \frac{n_A}{n}$ и $a = M(X) = P(A)$.

По Закону Больших Чисел имеем, что $\frac{n_A}{n} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} P(A)$, т.е. относительная частота случайного события сближается с его вероятностью при возрастании числа наблюдений. Это следствие теоремы Чебышева и она носит название **теоремы Бернулли**.

Таким образом, **теорему Бернулли** можно сформулировать так:

Если проводится достаточно большое количество n независимых испытаний по определению события A , и вероятность p появления события A постоянна, то относительная частота появления события A окажется близкой к вероятности этого события.

Если более строго, то имеет место следующий предел

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P\left(\left|\frac{n_A}{n} - p\right| < \varepsilon\right) = 1. \quad (1.25)$$

Центральная предельная теорема (ЦПТ)

В теории вероятностей существует ряд предельных теорем, указывающих условия, при выполнении которых распределение вероятностей нормированных сумм случайных величин сходится к нормальному (гауссовскому) распределению. Рассмотрим одну из них.

Пусть S_n = количество успехов в n испытаниях Бернулли и p - вероятность успеха в одном испытании, тогда по интегральной теореме Муавра-Лапласа для любого $c < d$ имеет место

$$P\left\{c \leq \frac{S_n - np}{\sqrt{npq}} \leq d\right\} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \int_c^d \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}} dx.$$

Здесь $S_n = \sum_{k=1}^n X_k$, где $X_k = \begin{cases} 1, & \text{успех} \\ 0, & \text{неуспех} \end{cases}$.

Легко видеть, что

$$\frac{S_n - np}{\sqrt{npq}} = \frac{1}{\sqrt{n\sigma}} \sum_{k=1}^n (X_k - a),$$

где $M(X) = a$, $\sigma^2 = D(X) = pq$, тогда формулировка интегральной теоремы Муавра-Лапласа может быть переписана в новых обозначениях так:

При любых конечных значениях $c < d$ имеет место

$$P\left\{c \leq \frac{1}{\sqrt{n}\sigma} \sum_{k=1}^n (X_k - a) \leq d\right\} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \int_c^d \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-a)^2}{2\sigma^2}} dx \quad (1.26)$$

Эта теорема носит название «**Центральная предельная теорема**» .

Здесь X_n последовательность независимых одинаково распределенных (т.е. совпадают функции распределения) случайных величин, $a=M(X)$ - математическое ожидание, дисперсия $D(X)=\sigma^2 < \infty$ - имеет конечное значение.

Эту теорему мы сформулировали, используя схему Бернулли, однако отметим, что данная теорема справедлива и в общем случае.

1.2.3. Оценка погрешности математического ожидания исследуемой величины

Пусть для получения оценки математического ожидания a^* случайной величины X было произведено n независимых испытаний (разыграно n возможных значений X), и по ним была найдена выборочная средняя \bar{X} , которая принята в качестве искомой оценки: $a^* = \bar{X}$. Ясно, что если повторить опыт, то будут получены другие возможные значения \bar{X} , следовательно, другая средняя, а значит и другая оценка a^* . При этом возникает вопрос о величине допускаемой ошибки: которую из полученных значений математического ожидания выбрать в качестве измеренной величины? Ограничимся отысканием лишь верхней границы δ допускаемой ошибки с заданной вероятностью (надёжностью) γ : $P(|\bar{X} - a| \leq \delta) = \gamma$.

Интересующая нас верхняя грань ошибки δ есть не что иное, как «точность оценки» математического ожидания по выборочной средней при помощи доверительных интервалов. Рассмотрим три случая оценки ошибки для нормального (гауссовского) распределения плотности вероятности.

1. Случайная величина X имеет нормальное распределение, и её среднее квадратичное отклонение δ известно.

В этом случае с надёжностью γ верхняя граница ошибки

$$\delta = \frac{t \cdot \sigma}{\sqrt{N}}, \quad (1.27)$$

где N число испытаний (разыгранных значений X); t – значение аргумента функции Лапласа, при котором $\Phi(t) = \frac{\gamma}{2}$, σ - известное среднее квадратичное отклонение X .

2. Случайная величина X имеет нормальное распределение, причём её среднее квадратичное отклонение σ неизвестно.

В этом случае с надёжностью γ верхняя граница ошибки

$$\delta = \frac{t_\gamma \cdot s}{\sqrt{N}}, \quad (1.28)$$

где N – число испытаний; s – «исправленное» среднее квадратичное отклонение, которая находится из эксперимента, t_γ находят по таблице приложения.

3. Случайная величина X распределена по закону, отличному от нормального распределения.

В этом случае при достаточно большом числе испытаний с надёжностью, приближённо равной γ , верхняя граница ошибки может быть вычислена по формуле (1.28), если среднее квадратичное отклонение σ случайной величины X известно; если же σ неизвестно, то можно подставить в формулу (1.28) его оценку S – «исправленное» среднее квадратичное отклонение. Заметим, что чем больше N , тем меньше различие между результатами, которые дают обе формулы.

4. При использовании одной нормально распределенной случайной величины X для оценки измеряемой величины используется правило трех «сигм»

$$P(a - 3\sigma < X \leq a + 3\sigma) = 0.997 \quad (1.29)$$

Если мы рассматриваем N независимых случайных величин X_1, X_2, \dots, X_N с одной и той же плотностью распределения, то

$$P\left(a - \frac{3\sigma}{\sqrt{N}} \leq \bar{X} \leq a + \frac{3\sigma}{\sqrt{N}}\right) = 0.997, \quad (1.30)$$

где $\bar{X} = \frac{X_1 + X_2 + \dots + X_n}{N}$ среднее арифметическое от независимых случайных величин.

1.3. Генераторы, алгоритмы получения и преобразования случайных чисел

Суть компьютерного моделирования методом Монте-Карло заключается в следующем: случайному эксперименту реального явления или процесса или описывающим его дифференциальным уравнениям сопоставляется аналогичный им (иногда совершенно непохожий) вероятностный процесс, который моделирует это явление, т.е. создается вероятностная модель исследуемого явления. На вероятностной модели проводятся исследования, отрабатываются возможные решения, чаще всего на компьютере, которые затем переносятся на реальный процесс или явление.

Однако для проведения испытаний в вероятностной модели необходимы генераторы случайных чисел. Где взять эти генераторы в реальности, а если задача решается на компьютере, как создать генераторы истинно случайных чисел для ЭВМ и как использовать их для решения задач в методе Монте-Карло?

Таким образом, для решения вероятностной модели стоит задача получения случайных чисел.

1.3.1. Получение случайных чисел с помощью случайного эксперимента

Генераторов получения случайных чисел с помощью опытов можно придумать бесконечное множество. Приведем примеры.

1. Самый простой генератор – это однородный кубик с нанесенными на него числами от 0 до 5 (игральная кость). Проводя N опытов выброса кости, мы получаем случайные цифры в шестеричной системе исчисления. Из шестеричной системы по алгоритмам преобразования можно получить случайные цифры в десятичной системе исчисления.
2. Следующий простой генератор – это монета. Если проведем N опытов выброса монеты, то мы получаем случайные события «орел» или «решку». Обозначим их соответственно нулем или единицей, иначе говоря, цифрами в двоичной системе исчисления, тогда процедура бросания монеты является генератором двоичных цифр.
3. Рулетка в игровых домах и клубах представляет собой тарелкообразную форму, при бросании шарика по краям рулетки шарик, совершив несколько оборотов, падает в ячейки, находящиеся на краях дна рулетки. Ячейки соответственно пронумерованы. Попадание шарика в определенную ячейку – событие чисто случайное. Проводя N опытов, мы получаем последовательность случайных чисел.
4. Для реализации розыгрыша случайных чисел в различных видах лотереи и игровых автоматах используются специальные устройства (генераторы случайных чисел), которые выбрасывают эти случайных числа.

1.3.2. Алгоритмы получения псевдослучайных чисел ⁸

Проведем случайный эксперимент, в результате которого наблюдаем или получаем случайное число. Используя это случайное число, по какой-либо заданной формуле преобразуем его в другое случайное число, затем повторяем эту итерацию, тогда в конечном счете получаем ряд случайных чисел. Таким образом, полученные случайные числа называются псевдослучайными числами. Отметим, что при использовании формул для получения случайных чисел через какое-то число испытаний начинается повторение случайных чисел, т.е. псевдослучайные числа периодичны, иначе говоря, запас псевдослучайных чисел ограничен. Вопрос состоит только в том, каков период псевдослучайных чисел? Это зависит от выбранного алгоритма выработки псевдослучайных чисел.

⁸ Другие способы получения случайного числа изложены в книге «Метод статистических испытаний (метод Монте-Карло)» / Под редакцией Ю.А. Шрейдера. – Изд-во «Физматлит», 1962. – с.331.

Существует достаточное количество способов получения псевдослучайных чисел (см. в работах [5, 13, 22]). Рассмотрим без доказательства несколько способов получения псевдослучайных чисел.

1. Последовательность псевдослучайных чисел x_i , $i = 1, 2, \dots$, можно получить с помощью способа Лемера, или как говорят иногда методом вычетов. Алгоритм этого способа состоит в следующем [70]:
 - 1) Первое случайное целое число r_1 выбирается между числами 0 и P , где число P выбирается заранее.
 - 2) Умножаем это случайное число на выбранный заранее постоянный множитель M .
 - 3) К полученному произведению прибавляем некоторое выбранное заранее целое число K .
 - 4) Результат первых трех шагов делим на P и получившийся остаток выбираем в качестве следующего случайного числа. Формула представленного алгоритма имеет следующий вид: $r_{i+1} = (M r_i + K) \bmod P$, $i = 1, 2, \dots$. Выбор различных значений M , K и P дает различные периоды псевдослучайных последовательностей. Доказано, что лучше всего использовать целые числа. При $K=0$, а $P = 2^N$ наибольший период достигается при $M=3+8 \cdot I$ или $M = 5+8 \cdot I$. В качестве начального числа r_1 желательно выбрать нечетное число. При достаточно больших числах M полученный ряд производит впечатление случайного ряда.
2. Для получения случайного числа можно использовать также другой алгоритм Лемера:
 - 1) Берем случайное число γ и умножим его $10^{2 \cdot k}$ ($\xi_0 = \gamma \cdot 10^{2 \cdot k}$)
 - 2) Возводим в квадрат ξ_0^2
 - 3) Берем последние $2 \cdot k$ от ξ_0^2
 - 4) Умножим на постоянное любое число C , получаем новое число ξ_1 .
 - 5) Берем первые $2 \cdot k$ цифры от ξ_1 , тогда получим число ξ_2 .
 - 6) Берем первые $2 \cdot k$ от ξ_0^2
 - 7) Умножим на постоянное любое число C , получаем новое число ξ_3 .
 - 8) Берем последние $2 \cdot k$ цифры от ξ_3 , тогда получим число ξ_4 .
 - 9) Случайное число $\xi = (\xi_1 + \xi_2) / (2 \cdot 10^{2 \cdot k})$.
3. Для генерирования эталонных псевдослучайных чисел можно также воспользоваться методом середины квадратов (метод Неймана), суть которого заключается в следующем: пусть $\gamma_1 = 0,9876$ тогда $\gamma_1^2 = 0,97535376$, берем средние четыре цифры и составим $\gamma_2 = 0,5353$, тогда $\gamma_2^2 = 0,28654609$ Следовательно, $\gamma_3 = 0,6546$ и т.д., т.е. каждое последующее число образует-

ся возведением предыдущего в квадрат и отбрасыванием цифр с обоих концов.

4. Следующий класс генераторов случайных чисел предложен А.Зейманом и Дж.Марсалиа. Генераторы этого типа основаны на использовании последовательности Фибоначчи. Пример такой последовательности $\{0, 1, 1, 2, 3, 5, 8, 13, 21, 34, 55, \dots\}$. Рекурсивное описание последовательности Фибоначчи имеет вид $f_1 = 0, f_2 = 1, f_i = f_{i-1} + f_{i-2}, i = 3, 4, 5, \dots$, т.е. каждый последующий член равен сумме предыдущих. Если мы берем только последнюю цифру каждого числа в последовательности, то получим последовательность чисел $\{0, 1, 1, 2, 3, 5, 8, 3, 1, 4, 5, 9, 4, \dots\}$. Если эта последовательность применяется для начального заполнения массива большой длины, то используя этот массив, можно создать генератор случайных чисел Фибоначчи с запаздыванием, где складываются не соседние, а удаленные числа.

1.3.3. Понятие эталонной ⁹, случайной величины γ

Выберем интервал чисел от 0 до 1. Представим себе, что мы имеем некоторый генератор выработки случайных чисел X по равномерному распределению в интервале $[0, 1]$, т.е. для области $0 < x < 1$, функция распределения равна $F(x) = x$, а плотность вероятности реализации случайного числа соответственно равна единице $f_\gamma(x) = 1$.

Рассмотрим случайный эксперимент, при проведении которого реализуется равномерное распределение случайных чисел в некотором интервале. В результате опыта мы получаем некоторое число γ , которое может быть представлено в виде

$$\gamma = 0, \varepsilon_1 \varepsilon_2 \dots \varepsilon_k \dots, \text{ например, в результате розыгрыша упало число } \\ \gamma = 0.4603721 \dots,$$

Реализованные в результате розыгрыша числа γ , лежащие в интервале $[0, 1]$, в дальнейшем будем называть эталонными случайными числами, а цифры ε_i , входящие в случайные числа, называть десятичными, случайными цифрами, в отличие от случайных цифр, в другой системе исчисления. Причем каждая цифра является независимой от других цифр.

При решении реальных задач в случайной величине γ количество случайных цифр после запятой выбирают конечным, т.е.

$$\gamma = 0, \varepsilon_1 \varepsilon_2 \dots \varepsilon_N. \tag{1.31}$$

Можно сказать, что при вероятностно-имитационном компьютерном моделировании реальных явлений, эталонная или стандартная случайная величина

⁹ Иногда случайные величины в интервале $[0,1]$ называют стандартной или базовой случайной величиной

γ является базовой для получения случайных величин в другом диапазоне (интервале) и для других распределений плотности вероятности.

1.3.4. Преобразование случайных величин ¹⁰

В методе Монте-Карло часто стоит задача преобразования одной случайной величины в другую.

Рассмотрим функцию распределения непрерывной случайной величины, которая по определению имеет вид

$$F(x) = P(X \leq x) = \int_{-\infty}^x f(y)dy, \quad (1.32)$$

где функция $F(x)$ меняется от 0 до 1.

Приведем без доказательства одну из теорем преобразования случайной величины.

Случайная величина, удовлетворяющая уравнению

$$F(x) = \gamma \quad (1.33)$$

имеет плотность вероятности $f(x)$.

Эта теорема позволяет получать формулы преобразования одной случайной величины в другую для различных законов распределения.

Пример 1. Например, рассмотрим случайный эксперимент, плотность вероятности которого подчиняется равномерному распределению

$$f(x) = \begin{cases} 0 & \text{при } x \leq a \\ \frac{1}{b-a} & \text{при } a < x \leq b \\ 0 & \text{при } x > b \end{cases}$$

здесь случайная величина X лежит в промежутке $[a, b]$.

Применим формулу (1.33),

$$\gamma = \int_a^x f(y)dy = \frac{1}{b-a} \int_a^x dy = \frac{x-a}{b-a}, \quad (1.34)$$

Откуда получаем формулу преобразования для равномерного распределения

$$x = a + (b - a) \gamma, \quad (1.35)$$

т.е. для определения случайных величин в этом интервале мы обращаемся к последовательности случайных чисел, равномерно распределенных на отрезке $[0, 1]$, т.е. к эталонной случайной величине γ , а случайную величину X в интервале $[a, b]$ получаем по формуле преобразования (1.35).

Пример 2. Рассмотрим теперь экспоненциальное распределение

¹⁰ Более подробно теорию преобразования случайных величин см. в книге И.М.Соболя [31], глава 2.

$$f(y) = \lambda e^{-\lambda(y-a)}. \quad (1.36)$$

Так как

$$F(x) = \int_a^x \lambda e^{-\lambda(y-a)} dy = 1 - e^{-\lambda(x-a)} = \gamma, \quad (1.37)$$

то для расчета экспоненциальной случайной величины X имеем следующую формулу

$$x = a - \frac{\ln(1-\gamma)}{\lambda}. \quad (1.38)$$

Пример 3. Для получения гауссовской (нормированной) случайной величины X ($a=0, \sigma=1$) мы должны решить уравнение и найти X

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^x e^{-y^2/2} dy = \gamma.$$

Решить это уравнение достаточно трудно, поэтому используют другие методы преобразования.

- 1). Один из способов преобразования случайной величины для получения гауссовского распределения – это использование суммы n независимых, равномерно распределенных величин типа

$$x^{(n)} = \sqrt{\frac{3}{n}} \sum_{i=1}^n (2\gamma_i - 1), \quad (1.39)$$

согласно центральной предельной теореме при $n \rightarrow \infty$ имеем, что

$$P\{X^{(n)} < x\} \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^x e^{-y^2/2} dy, \quad (1.40)$$

т.е. для больших n можно использовать эту асимптотику. Опыт показывает, что при значении $n=12$ можно использовать формулу

$$x \approx x^{(12)} = \sum_{i=1}^{12} \gamma_i - 6, \quad (1.41)$$

где γ_i - равномерно распределенные случайные числа от 0 до 1. Для получения одного значения ξ в этом случае используются 12 значений γ .

Иногда для определения случайной величины для гауссовского распределения используют следующую формулу

$$x \approx 0.01x^{(5)} [97 + (x^{(5)})^2]. \quad (1.42)$$

Здесь добавлена поправка, которая ускоряет сходимость распределения к нормальному.

- 2). Другой способ преобразования эталонного случайного числа в гауссовское – это использование алгоритма Малера, который достаточно эффек-

тивен и дает сразу два значения

$$x_1 = \sqrt{-2 \ln \gamma_1} \cdot \cos(2\pi\gamma_2), \quad x_2 = \sqrt{-2 \ln \gamma_1} \cdot \sin(2\pi\gamma_2). \quad (1.43)$$

Если нужно только одно значение, то можно выбрать одну из этих формул. Если случайная величина x нормирована, т.е. $a=0$ и $\sigma=1$, то для получения гауссовской случайной величины y с математическим ожиданием a и дисперсией σ используют преобразование

$$y = \sigma \cdot x + a. \quad (1.44)$$

Пример 4. Моделирование равновероятного направления в трехмерном пространстве (равнораспределенная на поверхности сферы).

Элемент вероятности направления в трехмерном пространстве в декартовой и сферической системе координат для единичного вектора \vec{e} имеет вид

$$dp = f(\vec{e})\delta(e_x^2 + e_y^2 + e_z^2 - 1) \frac{de_x de_y de_z}{2\pi} = \frac{1}{4\pi} d \cos \theta d\varphi.$$

Здесь e_x, e_y, e_z проекции единичного вектора. Рассмотрим несколько алгоритмов получения случайных чисел для проекций единичного вектора.

1) . Берутся два случайные числа γ_1 и γ_2 и по алгоритму

$$e_z = 2\gamma_1 - 1, \quad e_x + ie_y = 2\sqrt{\gamma_1 - \gamma_1^2} \exp(i2\pi\gamma_2), \quad (1.45)$$

определяются три случайных числа e_x, e_y, e_z , которые являются проекциями единичного вектора.

2) . Берутся три случайные числа γ_1, γ_2 и γ_3 и вычисляется величина

$$d = (2\gamma_1 - 1)^2 + (2\gamma_2 - 1)^2 + (2\gamma_3 - 1)^2, \quad (1.46)$$

Если $d < 1$, $p = \pi/6$, то вычисляются

$$e_{x,y,z} = \frac{2\gamma_{1,2,3} - 1}{\sqrt{d}}. \quad (1.47)$$

1.3.5. Генераторы псевдослучайных чисел на ЭВМ

Не останавливаясь на достоинствах и недостатках различных методов получения случайных чисел, отметим, что в памяти современных ЭВМ хранятся некоторые алгоритмы выработки таких псевдослучайных чисел. Так как эти числа генерируются по заданному алгоритму, то они псевдослучайны, хотя и обладают статистическими характеристиками случайных чисел. Эти генераторы используются для получения псевдослучайных чисел, которые в дальнейшем применяются в вероятностной модели.

Для современных персональных вычислительных машин генерация псевдослучайных эталонных и случайных чисел реализована в языках программирования. В языке Паскаль для подключения генератора случайных чисел необ-

ходимо вписать в программе команду *Randomize*. Генерирование эталонного псевдослучайного числа в интервале $[0, 1]$ производится как

$$\gamma := \text{Random};$$

Если необходимо получить целые случайные числа от 0 до N , то запись генерации записывается в виде

$$x_i := \text{Random}(N);$$

На языке Бейсик генерация эталонных случайных чисел в интервале $[0,1]$ записывается в виде

$$\gamma = \text{RND}(1).$$

На языке Фортран (язык программирования для физиков и инженеров) генерация случайных чисел в интервале $[0,1]$ осуществляется с помощью подключения генератора случайных чисел $\text{Randomize}(a)$, где a – любое положительное число. Вызов для присвоения эталонного случайного числа в интервале $[0,1]$ записывается в виде

$$\gamma = \text{RND}(1).$$

1.3.6. Использование таблицы дискретных случайных чисел

Если мы имеем некоторый генератор случайных цифр, то, проводя, к примеру, N независимых опытов можем получить N независимых случайных цифр $\varepsilon_1 \varepsilon_2 \dots \varepsilon_N$, записывая их в порядке появления в таблицу, получим таблицу случайных цифр. Порядок использования этих таблиц достаточно прост. Например, нам необходимо получить случайные числа в интервале $[0, 1]$, для этого выбираем любую последовательность, например, четыре цифры $\varepsilon_i \varepsilon_{i+1} \varepsilon_{i+2} \varepsilon_{i+3}$, проводя к виду $\gamma = 0, \varepsilon_i \varepsilon_{i+1} \varepsilon_{i+2} \varepsilon_{i+3}$, получаем случайное число в заданном интервале.

Составление таблицы случайных цифр является не простой задачей. При создании генератора случайных цифр мы не гарантированы от ошибок. Созданная таблица случайных цифр тестируется и анализируется так, чтобы данная таблица действительно была таблицей случайных цифр. Это необходимо для того, чтобы мы были гарантированы в случайности полученных цифр.

Отметим, что тестируемые таблицы случайных цифр часто даются в справочниках, учебных пособиях и задачниках по теории вероятностей [5,6,7,23,25], и их можно использовать для решения задач при небольших сериях испытаний. Таблица случайных чисел дана в приложении 1.

Задания на моделирование:

1. Разработайте программу генерации случайных чисел с использованием генератора *Randomize* в интервале $[0, 1]$ и интервалах $[a, b]$, где $a < b$. Постройте диаграмму распределения полученной последовательности.

2. Создайте собственную программу генерации случайных чисел методом вычетов. Постройте диаграмму распределения сгенерированной последовательности.
3. Разработайте собственную программу генерации случайных чисел методом Лемера. Используйте целые, рациональные и иррациональные значения коэффициентов M , K и P . Постройте диаграмму распределения полученной последовательности.
4. Разработайте программу генерации случайных чисел методом Лемера при $K=0$, $P = 2^{-N}$ и $M=3+8 \cdot I$. Постройте диаграмму распределения полученной последовательности.
5. Создайте программу генерации случайных чисел методом Неймана. Постройте диаграмму распределения сгенерированной последовательности.
6. Разработайте программу генерации случайных чисел методом Марсалиа-Зеймана. Получите из 1000 первых чисел Фибоначчи, отбрасывая все разряды кроме единиц. Складывая все числа, удаленные на n элементов получите ряд случайных чисел Фибоначчи. Постройте диаграмму распределения полученных чисел.
7. Разработайте программу получения последовательности случайных чисел, используя рациональные и иррациональные значения коэффициентов a и b в дробной части многочлена $x_n = f(a \cdot n + b)$, где $n = 1, 2, 3, \dots$. Постройте диаграмму распределения сгенерированной последовательности.

1.4. Недостатки и достоинства аналитических, приближенных методов решения математических задач, в том числе и метода Монте-Карло

Как мы отметили в первой главе, если построена математическая модель физического процесса или явления, то его можно решить различными методами с применением информационных технологий. Рассмотрим идеологию решения математической задачи различными методами и отметим их основные недостатки, возможности и достоинства.

Первый метод – аналитический, который дает решение математической модели физической задачи либо в виде компактной формулы, либо в виде разложения в ряды или интегралы по полному набору собственных функций какого-нибудь оператора.

Задача классического математика состоит в применении известных и разработке новых математических способов для решения математической модели реального процесса или явления, чаще всего представленного в виде дифференциального, интегрального уравнения, системы дифференциальных или интегро-дифференциальных уравнений.

Аналитическое решение математической модели явления или процесса ма-

тематики находят, применив различные приближения, т.е. на самом деле решают упрощенную задачу (модель). Корректность решения зависит от используемого приближения.

В большинстве случаев отсутствуют универсальные способы решения многих математических задач. Например, способ разложения в ряд по собственным функциям не работает при решении дифференциальных уравнений в частных производных, где переменные не разделяются. Применение интегральных преобразований Лапласа непригодно при решении обыкновенных дифференциальных уравнений с переменными коэффициентами. В квантовой механике точно решаются только задачи для атома водорода.

Нет общих (универсальных) способов решения нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных для задач нелинейной оптики, а также решения интегральных уравнений замедления нейтронов и диффузии гамма квантов.

Любая задача имеет геометрические условия (плоскость, шар, цилиндр, эллипсоид и т.д.), которые записываются в виде начальных и граничных условий для дифференциальных или геометрических областей в интегральных уравнениях. Усложнение геометрии задачи вызывает непреодолимые трудности в нахождении аналитических решений.

Достоинство аналитических методов состоит в том, что полученная аналитическая формула даже для упрощенной модели удовлетворительно характеризует суть явлений. Аналитические решения позволяют понять и наглядно представить основные закономерности особенно при изучении нового явления или процесса. Поэтому при математическом моделировании явлений на первом этапе используют аналитический способ первоначального анализа математической модели. Исследование объекта или явления обычно начинается с поиска возможных аналитических решений упрощенной математической модели. Полученные аналитические решения часто используются как тестовые модели для сравнения результатов решения математической модели, полученных с помощью численного метода и математических пакетов.

Численный метод, или метод прямого программирования связан с разработкой метода вычисления сформулированной математической задачи (создания или использования готового вычислительного алгоритма задачи). Дискретный аналог математической модели – это разностные уравнения, представляющие собой совокупность цепочек алгебраических формул, по которым ведутся вычисления, и логических условий, позволяющих установить нужную последовательность применения этих формул.

Использование численных моделей позволяет исправить часть недостатков аналитического метода, в частности:

1. Численное моделирование позволяет иногда решать математические модели реального процесса со сложной геометрией.
2. Имеется возможность решения более реальных математических моделей,

моделирующие явление или процесс, т.е. решение нелинейных дифференциальных, систем дифференциальных уравнений в частных производных, интегральных уравнений.

Численный метод – это приближенный метод решения, поэтому одним из существенных недостатков данного метода является оценка погрешности. Аналитическая оценка погрешности является чаще всего сложной процедурой, чем сам процесс решения, в некоторых случаях она просто невозможна. В этих случаях для оценки погрешности используют вычислительный эксперимент или сравнение с аналитическими решениями и реальным натурным экспериментом.

Следующие методы решения математической модели – это применение информационных систем и математических пакетов (MathCAD, Maple, MatLAB и т.д.).

Математические системы MathCAD, Maple, Math Lab и другие пакеты являются отражением разработанных математических методов, т.е. в данных средах систематизированы и заложены методы решения уравнений различного типа, как в виде разложения в ряды или преобразования Лапласа, так и численные методы.

Применение математических систем позволяют модельщикам оперативно оценить решения упрощенных моделей, представить закономерности изучаемого явления. Эти работы позволят перейти к выбору метода и способа решения более реалистической математической модели и полномасштабному исследованию реального явления или процесса.

Достоинство применения математических пакетов состоит в сокращении времени решения математической задачи. Недостаток на сегодняшний день заключается в ограниченности методов решения систем дифференциальных и интегральных уравнений, в частности систем нелинейных уравнений в частных производных.

При компьютерном моделировании с помощью математических систем важен также субъективный фактор, глубокое знание и освоение технологий математического моделирования в системах MathCAD, Maple, Math Lab и других пакетах существенно отражается в оперативности решения физической задачи.

Метод Монте-Карло является одним из мощных при решении математических задач, особенно в тех случаях, если проблему невозможно решить как аналитическими, так и приближенными методами.

В настоящее время достаточно много задач, решение которых необходимы для физических, экономических, технических, производственных и других областей, и одним из направлений развития математических способов решения является применение метода Монте-Карло (вероятностного, имитационного, статистического моделирования).

Все перечисленные выше недостатки аналитических и классических приближенных методов отсутствуют в методе Монте-Карло:

- метод универсален,
- нет сложностей в выборе геометрии рассматриваемой задачи,
- метод является прямой математической моделью физического процесса, достаточно описать имитирующий вероятностный процесс,
- нет необходимости создания математической модели в виде интегрального или дифференциального уравнения или их комбинаций,
- точность в оценке погрешности слабо зависит от размерности пространства и памяти ЭВМ.

Основной недостаток метода Монте-Карло заключается в оценке погрешности, точнее, в её определении. Погрешность в определении искомой величины методом Монте-Карло определяется статистической погрешностью (1.21-1.22), которую можно записать как

$$\delta = \frac{c}{\sqrt{N}}.$$

Из этой формулы следует, что число испытаний N должно быть достаточно большим. Сложность в определении погрешности вычисления методом Монте-Карло состоит в определении коэффициента C в числителе. Во многих задачах применение аналитических методов позволяет определить и уменьшить значение коэффициента C . В этом случае использование метода Монте-Карло позволяет получить не только количественные характеристики, но и необходимые качественные закономерности.

Второй недостаток метода связан с необходимостью проведения однотипных расчетов для нескольких серий экспериментов на ЭВМ, их количество связано с количеством испытаний $N_1 \cdot N_2$, где N_1 – количество испытаний для одной серии, N_2 – количество серий экспериментов. Этот недостаток фактически связан с быстродействием современных вычислительных машин.

Необходимость применения метода Монте-Карло при решении задач связана, на наш взгляд, со следующими причинами. Если задача не может быть решена с помощью как аналитических, так и классических приближенных методов, то необходимо подумать о применении метода статистических испытаний. Из опыта работы специалистов по методу Монте-Карло следуют два важных заключения [22]:

- 1) нет такого классического приближенного метода расчета, который бы не мог быть усовершенствован превращением его в метод Монте-Карло;
- 2) нет такой схемы Монте-Карло, которая бы не могла быть усовершенствована на основе известных аналитических решений, имеющихся для данного класса задач.

Таким образом, аналитические, приближенные методы и метод Монте-Карло, развиваясь, становятся взаимозависимыми и дополняют друг друга.

Прежде чем перейти к решению физических задач, отметим, что метод Монте-Карло не является сложным, как это представляется тем, кто только

начинает его изучать. Ниже приведены технология использования метода Монте-Карло для решения различного вида физических задач, математические модели некоторых из них могут быть решены как аналитическими, так численными методами.

Отметим несколько правил, которые необходимо учитывать при построении алгоритмов методом Монте-Карло.

1. Алгоритм и программа должны быть организованы так, чтобы все точки искомой зависимости вычислялись параллельно и одновременно, а не последовательно.
2. В программе вычисления методом Монте-Карло должна быть приведена процедура, которая проводит и выводит оценку погрешности метода.
3. При проведении нескольких серий экспериментов мы получаем разные оценки ожидаемой, т.е. определяемой величины. Необходимо разработать процедуру проведения оценки, значений смещения определяемой величины.
4. Результаты метода статистических испытаний могут в значительной степени зависеть от количества N испытаний. Поэтому статистика должна быть достаточной, чтобы время усреднения было больше времени релаксации. В этом случае можно использовать асимптотику, т.е. применение центральной предельной теоремы, на основе которой можно получить надежную оценку погрешности и доверительные интервалы.
5. Результаты вычислений не должны зависеть от особенностей метода (например, иного датчика случайных чисел, другого алгоритма, схемы генерирования новой конфигурации и т.д.). Малое изменение каких-либо параметров не должно приводить к существенному изменению результатов.

частные суммы последнего ряда можно получить итерационным способом, полагая последовательно:

$$\begin{aligned} \vec{x}^{(1)} &= \vec{b} \\ \vec{x}^{(2)} &= B\vec{x}^{(1)} + \vec{b} = B\vec{b} + \vec{b} \\ &\dots\dots\dots \\ \vec{x}^{(k)} &= B\vec{x}^{(k-1)} + \vec{b} = B^{k-1}\vec{b} + B^{k-2}\vec{b} + \dots + \vec{b} \end{aligned} \quad (2.7)$$

Сходимость метода простых итераций эквивалентна сходимости последовательности $\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \dots, \mathbf{x}^{(k)}$

Для вычисления перейдем к координатной записи. В дальнейшем будем обозначать элементы матрицы B через B_{ij} . Тогда m -я координата x_m вектора X равна:

$$x_m = b_m + \sum_i B_{mi}b_i + \sum_{i_1, i_2} B_{mi_1}B_{i_1i_2}b_{i_2} + \dots + \sum_{i_1, i_2, \dots, i_j} B_{mi_1}B_{i_1i_2} \dots B_{i_{j-1}i_j}b_{i_j} \quad (2.8)$$

т.е. мы нашли решение системы линейных уравнений. Для того чтобы понять, почему оно является решением, рассмотрим случай, в котором сумма элементов по каждой строке равна 1:

$$\sum_i B_{mi} = 1 \quad (2.9)$$

Тогда величины B_{mi} можно рассматривать как набор вероятностей для полной системы несовместимых событий.

Рассмотрим технологию вероятностного моделирования системы уравнений методом Монте-Карло.

Представим каждый элемент B_{mi} матрицы B в виде произведения двух сомножителей

$$B_{mj} = F_{mj}P_{mj}, \quad (2.10)$$

где $0 < P_{mj} < 1$.

Координаты вектора правой части (2.1) представим в виде

$$b_j = f_j p_j. \quad (2.11)$$

При этом будем полагать, что выполнено равенство

$$p_m + \sum_j^n P_{mj} = 1. \quad (2.12)$$

Тогда равенство (2.8) можно представить в виде

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_m = & f_m P_m + \sum_i F_{mi} f_i P_{mj} P_i + \dots + \\ & + \sum_{i_1, i_2, \dots, i_r} F_{mi_1} F_{i_1 i_2} \dots F_{i_{r-1} i_r} f_{i_r} P_{mi_1} \dots P_{i_{r-1} i_r} P_{i_r} + \dots \end{aligned} \quad (2.13)$$

Рассмотрим теперь n разбиений отрезка $[0, 1]$, каждое на $n+1$ часть. Длины частей m -го разбиения равны соответственно

$$P_{m1} P_{m2} \dots P_{mn}, P_{mn}.$$

Пусть $\xi_0, \xi_1, \xi_2, \dots, \xi_l, \dots$ - значения независимых равномерно распределенных величин. Определим величину η_m следующим образом.

Сначала выберем m -е разбиение отрезка и посмотрим, в какую часть попадает величина ξ_0 . Если ξ_0 попала в $(n+1)$ -ю часть (длины P_m), то полагаем, что искомая величина равна

$$\eta_m = f_m. \quad (2.14)$$

Если ξ_0 попала в i_1 -ю часть разбиения (длины P_{mi_1}), то берем i_1 -е разбиение и смотрим, в какую часть этого разбиения попадает величина ξ_1 . Если ξ_1 попала в $(n+1)$ -ю часть, то полагаем, что искомая величина равна

$$\eta_m = F_{mi_1} f_{i_1}. \quad (2.15)$$

Если же ξ_1 попала в i_2 -ю часть разбиения (длины $P_{i_1 i_2}$), то берем ξ_2 и проверим, в какую часть i_2 -го разбиения она попала. Этот процесс продолжается, либо до первого попадания одной из величин ξ_l в $(n+1)$ -ю часть l -го разбиения, либо до бесконечности.

Таким образом, величина η_m принимает значения, определяемые данной историей процесса, т.е.

$$F_{mi_1} F_{i_1 i_2} \dots F_{i_{k-1} i_r} f_{i_k}$$

с вероятностью

$$P_{mi_1} P_{i_1 i_2} \dots P_{i_{k-1} i_r} P_{i_k}$$

Это значит, что величина η_m принимает значения (), если ξ_0 попала в i_1 -ю часть m -го разбиения, ξ_1 попала в i_2 -ю часть i_1 -го разбиения и т.д., а ξ_k попала в $(n+1)$ -ю часть k -го разбиения.

Математическое ожидание определяемой величины η_m равно

$$M\eta_m = f_m P_m + \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{i_1, i_2, \dots, i_k} F_{mi_1} F_{i_1 i_2} \dots F_{i_{k-1} i_k} f_{i_k} P_{mi_1} \dots P_{i_{k-1} i_k} P_{i_k}. \quad (2.16)$$

Сравнивая с выражением (2.13), получаем

$$M\eta_m = x_m,$$

т.е. уравнение (2.13) позволяет вычислять неизвестные значения x_i нашей системы уравнений (2.1) путем моделирования случайной величины по методу статистических испытаний.

При рассмотренном способе вычисления неизвестные определяются последовательно в каждой итерации, т.е. решаем вначале первое уравнение, находим первое неизвестное x_1 , потом второе уравнение и находим второе неизвестное x_2 , затем решаем третье уравнение и т.д. При этом число арифметических операций пропорционально числу уравнений, а не кубу этого числа, как в стандартных численных методах. В этом преимущество монте-карловского процесса вычисления.

Задания на моделирование:

1. Найти неизвестные следующей системы уравнений методом Монте-Карло.

$$7x_1 + 2x_2 + 2x_3 + 3x_4 = 12$$

$$5x_1 + 7x_2 + 0x_3 + x_4 = 15$$

$$3x_1 + 7x_2 + 4x_3 + 8x_n = 1$$

$$x_1 + x_2 + 2x_3 + 5x_n = 14$$

2. Решить систему уравнений методом Гаусса.
3. Сравнить решения, полученные разными методами.
4. Найти погрешности решения метода Монте-Карло.

2.2. Вычисление интегралов способом среднего

Пусть случайная величина y является функцией от случайной величины x . По определению среднего

$$\bar{y} = \int y(x) f(x) dx. \quad (2.17)$$

В теории вероятностей доказывается, что для случайной величины x с плотностью распределения $f_1(x)$ всегда можно найти такую случайную величину y с плотностью распределения $f_2(y)$, так что

$$\bar{x} = \bar{y} \text{ или } \int x f_1(x) dx = \int y f_2(y) dy. \quad (2.18)$$

Эта операция иногда называется преобразованием случайной величины. Преобразование случайной величины является узловым моментом в теории статистических испытаний (Монте-Карло). Обычно в качестве исходной (базо-

вой) случайной величины выбираются случайные цифры и из них строятся случайные числа в интервале от 0 до 1. Случайные цифры можно генерировать с помощью ЭВМ или пользоваться таблицей случайных чисел (см. приложение). Например, 8631 6918 4168 8652 6712 2039 и т.д. Построим из них числа от 0 до 1: 0,8631; 0,6918; 0,4168; 0,8652; 0,6712; 0,2039 и т.д.

Пусть у нас имеется случайная величина Y в интервале от 0 до 1. Если нам нужно перейти к другой случайной величине X , то формула перехода $y \rightarrow x$, согласно определению непрерывной случайной величины, имеет вид:

$$y = \int_a^x f(x') dx' = F(x) \quad (2.19)$$

Здесь $f(x)$ - нами взятая произвольная плотность распределения. Следует отметить, что удачный выбор плотности распределения вероятности $f(x)$ во многом определяет затраты и точность вычислений в методе Монте-Карло.

Технология вычисления интеграла способом среднего

Рассмотрим вычисление определенного интеграла

$$I = \int_a^b \varphi(x) dx \quad (2.20)$$

для этого берем случайную величину X , распределенную в интервале от a до b с плотностью распределения $f(x)$, и построим другую функцию $\phi(x)$ в виде

$$\phi(x) = \frac{\varphi(x)}{f(x)} \quad .$$

Тогда

$$I = \int_a^b \varphi(x) dx = \int_a^b \frac{\varphi(x)}{f(x)} f(x) dx = \int_a^b \phi(x) f(x) dx = \bar{\phi} \quad (2.21)$$

Введем обозначение $dy = f(x) dx$, тогда случайная величина Y определится как

$$y = \int_0^x f(x') dx' \quad .$$

Вычисляя этот интеграл, получим зависимость $y = y(x)$, откуда выражаем x и подставляем в функцию $\phi(x(y))$.

Тогда интеграл (2.21) примет вид

$$I = \int_{a'}^{b'} \phi(x(y)) dy = \int_{a'}^{b'} \phi(y) dy \quad .$$

Отметим, что если случайная величина X лежит в интервале $[a, b]$, то для случайной величины Y , пределы интервалов также необходимо изменить, тогда наш искомый интеграл определится как

$$I \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{\varphi(y_i)}{f(y_i)} = \bar{\phi} = \langle \phi_{cp} \rangle .$$

Пример. В качестве иллюстрации вычислим следующий интеграл методом статистических испытаний

$$I = \int_0^{\pi/2} \sin x dx , \quad (2.22)$$

зная, что точное значение этого интеграла $I = 1$.

1. Случай равномерного распределения. Берем случайную величину X , принимающую значения в интервале от 0 до $\pi/2$ и подчиняющуюся закону

равномерного распределения $F(x) = \frac{x}{b-a}$ ($a=0$ и $b=\pi/2$).

Плотность распределения вероятности

$$f(x) = \frac{dF(x)}{dx} = \frac{1}{b-a} .$$

Для перехода от случайной величины X в интервале $[0, \pi/2]$ к случайной величине Y выполним преобразование по формуле (2.19)

$$y = \int_0^x f(x') dx' = \int_0^x \frac{2}{\pi} dx' = \frac{2}{\pi} x . \quad (2.23)$$

Плотность распределения $f(y)$ случайной величины Y имеет вид

$$f(y) = \frac{1}{b-a} = \frac{1}{\frac{\pi}{2} - 0} = \frac{2}{\pi} . \quad (2.24)$$

Вычисляемый интеграл можем представить как

$$I = \int_0^{\pi/2} \sin x dx = \int_0^{\pi/2} \frac{\sin x}{f(x)} f(x) dx = \int_0^{\pi/2} \phi(x) f(x) dx = \bar{\phi} . \quad (2.25)$$

Вычисление интеграла (2.22) проведем методом Монте-Карло. Из формулы (2.23) найдем x

$$x = \frac{\pi}{2} y . \quad (2.26)$$

т.к. интервал изменения x равен $[0, \pi/2]$, то интервал изменения y будет равен $[0, 1]$. Теперь, используя формулу $\phi(x) = \frac{\varphi(x(y))}{f(x(y))} = \frac{\sin(\frac{\pi}{2} y)}{2/\pi}$, запишем интеграл

в виде

$$I = \int_0^{\pi/2} \frac{\sin(x)}{f(x)} f(x) dx = \int_0^1 \frac{\sin(\frac{\pi}{2} y)}{2/\pi} dy.$$

Переходя от интеграла к сумме, получим алгоритм определения значения интеграла (2.26).

$$y_i := random,$$

$$I \approx \frac{1}{N} \sum_i^N \frac{\sin(\frac{\pi}{2} y_i)}{2/\pi}, \quad (2.27)$$

здесь Y - случайная величина, лежащая в интервале $[0, 1]$, $i = 1, 2, 3, \dots, N$. Для наглядности приведем результаты вычислений в виде таблицы.

i	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
y_i	0,8631	0,6918	0,4168	0,8652	0,6712	0,2039	0,0339	0,4216	0,4717	0,6615
$\pi y_i/2$	1,359	1,087	0,6446	1,359	1,054	0,3202	0,053	0,662	0,741	1,039
$Sin(\pi y_i/2)$	0,978	0,885	0,6088	0,9777	0,8694	0,3148	0,053	0,6147	0,675	0,862
$\pi Sin(y_i)/2$	1,536	1,391	0,9564	1,536	1,366	0,4945	0,085	0,96	1,06	1,35

Интеграл I определяется по алгоритму (2.27). При $N=10$ получается $I = 1.06$.

2. Случай неравномерного распределения. Выберем для простоты плотность распределения случайной величины X вида

$$f_x(x) = Ax. \quad (2.28)$$

Найдем постоянную A из условия нормировки $\int_a^b f(x) dx = 1$ для нашей за-

дачи $\int_0^{\pi/2} Ax dx = 1.$

Отсюда $A = \frac{8}{\pi^2}.$

Следовательно, плотность распределения случайной величины x имеет вид

$$f(x) = \frac{8}{\pi^2} x. \quad (2.29)$$

Проведем преобразование случайной величины. Для этого перейдем от случайной величины x , распределенной в интервале $[0, \pi/2]$, к случайной величине y по соотношению

$$y = \int_0^x \frac{8}{\pi^2} x' dx' = \frac{4x^2}{\pi^2}. \quad (2.30)$$

Подставляя пределы интегрирования по X , из формулы (2.30) найдем пределы интегрирования по величине y , она лежит в пределах $[0, 1]$. Используя обратную функцию $x = \frac{\pi}{2} \sqrt{y}$ и плотность распределения

$$f(y) = \frac{8}{\pi^2} x = \frac{4}{\pi} \sqrt{y},$$

найдем функцию $\phi(y)$, т.е.

$$\phi_i(x(y)) = \frac{\varphi(x(y_i))}{f(x(y))} = \frac{\sin(\frac{\pi}{2} \sqrt{y})}{\frac{4}{\pi} \sqrt{y}}.$$

Тогда интеграл (2.25) примет вид

$$I = \int_0^{\pi/2} \frac{\sin(x)}{f(x)} f(x) dx = \int_0^1 \frac{\sin(\frac{\pi}{2} \sqrt{y})}{\frac{4}{\pi} \sqrt{y}} dy.$$

Переходя от интеграла к сумме, получаем формулу вычисления интеграла (2.22)

$$I \cong \frac{1}{N} \sum_i^N \frac{\sin(\frac{\pi}{2} \sqrt{y_i})}{\frac{4}{\pi} \sqrt{y_i}}. \quad (2.31)$$

Здесь y_i случайная величина, лежащая в интервале $[0, 1]$.

Интересно сравнение результатов формул (2.27) и (2.31) при одном и том же N .

Таким образом, метод Монте-Карло может быть реализован в виде разных алгоритмов с различной эффективностью.

Для сравнения эффективности вводят понятие о трудоемкости алгоритма, которая определяется как произведение времени расчета одного значения X на дисперсию $D(x)$ случайной величины.

$$T = t \cdot D(x).$$

Задания на моделирование:

Вычислить методом статистических испытаний интегралы ошибок $erf(y)$:

$$\operatorname{erf}(y) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^y e^{-x^2} dx, \quad (2.32)$$

для $y_{\max} = 1$ с интервалом 0, 1 ($0.1 \leq y \leq 1$).

В качестве плотности распределения $f(x)$ выбрать:

1. Линейное распределение $f(x) = A_1 x$.
2. Экспоненциальное распределение $f(x) = A_2 e^{-x}$.

Постоянные A_1 и A_2 найти из условия нормировки. Вычисленные значения $\operatorname{erf}(y)$ сравнить с табличными данными и оценить ошибки вычислений в каждом случае. Число испытаний N рекомендуется брать не меньше 100.

2.3. Нахождение определенных интегралов способом «зонтика» Неймана

1. Постановка задачи. Пусть нам дан определенный интеграл

$$I = \int_a^b f(x) dx.$$

Значение этого интеграла по геометрической интерпретации равно площади подынтегральной функции $y=f(x)$. Вычислить интеграл методом «зонтика» Неймана.

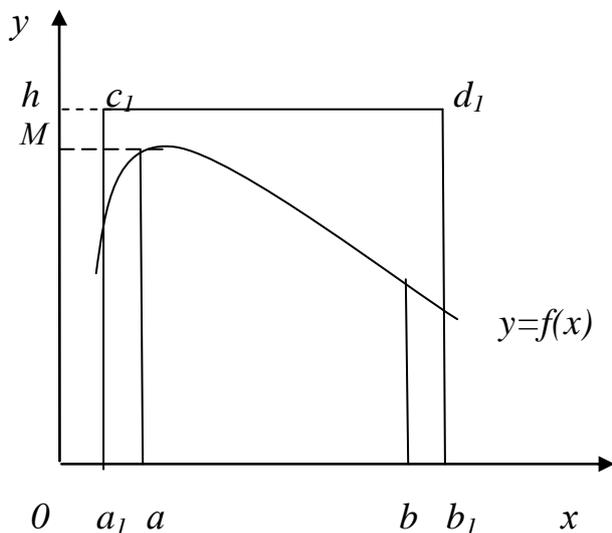


Рис. 2.1

2. Модель. Рассмотрим простую функцию, будем считать, что она отлична от нуля в интервале от a до b . Выберем любой прямоугольник, накрывающий всю площадь под функцией $f(x)$, т.е. с высотой $h \geq M$, где M абсолютный максимум функции в интервале от a до b , и основанием $b_1 - a_1$, причем $b_1 \geq b$ и $a_1 \leq a$ (рис.2.1).

Рассмотрим теперь технологию вычисления площади методом статистических испытаний. Разыгрываем два равномерно распределенных случайных числа γ_1 и γ_2 . По формуле (1.35) вычисляем значения x и y . Повторяем опыт разыгрывания пары случайных чисел N раз. Они определяют координаты точек, которые попадают внутрь прямоугольника $a_1 c_1 d_1 b_1$. Вероятность нахождения этих точек ниже подынтегральной функции $f(x)$, вычисляется по формуле

$$P(A) = \frac{S_{f(x)}(a,b)}{S_{\text{прямоугол}}(a_1,b_1)} = \frac{S_{f(x)}(a,b)}{h(b_1 - a_1)}. \quad (2.33)$$

Оценку этой вероятности можно найти также по отношению числа точек (попавших под интегральную функцию), к числу точек внутри прямоугольника, т.е.

$$P(A) = \frac{N_{f(x)}}{N_{\text{прямоугол}}}.$$

Приравнивая их, получаем, что площадь под интегральной функцией равна

$$S_{f(x)} = S_{\text{прямоугол}} \frac{N_{f(x)}}{N_{\text{прямоугол}}} = h(b - a) \frac{N_{f(x)}}{N_{\text{прямоугол}}}. \quad (2.34)$$

Этот способ по существу следует из закона больших чисел.

3. Алгоритм. Рассмотрим алгоритм получения точек на плоскости.

1. Разыгрываются N раз, два эталонных случайных числа γ_{1i} и γ_{2i} . Вычисляются координаты $x_i = a_1 + (b_1 - a_1)\gamma_{1i}$ и $y_i = \gamma_{2i}h$.
2. Проверяется выполнение неравенств

$$a_1 < x_i < b_1, \quad h\gamma_{2i} \leq h$$

здесь h – высота выбранного прямоугольника, обычно его берут равной максимуму функции $f(x)$, т.е. $h = M$.

3. В случае выполнения $i_n = i_n + 1$, в итоге мы получаем значение

$$N_{\text{прямоугол}}.$$

4. Проверятся выполнение неравенств

$$a < x_i < b, \quad y_i \leq f(x_i)$$

5. В случае выполнения неравенств $i_f = i_f + 1$, в итоге мы получаем число точек под интегральной функцией $N_{f(x)}$ в интервале от a до b .

Таким образом по формуле (2.34) мы определим значение площади под интегральной функцией.

Рассмотрим трехмерный случай. Формулу для вычисления объема неизвестного тела по методу Монте-Карло можно найти по аналогии с формулой (2.34):

$$V_x = V_{\text{параллелепипеда}} \frac{N_x}{N_{\text{параллелепипеда}}},$$

здесь N_x число точек, попавших в определяемый объем, $V_{\text{параллелепипеда}}$ – объем выбранного известного параллелепипеда.

4. Задания на моделирование

1. Вычислить интегралы следующих функций в интервалах и сравнить с точным значением интеграла

Функция	Интервал	Точное значение интеграла
$y = x$	$0 < x < 1$	0.5
$y = x^2$	$0 < x < 1$	0.333333.....
$y = \sin(x)$	$0 < x < \pi/2$	1
$y = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(-x^2/2)$	$0 < x < 5$	0.5

2. Определить погрешность вычислений.
3. Найти причину допускаемой погрешности и определить способы уменьшения погрешности.

2.4. Вычисление значения числа π

Рассмотрим задачу вычисления значения числа π . Эта задача интересна и с дидактической точки зрения, так как помогает совместить простые опыты с решением довольно сложной математической модели по определению числа π .

1. Способ дождя. Идея определения числа π заключается в следующем: при радиусе круга $r = 1$, его площадь S равна π . Рассмотрим четверть круга (рис.2.2), тогда

$$\pi = 4S. \quad (2.35)$$

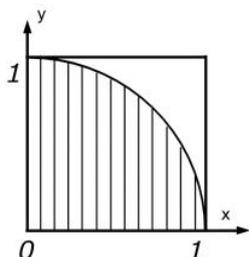


Рис.2.2

Если мы определим площадь четверти круга, то определим значение числа π . Для определения площади круга используем метод Монте-Карло, который требует применения случайных чисел. Экспериментально случайные числа можно получить как при помощи рулетки, так и при помощи дождя. Для опыта приготовим кусок картона, нарисуем на нем квадрат и впишем в квадрат четверть круга.

Если такой чертеж некоторое время подержать под дождем, то на его поверхности останутся следы капель. Подсчитаем число следов внутри квадрата и внутри четверти круга. Очевидно, что их отношение будет приближенно равно отношению площадей этих фигур, так как попадание капель в различные места

чертежа равновероятно, т.е. $\frac{S_{kr}}{S_{kv}} \cong \frac{N_{kr}}{N_{kv}}$, т.к. $S_{kv} = 1$, то $S_{kr} \cong \frac{N_{kr}}{N_{kv}}$.

Таким образом, значение числа π можно найти, определив N_{kr} – число капель в круге и N_{kv} – число капель в квадрате

$$\pi = 4S_{kr} \cong 4 \frac{N_{kr}}{N_{kv}}. \quad (2.36)$$

Фактически значение площади подынтегральной функции мы нашли, используя метод «зонтика» Неймана.

Генерация случайных чисел на отрезке. Дождь можно заменить таблицей случайных чисел, которая составляется с помощью компьютера по специальной программе (можно воспользоваться одной из многочисленных публикаций таких таблиц, например, в книгах [5,6,7,23,25]). Каждому следу капли поставим в соответствие два случайных числа, характеризующих его положение вдоль осей Ox и Oy (см. рис.2.2).

Случайные числа можно выбрать из таблицы в любом порядке, например, подряд. Пусть первое четырехзначное число в таблице 3265. Из него можно "приготовить" пару чисел, каждое из которых больше нуля и меньше единицы: $x=0.32$, $y=0.65$. Эти числа будем считать координатами капли, т. е. капля как будто попала в точку $(0.32; 0.65)$.

Решение. Аналогично поступаем и со всеми выбранными случайными числами. Если окажется, что для точки $(x_i; y_i)$ выполняется неравенство $x_i^2 + y_i^2 > 1$, то, значит, она лежит вне круга. Если $x_i^2 + y_i^2 \leq 1$, то точка лежит внутри круга.

Для подсчета значения π снова воспользуемся формулой (2.36). Ошибка вычислений по этому методу, как правило, пропорциональна $\frac{C}{\sqrt{N}}$, где C - некоторая постоянная, а N - число испытаний. В нашем случае $N = N_{kv}$. Из этой формулы видно: для того чтобы уменьшить ошибку в 10 раз, нужно увеличить N в 100 раз. Ясно, что широкое применение метода статистических испытаний (Монте-Карло) стало возможным только благодаря компьютерам. Программа 1 и 2 в приложении 3 реализуют описанный метод.

2. Способ "падающей иголки" или игла Бюффона. Идея метода также заключается в вычислении площади под некоторой кривой. В методе иглы Бюффона в качестве подынтегральной кривой используется тригонометрическая функция \cos . Сущность метода заключается в том, чтобы экспериментально воспроизвести событие, вероятность которого выражается через число π , и приближённо оценить эту вероятность.

Построение модели. Возьмем обыкновенную швейную иглку и лист бумаги. На листе проведем несколько параллельных, прямых линий так, чтобы расстояния между ними были равны a и не превышали длину иглки L .

Чертеж должен быть достаточно большим, чтобы случайно брошенная игла не упала за его пределы. Положение случайным образом брошенной на чертеж иглы (см. рис. 2.4) определяется расстоянием x от ее середины до ближайшей прямой, углом, который игла образует с перпендикуляром, опущенным из середины иглы на ближайшую прямую (см. рис. 2.3). Ясно, что $0 \leq x \leq 1/2$, $-\pi/2 \leq y \leq \pi/2$.

На рис.2.5 изобразим графически функцию $y=0.5*L*\cos(\varphi)$.

Всевозможные расположения иглы характеризуются точками с координатами $(\varphi; y)$, расположенными на участке ABCD. Заштрихованный участок AED - это точки, которые соответствуют случаю пересечения иглы с прямыми линиями. Вероятность события - "игла пересекла прямую" - вычисляется по формуле

$$P(A) = \frac{S_{AED}}{S_{ABCD}},$$

здесь $S_{AED} = \int_{-\pi/2}^{\pi/2} 0.5 \cos(\varphi) d\varphi = 1$, $S_{ABCD} = 0.5 \cdot a \cdot \pi / L$,

т. е. $P(a) = \frac{2 \cdot L}{a \cdot \pi}$. (2.37)

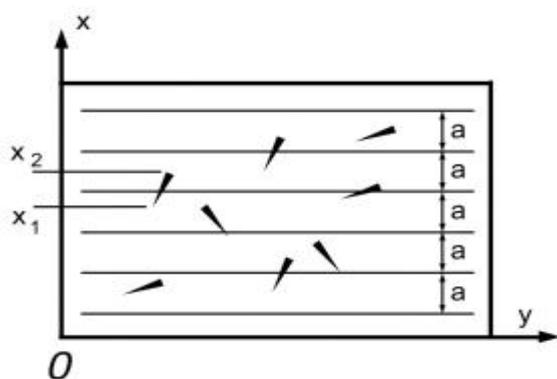


Рис. 2.3

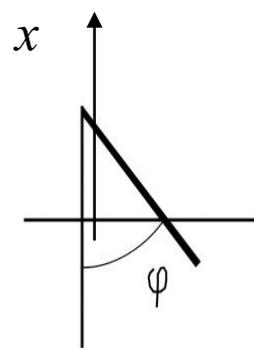


Рис.2.4

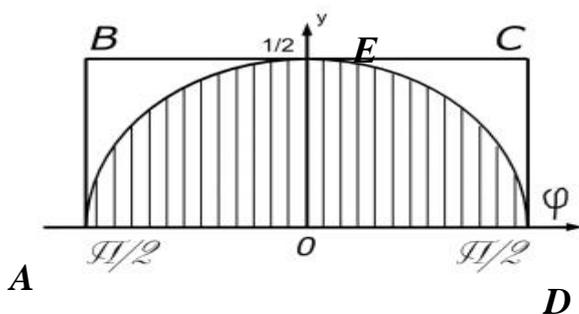


Рис. 2.5

Вероятность $P(a)$ также можно приблизительно определить многократным бросанием иглы. Пусть иглу бросали на чертеж N раз и она упала k раз, пересекая одну из прямых, тогда при достаточно большом N имеем

$$P(a) = \frac{k}{N}. \tag{2.38}$$

Приравнивая формулы (2.35) и (2.36) получаем формулу для расчета значения π (пи).

$$\pi = \frac{2 \cdot L \cdot N}{a \cdot k}. \tag{2.39}$$

При вычислении тригонометрических функций на языке Паскаль и Бейсике углы из градусной меры приходится переводить в радианную меру, где ис-

пользуется значение π . Поэтому для построения нашей модели мы используем проекцию иглы (рис.2.4). Координаты проекции иглы на ось ОУ не влияют на наши расчеты. Координату $X1$ зададим датчиком случайных чисел. Координата $X2$ может изменяться в промежутке $X1 \leq X2 \leq X1 + L$, L - длина иглы. Условие пересечения иглы прямой $X1 \leq a \leq X2$, где a - координата x проекции прямой на ОХ. Для конкретности возьмем расстояние между прямыми – $a = 2$, длину иглы – $L = 1$, количество линий на рис. 2.2. Описанная модель реализована в программах 3 и 4 (см. приложение 3.).

Задания на моделирование:

1. Составить программы определения числа π по рассмотренным методам.
2. Провести моделирование.
3. Оценить погрешность результатов и построить графики .

2.5. Решение уравнений эллиптического типа (задача Дирихле)

Перейдем теперь к рассмотрению решения уравнений эллиптического типа на примере вероятностного моделирования уравнения Лапласа (задачи Дирихле)¹². Запишем уравнение Лапласа для прямоугольника.

$$\frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial y^2} = 0, \quad 0 < x < a, \quad 0 < y < b, \quad (2.40)$$

$$u(x, y) |_{G} = s(x, y). \quad (2.41)$$

Введем в рассматриваемой области равномерную сетку. Рассмотрим ее фрагмент (рис. 2.6).

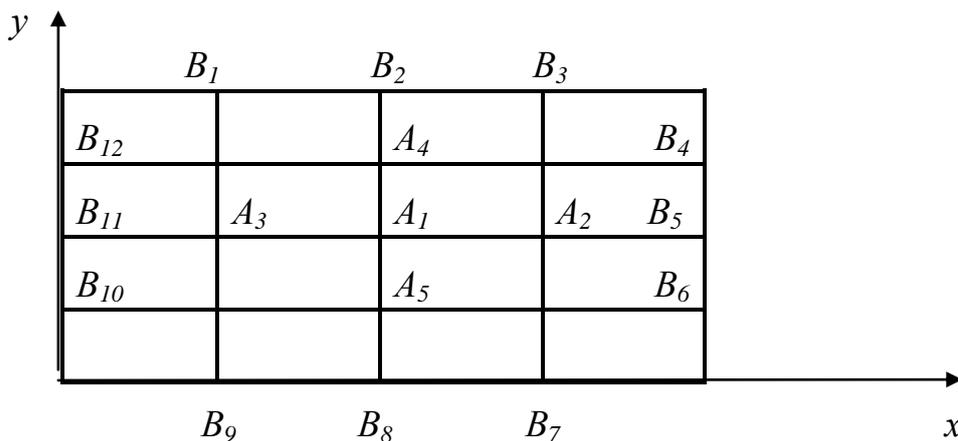


Рис. 2.6. Фрагмент сетки

Здесь A_i , $i = 1, 2, \dots$ - внутренние точки области, B_j , $j = 1, 2, \dots$ - граничные точки.

¹² В этом параграфе будем следовать способу решения, описанному в работе [26].

Представим себе некую частицу M , которая совершает равномерное случайное блуждание по узлам сетки. А именно, находясь во внутреннем узле сетки, эта частица за один переход может переместиться в один из соседних узлов (с вероятностью $p=1/4$). Будем считать, что блуждание частицы M заканчивается, как только эта частица попадет на границу области G . Говорят, что граница G представляет собой «поглощающий экран». Далее, договариваются определять шаг движения частицы в ту или иную сторону в зависимости от выпавшего случайного числа. Например, 0 или 4—шаг вправо; 1 или 5—вверх и т.д. После того, как частица достигла границы, повторяем движения из той же точки достаточное число раз и найдем относительное число прибытий частиц в каждую из граничных точек:

$$p_{A_i}(B_j) = \frac{n_j}{N_i}, i = 1, 2, 3, \dots; j = 1, 2, \dots, \quad (2.42)$$

где n — число прибытий в точку B_j , N_i — общее число блужданий из точки A_i , причем

$$\sum_{j=1}^k p_{A_i}(B_j) = \sum_{j=1}^k \frac{n_j}{N_i} = 1 \quad (2.43)$$

Предположим, что по прибытии на границу частица получает «приз» $s_j = s(B_j)$. Поставим задачу вычисления среднего числа вознаграждений $R(A_i)$ для всех случайных прогулок частицы из точек A .

Это среднее вознаграждение вычисляется по формуле (полной вероятности):

$$R(A_i) = s_1 p_{A_i}(B_1) + s_2 p_{A_i}(B_2) + \dots + s_{12} p_{A_i}(B_{12}) \quad (2.44)$$

Оказывается, что среднее вознаграждение $R(A_i)$ (для всех внутренних точек области) является приближенным решением задачи Дирихле. Действительно,

1) если частица M лежит в точке на границе, блуждание немедленно заканчивается и частица получает приз s_j . Среднее вознаграждение для каждой граничной точки оказывается равным s_j .

2) Блуждание частицы начинается из внутренней точки. Тогда среднее вознаграждение, например, для точки A_1 будет равно среднему арифметическому от средних вознаграждений для четырех соседних точек:

$$R(A_1) = \frac{1}{4} [R(A_2) + R(A_3) + R(A_4) + R(A_5)] \quad (2.45)$$

Таким образом, величина $R(A_i)$ соответствует решению задачи Дирихле (2.40), (2.41):

$$u_{i,j} = \frac{1}{4} [u_{i-1,j} + u_{i+1,j} + u_{i,j-1} + u_{i,j+1}] \text{ для внутренних точек прямоугольника,}$$

$$u_{i,j} = s_{i,j}$$

на границе области.

Во многих случаях для исследователя представляет интерес решение уравнения с частными производными для некоторой локальной области или в какой-либо одной точке. Приведем в качестве примера моделирование решения задачи Дирихле методом Монте-Карло. Пусть требуется найти неизвестное значение $u(2, 2)$, если

$$u(x, y) = 0 \tag{2.46}$$

во внутренних точках квадрата ($0 < x < 4$; $0 < y < 4$),

$$\begin{aligned} u(x, 0) &= 0, & 0 < x < 4, \\ u(0, y) &= 0, & 0 < y < 4, \\ u(4, y) &= y, & 0 < y < 4, \\ u(x, 4) &= x, & 0 < x < 4, \end{aligned} \tag{2.47}$$

В качестве сетки для численного моделирования данной задачи выберем ту, что приведено на рис. 2.6 (внутренние точки A_i , граничные — B_j , $i = 1, 2, \dots, j = 1, 2, \dots, 12$). Так, при выпадении случайного числа 0 или 4 частица перемещается на шаг вправо; 1 или 5—вверх; 2 или 6—влево; 3 или 7—вниз. Выпадение чисел 8 или 9—шаг на месте. Будем считать, что мы имеем равномерно распределенную на $[0, 1]$ последовательность случайных чисел и соответствующую этим числам траекторию перемещений частицы M из точки $(2, 2)$ по приведенным выше правилам. Пример взят из книги: *Демидович Б.И., Марон И.А., Шувалова Э.З. «Численные методы анализа».*

Случайное число	5—шаг	вверх	$(2,2) \rightarrow (2,3)$,
»	»	1—шаг	вниз $(2,3) \rightarrow (2,2)$,
»	»	7—шаг	вниз $(2,2) \rightarrow (2,1)$,
»	»	0—шаг	вправо $(2,1) \rightarrow (3,1)$,
»	»	3—шаг	вниз $(2,2) \rightarrow (2,1)$,
»	»	7—шаг	вниз $(2,1) \rightarrow (2,0)$.

Всего 13 перемещений частицы до попадания в точку границы $(2,0)$. Затем генерируется следующий набор случайных чисел и осуществляется второе блуждание частицы M из точки $(2,2)$ и т.д. Относительная доля блужданий, заканчивающихся в точках B . и величина вознаграждения s . при достижении этой точки приведены в таблице.

Номер точки	Относительная доля блужданий n_j / N	Приз s_j
1	0.13	1
2	0.16	2
3	0.04	3

4	0.05	3
5	0.16	2
6	0.06	1
7	0.06	0
8	0.14	0
9	0.04	0
10	0.07	0
11	0.15	0
12	0.04	0
	$\Sigma=1$	

Теперь значение $u(2, 2)$ вычисляется по формуле (2.45). В соответствии с этой формулой получаем;

$$u(2,2)=R(A_1) = 1 \cdot 0,03 + 2 \cdot 0,16 + 3 \cdot 0,04 + \dots + 0 \cdot 0,04 = 1,0.$$

Удивительно, но случайно получено точное решение задачи Дирихле, которое в данном случае имеет вид [17]: $u(x,y) = xy/4$.

$$\text{Тогда } u(2,2) = 2 \cdot 2 / 4 = 1.$$

Эта методика может быть обобщена на случай произвольной области. Метод статистических испытаний с успехом используется в решении уравнений параболического типа, в частности, в задачах диффузии [22, 51].

Задания на моделирование:

1. Составить программу моделирования решения уравнений эллиптического типа.
2. Провести моделирование решение уравнения
3. Построить графики и провести анализ результатов.

Результаты моделирования. На рис.2.7 приведен результат моделирования уравнения Лапласа во внутренних точках квадрата ($-6 < x < 6$; $-6 < y < 6$), при граничных условиях

$$u(x, 0) = 0, -6 < x < 6, \quad u(0, y) = 0, -6 < y < 6,$$

$$u(4, y) = y, -6 < y < 6, \quad u(x, 4) = x, -6 < x < 6,$$

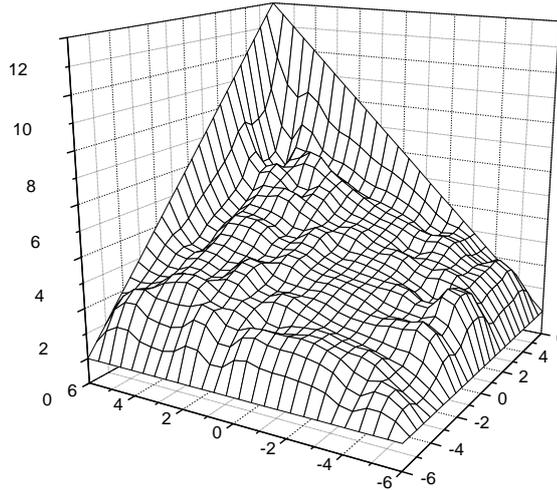


Рис.2.7

2.6. Решение уравнений параболического типа на примере уравнения теплопроводности

Постановка задачи. Рассмотрим теперь реализацию метода статистических испытаний для уравнений параболического типа¹³. Идея реализации метода для уравнений параболического типа в одномерном случае, состоит в использовании разностной схемы Кранка—Николсона.

Рассмотрим следующую задачу:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad 0 < x < l, \quad 0 < t < \infty, \quad (2.48)$$

$$u(0, t) = f(t), \quad u(l, t) = g(t), \quad (2.49)$$

$$u(x, 0) = \varphi(x).$$

Алгоритм решения. Для проведения численного эксперимента аппроксимируем частные производные, входящие в уравнение (2.48), следующим образом:

$$u_t(x, t) = \frac{1}{\tau} [u(x, t + \tau) - u(x, t)], \quad (2.50)$$

$$u_{xx} = \frac{\lambda}{h^2} [u(x + h, t + \tau) - 2u(x, t + \tau) + u(x - h, t + \tau)] + \frac{1 - \lambda}{h^2} [u(x + h, t) - 2u(x, t) + u(x - h, t)], \quad (2.51)$$

где $\lambda \in [0, 1]$.

¹³ В этом параграфе будем следовать способу решения, описанному в работе [26].

Здесь u_{xx} представляется как взвешенное среднее аппроксимаций, производной на временных слоях t и $t + \tau$. При $\lambda = 0$ это представление дает обычную явную схему; при $\lambda = 0,5$ получается среднее двух центральных разностных производных (разностная схема с весом $A = 0.5$, называемая схемой Кранка — Николсона).

Рассмотрим теперь технологию решения уравнения (2.51) вероятностным методом. Заменяя частные производные в задаче (2.48) - (2.49) их конечно-разностными представлениями и выражая член $u_{i,j+1}$ в уравнении (2.48), запишем

$$u_{i,j} = \frac{1}{1 + 2\lambda\tau / h^2} \left[\begin{array}{l} \frac{\lambda\tau}{h^2} (u_{i+1,j+1} + u_{i-1,j+1}) + \\ + \frac{\tau(1-\lambda)}{h^2} (u_{i+1,j} + u_{i-1,j}) + u_{i,j} (1 - 2\tau(1-\lambda)/h) \end{array} \right], (2.52)$$

Рассмотрение соотношения (2.52) показывает, что коэффициенты при функции u с различными индексами положительны и их сумма равна единице. Иначе говоря, решение $u_{i,j+1}$ является взвешенным средним решений в пяти точках шеститочечного шаблона на двух временных слоях j и $j + 1$. Это значит, что блуждание частицы M , о котором говорилось в §2.5, из точки $(i, j + 1)$ в соседние точки происходит с вероятностями:

Координаты точки	Вероятность
$(i + 1, j + 1)$	$p_1 = \frac{\lambda\tau}{h^2 + 2\lambda\tau}$
$(i - 1, j + 1)$	$p_2 = \frac{\lambda\tau}{h^2 + 2\lambda\tau}$
(i, j)	$p_3 = \frac{h - 2\tau(1-\lambda)}{h^2 + 2\lambda\tau}$
$(i + 1, j)$	$p_4 = \frac{\tau(1-\lambda)}{h^2 + 2\lambda\tau}$
$(i - 1, j)$	$p_5 = \frac{\lambda\tau}{h^2 + 2\lambda\tau}$

Задания на моделирование:

- Составить программу моделирования решения уравнений параболического типа.
 - Провести моделирование решение уравнения.
 - Построить графики и провести анализ результатов.
- Сравните результаты численного решения уравнений методом Зейделя и методом статистических испытаний.

Подсказка. Для генерации случайных чисел от 1 до 5 (в данном случае этого оказывается достаточно) с вероятностями, соответствующими перемещениям частицы M в приведенных направлениях, используйте следующий алгоритм. Рассмотрите единичный отрезок, разбитый на 5 интервалов, длины которых соответственно равны вероятностям p_i , $i = 1, 2, \dots, 5$ с номерами, равными 1, 2, 3, 4, 5. Причем, договоримся определять направление перемещения частицы в зависимости от получения случайного числа от 1 до 5.

В приложении приведена программа, реализующая предложенный алгоритм для одномерного уравнения теплопроводности, написанная на алгоритмическом языке Паскаль.

Результаты моделирования. На рис.2.8 приведен расчет процесса охлаждения проводника длиной 1 м.

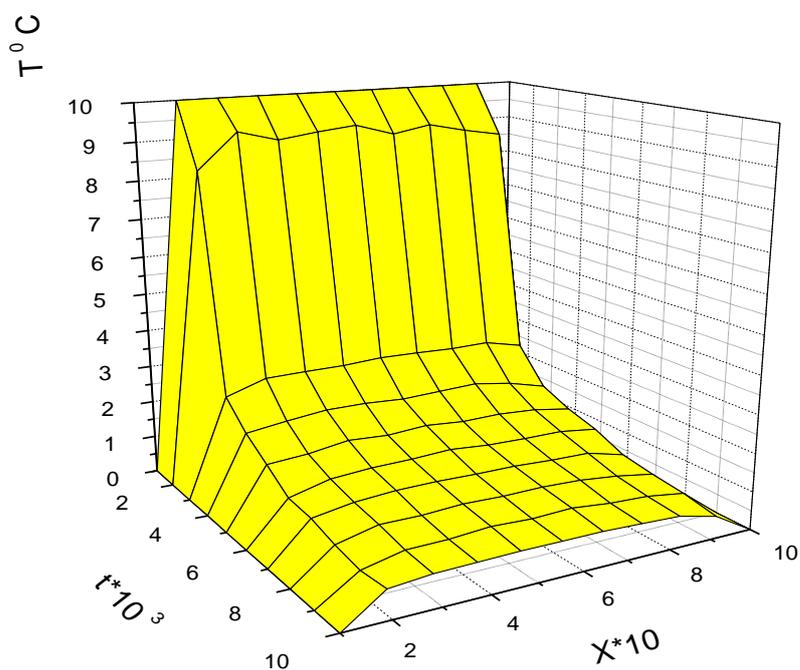


Рис.2.8.

ГЛАВА III. ИМИТАЦИОННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ И ЯВЛЕНИЙ

Общая схема решения задач методом Монте-Карло при имитационном моделировании такова:

1) физическому явлению или описывающим его уравнениям сопоставляется аналогичный им (иногда совершенно непохожий) вероятностный процесс, который называется имитирующим или симулирующим. Создание вероятностной модели, применение метода Монте-Карло для «имитации» и его решение на ЭВМ для определения характеристик и параметров исследуемого реального явления называют имитационным моделированием;

2) искомым величинам реального явления или процесса сопоставляются математические ожидания случайных величин вероятностного процесса;

3) решения задачи в методе Монте-Карло ищутся в виде статистических сумм, в отличие от аналитических методов, где решение ищется в виде ряда по собственным функциям. Для этого на основе генератора случайных чисел или выбранного алгоритма получения псевдослучайных чисел производится розыгрыш реализаций случайных величин имитирующих процесс или явление. Решение ищется в виде средних значений, соответствующих математическим ожиданиям определяемой величины.

3.1. Имитационное моделирование задач нейтронной физики

Одна из основных областей применения метода статистических испытаний (Монте-Карло) в физике – это задачи, возникающие в физике элементарных частиц и нейтронной физике. Историю каждой вновь появившейся частицы можно проследить точно таким же образом. В результате в области G получается ветвящаяся траектория, которую иногда называют *деревом*. На рис. 3.1 построено генеалогическое дерево для распада ядра урана (обозначения: U – ядро урана, γ - квант, n — фотон, α -частица, e^- — электрон, e^+ — позитрон). Деревья могут оказаться бесконечными. На практике, однако, подсчитывают только конечное число ветвей. Где заканчивается дерево — обычно ясно из условий задачи.

Возвращаясь к исходному потоку, выберем достаточно большое число частиц так, чтобы они давали хорошее представление о части, попадающей в область G . Для каждой из частиц построим дерево. По этой совокупности деревьев можно приближенно определить все интересующие нас характеристики: количество частиц того или иного вида в разные моменты времени, количество тех или иных взаимодействий, распределение частиц по энергиям и в пространстве, количество выделенной энергии и т. д.

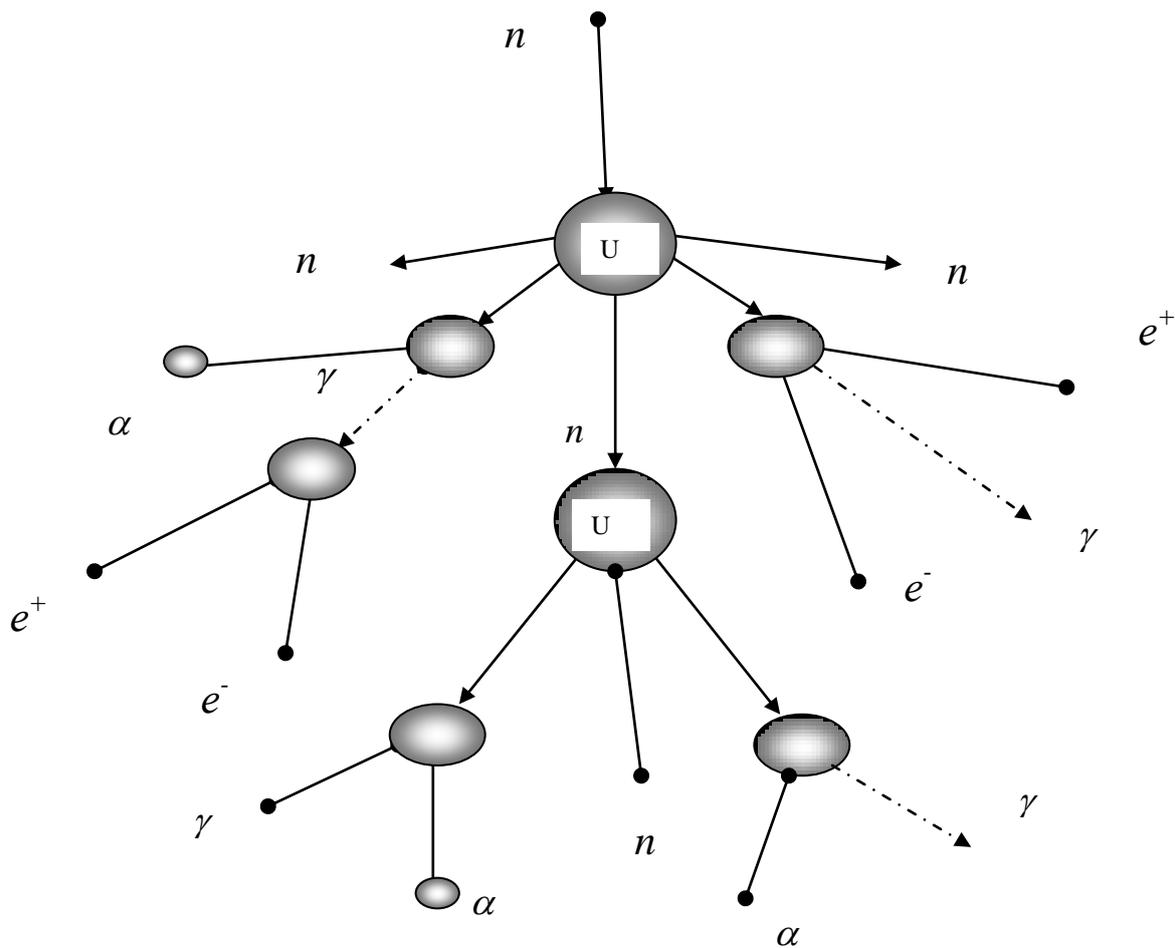


Рис.3.1

3.1.1. Задача имитационного моделирования прохождения нейтронов через пластинку

Постановка задачи. Рассмотрим задачу прохождения однородного потока нейтронов через плоскую пластинку. Предположим, что пластинка однородна, имеет ширину H , не содержит делящихся веществ и ее полное сечение состоит из сечения рассеяния, сечения поглощения (захвата) и сечения деления. Задачи такого типа очень часто встречаются на практике, в частности при расчете защиты от излучений реактора.

Основная схема имитационного моделирования. Суть метода решения задачи прохождения нейтрона через пластинку состоит в следующем: разыгрывается так называемая "история" одного нейтрона, которая включает в себя следующие факторы (процессы):

- 1) розыгрыш сорта ядра (для сложных веществ);
- 2) моделирование вида взаимодействия;
- 3) моделирование направления движения нейтрона после рассеяния, поглощения или после деления;
- 4) моделирование свободного пробега;

- 5) если нейтрон остается в пластине, то к пункту 1, если вылетает за пределы, то к пункту 6;
- 6) конец "истории".

Законы распределения этих факторов (процессов) известны (или из теории или из эксперимента). Тогда, разыграв случайные факторы, мы можем рассчитать конкретную случайную реализацию реального процесса или явления. Далее величины усредняются по многим "историям".

Например, для приведенной задачи нас интересует количество отраженных, прошедших и захваченных нейтронов в веществе. Решая задачу для различных веществ, мы можем найти материалы, необходимые для создания защиты реакторов, для создания замедлителей (поглотителей) нейтронов.

Моделирование реального явления по вышеприведенной технологии называют имитацией. Компьютерное исследование реального явления или процесса с помощью использования имитации называется имитационно-вероятностным моделированием.

В физике элементарных частиц многие задачи решаются с помощью вероятностно-имитационного моделирования. Здесь мы привели примерную схему применения метода Монте-Карло для задачи прохождения нейтрона через пластину. Более подробное рассмотрение, в частности, для приведенной задачи, требует учета элементарных (микроскопических) законов, характерных для задач конкретного типа, в которых требуется определить количество проходящих нейтронов, их спектральный состав, отражательную способность пластинки (альбедо), спектральный состав поглощенного излучения и др.

3.1.2. Моделирование сорта ядра и вида взаимодействия нейтрона с ядром

Постановка задачи. Если в области G содержится сложное вещество, то можно разыграть, с ядром какого из них произошло столкновение нейтрона: вероятности столкновения, очевидно, пропорциональны количествам различных ядер. При столкновении частица может перестать существовать (поглотиться); может рассеяться (т. е. получить новое направление и новую энергию). Если частица — нейтрон, то при столкновении с ядром делящегося вещества она может вызвать распад ядра и появление нескольких новых нейтронов; если частица — фотон, то она может привести к образованию пары электрон—позитрон или к появлению свободного электрона (фотоэффект) и т. д. Вероятности различных взаимодействий частиц данного вида с атомами известны. Они характеризуются так называемыми *сечениями взаимодействий* или *парциальными сечениями*.

В нейтронной физике взаимодействие ядер с нейтронами принято описывать при помощи эффективных сечений. Пусть на плоский одноатомный слой вещества (площадью 1 см^2) по нормали к нему падает однородный поток нейтронов. Обозначим через n число атомов в слое (в 1 см^2). Если доля нейтро-

нов, принимающих участие в некотором взаимодействии, равна d , то *эффективное поперечное сечение* ядра по отношению к данному взаимодействию равно

σ_s — сечение рассеяния (scattering), которое подразделяется на следующие виды:

σ_{se} — сечение упругого рассеяния (elastic scattering);

σ_{si} — сечение неупругого рассеяния (inelastic scattering);

σ_c — сечение захвата (capture), которая подразделяется на:

$\sigma_{i\gamma}$ — сечение радиационного захвата, т.е. с испусканием гамма-квантов,

$\sigma_{i\alpha}$ — сечение захвата по отношению к какой-либо ядерной реакции (например α -распад),

σ_f — сечение деления (fission);

σ_a — сечение поглощения (absorption) или σ_{ac} — сечение активации, т.е. захвата нейтрона с созданием радиоактивного ядра.

σ_t — полное сечение (total),

Отметим, что нейтронные, эффективные сечения могут зависеть от энергии существенным образом.

Поперечные сечения σ измеряются в барнах: $1 \text{ барн} = 10^{-24} \text{ см}^2$

Кроме эффективных поперечных сечения ядер σ , называемые иногда микроскопическими сечениями по отношению к различным взаимодействиям с нейтронами, определяют и макроскопические поперечные сечения Σ .

Макроскопическими поперечными сечениями называются произведения плотности вещества на микросечение одного типа взаимодействия

$$\Sigma = n\sigma, \quad (3.1)$$

здесь n — ядерная концентрация вещества, т. е. количество ядер в 1 см^3 , поэтому размерность макроскопического сечения измеряется в обратных сантиметрах (см^{-1}). Полное макроскопическое сечение можно определить как

$$\Sigma_t = \sum_{i=1}^n n_i \sigma_i(E). \quad (3.2)$$

В случае смеси m веществ имеем

$$\Sigma = \Sigma_{(t1)} + \Sigma_{(t2)} + \dots + \Sigma_{(tm)} = \sum_{j=1}^m \sum_{i=1}^n n_{ij} \sigma_{ij}. \quad (3.3)$$

Отношения различных поперечных сечений к полному сечению характеризуют вероятности различных взаимодействий при столкновении нейтрона с яд-

ром вещества. Они используются для розыгрыша типа взаимодействия, когда моделируется история нейтрона.

Если для одного типа атомов полное поперечное сечение равно

$$\sigma_t = \sigma_s + \sigma_c + \sigma_f + \dots = \sum_{i=1}^n \sigma_i . \quad (3.4)$$

То вероятности отдельных типов взаимодействий определяются как

$$P_s = \frac{\sigma_s}{\sigma_t} - \text{вероятность рассеяния,}$$

$$P_\alpha = \frac{\sigma_\alpha}{\sigma_t} - \text{вероятность поглощения,}$$

$$P_f = \frac{\sigma_f}{\sigma_t} - \text{вероятность деления ядер,}$$

и т.д.

Тип взаимодействия и сорт ядра при данном столкновении также можно разыграть.

Схема розыгрыша типа взаимодействия. Для иллюстрации алгоритма моделирования рассмотрим следующий пример. Пусть происходит столкновение нейтрона с веществом одного сорта ядер (бериллий) и реализуются три вида взаимодействий: упругое рассеяние, захват и деление. Полное микросечение данных процессов можно записать в виде

$$\sigma_t = \sigma_s + \sigma_\alpha + \sigma_f .$$

Вероятность того, что один из этих процессов реализуется, равна единице.

$$p = \frac{\sigma_s}{\sigma_t} + \frac{\sigma_\alpha}{\sigma_t} + \frac{\sigma_f}{\sigma_t} = 1 .$$

Возьмем интервал $[0, 1]$ (рис.3.2), отложим на нем эти вероятности



Рис.3.2

Тип взаимодействия нейтрона с ядром зависит от энергии нейтрона. Возможные типы взаимодействий можно найти методом статистических испытаний. Чтобы разыграть тип взаимодействия, определяем, в который из трех интервалов оно попало. Если

$$\gamma < \frac{\sigma_s}{\sigma_t} ,$$

то имеет место рассеяние;

если

$$\frac{\sigma_s}{\sigma_t} < \gamma < \frac{\sigma_\alpha + \sigma_f}{\sigma_t},$$

то имеет место захват; если

$$\frac{\sigma_\alpha + \sigma_f}{\sigma_t} < \gamma < 1,$$

то имеет место деление.

Схема розыгрыша сорта ядра. Вероятность столкновения нейтрона с i – сортом ядра равна

$$P_i = \frac{\sum_{j=1} n_j \sigma_j}{\sum_{j=1} \sum_{k=1} n_{jk} \sigma_{jk}}. \quad (3.5)$$

Если вещество состоит из молекул с весом A , в состав которой входят N_i атомов с ядрами i – сорта, то макросечения определяются из формулы

$$\Sigma_i = n_i \sigma_i = \frac{\rho \cdot 6 \cdot 10^{23}}{A} \cdot N_i \cdot \sigma_i, \quad (3.6)$$

здесь ρ – плотность вещества в г/см⁻³, σ_i – в барнах (1 барн = 10⁻²⁴ см²), A – массовое число. Рассмотрим пример, для воды $N_1 = 2$, $N_2 = 1$.

Плотность воды $\rho = 1$ г·см⁻³, $A = 18$. Для водорода $\sigma_{11} = 6.24$ (упругое рассеяние), $\sigma_{12} = 0.33$ (захват), для кислорода $\sigma_{21} = 4.8$ (упругое рассеяние), $\sigma_{22} = 0$ (захват). Так как $\Sigma_{11} = 0.426$ см², $\Sigma_{12} = 0.22$ см², то $\sum_j n_j \sigma_j = 0.648$ для водорода, аналогично для кислорода $\Sigma_{21} = 0.16$ см², $\Sigma_{22} =$

0.0 см², $\sum_j n_j \sigma_j = 0.16$. Общая сумма $\sum_{j=1} \sum_{k=1} n_{jk} \sigma_{jk} = 0.808$. Согласно (3.5)

имеем, что $p_1 = 0.802$, $p_2 = 0.198$

Розыгрыш сорта ядра ничем не отличается от розыгрыша типа взаимодействия и определяется по формуле

$$i = \min i' \quad \text{и} \quad \beta < \sum_{k=1}^{i'} P_k. \quad (3.7)$$

Задания на моделирование:

1. Составить алгоритм и программу розыгрыша сорта ядра, вида взаимодействия для нейтронов от полониево-бериллиевого источника, замедляющихся в природном порошке борной кислоты. Плотность порошка принять равной $\rho = 1.7$ г·см⁻³. Формула борной кислоты HBO_2 .
2. Составить программу для разыгрывания вида взаимодействия нейтрона с ядром бериллия в зависимости от параметров микросечения.

3. Провести моделирование, т.е найти вероятности данного типа взаимодействия для 1000, 10000 испытаний.
4. Результаты моделирования представить в виде гистограммы.

3.1.3. Решение задачи розыгрыша типа взаимодействия и сорта ядра имитационным моделированием

Здесь мы даем технологию вычисления параметров задачи параграфа 3.1.2 методом Монте-Карло. Читатель, уяснив данную технологию, может использовать её в других задачах по методу аналогий.

Постановка задачи. Задача моделирования состоит в определении микро- и макросечений сорта ядра и видов взаимодействия для борной кислоты.

Формула борной кислоты HBO_2 . Борная кислота состоит из ядер трех сортов: водорода, бора и кислорода. Тип взаимодействия с каждым сортом ядра в большей степени зависит от энергии нейтронов. Энергия нейтронов полониево-бериллиевого источника доходит до 11 Мэв, для расчетов выберем интервал энергий в пределах от 0,0 – до 11 Мэв.

При имитационном моделировании удобнее всего создавать подпрограммы, которые затем можно использовать в основной программе, поэтому рассмотрим алгоритмы вычисления микро- макросечений, сорта ядра, типа взаимодействий и длины свободного пробега, используя данные из работ [19].

1. Вычисление микросечений водорода

Сечение водорода в данном интервале состоит из упругого рассеяния и захвата при тепловых энергиях. Эффективное сечение взаимодействия нейтрона с водородом вычисляются

$$\sigma_{11} = 1,3 \left(\frac{3}{0,5E + 1,49} + \frac{1}{0,5E + 0,073} \right)$$

$$\sigma_{12} = 0$$

Если $E > E_{\text{теш}}$, то $\sigma_{13} = 0$, иначе $\sigma_{13} = 0,33$.

2. Вычисление микросечений кислорода

Сечение кислорода состоит из упругого, неупругого взаимодействия, причем эти сечения значительно зависят от энергии, вероятность захвата очень слабая.

Упругое рассеяние

Энергия, Мэв	Микросечение, барн
$E < 0,0105$	$\sigma_{21} = 3,8$
$0,0105 < E < 0,0604$	$\sigma_{21} = -0,2525 \cdot 10^{-6} E^4 + 0,2294 \cdot 10^{-4} E^3 - 0,2209 \cdot 10^{-4} E^2 - 0,2332 \cdot 10^{-1} E + 4,0349$
$0,0604 < E < 0,2$	$\sigma_{21} = 3,5$
$0,2 < E < 0,6$	$\sigma_{21} = 4,8$

$0,6 < E < 1,3$	$\sigma_{21} = 4,1$
$1,3 < E < 2,74$	$\sigma_{21} = 1,55$
$2,74 < E < 4,2$	$\sigma_{21} = 2,15$
$4,2 < E$	$\sigma_{21} = 2,061 - 0,1017E$

Неупругое $\sigma_{22} = 0,16$ барн, если $E > 6$ МэВ

$\sigma_{22} = 0$, если $E < 6$ МэВ

Захват $\sigma_{23} = 0$

3. Вычисление микросечений бора

Для сечения бора, кроме упругого рассеяния, которое падает от тепловых энергий в сторону возрастания энергии по закону $\frac{1}{\sqrt{E}}$, существенен захват.

Взаимодействие	Микросечение, барн	Энергия, МэВ
Упругое	$\sigma_{31} = 4$,	если $E < 10^{-2}$
	$\sigma_{31} = 4 - 2,2E$	если $10^{-2} < E < 1$
	$\sigma_{31} = 1,8$,	если $E > 1$
неупругое	$\sigma_{32} = 0$	
Захват	$\sigma_{33} = \frac{0,113}{\sqrt{E}}$	

4. Вычисление полного микросечения

Расчет полного микросечения молекулы НВО₂ проводится по формуле

$$\sigma = \sum_{m=1}^3 (\sigma_{1m} + 2\sigma_{2m} + \sigma_{3m}). \quad (3.8)$$

5. Розыгрыш сорта ядра

Для нашей задачи существуют возможность попадания нейтрона на одну из четырех ядер молекулы НВО₂ и реализации трех типов взаимодействия. Введем индексы сорта ядра $i = 1$ (Н), 2 (О), 3 (В) и типа взаимодействий $m = 1$ (упругое рассеяние), 2 (неупругое рассеяние), 3 (захват).

Рассмотрим вероятность попадания в определенный сорт ядра. Она определяется как

$$p_1 = \frac{\sum_{m=1}^3 \sigma_{1m}}{\sigma}, \quad p_2 = \frac{\sum_{m=1}^3 2\sigma_{2m}}{\sigma}, \quad p_3 = \frac{\sum_{m=1}^3 \sigma_{3m}}{\sigma}.$$

Вычисление сорта ядра проводится по схеме розыгрыша типа взаимодействий (рис.3.3). Розыгрыш сорта ядра проводится по следующему алгоритму.

Находится случайное число γ_3 и проводится сравнение.

Если $\gamma_3 < p_1$, то сорт $i = 1$ (водород).

Если $p_1 < \gamma_3 < p_1 + p_2$, то сорт $i = 2$ (кислород).

Если $\gamma_3 > p_1 + p_2$, то сорт $i = 3$ (бор).

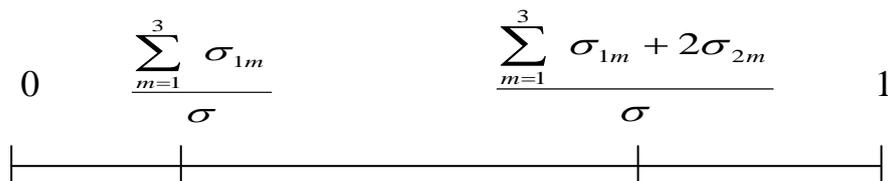


Рис.3.3

6. Розыгрыш типа взаимодействия

Вероятности типа взаимодействия определяется как

$$p_1 = \frac{\sigma_{i1}}{\sum_{m=1}^3 \sigma_{im}}, \quad p_2 = \frac{\sigma_{i2}}{\sum_{m=1}^3 \sigma_{im}}, \quad p_3 = \frac{\sigma_{i3}}{\sum_{m=1}^3 \sigma_{im}}.$$

Возьмем интервал $[0, 1]$, отложим на нем эти вероятности



Рис.3.4

Схема розыгрыша типа взаимодействий также определяется следующим образом, находится случайное число γ_1 и проводится сравнение.

Если $\gamma_3 < p_1$, то тип $m = 1$ (упругое).

Если $p_1 < \gamma_3 < p_1 + p_2$, то тип $m = 2$ (неупругое).

Если $p_1 + p_2 < \gamma_3$, то тип $m = 3$ (захват).

7. Определение полного макросечения

Значение полного макросечения находится из формулы (3.4), где N – полное число молекул борной кислоты в единице объема, которая вычисляется по формуле (3.6).

3.1.4. Определение направления и энергии частиц после рассеяния

Постановка задачи. После взаимодействия происходит изменение направления движения и энергии частицы. Задача состоит в разработке имитационной модели изменения направления и энергии частицы.

Создание имитационной модели. Рассмотрим упругое рассеяние нейтрона ядром с массовым числом A . Такое рассеяние определяется двумя случайными величинами, в качестве которых удобно выбрать угол рассеяния θ в системе

координат, связанной с центром масс пары нейтрон — ядро, и азимутальный угол рассеяния χ :

$$0 \leq \theta \leq \pi, \quad 0 \leq \chi \leq 2\pi.$$

Используя законы сохранения импульса и энергии, нетрудно вычислить

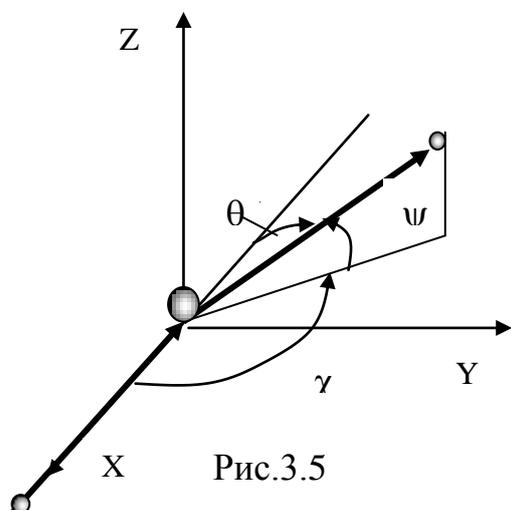


Рис.3.5

угол ψ , на который отклоняется нейтрон от своего первоначального движения, и энергию E' , которую он сохраняет:

$$\cos \psi = \frac{A \cos \theta + 1}{\sqrt{A^2 + 2A \cos \theta + 1}};$$

$$\text{A) } \frac{E'}{E} = \frac{A^2 + 2A \cos \theta + 1}{(A + 1)^2} \quad (3.9)$$

Обычно рассеяние нейтрона предполагается изотропным в системе центра масс:

$\cos(\psi)$ распределен равномерно в интервале $(-1, +1)$, а угол χ распределен равномерно в

интервале $(0, 2\pi)$. При этом в лабораторной системе координат x, y, z (рис. 3.5) различные направления рассеяния не равновероятны. Из формулы (3.9) видно, что энергия E' оказывается равномерно распределенной в интервале

$$\left(\frac{A - 1}{A + 1} \right)^2 E \leq E' \leq E. \quad (3.10)$$

Правило розыгрыша упругого рассеяния, изотропного в системе центра масс, состоит в следующем: находим два случайных числа γ_1, γ_2 и полагаем $\cos \theta = 2\gamma_1 - 1, \chi = 2\pi\gamma_2$, затем по формулам (3.14) и (3.15) находим $\cos \psi, E'$.

Б) В случае анизотропного рассеяния формулы (3.9) и (3.10) сохраняют свою силу. Азимутальный угол χ по-прежнему предполагается равномерно распределенным на интервале $(0, 2\pi)$. Однако плотность распределения $\mu = \cos \theta$ оказывается непостоянной: она пропорциональна дифференциальному сечению упругого рассеяния в системе центра масс, зависящему от угла $\sigma_e(\theta)$. Формула для розыгрыша величины $\mu = \cos \theta$ имеет вид

$$2\pi \int_{-1}^{\mu} \sigma_e(\theta) d\mu = \gamma \sigma_{se}. \quad (3.11)$$

Если известно явное выражение для функции $\sigma_e(\theta)$, то решая уравнение (3.11), мы найдем формулу, по которой будем определять значение $\mu = \cos \theta$.

В) В случае упругого рассеяния на тяжелых ядрах для значений $A \gg 1$ из формул (3.9) и (3.10) получаем, что

$$E' \approx E, \quad \cos \psi \approx \cos \theta.$$

Эксперименты показывают, что для большинства тяжелых ядер происходит анизотропное рассеивание нейтронов: соответствующие дифференциальные сечения $\sigma_e(\psi) \neq \text{const}$. Эти сечения и надо использовать для розыгрыша направления, полагая при этом $E' \sim E$. Однако во многих расчетах эффектом анизотропности рассеяния на тяжелых ядрах пренебрегают. Тогда это рассеяние оказывается изотропным в лабораторной системе координат, и для розыгрыша направления можно использовать формулы § 1.1.4. п.5.

3.1.5. Моделирование длины свободного пробега

Постановка задачи. Пусть в интересующую нас область вещества, например, в Ве (бериллий) попадает поток нейтронов. Задача моделирования заключается в вычислении средней длины свободного пробега нейтронов методом статистических испытаний.

Имитационная модель. Рассмотрим *метод «истории»* одной частицы. Длина полного свободного пробега нейтрона — случайная величина. Закон ее распределения записывается как

$$F \{l < x\} = 1 - \exp\left(-\int_0^x \Sigma_t ds\right), \quad (3.12)$$

где s — расстояние (от предыдущего столкновения) по направлению движения нейтрона. Плотность распределения вероятности равна

$$f_l(x) = \frac{dF(x)}{dx} = \Sigma_t \exp\left(-\int_0^x \Sigma_t ds\right). \quad (3.13)$$

Рассмотрим однородную среду, т.е. случай, когда Σ_t не зависит от s . Тогда длина свободного пробега λ в однородной среде определяется через случайную величину γ , имеющую плотности распределения вероятности

$$f(\lambda) = \Sigma e^{-\Sigma \cdot \lambda}, \quad (3.14)$$

здесь Σ - макросечение однородных ядер. Метод обратных функций позволяет записать формулу для моделирования длины свободного пробега

$$\lambda = -\frac{1}{\Sigma} \ln \frac{f(\lambda)}{\Sigma} = -\frac{1}{\Sigma} \ln \gamma, \quad (3.15)$$

где γ - эталонная случайная величина, лежащая в интервале $[0, 1]$. Математическое ожидание или средняя длина пробега в однородной среде.

$$\bar{\lambda} = M(\lambda) = \frac{1}{\Sigma}.$$

Часто в качестве единичной длины используют среднюю длину $\bar{\lambda}$ свободного пробега и представляют в виде $\lambda/\bar{\lambda} = -\ln \gamma$.

Метод статистических весов. Если пробег нейтрона разыгрывается внутри однородной конечной области, а возможность вылета учитывается путем изменения веса нейтрона, то формула (3.15) заменяется формулой

$$\lambda = -\frac{1}{\Sigma_t} \ln(1 - \gamma'). \quad (3.16)$$

Новый вес нейтрона равен

$$\gamma' = \gamma(1 - \exp(-x * \Sigma_t)), \quad (3.17)$$

где x — расстояние до границы области по направлению полета нейтрона.

Задания на моделирование:

1. Составить программу для определения длины свободного пробега нейтрона в бериллии. Микроскопическое сечение бериллия $\sigma_t = 6$ барн (при температуре 300° К для энергий от 0,1 до 10^4 eV). Чтобы определить число атомов Be в 1 см^3 , умножаем его плотность $1,84 \text{ г/см}^3$ на число Авогадро $6,02 \cdot 10^{23}$ и делим на массовое число $A = 9$, тогда концентрация Be равна $n = 1,23 \cdot 10^{23} \text{ см}^{-3}$. Вычислим макроскопическое сечение $\Sigma_t = n\sigma_t = 0,74 \text{ см}^{-1}$ и среднюю длину свободного пробега нейтронов в веществе бериллия $\bar{\lambda} = 1,3 \text{ см}$.
2. Провести моделирование длины свободного пробега нейтрона от реальных параметров среды, считая, что распределение длин свободного пробега подчиняется: 1) равномерному распределению; 2) нормальному распределению.
3. Провести моделирование длины свободного пробега нейтрона в порошке борной кислоты (плотность HBO_2 принять равной $\rho = 1,7 \text{ г}\cdot\text{см}^{-3}$), воде H_2O ($\rho = 1 \text{ г}\cdot\text{см}^{-3}$) и провести сравнение.

3.1.6. Имитационное моделирование траектории движения нейтронов через пластинку (двухмерный случай)

Рассмотрим траекторию движения нейтрона в пластинке, считая, что оно движется в некоторой плоскости. Выберем ось Qz перпендикулярно к плоскости пластинки. Пусть поток нейтронов падает на плоскость пластины нормально из области $z < 0$. Начальную координату Z_0 падающего нейтрона зададим равной нулю. Энергия нейтронов в начальный момент зависит от свойств падающего потока и может быть задана по-разному:

- а) значение $E_0 = \text{const}$ задано в виде моноэнергетического потока;
- б) значение энергии разыгрывается по случайному закону $E_i = \gamma_i$;

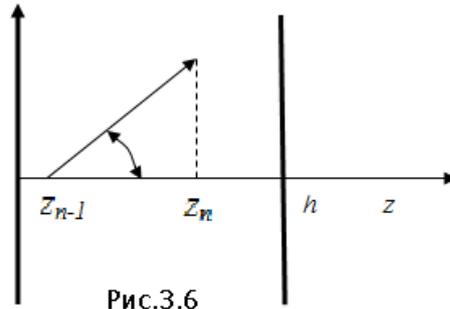


Рис.3.6

в) энергетический спектр $n(E)$ падающего потока распределено по какому-то закону, в частности по нормальному закону. Тогда значение E_i разыгрывается по формуле

$$E_i = \frac{E_0}{\sqrt{2\pi\sigma}} e^{-\frac{(\gamma_i - E_0)^2}{2\sigma^2}} \quad (3.18)$$

Здесь E_0 – наивероятнейшее значение энергии потока нейтронов, σ – дисперсия энергии нейтронов. Таким образом, состояние нейтрона характеризуется всего тремя величинами: координатой z , энергией E и направлением полета. Таким образом, эти величины можем определить по нижеописанному алгоритму.

1. **Моделирование координаты** столкновения ($n = 1, 2, \dots$)

$$z_n = z_{n-1} - \frac{\mu_{n-1} \ln \gamma}{\Sigma_t} \quad (3.19)$$

Здесь $\mu_n = \cos \theta_n$, а макросечение Σ_t является функцией от энергии E_{n-1} .

Проверяем выполнение условий:

1) не пролетел ли нейтрон сквозь пластинку

$$z_n - h > 0;$$

2) не отразился ли нейтрон обратно

$$z_n < 0.$$

При выполнении каждого из этих двух условий траектория заканчивается (а в соответствующем счетчике делается запись).

3. **Моделирование взаимодействия.** Если $0 \leq z_n \leq h$, то разыгрываем «судьбу» нейтрона при этом столкновении: находим очередное γ и, если $\gamma > \frac{\sigma_c}{\sigma_t}$, то нейтрон считается поглощенным; траектория его заканчивается (и в соответствующем счетчике делается запись об этом).

Если оказалось, что $\gamma < \frac{\sigma_c}{\sigma_t}$, то нейтрон испытывает рассеяние, и нужно

разыграть его направление и энергию.

4. **Моделирование направления и энергии** после упругого рассеяния нейтрона в системе центра масс при изотропном распределении ядер проводится по формулам

$$\cos \theta = 2\gamma_1 - 1,$$

$$E_n = E_{n-1} \frac{A^2 + 2A \cos \theta + 1}{(A+1)^2}. \quad (3.19)$$

5. Задания на моделирование:

- Составить программу для имитации движения нейтронов в плоской пластине из бериллия.
- 2. Промоделировать задачу о прохождении нейтронов через пластинку бериллия; рассеяние считать изотропным в системе центра масс. Толщину пластинки выбрать равную $h = 5$ длин свободного пробега. В качестве переменной вместо энергии E можно выбрать так называемую летаргию $u = \ln(E_0 / E)$. Плотность падающего потока нейтронов считать постоянным.
- 3. Рассчитать отражательную, поглощательную и пропускательную способность бериллия.
- 4. Построить одну из траекторий движения нейтрона.

3.2. Имитационное моделирование прохождения γ -излучения через вещество

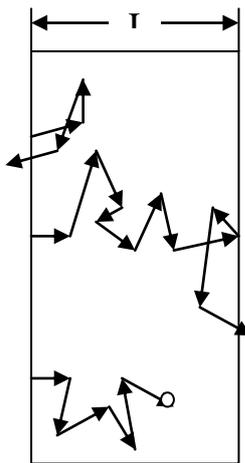


Рис.3.7

1. Постановка задачи. Рассмотрим теперь другую задачу. В качестве процесса выберем задачу прохождения γ -излучения через вещество некоторой протяженности L . Задача состоит в определении поглощательной и отражательной (альбедо) способности пластинки¹⁴ (рис.3.7).

3. Имитационная модель. Взаимодействия γ -кванта со средой будем описывать микро- и макросечениями. Микроскопическое сечение определяет вероятность определенного взаимодействия. Для гамма-квантов известны более 100 видов взаимодействия, но наиболее вероятны четыре.

- 1) образование электронно-позитронных пар (σ_p),

- 2) фотоэффект (σ_F),

¹⁴ Задача из работы [37]

- 3) когерентное рассеяние (σ_K),
- 4) комптоновский эффект (σ_γ).

Каждый квант описывает некоторую траекторию: в 7-мерном фазовом пространстве $\alpha(\vec{r}, \vec{\omega}, E)$. Траектория есть последовательность точек $\alpha(\vec{r}, \vec{\omega}, E)$. Для нашей модели выделим три основных случайных фактора, которые необходимо определить с помощью имитационного моделирования:

- 1) длина свободного пробега,
- 2) вид взаимодействия,
- 3) направления рассеяния.

Определим основные допущения к нашей имитационной модели:

- частицы между собой не взаимодействуют;
- частицы обладают свойством "марковости", т.е. существует зависимость следующего события от предыдущего;
- среда не изменяется.
- угол падения прямой;
- энергия квантов постоянна;
- направление рассеяния изотропно и происходит в двухмерной плоскости.

4. Схема имитационного моделирования. Для простоты рассуждения рассмотрим только два сорта взаимодействия : а) рассеяние (σ_K), б) поглощение (σ_K). Моделируется каждая отдельная частица, для которой разыгрывается "история" одной частицы:

- 1) рождение частицы;
- 2) моделирование свободного пробега;
- 3) моделирование вида взаимодействия:
 - при условии рассеяния;
 - при условии поглощения или вылета за пределы области;
- 4) конец «одной истории»;
- 5) возврат к пункту 1.

По данному алгоритму проводится розыгрыш N историй, затем усреднение по всем историям.

5. Использование весов, заменяющих поглощение. Если вместо истории одной частицы рассматривается пакет из N_0 частиц вдоль одной траектории, то используется метод статистических «весов». Этот метод заключается в следую-

щем: при первом столкновении поглощаются $N_0 \frac{\sigma_c}{\sigma}$ частиц. Количество частиц в пакете при $k + 1$ -ом столкновении уменьшается до $N_{k+1} = N_k \frac{\sigma_s}{\sigma}$, но никогда не заканчивается поглощением. Вместо доли частиц обычно говорят о статистическом "весе" одной частицы N и следят за одной частицей, а затем проводят обобщение на поток частиц.

При решении сложных задач применяются алгоритмы, разным способом использующие статистические веса. Метод Монте-Карло позволяет рассмотреть любую "геометрию задачи".

6. Задания на моделирование:

1. Составить программу для определения длины свободного пробега γ -кванта в бериллии.
2. Провести моделирование длины свободного пробега γ -кванта от реальных параметров среды, считая, что распределение длин свободного пробега подчиняется: 1) равномерному распределению; 2) нормальному распределению.
3. Построить траекторию движения γ -кванта.

7. Результаты моделирования

Ниже (рис.3.8) приведены результаты моделирования движения γ -кванта. Программа для вычислительного эксперимента дана в приложении 3. Для вывода траектории движения использован графический пакет Origin.

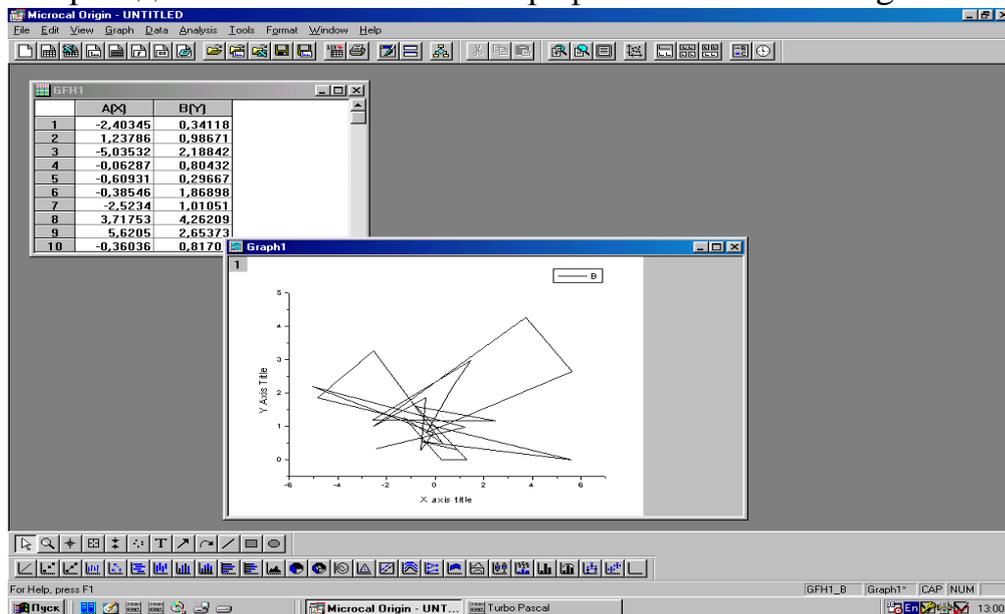


Рис.3.8

3.3. Имитационное моделирование распространения упругих волн в пористых средах (задача геофизики)

Постановка первой задачи. Рассмотрим распространение «акустического кванта» в безграничной среде, где источник гармонических колебаний является

точечным, с известной амплитудой колебаний и частотой.

Модель первая. Моделирование проводится на плоскости, рассекающей пласт вертикально. Данная плоскость условно разбивается на ячейки и представляет собой матрицу $m \times n$ (m - высота, n - длина), которые ограничивают область рассмотрения траекторий «акустического кванта» (рис.3.9).

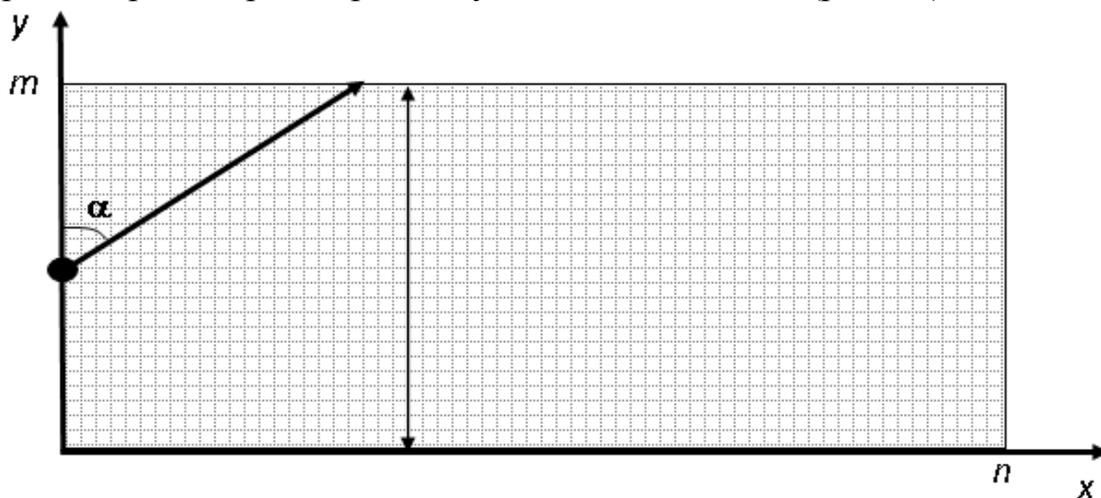


Рис.3.9

«Акустический квант» вылетает из источника гармонических колебаний в случайном направлении. Розыгрыш угла происходит следующим образом

$$\alpha = \pi * \gamma, \quad (3.20)$$

где γ - случайное эталонное число. Далее траектория кванта представляет собой прямую. Так как волна сферическая, то при прохождении «кванта» через каждую клетку находим амплитуду смещения по формуле:

$$A_{i,j} = \frac{A_0}{r_{ij}} \cdot \cos(\omega \cdot t - k \cdot r_{ij}) \cdot \exp(-\beta \cdot r_{ij}) \quad i = 1..n, \quad j = 1..m, \quad (3.21)$$

где $k = \frac{\omega}{c}$ - волновое число, α - коэффициент поглощения, c - скорость волны в среде и r - расстояние от источника до клетки. При вылете «кванта» из рассматриваемой области, переходим на следующий розыгрыш, и так до заданного числа испытаний. После находим амплитуду смещения для каждой клетки:

$$A_{i,j}^* = \frac{A_{i,j}}{N},$$

где N – число испытаний.

А плотность потока энергий будет определяться по формуле:

$$I_{i,j} = \frac{1}{2} \cdot A_{i,j}^2 \cdot \omega^2 \cdot c \cdot \rho. \quad (3.22)$$

Задания на моделирование:

1. Составить программу для определения длины свободного пробега акустического кванта в безграничной среде.
2. Провести моделирование пробега акустического кванта в безграничной среде от реальных параметров среды.

3. Определить распределение энергии акустического кванта в среде.

Результаты моделирования

Будем считать, что скорость волны в насыщенном нефтью пласте $v=2300$ м/с. Значения коэффициента поглощения для некоторых частот приведены в таблице .

№	1	2	3	4	5
ν , Гц	10	50	100	500	1000
α , 1/м	$6.83e-8$	$1.7e-6$	$6.82e-6$	$1.8e-4$	$6.8e-4$

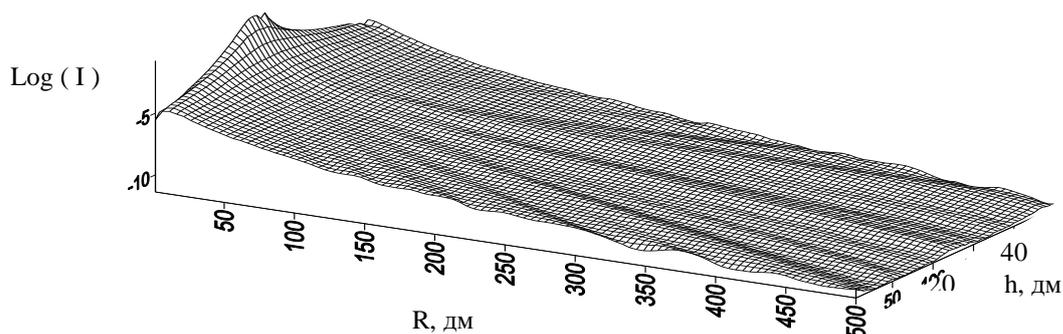


Рис.3.10. Пространственное распределение потока энергий, $\nu=10$ Гц,

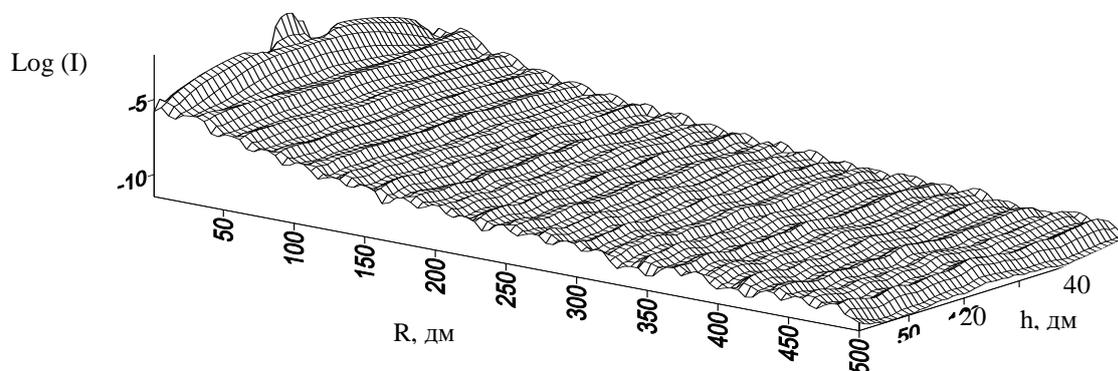


Рис.3.11. Пространственное распределение потока энергий, $\nu=500$ Гц, $A_0=10e-6$
м

Программа для вычислительного эксперимента дана в приложении 4. На рис.3.10-3.11 показаны результаты моделирования.

2. Постановка второй задачи. Рассмотрим теперь распространение «акустического кванта» в безграничной, **насыщенной** пористой среде, где у источника гармонических колебаний известна частота, а распределение начальной амплитуды на границе пласта имеет форму гауссовской функции (нормальное распределение).

$$P(x) = \frac{1}{\delta_x \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(x-m_x)^2}{2\delta_x^2}\right). \quad (3.23)$$

Иначе говоря, рассмотрим задачу, когда источник акустических квантов не точечный.

Модель. Моделирование производится на плоскости, рассекающей пласт вертикально. Данная плоскость условно разбивается на ячейки, и будет представлять собой матрицу $m \times n$ (m - ширина, n - длина), ограничивающую область рассмотрения траекторий «акустического кванта»(рис.3.9) и соответствуют толщине и глубине пласта.

«Акустический квант» вылетает из точки $A(x,y)$ где $x=0$, а $y=1..m$, амплитудой A_0 . A_0 и m разыгрывается по способу Неймана – попадание под «зонтик» (способ отказов). Разыгрывается дискретная, целая случайная величина β_1 в диапазоне от 1 до m , и случайная величина β_2 от 0 до A_0 . Проверяется выполнение неравенства

$$P(\beta_1) > \beta_2,$$

где $P(\beta_1) = \frac{A_0 \cdot 275}{\delta_x \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{((\beta_1 - m_x) \cdot d)^2}{2\delta_x^2}\right)$ - нормированная для нашего случая функция Гаусса (Рис.3.12).

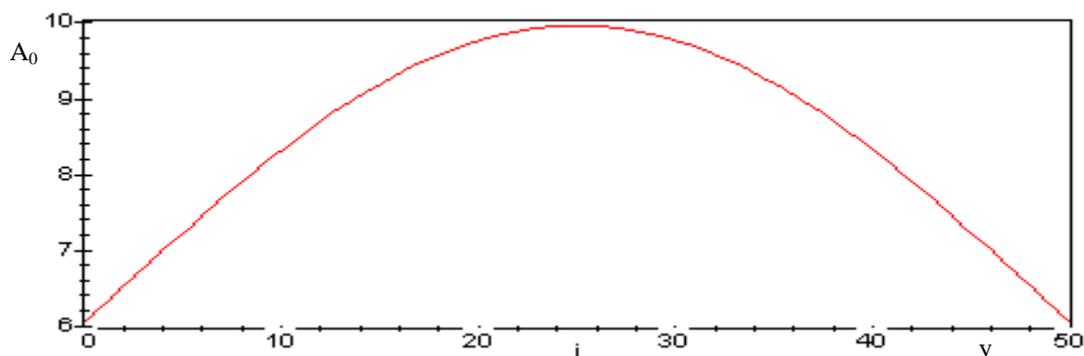


Рис. 3.12. Вид плотности распределения акустических квантов на границе пласта (функция Гаусса при $\delta_x=7$, $d=\delta_x/(m/2)$, $A_0=10$ мкм)

При невыполнения неравенства заново разыгрываются β_1 и β_2 , если иначе то $y = \beta_1$, а $A_0 = \beta_2$.

Розыгрыш угла происходит следующим образом:

$$\alpha = \pi * \beta \tag{3.24}$$

где β - случайное число от 0 до 1.

Далее траектория кванта представляет собой прямую. Так как волна сферическая, то при прохождении «кванта» через каждую клетку находим амплитуду смещения по формуле:

$$A_{i,j} = \frac{A_0}{r} \cdot \cos(\omega \cdot t - k \cdot r) \cdot \exp(-\alpha \cdot r) \quad i = 1..n, \quad j = 1..m, \tag{3.25}$$

где $k = \frac{\omega}{v}$ - волновое число, α - коэффициент поглощения, c - скорость волны в среде и r - расстояние от источника до клетки. При вылете «кванта» из рассматриваемой области, переходим на следующий розыгрыш, и так до заданного числа испытаний. После находим амплитуду смещения для каждой клетки следующим образом:

$$A_{i,j}^* = A_{i,j} / N, \text{ где } N - \text{число испытаний.}$$

А плотность потока энергий будет определяться по формуле:

$$I_{i,j} = \frac{1}{2} \cdot A_{i,j}^2 \cdot \omega^2 \cdot c \cdot \rho.$$

Задания на моделирование:

1. Составить программу для определения длины свободного пробега акустического кванта в насыщенной пористой среде.
2. Провести моделирование пробега акустического кванта в безграничной среде от реальных параметров среды.
3. Определить распределение энергии акустического кванта в среде.

Результаты моделирования. После проведенных расчетов данные выводятся на внешний файл. Входные данные: скорость волны в насыщенной нефти пласте $\theta=2300$ м/с, а значения коэффициента поглощения для некоторых частот приведены в таблице:

№	1	2	3	4	5
ν , Гц	10	50	100	500	1000
α , 1/м	6.83e-8	1.7e-6	6.82e-6	1.8e-4	6.8e-4

Результаты моделирования. На рисунках показаны пространственное распределение потока энергий.

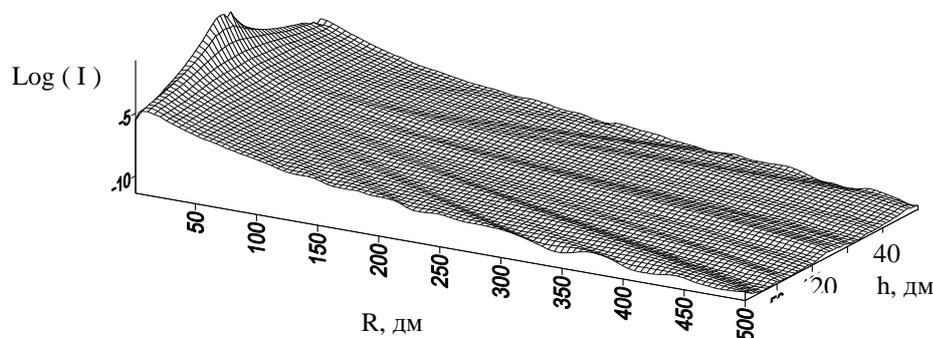


Рис.3.13. Пространственное распределение потока энергий, $\nu=10$ Гц, $A_0=10e-6$ м

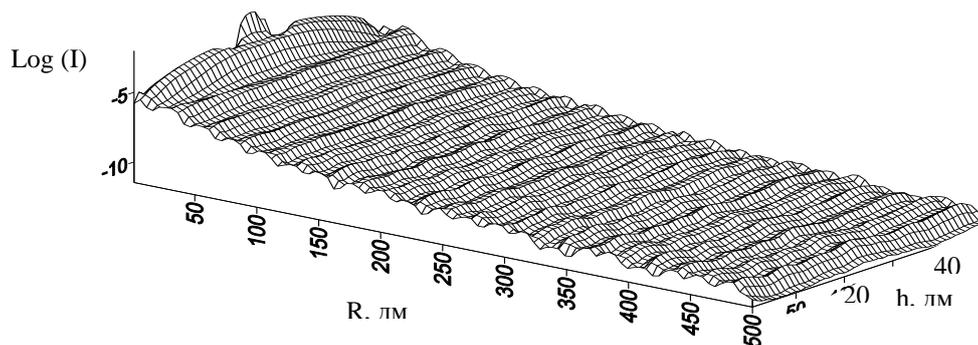


Рис.3.14. Пространственное распределение потока энергий,
 $\nu=500$ Гц, $A_0=10e-6$ м

3.4. Имитационное моделирование явления спонтанного излучения атомов

1. Постановка задачи. Рассмотрим систему невзаимодействующих атомных частиц, в которой безызлучательные переходы можно не принимать во внимание. Система характеризуется набором дискретных энергетических состояний, среди которых нас будут интересовать лишь состояния 1 и 2 (рис.3.15). Кратность вырождения состояния /статистические веса/ обозначим g_1 и g_2 . При отсутствии вырождения уровней

$$E_2 \quad B_{21}\rho_\nu \quad A_{21} \frac{3}{2} \quad B_{12}\rho_\nu \quad N_2$$

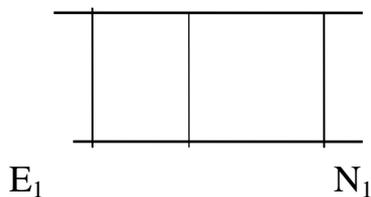


Рис.3.15

$$h\nu = E_2 - E_1 \quad g_1 = g_2 = 1.$$

В дальнейшем будем считать, что уровни не вырождены. В случае термодинамического равновесия соотношение между заселенностями N_2 и N_1 уровней электронами определяется распределением Больцмана:

$$\frac{N_2}{N_1} = \exp\left(-\frac{E_2 - E_1}{kT}\right), \quad (3.26)$$

где N_2 - число атомов, находящихся в возбужденном состоянии, N_1 - невозбужденном состоянии. Равновесное состояние среды с собственным излучением поддерживается благодаря протеканию трех процессов в этой среде:

- 1) спонтанного излучения,
- 2) резонансного поглощения,
- 3) индуцированного или вынужденного излучения.

Рассмотрим явление **спонтанного излучения**, оно связано с самопроизвольным переходом атома из возбужденного уровня с излучением света с частотой

$\nu_{21} = \frac{E_2 - E_1}{h}$. Процесс спонтанного перехода атома из возбужденного состояния – есть процесс случайный. Вероятность спонтанных переходов за время dt :

$$\frac{dW_{21}}{dt} = A_{21},$$

здесь A_{21} – некоторая константа, не зависящая от времени. Величина, обратная A_{21} называется спонтанным временем жизни для перехода $2 \rightarrow 1$,

т.е. $\tau_{sp} = \frac{1}{A_{21}}$. Значение A_{21} для переходов в оптическом диапазоне может

изменяться от 10^{-8} с^{-1} для разрешенных, до $\sim 1 \text{ с}^{-1}$ для запрещенных переходов.

Математическая модель спонтанного распада возбужденных атомов может быть записана в виде:

$$\frac{dN_2}{dt} = -A_{21}N_2, \quad (3.27)$$

Уравнение (3.27) имеет решение:

$$N_2 = N_{02} e^{-A_{21}t}, \quad (3.28)$$

где N_{02} - начальное число атомов (при $t=0$) в состоянии 2.

2. Построение модели. Математическая модель (3.27) описывает спонтанное излучение множества возбужденных атомов. Однако при таком описании теряется «судьба» каждого отдельного атома, кроме того, оно справедливо, если атомов много. Существует другой способ описания случайных процессов.

Вероятность события W_{21}^s дожить атому до момента t и вероятность распада W_{21}^s именно в момент времени t можно определить как

$$\begin{aligned} W_{21}^s(t) &= e^{-A_{21}t}, \\ W_{21}^s'(t) &= \frac{dW_{21}^s(t)}{dt} = A_{21}e^{-A_{21}t}. \end{aligned} \quad (3.29)$$

Если имеется в начальный момент N_{02} атомов, то до момента t распадается примерно $N_{02}(1 - e^{-A_{21}t})$ атомов, после этого момента $N_{02}e^{-A_{21}t}$, причем, чем больше атомов, тем точнее будут выполняться приведенные выше соотношения.

Например, если имеется 100 атомов, то они распадутся в некоторые моменты времени $t_1, t_2, t_3, \dots, t_{100}$, точно предсказать которые невозможно. Убыль атомов будет описываться ступенчатым графиком. Если возьмём другие 100 атомов, то они распадутся в другие моменты времени $t'_1, t'_2, t'_3, \dots, t'_{100}$, и мы получим другой ступенчатый график. Чем больше число частиц, тем ближе будут эти ступенчатые графики к кривой, рассчитанной по решению уравнения. На ЭВМ моделируется не решение уравнения (3.27), а вероятностный процесс, эквивалентный реальному процессу распада на опыте, т.е. мы здесь используем метод имитационного моделирования. Причем возможны разные способы имитации.

Первый способ имитации. Генерируется случайное число γ , нормально распределенное между 0 и 1 (ему отвечает случайная точка на отрезке единичной длины), и время распада первого атома определяется по формуле:

$$t = -\frac{\ln \gamma}{A_{21}}. \quad (3.30)$$

Если розыгрыш случайных чисел производится N_{02} раз, то по N_{02} временам t и формуле (3.29) можно построить ступенчатый график, который нельзя отличить от графика полученного на опыте.

Второй способ имитации. Рассмотрим совокупность атомов как некоторую систему, тогда распад одного из атомов – как событие, переводящее систему в новое состояние. В этом случае вероятность того, что в системе до момента t не произойдет никакого события (распада) $W_{21}^s(t)$, равна произведению вероятностей $W_{21}^s(t)_i = p_i(t)$ распада отдельных атомов.

$$P(t) = p_1(t)p_2(t)p_3(t)\dots p_{N_{02}}(t).$$

Тогда для случайной величины γ_1 , по формуле

$$t_1 = -\frac{\ln \gamma_1}{N_{02}A_{21}} \quad (3.31)$$

можем определить время первого распада в системе. Поскольку вероятность распасться первым для всех атомов одна и та же, то для следующего случайного числа γ_2 мы сможем определить, какой из N_{02} атомов распался. Для этого отрезок от 0 до 1 разбивается на N_{02} равных частей и считается, что распаду i -атома отвечает попадание случайного числа в i -й интервал. Начиная с момента t_1 , наша система состоит не из N_{02} , а из $N_{02}-1$ атомов, и вероятность системы дожить до момента $t_2 = t_1 + t$ равна:

$$W_{21}^s(t) = e^{-(N_{02}-1)A_{21}t}.$$

Для случайного величины γ_3 , мы сможем определить время второго распада:

$$t_2 - t_1 = -\frac{\ln \gamma_3}{(N_{02}-1)A_{21}}. \quad (3.32)$$

Затем определяем, какой из атомов распался, и т.д. до момента, когда распадется последний из атомов. Таким образом, и при таком подходе полностью воспроизведем процесс спонтанного распада N_{02} атомов. Полученная ступенчатая кривая распада или набор кривых, если такой процесс воспроизведен несколько раз, обладает теми же свойствами, что и полученная первым способом или при наблюдении процесса распада на опыте.

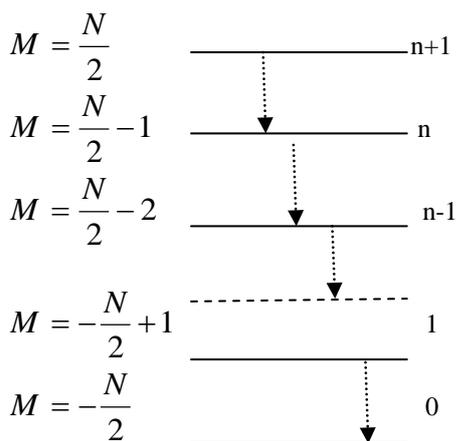
3. Задания на моделирование:

1. Составить программу для спонтанного распада возбужденных атомов.

2. Провести моделирование спонтанного распада при различных значениях количества возбужденных атомов.
3. Результаты исследований представить в виде гистограмм и изучить флуктуации интенсивности спонтанного излучения атомов.

3.5. Моделирование явления спонтанного излучения многоатомной системы (сверхизлучения Дике)

1. Постановка задачи и алгоритм моделирования. Рассмотрим систему N – двухуровневых атомов, заключенных в малом объеме ($L < \lambda$) или протяженном объеме, имеющем выделенное направление излучения. Предположим, что все атомы в начальный момент возбуждены. Для каждого атома существует вектор дипольного момента перехода \vec{d} . Его величина связана с вероятностью перехода электрона с одного уровня на другой уровнем следующим образом



Существует два типа высвечивания многоатомной системы. При первом типе высвечивания атомы не сфазированы друг с другом, здесь каждый атом излучает независимо. Направление излучения фотона при таком распаде атомов случайное. Такое излучение называется спонтанным. Другой тип излучения, при котором атомы связаны между собой, дипольные моменты их коррелированы (сфазированы), иначе говоря, дипольные моменты атомов когерентны в процессе излучения. Корреляция происходит в процессе высвечивания в собственном поле излучения атомов. Атомы чувствуют друг друга через общее поле излучения и начинают излучать одновременно в коррелированном направлении. Такой тип излучения называется сверхизлучением. Впервые второй тип излучения был предсказан в работе [1] и называется сверхизлучением Дике. Вероятность излучательного перехода $M \Rightarrow M - 1$ в единицу времени многоатомной системы для второго типа излучения представляется в виде

$$\gamma = \frac{4d^2 \omega^3}{3\hbar c^3}.$$

Рис. 3.16.

Существует два типа высвечивания многоатомной системы. При первом типе высвечивания атомы не сфазированы друг с другом, здесь каждый атом излучает независимо. Направление излучения фотона при таком распаде атомов случайное. Такое излучение называется спонтанным. Другой тип излучения, при котором атомы связаны между собой, дипольные моменты их коррелированы (сфазированы), иначе говоря, дипольные моменты атомов когерентны в процессе излучения. Корреляция происходит в процессе высвечивания в собственном поле излучения атомов. Атомы чувствуют друг друга через общее поле излучения и начинают излучать одновременно в коррелированном направлении. Такой тип излучения называется сверхизлучением. Впервые второй тип излучения был предсказан в работе [1] и называется сверхизлучением Дике. Вероятность излучательного перехода $M \Rightarrow M - 1$ в единицу времени многоатомной системы для второго типа излучения представляется в виде

$$\gamma_M = \gamma(N/2 + M)(N/2 - M + 1), \quad (3.33)$$

где M – полуразность заселенности уровней, γ – вероятность спонтанного излучения отдельного атома.

1. Если $M = \frac{N}{2}$, то $\gamma_{\frac{N}{2}} = \gamma N$ – спонтанное излучение

2. Если $M = 0$, то $\gamma_0 = \gamma \frac{N^2}{4}$ - сверхизлучение Дике

Развитие излучения многоатомной системы может быть описано системой балансных уравнений

$$\frac{d\rho_M(t)}{dt} = -\gamma_M \rho_M(t) + \gamma_{M+1} \rho_{M+1}(t), \quad (3.34a)$$

$$\rho_{M \frac{N}{2}}(0) = \delta_{M \frac{N}{2}}, \quad (3.34b)$$

где $\rho_M(t)$ - вероятность заселенности уровня M .

Определим число возбужденных атомов.

Для $M = 0$ - число возбужденных атомов $N^* = \frac{N}{2}$.

Для $M = M$, - число возбужденных атомов $N^* = \frac{N}{2} + M$.

С учетом условия нормировки $\sum_M \rho_M(t) = 1$ и $\bar{M} = \sum_M \rho_M(t) \cdot M$ получим, что число возбужденных атомов в момент времени t равно

$$\bar{N}^*(t) = \sum \rho_M(t) \cdot \left(\frac{N}{2} + M\right) = \frac{N}{2} + \bar{M}$$

Получим реализацию импульса сверхизлучения, используя метод статистических испытаний (Монте-Карло). Вероятность излучения j -го фотона за некоторое время $\Delta t_{\frac{N}{2}-j+1}$ полагаем равной малой фиксированной величине, так что

$$\gamma_{\frac{N}{2}-j+1} \Delta t_{\frac{N}{2}-j+1} = \varepsilon < 1, \quad j = 1, 2, 3, \dots, n. \quad (3.35)$$

Пусть в начальный момент заселен верхний уровень $\rho_{\frac{N}{2}}(0) = 1$. Определим время, через которое испустится l -ый фотон. Рассмотрим интервал

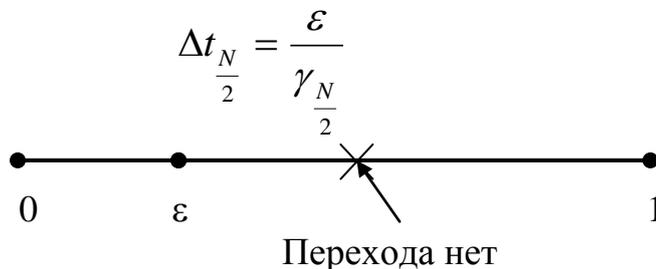


Рис. 3.17

Для интервала $[0, 1]$ вероятность перехода $\rho_{\frac{N}{2}}(0) = 1$. Определим вероятность перехода в интервале $[0, \varepsilon]$, в частности для $\varepsilon = 0.01$. Для этого про-

водим розыгрыш случайного числа ξ . Если случайное число $\xi < \varepsilon$, считаем что произошел переход.

Предположим, что i_1 – номер случайного числа, то формула

$$T_1 = i_1 \cdot \Delta t_{\frac{N}{2}},$$

определяет время, за которое произошло испускание первого фотона.

Время излучения второго фотона можно определить как

$$T_2 = T_1 + (i_2 - i_1) \cdot \Delta t_{\frac{N-1}{2}}, \quad \Delta t_{\frac{N-1}{2}} = \frac{\varepsilon}{\gamma_{\frac{N-1}{2}}},$$

где i_2 - номер второго случайного числа ($i_2 > i_1$).

Тогда время, через которое испустится n – ый фотон после испускания $(n-1)$ –го фотона, равно

$$T_n = \Delta t_{\frac{N}{2}} \cdot i_1 + \Delta t_{\frac{N-1}{2}} \cdot (i_2 - i_1) + \dots + \Delta t_{\frac{N-n+1}{2}} \cdot (i_n - i_{n-1}) = \sum_{j=1}^n \Delta t_{N/2-j+1} (i_j - i_{j-1}),$$

Г (3.36)

$n = 1, 2, 3, \dots, N$

де i_j - номера чисел, меньших ε в последовательности случайных чисел из интервала $[0, 1]$. Случайные цифры можно генерировать с помощью ЭВМ или пользоваться таблицей случайных чисел.

Зная времена испускания фотонов, можно получить функцию распределения, усредненный график которого должен иметь вид (рис.3.18).

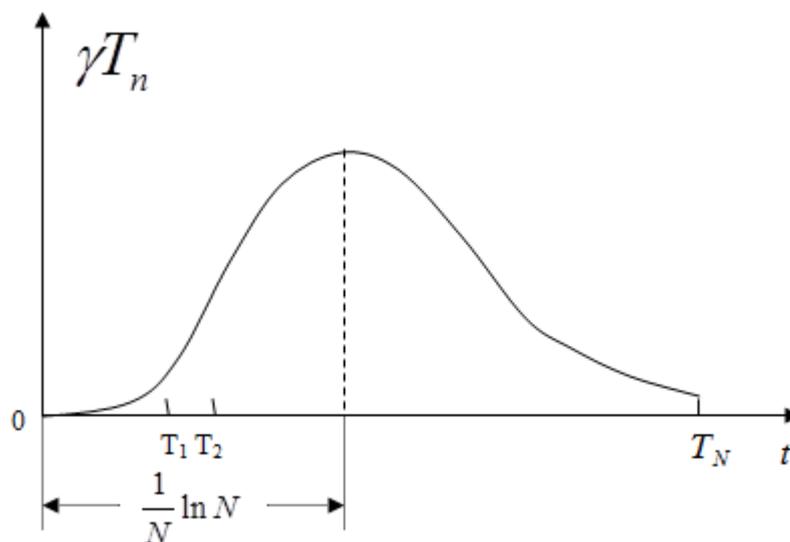


Рис. 3.18

Если $\varepsilon = 1$, то можно получить аналитическое выражение для интенсивности сверхизлучения Дике. Действительно, время, за которое будет испущено n фотонов, равно

$$t = \sum_{M=N/2}^{N/2-n} T_M \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \gamma^{-1} \int_{N/2}^{N/2-n} \frac{dM}{(N/2+M)(N/2-M+1)} = \frac{2\gamma^{-1}}{N+1} \operatorname{arcth} \frac{2M-1}{N+1} \Big|_{N/2}^{N/2-n}, \quad (3.37)$$

Выражая отсюда n , находим

$$n = \frac{N-1}{2} + \frac{N+1}{2} \operatorname{th} \left[\gamma \frac{N+1}{2} (t-t_0) \right], \quad t_0 = \gamma^{-1} \operatorname{arcth} \frac{N-1}{N+1} = \frac{\gamma^{-1}}{N+1} \ln N. \quad (3.38)$$

Следовательно, средняя интенсивность излучения в единицу времени может быть представлена в виде

$$I(t) = \frac{dn}{dt} = \gamma \left(\frac{N+1}{2} \right)^2 \operatorname{sech}^2 \left[\frac{N+1}{2} (t-t_0) \right]. \quad (3.39)$$

Таким образом, в отличие от спонтанного излучения, где интенсивность излучения определяется как $I(t) = \gamma N$, интенсивность сверхизлучения пропорциональна квадрату числа атомов – N^2 .

2. Задания на моделирование:

1. Составить алгоритм и программу решения уравнений (3.35-3.37).
2. Провести численное моделирование для различных значений \mathcal{E} и N .
3. Изучить флуктуации интенсивности в сверхизлучении. Результаты исследований представить в виде гистограмм.

ГЛАВА IV. МЕТОДЫ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ В ТЕРМОДИНАМИКЕ

В настоящее время методы компьютерного моделирования являются одним из основных инструментов исследования термодинамических, кинетических и структурных свойств жидкого состояния вещества в молекулярных моделях. Существуют различные методы определения термодинамических параметров изучаемой среды. Здесь мы рассмотрим три широко используемых в термодинамике и молекулярной физике методов математического и компьютерного моделирования – это метод молекулярной динамики, метод броуновской динамики и метод имитационного моделирования.

4.1. Метод молекулярной динамики

1. Теоретическое введение. Прежде чем рассмотрим применение метода статистических испытаний (Монте-Карло) для решения задач, особенно в молекулярной физике, рассмотрим метод, часто используемый для расчета термодинамических характеристик в среде. Одним из таких методов является детерминистический метод молекулярной динамики (МД) [2,11,18,28], основанный на принципах молекулярно-кинетической теории и заданном потенциале межчастичного взаимодействия, в котором динамика взаимодействующих частиц системы описывается классическими механическими уравнениями движения Ньютона

$$m\ddot{\vec{r}}_i = \vec{F}_i = -\frac{\partial U_N(\vec{r})}{\partial \vec{r}_i}, i = 1, \dots, N, \quad (4.1)$$

иначе говоря, этот метод вычисляет характеристики системы путем интегрирования уравнений движения для каждой частицы.

Исходной посылкой метода МД является хорошо определенное микроскопическое описание физической системы. Она может состоять из нескольких или многих тел и описываться гамильтонианом, лагранжианом или непосредственно уравнениями движения Ньютона.

Суть метода МД состоит в численном решении уравнений движения на компьютере. Для этого они аппроксимируются подходящей численной схемой, предназначенной для расчетов на компьютере.

Метод молекулярной динамики рассчитывает в фазовом пространстве траектории совокупности молекул, каждая из которых подчиняется классическим законам движения. Причем не только системы точечных частиц, но и системы частиц с внутренней структурой.

Важнейшим элементом компьютерной модели является потенциал межмолекулярного взаимодействия, т.к. посредством потенциала и массы частицы осуществляется связь модели с конкретной моделируемой системой или веще-

ством. Одним из часто используемых потенциалов в компьютерном эксперименте является потенциал Леннарда-Джонса (ЛД), который имеет вид (рис.4.1)

$$u(r_{ij}) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right], \quad (4.2)$$

где энергетический параметр ε определяет глубину потенциальной ямы, а линейный параметр σ - положение нуля потенциала. Чаще всего вычисления осуществляются в приведенных единицах, которые получают с помощью единиц m, ε, σ .

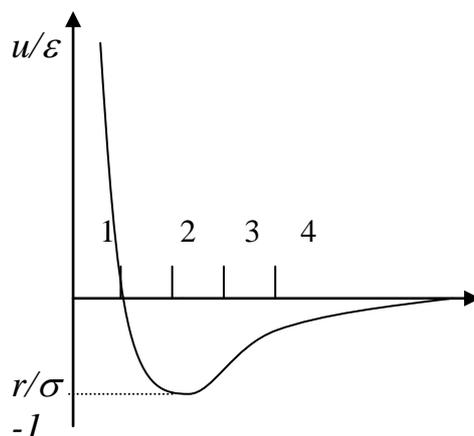


Рис.4.1

Для использования в модели потенциал (4.2) обрезается слева и справа, т.е. уменьшается число учитываемых взаимодействий, и в расчет принимаются только взаимодействия, попадающие под условие

$$r_c < L/2. \quad (4.3)$$

Влияние бесконечного окружения при радиусах $r_{ij} > r_c$ можно учесть поправкой. Если воспользоваться выражением для радиальной функции распределения

$$g(r) = \frac{n(r)}{\rho} = \frac{\Delta N / (4\pi r^2 dr)}{N/V} \quad (4.4)$$

и рассмотреть число частиц в шаровом слое $r, r + dr$

$$\Delta N = 4\pi g(r) \rho r^2 dr. \quad (4.5)$$

Задание 3-х из перечисленных постоянных: V - объем, N - число молекул, E - энергия, P - давление, T - температура, определяет ансамбль, в котором проводится расчет.

Уравнения движения частиц можно записать в виде

$$\begin{aligned} f_{ix} &= -\frac{dU}{dx} = -\frac{dU}{dr} \frac{dr}{dx} = ma_{ix}, \\ f_{iy} &= -\frac{dU}{dy} = -\frac{dU}{dr} \frac{dr}{dy} = ma_{iy}, \\ f_{iz} &= -\frac{dU}{dz} = -\frac{dU}{dr} \frac{dr}{dz} = ma_{iz}. \end{aligned} \quad (4.6)$$

2. Граничные и начальные условия. Пусть система состоит из N частиц. Для рассмотрения характеристик объема при заданной плотности ρ , необходимо ввести этот объем или МД - ячейку, при сохранении постоянной плотности. В газах и жидкостях для простоты вычислений выбирается кубическая ячейка

(рис.4.2). Пусть L – линейный размер МД – ячейки с объемом $V=L^3$. Введение кубической ячейки порождает 6 нежелательных поверхностей. Частицы, отраженные от них, будут возвращаться внутрь ячейки. Границы ячейки будут вносить ощутимый вклад в любую характеристику

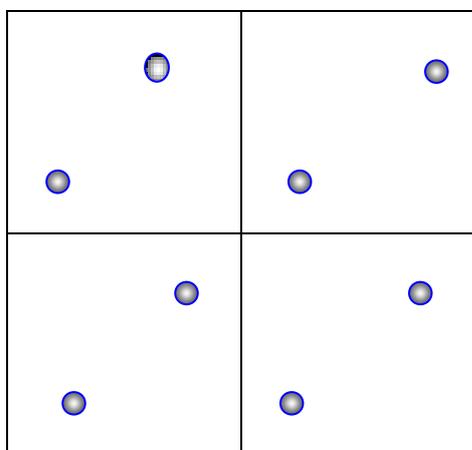


Рис.4.2

ячейки, особенно для систем с малым числом частиц. Для уменьшения этого эффекта вводятся периодические граничные условия, когда основная ячейка позиционируется в пространство, т.е. повторяет саму себя бесконечное число раз. Вычислительная реализация этого алгоритма заключается в следующем: если частица пересекает грань основной ячейки, она возвращается в ячейку с противоположной грани с той же скоростью, в результате выполняется закон сохранения частиц в элементарной ячейке. При введении периодических граничных условий можно ограничиться моделированием частиц в одной ячейке, т.е. устраняется влияние граней и создается квазибесконечный объем для более точного описания макроскопической системы.

Начальное расположение частиц в ячейке можно задать по закону случайного распределения.

3. Определение энергетических и термодинамических параметров.

Одной из основных задач компьютерных экспериментов является определение термодинамического состояния моделей. Термодинамические параметры определяются усреднением соответствующих функций динамических переменных по времени. В компьютерных экспериментах интервал времени усреднения ограничен. При усреднении полный набор состояний модели разбивается на несколько поднаборов (макрошагов). При этом полные средние значения функций по всем шагам вычисляются из средних по макрошкагам, а стандартные отклонения определяются из серии независимых измерений в соответствии с обычными приемами теории ошибок.

Выражение для потенциальной энергии межчастичного взаимодействия, имеет вид

$$U = \sum u(r_{ij}) + \Delta U , \quad (4.7)$$

где поправка на взаимодействие при $r_{ij} > r_c$ определяется с учетом (4.4)

$$\Delta U = 2\pi\rho N \int_{r_c}^{\infty} g(r)u(r_{ij})r^2 dr . \quad (4.8)$$

Кинетическая энергия системы определяется как

$$E_k = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \dot{r}_i^2 . \quad (4.9)$$

Среднее значение кинетической скорости

$$\langle E_k \rangle = \frac{1}{2N} \sum_{i=1}^N \dot{r}_i^2 . \quad (4.10)$$

Воспользовавшись выражением (4.9) и теоремой о равномерном распределении энергии по степеням свободы можно найти температуру системы

$$T = \frac{2E_k}{3(N-1)} . \quad (4.11)$$

Давление определяется с использованием теоремы вириала

$$p = \frac{1}{3V} (2E_k - W) , \quad (4.12)$$

где вириал давления рассчитывается как

$$W = \sum_{j>1} r_{ij} \frac{\partial U(r_{ij})}{\partial r_{ij}} + \Delta W , \quad (4.13)$$

где

$$\Delta W = \frac{\rho^2}{6} \int_{r_c}^{\infty} g(r) \frac{du_{ij}}{dr} 4\pi r^3 dr \quad (4.14)$$

поправка к вириалу с учетом дальнего окружения.

Умение оценивать эти свойства достаточно для получения как термического, так и калорического уравнения состояния, которые в свою очередь могут служить для определения любых производных.

Например, теплоемкость определится как

$$C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_V = \left(\frac{dU}{dT} + \frac{dE_k}{dT} \right)_V = \frac{3}{2} \left(1 + \frac{2}{3} \frac{\overline{U^2} - \bar{U}^2}{NT^2} \right) , \quad (4.15)$$

термический коэффициент давления

$$\gamma_V = \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_V = \rho + \frac{\overline{Up} - \bar{U}\bar{p}}{T^2} , \quad (4.16)$$

изотермическая сжимаемость

$$\beta_T = \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial p} \right)_T = \left[\frac{2}{3} \bar{p} + \frac{1}{3} \rho T + \frac{1}{9V} \overline{\sum r_{ij}^2 \frac{\partial^2 U}{\partial r_{ij}^2}} - N \frac{\overline{p^2} - \bar{p}^2}{\rho T} \right]^{-1} . \quad (4.17)$$

Распределение Максвелла имеет вид

$$\Delta N = 4\pi N \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{m v^2}{2kT}\right) v^2 dv . \quad (4.18)$$

4. Алгоритм вычисления. Для решения уравнения движения на компьютере конструируются конечные разностные схемы для дифференциальных

уравнений. Затем для них получаются рекурсивные соотношения для координат и скоростей, которые должны обеспечивать эффективность вычислений. Кроме того, разностная схема должна быть численно устойчива. С точки зрения вычислительной математики метод МД представляет собой задачу Коши. Для нее было разработано множество алгоритмов, но не все из которых могут быть использованы для решения физических задач по молекулярной физике.

В вычислительной физике используются методы Эйлера, Верле, Гира, Беемана, Токсваерда и др. В методе молекулярной динамики большинство расчетов в виду меньших математических трудностей проводится в NVE-ансамбле. В нашем случае мы будем использовать алгоритм Верле для NVE – ансамбля, который заключается в следующей последовательности.

1. Задаются положения частиц $\vec{r}_i(t)$.
2. Задаются скорости частиц $\dot{\vec{r}}_i(t)$.
3. Вычисляются силы $\vec{F}_i(\vec{r}_i(t))$.
4. Вычисляются новые положения частиц в момент времени $(t + \Delta t)$ по формуле

$$\vec{r}_i(t + \Delta t) = \vec{r}_i(t) + \dot{\vec{r}}_i(t)\Delta t + \Delta t^2 \frac{\vec{F}_i(t)}{2m}. \quad (4.19)$$

5. Вычисляются силы в следующий момент времени $\vec{F}_i(t + \Delta t)$.
6. Вычисляются скорости в момент времени $(t + \Delta t)$ по формуле

$$\dot{\vec{r}}_i(t + \Delta t) = \dot{\vec{r}}_i(t) + \Delta t \frac{\vec{F}_i(t + \Delta t) + \vec{F}_i(t)}{2m}.$$

7. Определяются мгновенные значения функций динамических переменных и выводятся зависимости термодинамических параметров от времени.
8. Проводится переобозначение координаты, скорости и силы частиц

$$\vec{r}_i(t) = \vec{r}_i(t + \Delta t), \quad \dot{\vec{r}}_i(t) = \dot{\vec{r}}_i(t + \Delta t), \quad \vec{F}_i(t) = \vec{F}_i(t + \Delta t).$$

9. Возвращаются к шагу 4.

5. Определение шага интегрирования. После получения алгоритма для численного решения уравнений движения встает вопрос о выборе временного шага h . Он определяет точность расчета траектории и, следовательно, влияет на точность вычисляемых характеристик системы, за исключением статистической погрешности. Выбор шага интегрирования будем искать по методу полушага $h/2$, см. например в [21]. Отметим, что выбор шага зависит от типа моделируемой системы, в термодинамических расчетах имеется общее эмпирическое правило: флуктуации полной энергии системы не должны превышать нескольких процентов от флуктуаций потенциальной энергии.

Таким образом, реальное компьютерное моделирование молекулярной системы может быть разбито на три этапа:

3. Задание начальных условий.
4. Достижение равновесия.
5. Расчет характеристик.

6. Задания на моделирование:

1. Построить разностную схему и разностные уравнения.
2. Привести уравнения к безразмерному виду, для этого использовать безразмерное расстояние $r^* = r/\sigma$, характерное время $\tau = \sigma\sqrt{m/\varepsilon}$, скорость $v = \sigma/\tau = \sqrt{\varepsilon/m}$.

Пример. Безразмерная сила для оси x имеет вид

$$f = 48x^* \left(\left(\frac{1}{r^*} \right)^{14} - 0.5 \left(\frac{1}{r^*} \right)^8 \right).$$

3. Написать алгоритм решения дифференциальных уравнений ()- ().
4. Составить блок-схему согласно алгоритму. Выходные данные представить в графической форме. Рекомендуется использовать графический пакет ORIGIN.
5. Провести вычислительный эксперимент для газа аргона, имеющего следующие параметры: $\varepsilon = 1.66 \cdot 10^{-21}$ Дж, $\sigma = 3.405$ А, $m = 6.69 \cdot 10^{-26}$ Дж/К, $k_B = 1.31 \cdot 10^{-23}$, $\varepsilon/k_B = 119,8$ К, $\tau = 1.82 \cdot 10^{-12}$ с, $v = 12$ м/с .
Рассчитать все термодинамические параметры и вывести графики для усредненных величин по времени.
6. Построить распределение Максвелла по скоростям в конечный момент времени.

7. Результаты моделирования

Проведем вычислительный эксперимент для газа аргона, имеющего следующие параметры: $\varepsilon/k_B = 119,8$ К, $\sigma = 3.405$ А, $m = 6.69 \cdot 10^{-26}$ Дж/К, $v = 12$ м/с . Для этого рассмотрим систему, состоящую из 108 частиц. Все расчеты будем осуществлять в приведенных единицах. Система исследуется на протяжении 10^4 шагов. Шаг по времени брался 10^{-5} с. Базовая МД ячейка выбиралась в форме куба с периодическими граничными условиями и стороной $L = 12$.

Программа для вычислительного эксперимента дана в приложении 15. В результате моделирования были рассчитаны радиальные функции распределения РФР и термодинамические параметры. На рис. 4.3 представлены РФР $g(r)$. На следующих рисунках представлены изменения термодинамических

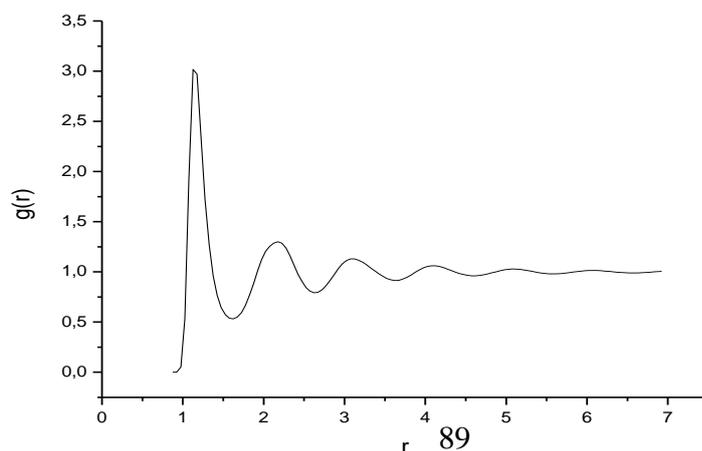


Рис 4.3. Радиальная функция распределения взаимодействия частиц аргона

свойств аргона со временем.

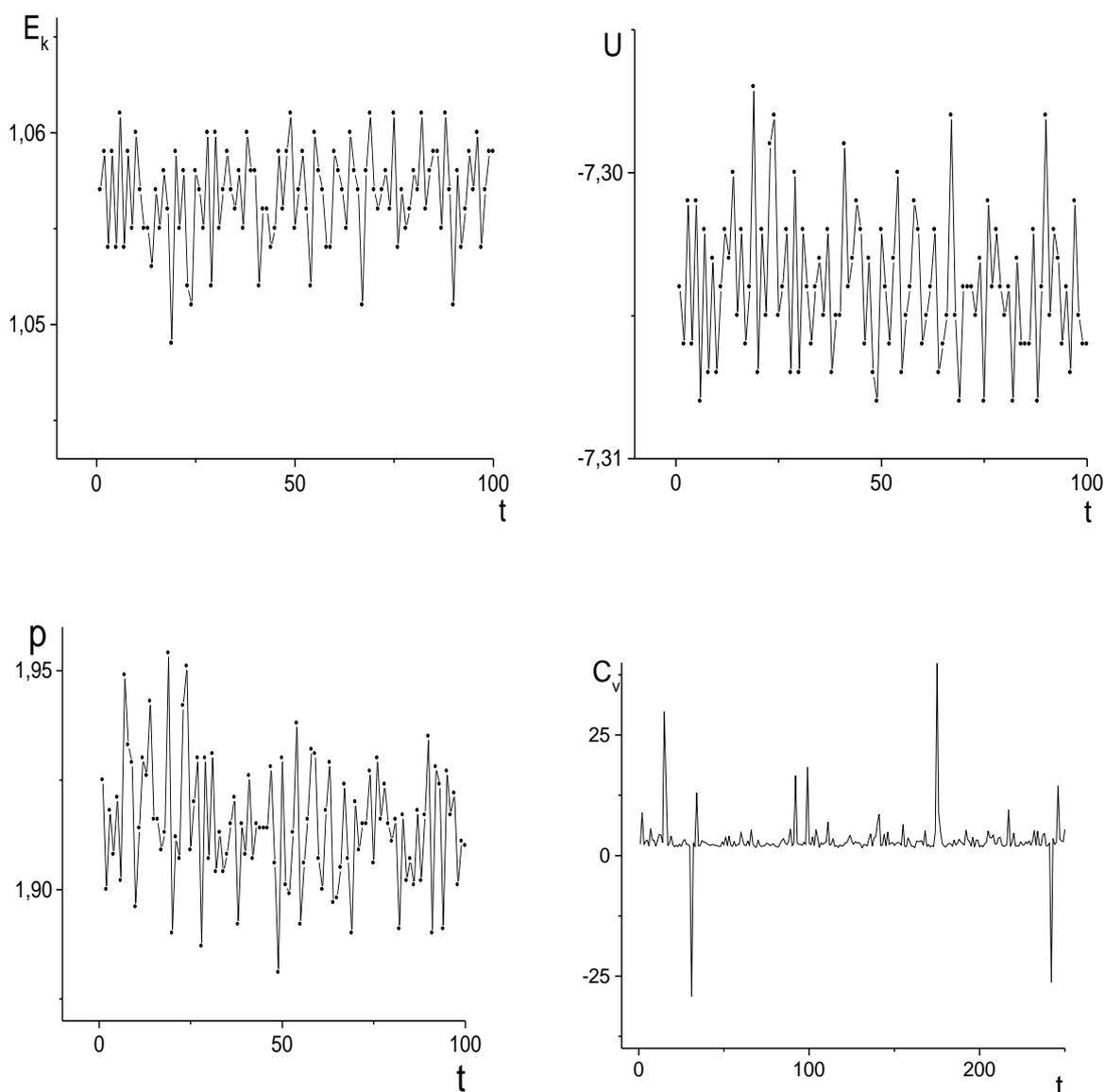


Рис.4.4.

В таблице приведены средние значения кинетической и потенциальной энергии, температуры, давления и теплоемкости, полученные в результате моделирования в приведенных единицах и системе СИ.

	E_k	U	T	p	C_v
Приведенные единицы	1,056	-7,304	0,7042	1,0771	1,961
СИ	$1,052 \times 10^3$ Дж/моль	- $7,273 \times 10^3$ Дж/моль	84,36 К	798 Бар	25,28 Дж/моль К

4.2. Метод броуновской динамики

Методами Монте-Карло иногда принято называть группу методов решения детерминированных (т.е. без случайности) задач, в которых существенно используются элементы случайности. Кроме того, существует множество задач, в которых случайный элемент присутствует естественным образом. Универсальность метода как метода математического моделирования прикладных задач определяется возможностью его использования в решении задач, не связанных со случайностью. Это достигается построением вспомогательных вероятностных моделей, куда в качестве параметров входят подлежащие определению постоянные величины.

1. Математическая модель. В методе броуновской динамики систему можно представить в виде набора частиц, динамически взаимодействующих между собой и стохастически с окружающей средой, детальное строение которой несущественно, т.е. движение частиц в растворе или расплаве сводится к движению частиц в непрерывной вязкой среде. Свойства этой непрерывной среды задаются случайной силой с заданными статистическими свойствами. Метод броуновской динамики рассчитывает в фазовом пространстве траектории молекул, движение каждой из которых в поле силы описывается уравнением Ланжевена

$$m \frac{d\vec{v}_i}{dt} = \vec{F}_{ij}(\vec{r}(t)) + f_i^*(t) - \gamma_i \vec{v}_i(t), \quad (4.20a)$$

$$\frac{d\vec{r}_i(t)}{dt} = \vec{v}_i(t), \quad i = 1, 2, \dots, N, \quad (4.20b)$$

где $\vec{r}(t)$ - набор межчастичных расстояний, γ_i - коэффициент трения броуновских частиц в поле окружающей среды, $f_i^*(t)$ - случайная сила ланжевенского источника, \vec{F}_{ij} - сила взаимодействия i -й частицы с остальными броуновскими частицами

$$\vec{F}_{ij} = \frac{48\varepsilon}{\sigma^2} \vec{r}_{ij} \left(\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{14} - \frac{1}{2} \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^8 \right). \quad (4.21)$$

Метод броуновской динамики использует случайные силы $f_i^*(t)$. Поэтому для его реализации необходимо уметь получать случайные величины ξ_i , обычно распределенные по нормальному закону с дисперсией $d = 1$

$$P(\xi_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(-\xi_i^2 / 2), \quad \sum_i P_i = 1. \quad (4.22)$$

Для нашей задачи случайная сила равна $f_i^* = \xi_i$

Если дисперсия d задана, то плотность вероятности определяется как

$$P(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi d^2}} \exp\left(-\frac{x^2}{2d^2}\right), \quad (4.23)$$

где $x = d^*\xi$. Если допустим, что дисперсия d не известна, то оно может быть определено как среднее значение $\langle \xi \rangle = d$.

2. Алгоритм метода броуновской динамики

1. Задать начальные координаты и скорости движения.
2. Получить значения случайной силы.
3. Интегрировать уравнения движения до момента столкновения частиц, т.е. вычисляются новые положения частиц в момент времени $(t + \Delta t)$ по формуле $\vec{r}_i(t + \Delta t) = \vec{r}_i(t) + \dot{\vec{r}}_i(t)\Delta t + \Delta t^2 \frac{\vec{F}_i(t)}{2m}$. Моменты столкновения для простоты можно выбирать регулярно, через несколько десятков шагов по времени (в принципе столкновение также подчиняется случайному закону в пределах некоторого времени).
4. Рассчитать мгновенные значения функций динамических переменных.
5. Из распределения Больцмана с заданной температурой выбрать новые скорости для всех частиц.
6. Вернуться к шагу 2.

3. Расчет макроскопических параметров

Выражение для потенциальной энергии межчастичного взаимодействия, имеет вид

$$U = U(r_{ij}), \quad (4.24)$$

Кинетическая энергия системы определяется как

$$E_k = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \dot{r}_i^2. \quad (4.25).$$

Среднее значение кинетической скорости

$$\langle E_k \rangle = \frac{1}{2N} \sum_{i=1}^N \dot{r}_i^2. \quad (4.26)$$

Воспользовавшись выражением (4.9) и теоремой о равномерном распределении энергии по степеням свободы можно найти температуру системы

$$T = \frac{2E_k}{3(N-1)}. \quad (4.27).$$

Давление определяется с использованием теоремы вириала

$$p = \frac{1}{3V} (2E_k - W), \quad (4.28)$$

где вириал давления рассчитывается как

$$W = \sum_{j>1} r_{ij} \frac{\partial U(r_{ij})}{\partial r_{ij}}, \quad (4.29)$$

Умения оценивать эти свойства достаточно для получения как термического, так и калорического уравнения состояния, которые в свою очередь могут служить для определения любых производных.

Например, теплоемкость определится как

$$C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_V = \left(\frac{dU}{dT} + \frac{dE_k}{dT} \right)_V = \frac{3}{2} \left(1 + \frac{2}{3} \frac{\overline{U^2} - \bar{U}^2}{NT^2} \right), \quad (4.30)$$

Таким образом, метод Монте-Карло отличается от метода молекулярной динамики тем, что каждое следующее событие определяется не путем решения уравнений Ньютона, а с использованием случайных процессов. Вместо оценки сил, определяющих возрастающие атомные движения, при моделировании методом Монте-Карло просто симулируют относительно большие движения системы и определяют, действительно ли измененная структура энергически возможна при моделируемой температуре. Однако данный метод несколько лучше метода молекулярной динамики для расчёта термодинамических характеристик молекул, например, для расчёта спектра возможных событий и их энергий.

4. Задания на моделирование:

1. Построить разностную схему и разностные уравнения.
2. Привести уравнения к безразмерному виду, для этого использовать безразмерное расстояние $r^* = r/\sigma$, характерное время $\tau = \sigma \sqrt{m/\varepsilon}$, скорость $v = \sigma/\tau = \sqrt{\varepsilon/m}$.
3. Написать алгоритм решения дифференциальных уравнений (4.20).
4. Составить блок-схему согласно алгоритму. Выходные данные представить в графической форме. Рекомендуется использовать графический пакет ORIGIN.
5. Провести вычислительный эксперимент для частицы краски гуммигута имеющего следующие параметры, $\sigma = 3.14 \cdot 10^{-12}$ м, $\rho = 10^3$ кг/м³, $k_B = 1.31 \cdot 10^{-23}$, $\varepsilon/k_B = 200$ К, $\tau = 1.82 \cdot 10^{-12}$ с, $v = 5 \cdot 10^{-3}$ м/с, $r = 0.5 \cdot 10^{-6}$ м.
6. Рассчитать все термодинамические параметры и вывести графики для усредненных величин по времени.
7. Построить фазовую траекторию броуновской частицы в объеме.

4. 3. Имитационный метод моделирования броуновских траекторий

1. Теоретическое введение. Броуновским движением называется наблюдающееся под микроскопом непрерывное, хаотическое движение мелких частиц, взвешенных в жидкости или газе.

Хаотическое движение небольших частиц обусловлено флуктуациями давления, производимого на частицы молекулами жидкости или газа. Броуновские частицы испытывают сравнительно небольшое число столкновений с молекулами среды за единицу времени и действующие на них силы не уравниваются.

Первые наблюдения за движением частиц, взвешенных в жидкости, были сделаны в 1827 году английским ботаником Р. Броуном. Важнейшими особенностями броуновского движения являются:

- неограниченно долгое продолжение движения без каких-либо видимых изменений;
- интенсивность движения зависит от размеров броуновских частиц, но не от их природы;
- интенсивность движения возрастает с ростом температуры и уменьшением вязкости жидкости.

Закономерности броуновского движения были подробно изучены А. Эйнштейном и М. Смолуховским. Оказалось, что среднее смещение броуновской частицы \bar{x} вдоль произвольного направления равно нулю. В то же время средняя величина квадрата смещения \bar{l}^2 пропорциональна времени t наблюдения над частицей:

$$\bar{l}^2 = 2Dt, \quad (4.31)$$

где D - коэффициент диффузии броуновских частиц, который для шарообразной частицы равен

$$D = \frac{RT}{6\pi\eta r N_A}, \quad (4.32)$$

где N_A - число Авогадро, η - коэффициент вязкости жидкости, r - радиус частицы. Пользуясь формулой

$$\bar{l}^2 = \frac{RT}{3\pi\eta r N_A} t = \frac{kT}{3\pi\eta r} t, \quad (4.33)$$

можно из результатов наблюдений за поведением броуновской частицы определить постоянную Больцмана и Авогадро.

2. Построение имитационной модели. Задача имитационного моделирования движения броуновской частицы состоит в определении квадрата смещения за равные промежутки времени.

Смещение броуновской частицы можно определить разными способами. Рассмотрим самый простой из них. Промежуток времени T_k , в течение которого мы хотим определить смещение, разделим на N равных частей, т.е.

$$0 = t_0 < t_1 < t_2 < \dots < t_N = T_k. \quad (4.34)$$

Значения $l(t_i)$ разыгрывают последовательно по формуле

$$l(t_i) = l(t_{i-1}) + \sqrt{\frac{T_k}{2N}} \xi_i. \quad (4.35)$$

В каждый момент времени находим квадрат $l(t_i)$ и среднее от квадрата, т.е. среднюю величину квадрата смещения. Здесь ξ_i нормально распределенные случайные величины с дисперсией, равной единице, с математическим ожиданием, равным трем, т.е. определенные по закону

$$f(\xi_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(\xi_i - 3)^2}{2}\right). \quad (4.36)$$

Будем считать, что движение броуновской частицы происходит в двухмерной плоскости. Тогда направление изменения траектории можно разыграть по формуле

$$\cos \theta_i = 2\gamma_i - 1, \quad (4.37)$$

где γ_i – эталонное случайное число в интервале $[0,1]$. Розыгрыш направления дает нам возможность определения декартовых координат броуновской частицы $x(t_i)$, $y(t_i)$ в каждый момент времени. Координаты частицы могут быть определены по алгоритму

$$\begin{aligned} x_i &= x_i + x_{i-1}, \\ y_i &= y_i + y_{i-1}, \\ \theta_i &= \theta_i + \theta_{i-1}, \\ x_i &= l_i \cos \theta_i, \\ y_i &= l_i \sin \theta_i \end{aligned} \quad (4.38)$$

При усложнении модели, т.е. если движение броуновской частицы происходит в трехмерной области, то можно использовать методику определения направления рассеяния по параграфу 3.1.4 или по алгоритмам (1.45-1.47).

3. Задания на моделирование:

1. Составить программу для определения траектории броуновской частицы
2. Построить траекторию движения броуновской частицы.
3. Провести моделирование движения броуновской частицы в зависимости от реальных параметров среды.
4. Определить постоянную Больцмана из результатов моделирования.

Результаты моделирования траектории движения броуновской частицы представлены на рис.4.5

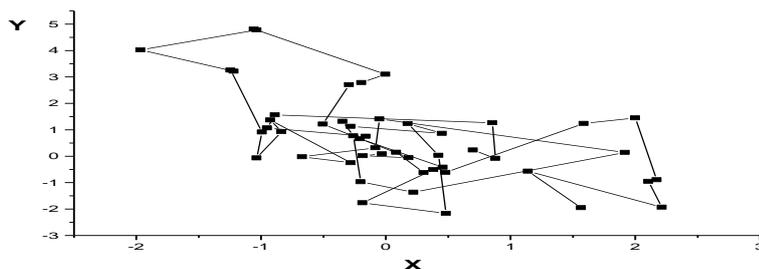


Рис. 4.5

Литература

1. Dicke R.H. Coherence in spontaneous radiation processes. //Phys.Rev. - 1954. - V. 93. - P. 99-110.
2. Metropolis N., Ulam S. The Monte-Carlo method. –J. Amer. Statistical assoc., 1949, v.44, N247, p335-341.
3. Биндер Курт и др. Методы Монте-Карло в статистической физике: Пер.с англ. / Под ред. Г.И.Марчука, Г.А. Михайлова. – М.: Мир, 1982. –400с.
4. Бронштейн И.Н., Семендяев К.А. Справочник по математике для инженеров и учащихся втузов. – 13-е изд., исправленное. –М.: Наука, 1986. - 544с.
5. Бусленко Н.П. и др. Метод статистических испытаний (метод Монте-Карло) / Под ред. Ю.А. Шрейдера. – М.: Изд-во «Физматлит», 1962. –331с.
6. Гмурман В. Е. Теория вероятностей и математическая статистика: Учеб. пособие для втузов. – 5-е изд., перераб. и доп. – М.: Высш. школа, 1977.
7. Гмурман В.Е. Руководство к решению задач по теории вероятностей и математической статистике: Учеб. пособие для студентов втузов. – 3-е изд., перераб. и доп. – М.: Высш. школа, 1979г.
8. Гордеев и др. Ядерно-физические константы. – М.: Атомиздат, 1963.
9. Грошев А.В. и др. Атлас спектров гамма-лучей радиационного захвата тепловых нейтронов. – М.: Атомиздат, 1958.
10. Гульд Х., Тобочник Я. Компьютерное моделирование в физике: Пер. с англ. Т. 1,2. – М.: Мир, 1990.
11. Дьяконов В. VisSim+MathCAD+MATLAB. Визуальное математическое моделирование. – М: СОЛОН-Пресс, 2004. – 384с.
12. Ельяшевич А.М. Моделирование молекулярной динамики с помощью ЭВМ // Релаксационные явления в полимерах/ Под ред. Г.М.Бартенева, Ю.В. Зеленова. – Л.: Химия, 1972. – С. 297-303.
13. Ермаков С. М. Методы Монте-Карло и смежные вопросы. – М.: Наука, 1971.
14. Кац М. Статистическая независимость в теории вероятностей, анализе и теории чисел. – М.: Изд-во ин. лит., 1962. – 155с.
15. Колмогоров А.Н. Основные понятия теории вероятностей (Серия теория вероятностей и математическая статистика). – М. 1974. – 120 с.
16. Краткий справочник инженера-физика. Ядерная физика. Атомная физика. /Сост. Н.Д.Федоров. – М.: Атомиздат, 1961. – 507 с.
17. Ленг.К. Астрофизические формулы. Руководство для физиков и астрофизиков. Ч 1-2. . – М.: Мир, 1978.
18. Маликов Р.Ф. Практикум по компьютерному моделированию физических явлений и объектов: Учеб. пособие. – Уфа : Изд-во БГПУ, 2004. -236с.
19. Маликов Р.Ф., Сулейманов Р.Р. Информатика классная и внеклассная: 2-е изд., перераб. и доп. – Уфа: Гилем, 2004. 365 с.
20. Математические методы для исследования полимеров / Под ред. И.М. Лифшица, А.М. Молчанова. – Пушкино, 1982.

21. Методы Монте-Карло в физике и геофизике. Ученые записки. В.56 (Серия физических наук №1). / Под ред. И.Г.Дядькина.. – Уфа, Изд-во БашГУ, 1978. -322с.
22. Михайлов Г.А. Некоторые вопросы теории методов Монте-Карло. – М.: Наука, 1990. – 142с.
23. Могилев А.В., Пак Н.И., Хённер Е.К. Информатика: Учеб. пособие для студ. пед. вузов. /Под ред. Е.К.Хённера. – М.:, 1999. – 816с.
24. Поршневу С.В. Компьютерное моделирование физических систем с использованием пакета MathCAD. Учеб.пособие. – М.: Горячая линия –Телеком, 2004. -319с.
25. Прохоров Ю.В., Розанов Ю.В. Теория вероятностей. – М.: Наука, 1973.
26. Прусаков Г.М. Математические модели и методы в расчетах на ЭВМ. – М.: Физматлит, 1993. – 144с.
27. Рудерман С.Ю. Законы в мире случая. Т. 1. Теория вероятностей. Книга 1-2. Учеб. пособие / БашГУ. – Уфа, 2001.
28. Севастьянов Б.А. Курс теории вероятностей и математической статистики. – М.: Наука,1982.
29. Секей Г. Парадоксы в теории вероятностей и математической статистике. – М.: Мир, 1990. – 240с.
30. Семенов М.Г. Математическое моделирование в MathCAD. – М: Альтекс-А, 2003. -206с.
31. Соболев И.М. Численные методы Монте-Карло. – М.: Изд-во «Физматлит», 1973. –311с.
32. Тихонов А.Н., Костомаров Д.П. Вводные лекции по прикладной математике, 1984. – М.: Наука.- 190 с.
33. Феллер В. Введение в теорию вероятностей и ее приложения.– М.: Мир., 1964. – Т.1. – 498с.
34. Феллер В. Введение в теорию вероятностей и ее приложения.– М.: Мир., 1967. – Т.2. – 752с.
35. Ширяев А.Н. Вероятность. – М.: Изд-во МГУ, 1980г.
36. Шеннон Р. Имитационное моделирование систем – искусство и наука: Пер. с англ. – М.: Мир, 1987.
37. Ремеев И.С. Математическое моделирование физических процессов: Учеб. пособ.. Изд-во БашГУ. – Уфа, 1996. – 72с.
38. Ермаков С.М., Некруткин В.В., Сипин А.С. Случайные процессы для решения классических уравнений математической физики. - М.: Наука, 1984. - 208 с.
39. Имитационное и статистическое моделирование: Практикум для студентов мат. и экон. спец. / В. И. Лобач, В. П. Кирлица, В. И. Малюгин, С. Н.Сталевская.- Мн. :БГУ, 2004. -189с.

ПРИЛОЖЕНИЯ

Приложение 1

Таблица равномерно распределённых случайных чисел

10 09 73 25 33	76 52 01 35 86	34 67 35 48 76	80 95 90 9117
37 54 20 48 05	64 89 47 42 96	24 80 52 40 37	20 63 61 04 02
08 42 26 89 53	19 64 50 93 03	23 20 90 25 60	15 95 33 47 64
99 01 90 25 29	09 37 67 07 15	38 31 13 11 65	88 67 67 43 97
12 80 79 99 70	80 15 73 61 47	64 03 23 66 53	98 95 11 68 77
66 06 57 47 17	34 07 27 68 50	36 69 73 61 70	65 81 33 98 85
31 06 01 08 05	45 57 18 24 06	35 30 34 26 14	86 79 90 74 39
85 26 97 76 02	02 05 16 56 92	68 66 57 48 18	73 05 38 52 47
63 57 33 21 35	05 32 54 70 48	90 55 35 75 48	28 46 82 87 09
73 79 64 57 53	03 52 96 47 78	35 80 83 42 82	60 93 52 03 44

Приложение 2

Нормальное распределение

t	f(t)	F(t)	t	f(t)	F(t)
0,0	0,398942	0,500000	2,3	0,08327	0,989276
0,1	0,396952	0,539828	2,4	0,022395	0,991802
0,2	0,391043	0,579260	2,5	0,017528	0,993790
0,3	0,381388	0,617911	2,6	0,013583	0,995339
0,4	0,368270	0,655422	2,7	0,010421	0,996533
0,5	0,352065	0,691462	2,8	0,007915	0,997445
0,6	0,333225	0,725747	2,9	0,005953	0,998134
0,7	0,312254	0,758036	3,0	0,004432	0,998650
0,8	0,289692	0,788145	3,1	0,003267	0,999032
0,9	0,266085	0,815940	3,2	0,002384	0,999313
1,0	0,241971	0,841345	3,3	0,001723	0,999517
1,1	0,217852	0,864334	3,4	0,001232	0,999663
1,2	0,194186	0,884930	3,5	0,000873	0,999767
1,3	0,171369	0,903200	3,6	0,000612	0,999841
1,4	0,149727	0,919243	3,7	0,000425	0,999892
1,5	0,129518	0,933193	3,8	0,000292	0,999928
1,6	0,110921	0,945201	3,9	0,000199	0,999952
1,7	0,094049	0,955435	4,0	0,000134	0,999968
1,8	0,078950	0,964070	4,1	0,000089	0,999979
1,9	0,065616	0,971283	4,2	0,000059	0,999987
2,0	0,053991	0,977250	4,3	0,000039	0,999991
2,1	0,043984	0,982136	4,4	0,000025	0,999995
2,2	0,035475	0,986097	4,5	0,000016	0,999997

Приложение 3

Микросечения некоторых веществ

Материал	Плотность ρ	Массовое число	Сечение упругого рассеяния, σ , барн	Сечение неупругого рассеяния, σ_b , барн
Парафин, (CH ₂) _n	0,9	14	3,6	-
Вода (H ₂ O)	1	18	3,6	-
Al	2,6	27	2	0,8
Fe	7,8	56	3,6	1,3
W	19,1	184	6,4	2,6
Pb	11,4	207	6	2,4

Приложение 4

Программа работы с генератором случайных чисел

```
const con=100;
var i:integer;
    num,x,y:real;
    fil:text;
begin
randomize;
assign(fil,'c:\result.dat');
rewrite(fil);
for i:=1 to con do
begin
num:=random;
writeln(fil, i, ' ', num);
writeln(i,num);
end;
close(fil);
end.
```

Приложение 5

Генератор псевдослучайных чисел по алгоритму Неймана

```
uses crt;
const N=7;
var i,c:integer;
    y1:real;
    temp:string;
    fil:text;
begin
```

```

randomize;
clrscr;
assign(fil,'c:\result.dat');
rewrite(fil);
y1:=random;
for i:=1 to N do
begin
writeln('y1=',y1:5:10);
y1:=sqr(y1);
writeln('y1^2=',y1:5:10);
str(y1:5:10,temp);
temp:=copy(temp,pos('.',temp)+3,3);
Insert('0.', temp, 1);
val(temp,y1,c);
writeln(y1:5:3);
writeln(fil,y1:5:3)
end;
close(fil);
readln;
end.

```

Приложение 6

Генератор псевдослучайных чисел по алгоритму Марсалиа-Зеймана

```

uses crt,dos;
var
pos: array[0..1000] of word;
posled: array[0..1000] of word;
itog: array[0..1000] of word;
itogi: array[0..1000] of real;
i,n,k,cod,kol:integer;
s:string;

procedure out;
var
f:text;
begin
assign(f,'data.txt');
rewrite(f);
for i:=0 to round(kol/2) do writeln(f,itog[i]);
assign(f,'data1.txt');
rewrite(f);
for i:=0 to round(kol/2) do writeln(f,itogi[i]:6:4);
end;

```

```

procedure tak;
begin
  for i:=0 to round(kol/2) do
    begin
      itogi[i]:=itog[random(round(kol/2))]*i+sqrt(itog[random(round(kol/2))]);
    end;
  end;
procedure mars(sm:integer);
var
  ka,tmp:integer;
begin
  ka:=0;
  tmp:=round(kol/2);
  for i:=tmp downto sm do
    begin
      itog[ka]:=posled[i-sm]+posled[i+sm];
      ka:=ka+1;
      writeln(itog[ka]);
    end;
  end;
begin
  clrscr;
  kol:=1000;
  pos[0]:=0;
  pos[1]:=1;
  randomize;
  for i:=2 to kol do
    begin
      pos[i]:=pos[i-1]+pos[i-2];
    end;
  for i:=0 to kol do
    begin
      str(pos[i],s);
      val(s[length(s)],posled[i],cod);
    end;
  writeln;
  mars(4);
  tak;
  out;
end.

```

Приложение 7

Программа решения уравнения Лапласа методом Монте-Карло

```

Program Direchle
uses crt;

```

```

const n=500;
  gr=4;
var z1,poln,poln1,i_x,i_y,shag,x,y,ch,i,j,s,napr1,napr2,napr3,napr4:integer;
  fi_le:text;
  mas:array [-gr..gr,-gr..gr] of integer;
  mas_height:array [-gr..gr,-gr..gr] of real;
  sum:real;
begin
  clrscr;
  for j:=-gr to gr do
    begin
      writeln;
      for i:=-gr to gr do
        begin
          if i=-gr then mas_height[j,i]:=0;
          if j=gr then mas_height[j,i]:=0;
          if j=-gr then
            begin
              mas_height[j,i]:=poln;
              inc(poln);
            end;
          if i=gr then
            begin
              dec(poln);
              mas_height[j,i]:=poln;
            end;
          end;
        end;
      writeln;
      randomize;
      assign(fi_le,'c:/direchle.dat');
      rewrite(fi_le);
      for i_x:=-gr+1 to gr-1 do
        for i_y:=-gr+1 to gr-1 do
          begin
            ch:=0;
            for i:=1 to n do
              begin
                x:=-i_x;y:=i_y;shag:=0;
                while (x<>gr) and (y<>gr) and (x<>-gr) and (y<>-gr) do
                  begin
                    s:=random(9);
                    if (s=0) or (s=4) then begin inc(y);end;
                    if (s=1) or (s=5) then begin inc(x);end;
                    if (s=2) or (s=6) then begin dec(y);end;

```

```

    if (s=3) or (s=7) then begin dec(x);end;
    inc(ch);
    inc(shag);
    end;
mas[x,y]:=mas[x,y]+shag;
end;
for z1:=-gr+1 to gr-1 do
    sum:=sum+(mas[z1,gr]/ch*mas_height[-z1,gr]);
for z1:=gr-1 downto -gr+1 do
    sum:=sum+(mas[gr,z1]/ch*mas_height[-gr,z1]);
mas_height[i_x,i_y]:=sum;
sum:=0;
for i:=-gr to gr do
for j:=-gr to gr do
    mas[i,j]:=0;
end;
for j:=-gr to gr do
begin
writeln(fi_le);
for i:=-gr to gr do
write(fi_le, mas_height[j,i]:2:3, ' ');
end;
close(fi_le);
end.

```

Приложение 8

Программа решения уравнения теплопроводности методом Монте-Карло

```

program montik;
uses crt;
const
    stx=0.125; {шаг по длине}
    stt=0.01; {шаг по времени}
    mt=0.07; {время }
    bts=9; {начальная температура на левом конце}
    tle=0; { начальная температура на левом конце }
    tre=0; { начальная температура на левом конце }
    Ni=500; {Число испытаний}
    ld=0.5; {лямда}
var
    mv:array[0..5] of real;
    Mass:array[0..10,0..10] of real;
    g:array[0..10,0..10] of integer;
    N,M,XX,Tt,x,t,i,vn,t1,x1:integer;

```

```

    tv,m,l:real;
    f:text;
label Metka;

function Convert_St_Int(vh:real):integer;
var
    vh_str:string;
    err_vih,pos_s,st_int:integer;
begin
    str(vh:2:2,vh_str);
    pos_s:=pos('.',vh_str);
    vh_str:=copy(vh_str,1,pos_s-1);
    val(vh_str,st_int,err_vih);
    Convert_st_int:=st_int;
end;

begin
    clrscr;
    assign(f,'c:\el.dat');
    rewrite(f);
    mv[0]:=5;
    mv[1]:=ld*stt/(sqr(stx)+2*ld*stt);
    mv[2]:=(stt-ld*stt)/(sqr(stx)+2*ld*stt);
    mv[3]:=(sqr(stx)-2*stt+2*ld*stt)/(sqr(stx)+2*ld*stt);
    mv[4]:=(stt-stt*ld)/(sqr(stx)+2*ld*stt);
    mv[5]:=stt*ld/(sqr(stx)+2*ld*stt);
    N:=Convert_St_Int(1/stx);
    M:=Convert_St_Int(mt/stt);
    Xx:=1;
    Tt:=1;
    randomize;
    for x:=0 to N do
        begin
            Mass[x,0]:=bts;
        end;
    for t:=0 to M do
        begin
            Mass[0,t]:=tle;
            Mass[N,t]:=tpe;
        end;
    for t:=1 to M do
        begin {ЦИКЛ по времени}
            for x:=1 to N-1 do
                begin {ЦИКЛ по длине}
                    for i:=1 to Ni do

```

```

begin {цикл по испытаниям}
  tv:=0;
  rn:=random;
  for vn:=1 to 5 do
    begin {расчет по блужданиям}
      if (tv<rn)and(rn<(tv+mv[vn])) then goto Metka;
      tv:=tv+mv[vn];
    end;{конец цикла по vn}
  metka:
  case vn of
  1:Xx:=Xx-1;
  2:
    begin
      Xx:=Xx-1;
      Tt:=Tt-1;
    end;
  3:Tt:=Tt-1;
  4:
    begin
      Xx:=Xx+1;
      Tt:=Tt-1;
    end;
  5:Xx:=Xx+1;
  end;{конец условия case}
  if (Xx=0) or (Xx=N) or (Tt=0) then
    begin
      g[Xx,Tt]:=g[Xx,Tt]+1;
      Xx:=x;
      Tt:=t;
    end;
  end;{конец цикла по блужданиям}
  for t1:=0 to t do
    begin
      Mass[x,t]:=Mass[x,t]+Mass[0,t1]*g[0,t1]/Ni;
      Mass[x,t]:=Mass[x,t]+Mass[N,t1]*g[N,t1]/Ni
    end;
  for x1:=1 to N-1 do
    begin
      Mass[x,t]:=Mass[x,t]+Mass[x1,0]*g[x1,0]/Ni;
    end;
  for t1:=0 to 10 do
    begin
      for x1:=0 to 10 do
        begin
          g[x1,t1]:=0;

```

```

        end;
    end;
end;{conec cicla po X}
end;{conec cicla po T}
writeln;
l:=0;
write('X=  ');
for x1:=0 to N do
    begin
        write(' ',1:2:2,' ');
        l:=l+stx;
    end;
writeln;
for x1:=0 to N do
    begin
        write('-----');
    end;
writeln;
l:=stt*M;
for t:=M downto 0 do
    begin
        write('T=',1:2:2,' ');
        l:=l-stt;
        for x:=0 to N do
            begin
                write(' ',Mass[x,t]:2:2,' ');
                write(f,Mass[x,t]:2:2,' ');
            end;
            writeln;
            writeln(f);
        end;
    end;
readln;
close(f);
end.

```

Приложение 9

Программа вычисления интеграла методом зонтика Неймана

```

Uses crt;
const N=10000;
var i,is:integer;
    S,Sp,g1,g2,x,y:real;
    fil:text;
begin
    randomize;

```

```

assign(fil,'c:\result.dat');
rewrite(fil);
Sp:=Pi/2;
for i:=1 to N do
begin
g1:=random;
g2:=random;
x:=Pi/2+Pi/2*g1;
if g2<sin(x) then is:=is+1;
end;
s:=Sp*is/N;
writeln(is,S);
close(fil);
readln;
end.

```

Приложение 10

Программы вычисления значения Пи

```

Program 1_1; { Вычисление числа Пи. Метод Монте-Карло }
uses crt;
var
  n,i,m: Longint;
  x,y,p: Real;
begin
clrscr; {очистка экрана}
randomize;
write('Кол-во N='); readln(n);
m := 0;
for i := 0 to n do begin
x:=Random(10000)/10000;
y:= Random(10000)/10000;
if sqr(x)+sqr(y) <= 1 then
m:=m+1;
end;
p := 4*m/n;
writeln('Значение пи равно',p:3:9);
readkey;
end.

```

```

Program 1_2; { Вычисление Пи. Метод падающей иголки }
uses crt;
var
  n,j,l,a,k: Longint;
  x1,y1,x2,y2,s,ro,p: Real;

```

```

begin
clrscr;
randomize;
l:= 1; {длина иглы}
a:=2; {расстояние между прямыми}
write('Кол-во N=');
readln(n);
k:=0; {кол-во пересечений.}
for j := 1 to n do begin
x1:=Random(10000)/10000;
y1:=Random(10000)/10000;
x2:=Random(10000)/10000;
y2:=Random(10000)/10000;
s:=abs(y2-y1)/sqrt(sqr(y2-y1)+sqr(x2-x1));
ro:=(Random(10000)/10000)*2-1;
if abs(ro)<=s/2 then k:=k+1;
end;
p:=n/k;
writeln('Значение Пи равно',p:3:9);
readkey;
end.

```

Приложение 11

Имитационное моделирование движения нейтронов через пластинку (двухмерный случай)

Программа моделирования без учета сорта ядра.

```

Program berillii;
uses crt;
const a=7;
n=10000;
var mu,psi,x,e,bc,bt,p,h,g1,g2,g3,g4,z,z0:real;
i,j,ch_scvoz,ch_otr,ch_pogl,ch_rass:integer;
mu_disable,e_disable:boolean;
begin
clrscr;
randomize;
for j:=1 to 5 do
begin
ch_scvoz:=0;
ch_otr:=0;
ch_pogl:=0;
ch_rass:=0;
h:=3; g1:=1; z0:=0;
for i:=1 to n do

```

```

begin
  g2:=random; g3:=random;
  if not e_disable then e:=g1;
  if not mu_disable then mu:=2*g3-1;
  z:=z0-(ln(g2)*mu/e);
  if z>h then
  begin
    inc(ch_scvoz); mu_disable:=false; e_disable:=false;
  end;
  if z<0 then
  begin
    inc(ch_otr); mu_disable:=false; e_disable:=false;
  end;
  if (z<=h) and (z>=0)
  then
  begin
    if e<0.01 then bc:=4 else bc:=4-2.2*g1;
    bt:=bc+(0.113/sqrt(g1));
    p:=bc/bt;
    g4:=random;
    if g4<p then
    begin
      inc(ch_pogl);
      mu_disable:=false;
      e_disable:=false;
    end
    else
    begin
      x:=2*pi*g2;
      psi:=(1+a*mu)/sqrt(1+2*a*mu+a*a);
      e:=e*(a*a+2*a*mu+1)/(a+1)*(a+1);
      mu:=mu*psi+cos(x)*sqrt((1-mu)*(1-psi*psi));
      inc(ch_rass);
      mu_disable:=true;
      e_disable:=true;
    end;
  end;
  g1:=random;
end;
writeln(ch_scvoz/n*100:5:0,');
writeln(ch_otr/n*100:5:0,'доля отраженных=');
writeln(ch_pogl/n*100:5:0, 'Доля поглощенных=');
writeln(ch_rass/n*100:5:0,' доля проходящих');
end;
end.

```

Программа моделирования прохождения нейтрона через вещество с учетом сорта ядра

```
Program born_kislota;
uses crt;
label a12,a23,a34;
var s,z,zs,e:real;
    a,m,h,x,j,i,sch1,sch2,sch3,b,b1:integer;

procedure vzaimodeistvie;
var g,k,p1,p2,p3,s11,s12,s13,s21,s22,s23,s31,s32,s33,pv1,pv2,pv3:real;
begin
k:=random;
s11:=1.3*(3/(0.5*e+1.49)+1/(0.5*e+0.073));
s12:=0;
s13:=0;
s21:=3.5;
s22:=0;
s23:=0;
s31:=4+2.2*e;
s32:=0;
s33:=0.113/sqrt(e);
s:=s11+2*s21+s31+s12+2*s22+s32+s13+2*s23+s33;
p1:=(s11+s12+s13)/s;
p2:=2*(s21+s22+s23)/s;
p3:=(s31+s32+s33)/s;
if k<p1 then i:=1;{Водород}
if (p1<k) and (k<(p1+p2)) then i:=2;{Кислород}
if k>(p1+p2)then i:=3;{Бор}
case i of
1: write(' Водород');
2:write(' Кислород');
3:write(' Бор'); end;
{end;

procedure vzaimod2;
var g,e,s11,s12,s13,s21,s22,s23,s31,s32,s33,pv1,pv2,pv3:real;
begin }
g:=random;
pv1:=(s11+s21+s31)/s;
pv2:=(s12+s22+s32)/s;
pv3:=(s13+s23+s33)/s;
if g<pv1 then m:=1;{упругое}
if (pv2<g) and (g<(pv1+pv2)) then m:=2;{неупругое}
if g>(pv1+pv2) then m:=3;{захват}
case m of
```

```

1:writeln(' упругое');
2:writeln(' неупругое');
3:writeln(' захват'); end;
  end;

procedure dlinna_probega;
var x,g1,cos:real;
begin
x:=random;
x:=-ln(x);
g1:=random;
cos:=2*g1-1;
z:=x*cos;
end;

{ Головная программа)
begin
clrscr;
randomize;
sch3:=0; sch1:=0; sch2:=0; h:=5; b:=0;
e:=0.001+11*random;
for a:=1 to 1000 do begin
a12:
vzaimodeistvie;
if m=3 then begin sch3:=sch3+1; goto a23; end;
if m=2 then begin sch2:=sch2+1; end;
if m=1 then begin sch1:=sch1+1; end;
dlinna_probega;
zs:=zs+z;
writeln(zs);
if zs<0 then begin b1:=b1+1; goto a23; end else goto a34;
a34:
if zs>h then begin b:=b+1; goto a23; end else goto a12;
a23:

end;
writeln('упругое', sch1, ' неупругое ',sch2,' Захват ',sch3);
writeln('Захват ',sch3,' Отраженные нейтроны',b1,' Проходящие нейтроны', b);
readln;
end.

```

Приложение 12

Программа прохождения гамма-излучения через вещество

```

Program Gamma;
var
  x1:array[0..500] of real;

```

```

y:array[0..500] of real;
i,j,NMax,k,N3,N2,N1:word;
Sigma,Ss,Sc,CosAlfa,X,D,Lambda:real;
G3,ed,p1,p2,p3,l,Lm:real;
out:text;
z:integer;
begin
  assign(out,'c:\gamma1.dat');rewrite(out);
  randomize;
  N1:=0; N2:=0;N3:=0;
  Ro:=1.5; {плотность вещества}
  Nmax:=100; {Число историй}
  Ss:=0.01; {микросечение рассеяния}
  Sc:=0.005; {микросечение захвата}
  Sigma:=(Ss+Sc)*ro; {макросечение}

  D:=5; {толщина пластинки}
  i:=0; k:=0; lm:=0;
repeat {цикл по историям}
  X:=0; {начальная координата}
  CosAlfa:=1; {начальный косинус угла}
  j:=1;
repeat
  Lambda:=-ln(Random)/Sigma;
  lm:=lm+lambda;
  X:=X+Lambda*CosAlfa;
  if x<0 then begin Inc(N1);break end;
  if x>d then begin Inc(N3);break end;
  if Random>Sc/(Sc+Ss) then begin Inc(N2);
  break end else CosAlfa:=2*Random-1;
  inc(j);
until false;
g3:=random;
  if g3>0.5 then ed:=-1 else ed:=1;
  x1[j]:=x1[j]+Lambda*Cosalfa;
  y[j]:=y[j]+Lambda*ed*sqrt(1-cosalfa*cosalfa);

  writeln('x=',x1[i],' ',y=',y[i]);
  Writeln(out,x1[i],' ',y[i]);
  inc(k);
  writeln(lm:3:2);
until k>=NMax;
p1:=N1/NMax;
p2:=N2/Nmax;
p3:=N3/Nmax;

```

```

writeln('доля отраженных=',p1:3:2);
writeln('Доля поглощенных=',p2:3:2);
writeln('доля прошедших=',p3:3:2);
writeln('среднее число пробегов=',k/Nmax:3:2);
writeln('средняя длина пробега=',lm/k:3:2);
readln;
close(out);
end.

```

Приложение 13

Программа моделирования распространения упругих волн в пористых средах

```

program P_us
! * Программа расчета пространственно - энергетического распределения *
! * поля скважинного генератора упругих волн в призабойной зоне пласта:

! БЕЗ границ
implicit complex(z)
implicit real(m)
integer,parameter::nm=50,nm1=500
real(8) pole(nm,nm1),pol(nm,nm1),npor(nm,nm1)
real(8) amp,ri,ro,pi,sx1,dr
real(8) m11(3),r11(3),m2(5)
real(8) k,v,w

OPEN(1,FILE='pol_0.DAT',STATUS='REPLACE')
OPEN(15,FILE='TR.DAT',STATUS='REPLACE')
OPEN(16,FILE='TR_25.DAT',STATUS='REPLACE')
! Читаем спектр с файла
! Параметры пористой среды
Print*,'Begin program '
l=3 ! Индексы сред
j=2
pi=3.14159265358979323846264
pi_2=acos(0.)

Eimp=20000. ! Энергия в ваттах на кв. м
ll1=0
ll2=0
print*,'To insert depth, h (m)'
read*,h
h=h*100.
print*,'Oscillation frequency f (hertz)'
read*,fr
print*,'imput NISA (istoriy)'
read*,NISA

```

```

        klet=nm
!11 continue
        k1=-1
        ns=1
        ni=0
        w=2*pi*fr
        h1=h/klet
        dr=h1*.72
        n2=1
        nss=10
        nii=100
        li=nm
        lj=nm1
!Obnuleni rab. massiva
        pole=0.
        pol=0.
        npor=0.

```

!Начало розыгрыша историй акустических квантов

```

m2(j)=2.16
ro=2.16
r11(j)=233406. !скорость
sx1=m2(j)*r11(j)
k_p m11(j)=1.8e-6 ! коэффициент
v=r11(j)
k=w/v
! p12=fr/r11(j)
!p12=0.
print*, 'm11(j)', m11(j), ' fr=', fr
!-----
Anul=sqrt(Eimp/(w**2*v*ro))
print*, 'anul=', anul
print*, ' m2(j)=', m2(j)
print*, ' v=', v
print*, ' m11(j)=', m11(j)
print*, ' fr=', fr/(2*pi)
read*, rrrrr
7 ni=ni+1
        n2=1
! Розыгрыш параметров источника квантов !!!!
n1=nm/2
x1=n1
amp=Anul

```

```

!-----
      hh2=(klet-n1)*h1
      hh1=h-hh2
      IF(ni.GE.nii*ns) GOTO 15
! Розыгрыш угла вылета кванта из источника
124  Call RanDom_Number(bd)
      a11=pi*bd
          amin=.8*Atan(1./klet)
          amax=pi-amin
          if(a11.Le.amin.or.a11.ge.amax) goto 124
      k1=1.
      r1=0.5*h/ABS(COS(a11))
      IF(a11.GT.pi_2) then
          k1=-1
          r1=hh1/ABS(COS(a11)) ! для уравнивания шансов попадания в противо-
положные границы
! следует положить
      endif
      ri=0.
      r5=ABS(COS(a11))/h1
      r6=SIN(a11)/h1
      r2=h/ABS(COS(a11))
! Начало траектории лучей квантов
5  ri=ri+dr
      IF(ri.GT.r1) GOTO 7
          ! Изменен GE на GT
      l3=NINT(ri*r5)
      l1=n1+k1*l3
          l4=NINT(ri*r6)
      l2=n2+l4
          if(l2.gt.nm1) print*,l4 !l2=200
!Условие для обязательного изменения, перехода
! в новую расчетную клетку
      IF(l1.EQ.l1.AND.l2.EQ.l2) GOTO 5

      pol(l1,l2)=pol(l1,l2)+(amp/(ri))*cos(w*1.-k*ri)*exp(-m11(j)*ri)
      npor(l1,l2)=npor(l1,l2)+1.
          l1=l1
      l2=l2
      IF((l2-lj).LT.0) goto 5
          goto 7
15  ns=ns+1
      WRITE(*,85) ni
85  FORMAT(1x, ' ', i6, ' ')
      IF(ni.LT.nisa) GOTO 7

```

```
print*,'Out of random process'  
!S! * Выход из розыгрыша историй*
```

```
! Вычисление плотности потока энергии по вектору Умова  
! размерности: плотность энергии в вт/кв.м, смещения в м, плотность в г/куб.см  
! скорости волн в см/сек.
```

```
DO i=1,li  
DO i1=1,lj  
if(npor(i,i1).gt.0.) then  
t_pole=(((pol(i,i1)))/nisa)**2  
pole(i,i1)=0.5*t_pole*fr**2*sx1  
else  
pole(i,i1)=0.  
endif  
enddo  
enddo  
do ii=1,nm1  
do ji=1,nm  
if(pole(ji,ii)>0.0) then  
write(15,*) ii, ' ',ji*5, ' ',log10((pole(ji,ii)))  
else  
write(15,*) ii, ' ',ji*5, ' ',-10.  
endif  
enddo  
enddo  
jj=nm/2  
DO ii=1,nm1  
if(pole(jj,ii)>0.0) then  
write(16,*) ii, ' ',log10(pole(jj,ii))  
else  
write(16,*) ii, ' ',-18.0  
endif  
ENDDO  
do ii=1,nm1  
do ji=1,nm  
if(pole(ji,ii)>0.0) then  
pole(ji,ii)=log10(pole(ji,ii))  
else  
pole(ji,ii)=-10  
endif  
enddo  
enddo  
DO i1=1,lj  
WRITE(1,31) (pole(i,i1),i=1,li)  
Enddo
```

```

31 FORMAT(",50(E10.3,")
310 FORMAT(",50(E10.3,")
!20 FORMAT(1X,i3,1x,50(A1))
28 FORMAT(/1X,'  ',/10(E10.3,1X)/
      STOP
END program P_us

```

Приложение 14

Программа моделирования спонтанного излучения

```

uses crt;
const n=50;
      a21=100;
var t,p:array[1..n] of real;
      result:array[1..n] of integer;
      temp,g,max:real;
      ch,i,j:integer;
      f:text;
begin
  clrscr;
  randomize;
  assign(f,'pokesh.dat');
  rewrite(f);
  for i:=1 to n do
    begin
      g:=random;
      t[i]:=-ln(g)/a21;
      writeln(t[i]:5:5);
    end;
  writeln;
  for j:=1 to n do
    for i:=1 to n do
      if t[i]>t[j] then
        begin
          temp:=t[j];t[j]:=t[i];t[i]:=temp;
        end;
    for j:=1 to n do
      writeln(t[j]:5:5);
    for i:=1 to n do
      p[i]:=a21*exp(-a21*t[i]);
      writeln;
    for j:=1 to n do
      writeln(f,t[j],' ',p[j]:5:5);
    close(f);
  end.

```

Программа моделирования методом молекулярной динамики

Программа написана на языке Фортран

```

PROGRAM md
  DIMENSION x(2000),y(2000),z(2000),vx(2000),vy(2000),vz(2000)
  DIMENSION ax(2000),ay(2000),az(2000)
  character cnfile*30
  data dt3 /0/
  write(*,(' enter end data file name '))
  read (*,'(A)') cnfile
  open(2,file = cnfile,status = 'unknown')
  CALL start(x,y,z,vx,vy,vz,N,Sx,Sy,Sz,dt,dt2,nsnap,ntime)
  CALL accel(x,y,z,ax,ay,az,N,Sx,Sy,Sz, virial,zpe)
  virial =0.0
  zpe =0.0
  DO 100 isnap = 1,nsnap
    DO 10 itime = 1,ntime
      CALL
move(x,y,z,vx,vy,vz,ax,ay,az,N,Sx,Sy,Sz,dt,dt2,flx,fly,flz, virial,zke,zpe)
10 CONTINUE
  dt3 = dt3 + dt
  CALL output(flx,fly,flz, virial,zke,zpe,Sx,Sy,Sz,dt,N,ntime, dt3)
100 CONTINUE
  close(2)
  STOP
  END
! подпрограмма
SUBROUTINE start(x,y,z,vx,vy,vz,N,Sx,Sy,Sz,dt,dt2,nsnap,ntime)
  DIMENSION x(2000),y(2000),z(2000),vx(2000),vy(2000),vz(2000)
  WRITE(6,*) 'Input number of particles!'введите число частиц'
  READ(5,*) N
  WRITE(6,*) 'Input box lenght: Sx, Sy, Sz!'введите размеры ящика'
  READ(5,*) Sx,Sy,Sz
  WRITE(6,*) 'Input time step: dt!'введите шаг по времени'
  READ(5,*) dt
  dt2 = dt*dt
  WRITE(6,*) 'Input max. velocity: vmax!'введите максимальное значение
скорости'
  READ(5,*) vmax
  WRITE(6,*) 'Input number of snapshots and number of steps between their:
nsnap and ntime!'введите число снимков и число шагов между ними'
  READ(5,*) nsnap,ntime

```

```

WRITE(6,*) 'Input random negative number: iseed!'введите отрицательное
случайное начальное число'
READ(5,*) iseed
WRITE(6,*) 'Input number of configuration: 1=old, 2=hot, 3=could!'введите
конфигурацию: 1=старая, 2=горячая, 3=холодная'
READ(5,*) icf
IF (icf.eq.1) then
! чтение старой конфигурации
DO 10 i=1,N
READ(8,12) x(i),y(i),z(i),vx(i),vy(i),vz(i)
12 FORMAT(4(2x,f10.5))
10 CONTINUE
ELSEIF (icf.eq.3) then
! упорядоченная (холодная) начальная конфигурация
area1 = Sx*Sy*Sz/N
ys = 0.5*sqrt(3.0)
a = sqrt(area1/ys)
Ly = 2*int(0.5*(1.0 + Sy/(a*ys)))
Lz = 2*int(0.5*(1.0 + Sz/(a*ys)))
Lx = N/(Ly*Lz)
DO 30 ix = 1,Lx
DO 20 iy = 1,Ly
do 19 iz = 1,Lz
z(i) = (iz - 0.5)*a*ys
i=(iy - 1)*Ly + ix
y(i) = (iy - 0.5)*a*ys
IF (mod(iy,2).eq.0) then
x(i) = (ix - 0.25)*a
ELSE
x(i) = (ix - 0.75)*a
END IF
vx(i) = vmax*(2*ran(iseed) - 1)
vy(i) = vmax*(2*ran(iseed) - 1)
vz(i) = vmax*(2*ran(iseed) - 1)
19 continue
20 CONTINUE
30 CONTINUE
ELSE
! случайная (горячая) конфигурация
DO 40 i = 1,N
x(i) = Sx*ran(iseed)
y(i) = Sy*ran(iseed)
z(i) = Sz*ran(iseed)
vx(i) = vmax*(2*ran(iseed) - 1)
vy(i) = vmax*(2*ran(iseed) - 1)

```

```

          vz(i) = vmax*(2*ran(iseed) - 1)
40  CONTINUE
      ENDIF
      DO 50 i = 1,N
          vxcum = vxcum + vx(i)
          vycum = vycum + vy(i)
          vzcum = vzcum + vz(i)
50  CONTINUE
      vxcum = vxcum/N
      vycum = vycum/N
      vzcum = vzcum/N
      DO 60 i = 1,N
          vx(i) = vx(i) - vxcum
          vy(i) = vy(i) - vycum
          vz(i) = vz(i) - vzcum
60  CONTINUE
      RETURN
      END

```

Подпрограмма MOVE

```

      SUBROUTINE move
(x,y,z,vx,vy,vz,ax,ay,az,N,Sx,Sy,Sz,dt,dt2,flx,fly,flz,virial,zke,zpe)
      DIMENSION x(2000),y(2000),z(2000),vx(2000),vy(2000),vz(2000)
      DIMENSION ax(2000),ay(2000),az(2000)
      DO 10 i = 1,N
          xnew = x(i) + vx(i)*dt + 0.5*ax(i)*dt2
          ynew = y(i) + vy(i)*dt + 0.5*ay(i)*dt2
          znew = z(i) + vz(i)*dt + 0.5*az(i)*dt2
          CALL cellp(xnew,ynew,znew,vx(i),vy(i),vz(i),Sx,Sy,Sz,flx,fly,flz)
          x(i) = xnew
          y(i) = ynew
          z(i) = znew
          vx(i) = vx(i) + 0.5*ax(i)*dt
          vy(i) = vy(i) + 0.5*ay(i)*dt
          vz(i) = vz(i) + 0.5*az(i)*dt
10  CONTINUE
      CALL accel(x,y,z,ax,ay,az,N,Sx,Sy,SZ,virial,zpe)
      DO 20 i = 1,n
          vx(i) = vx(i) + 0.5*dt*ax(i)
          vy(i) = vy(i) + 0.5*dt*ay(i)
          vz(i) = vz(i) + 0.5*dt*az(i)
          zke = zke + vx(i)*vx(i) + vy(i)*vy(i) + vz(i)*vz(i)
          virial = virial + ax(i)*x(i) + ay(i)*y(i) + az(i)*z(i)
20  CONTINUE

```

RETURN

END

Подпрограмма ACCEL

SUBROUTINE accel(x,y,z,ax,ay,az,N,Sx,Sy,Sz,virial,zpe)

DIMENSION x(2000),y(2000),z(2000),ax(2000),ay(2000),az(2000)

DO 1 i = 1,n

ax(i) =0.0

ay(i) =0.0

az(i) =0.0

1 CONTINUE

DO 20 i = 1,(n-1)

DO 10 j = (i+1),n

dx = x(i) - x(j)

dy = y(i) - y(j)

dz = z(i) - z(j)

CALL sep(dx,dy,dz,Sx,Sy,Sz)

r = sqrt(dx*dx + dy*dy + dz*dz)

CALL FandU(r,force,pot)

ax(i) = ax(i) + force*dx

ay(i) = ay(i) + force*dy

az(i) = az(i) + force*dz

virial = virial + force*r*r

zpe = zpe + pot

! определение силы, действующей на частицу j по 3-му закону Ньютона

ax(j) = ax(j) - force*dx

ay(j) = ay(j) - force*dy

az(j) = az(j) - force*dz

10 CONTINUE

20 CONTINUE

RETURN

END

Подпрограмма FANDU

SUBROUTINE FandU(r,force,pot)

ri = 1/r

ri3 = ri*ri*ri

ri6 = ri3*ri3

ri12 = ri6*ri6

g = 24*ri*ri6*(2*ri6 - 1)

force = g*ri

pot = 4*(ri12 - ri6)

RETURN

END

```

SUBROUTINE sep(dx,dy,dz,Sx,Sy,Sz)
IF (abs(dx).gt.0.5*Sx) dx = dx - sign(Sx,dx)
IF (abs(dy).gt.0.5*Sy) dy = dy - sign(Sy,dy)
IF (abs(dz).gt.0.5*Sz) dz = dz - sign(Sz,dz)
RETURN
END

```

```

SUBROUTINE cell(xnew,ynew,znew,Sx,Sy,Sz)
IF (xnew.lt.0) xnew = xnew + Sx
IF (xnew.gt.Sx) xnew = xnew - Sx
IF (ynew.lt.0) ynew = ynew + Sy
IF (ynew.gt.Sy) ynew = ynew - Sy
IF (znew.lt.0) znew = znew + Sz
IF (znew.gt.Sz) znew = znew - Sz
RETURN
END

```

```

SUBROUTINE cellp(xnew,ynew,znew,vx,vy,vz,Sx,Sy,Sz,flx,fly,flz)
IF (xnew.lt.0) then
  xnew = xnew + Sx
  flx = flx - vx
END IF
IF (xnew.gt.Sx) then
  xnew = xnew - Sx
  flx = flx + vx
END IF
IF (ynew.lt.0) then
  ynew = ynew + Sy
  fly = fly - vy
END IF
IF (ynew.gt.Sy) then
  ynew = ynew - Sy
  fly = fly + vy
END IF
IF (znew.lt.0) then
  znew = znew + Sz
  flz = flz - vz
END IF
IF (znew.gt.Sz) then
  znew = znew - Sz
  flz = flz + vz
END IF
RETURN
END

```

```

SUBROUTINE output(flx,fly,flz,virial,zke,zpe,Sx,Sy,Sz,dt,N,ntime,dt3)

```

```

data iff /0/
IF (iff.eq.0) then
    iff = 1
    write(6,*)' ke pe tot pflux pvirial pideal'
END IF
pflux = ((flx/Sx) + (fly/Sy) + (flz/Sz))/(3*dt*ntime)
zke = 0.5*zke/ntime
zpe = zpe/ntime
tot = zke + zpe
pideal = zke/(Sx*Sy*Sz)
pvirial = pideal + (0.5/(Sx*Sy*Sz))*virial/ntime
write(6,13) zke,zpe,tot,pflux, pvirial, pideal
write(2,14) dt3,zpe
13 format(6(1x,e12.4))
14 format(6(1x,e11.4))
zke = 0
zpe = 0
fly = 0
flx = 0
flz = 0
virial = 0
RETURN
END

```

Приложение 16

Броуновские траектории

```

Program brountraectoria;
uses crt;
var
    x:array[0..200] of real;
    y:array[0..200] of real;
    j,N,t:word;
    S,Mr,CosAlfa,Lambda:real;
    g1,g2,g3,ed,L:real;
    bro:text;
begin
    clrscr;
    assign(bro,'c:\gfh2-1.dat');rewrite(bro);
    randomize;
    N:=50;
    S:=1;
    x[0]:=0;
    y[0]:=0;
    t:=0; l:=0; j:=1;
repeat

```

```

g1:=random;
Lambda:=-ln(g1);
L:=L+Lambda;
g2:=random;
CosAlfa:=2*g2-1;
g3:=random;
if g3>0.5 then ed:=-1 else ed:=1;
x[j]:=x[j]+Lambda*Cosalfa;
y[j]:=y[j]+Lambda*ed*sqrt(1-cosalfa*cosalfa);
writeln('x=',x[j],' ',y=',y[j]);
Writeln(bro,x[j],' ',y[j]);
inc(t,j);
writeln(1:3:2);
until t>=N;
writeln('srednaja dlina=',L/t:3:2);
readln;
close(bro);
end.

```

Эдуард Рифович Жданов
Рамиль Фарукович Маликов
Рустем Канифьянович Хисматуллин

***Компьютерное моделирование
физических явлений и процессов
методом Монте-Карло***

Учебно-методическое пособие

Редактор Т.В. Подкопаева

Лиц. на издат. деят. Б848421 от 03.11.2000 г. Подписано в печать 25.05.2005.
Формат 60X84/16. Компьютерный набор. Гарнитура Times New Roman.
Отпечатано на ризографе. Усл. печ. л. – 8.0. Уч.-изд. л. – 7.8.
Тираж 100 экз. Заказ № 330

ИПК БГПУ 450000, г.Уфа, ул. Октябрьской революции, 3а