

УДК 004.932+519.688

Алгоритм генерации псевдослучайных чисел для компьютерного симулятора двухщелевой дифракции одиночных микрочастиц

Неустроев А.Л., студент

*Россия, 105005, г. Москва, МГТУ им. Н.Э. Баумана,
кафедра «Программное обеспечение ЭВМ и информационные технологии»*

Научный руководитель: Романова Т.Н., к.ф.-м.н., доцент

Россия, 105005, г. Москва, МГТУ им. Н.Э. Баумана

bauman@bmstu.ru

В работе [1] впервые наблюдалась двухщелевая дифракция одиночных электронных волн. Авторам [1] удалось визуализировать динамику формирования дифракционной картины по мере увеличения количества дифрагированных электронов. В результате поглощения каждого дифрагированного электрона на регистрирующем устройстве возникала светлая точка. При малом количестве дифрагированных электронов (порядка 10 – 100 шт.) точки в плоскости регистрирующего устройства располагались хаотически. По мере увеличения количества дифрагированных электронов до нескольких тысяч из отдельных хаотически расположенных точек формировалась хорошо воспроизводимая от эксперимента к эксперименту упорядоченная дифракционная картина, состоящая из чередующихся эквидистантных светлых и темных полос.

В последующие годы был выполнен ряд экспериментов по исследованию динамики формирования дифракционных картин в результате дифракции одиночных фотонов [2,3] и одиночных молекул [4]. Результаты этих экспериментов аналогичны результатам работы [1]: по мере увеличения количества дифрагированных микрочастиц из отдельных хаотически расположенных точек на регистрирующем устройстве формируется упорядоченная дифракционная картина, состоящая из чередующихся эквидистантных светлых и темных полос.

Значимость экспериментов [1-4] состоит в том, что в них максимально ярко проявляется фундаментальный принцип квантовой физики – корпускулярно-волновой дуализм микрообъектов. В пределах каждого из экспериментов [1-4] каждый отдельно взятый электрон, фотон или молекула сначала проявляет волновые, а затем корпускулярные свойства. Каждый отдельный электрон, фотон или молекула распространяется в пространстве как волновой пакет, что подтверждается наличием

дифракционной картины, но при взаимодействии с регистрирующим устройством происходит пространственная локализация каждого волнового пакета и каждый электрон, фотон или молекула поглощаются как корпускула, оставляя на регистрирующем устройстве след в виде одиночной точки.

Натурная демонстрация экспериментов типа [1-4] в рамках учебного курса квантовой физики проблематична из-за их технической сложности. Возможной альтернативной натурному эксперименту является имитационное компьютерное моделирование.

В работе [5] разработан алгоритм генерации псевдослучайных чисел, плотность распределения которых не только качественно, но и количественно совпадает с плотностью распределения микрочастиц в дифракционной картине при дифракции на одиночной щели. В настоящей работе на базе алгоритма [5] разработан алгоритм генерации псевдослучайных чисел для моделирования динамики формирования дифракционной картины при двухщелевой дифракции. На основе этого алгоритма создана компьютерная программа, позволяющая воспроизводить на экране монитора динамику формирования дифракционной картины при двухщелевой дифракции. Созданная программа так же позволяет рассчитывать числовые характеристики генерируемых случайных последовательностей и сравнивать их с числовыми характеристиками распределения микрочастиц в стационарной дифракционной картине при двухщелевой дифракции.

Физико-математическая модель и алгоритм генерации. Рассмотрим виртуальную экспериментальную установку, состоящую из последовательно расположенных источника моноэнергетических микрочастиц, непрозрачного экрана с двойной щелью и регистрирующего устройства (детектора). Движение микрочастиц от источника до экрана и от экрана до детектора считаем свободным. В этом случае стационарное пространственное распределение микрочастиц описывается стационарным волновым уравнением:

$$\Delta\Psi(\vec{r}) + k^2\Psi(\vec{r}) = 0, \quad (1)$$

где Δ - оператор Лапласа, k - модуль волнового вектора микрочастицы. Если частицы обладают массой, то $\Psi(\vec{r})$ в (1) это волновая функция микрочастиц [6], для безмассовых частиц (фотонов) $\Psi(\vec{r})$ это одна из проекций векторного потенциала [7]. Общим для всех типов микрочастиц является то, что вероятность обнаружить микрочастицу в некоторой точке пространства \vec{r} пропорциональна $|\Psi(\vec{r})|^2$ [6,7].

Будем считать, экран расположен в плоскости $z = 0$, а детектор в плоскости $z = L$. Щели в экране будем считать бесконечно вытянутыми вдоль оси Y , каждая щель имеет ширину a в направлении оси X , расстояние между щелями равно b . В этом случае $\Psi(\vec{r})$ в области пространства между экраном и детектором является однородной в направлении оси Y , т.е. $\Psi(\vec{r}) = \Psi(x, z)$.

В условиях реальных экспериментов [1-4] ширина щели мала по сравнению с радиусом кривизны волнового фронта и велика по сравнению с длиной волны λ . Это позволяет считать падающие на экран волны плоскими в пределах ширины щели, а при решении уравнения (1) использовать приближенные граничные условия Кирхгофа [8]: в области щелей в экране функция $\Psi(\vec{r})$ имеет такой же вид, какой она имела бы при отсутствии экрана, а на непрозрачных частях экрана $\Psi(\vec{r})_{z=0} = 0$ и $(\partial\Psi/\partial z)_{z=0} = 0$. В этом случае решение уравнения (1) в области пространства $z > 0$ имеет вид [8]:

$$\Psi(x, z) \sim \int_{-b-a/2}^{-a/2} \frac{e^{ik\sqrt{(x-x')^2+z^2}}}{\sqrt{(x-x')^2+z^2}} dx' + \int_{a/2}^{b+a/2} \frac{e^{ik\sqrt{(x-x')^2+z^2}}}{\sqrt{(x-x')^2+z^2}} dx'. \quad (2)$$

Интегрирование в (2) ведется по ширине щелей. Знак пропорциональности " \sim " в (2) означает, что решение (2) записано с точностью до постоянных коэффициентов, которые для дальнейших расчетов не имеют значения. В реальных экспериментах [1-4] выполнялось условие дифракции Фраунгофера $ka^2 \ll L$. Вычисление интеграла (2) в приближении Фраунгофера дает

$$|\Psi(X, L)|^2 \equiv |\Psi(X)|^2 = \frac{A}{X^2} \sin^2\left(\frac{X}{2}\right) \cos^2\left(\frac{\xi X}{2}\right), \quad (3)$$

где $X = \frac{2\pi bx}{\lambda L}$, $\xi = (a+b)/b$, A - некоторая нормировочная константа.

Задача работы состоит в создании генератора псевдослучайных чисел с плотностью распределения вероятности $f(X)$, совпадающей с плотностью распределения вероятности попадания микрочастиц в различные точки детектора. Чтобы $|\Psi(X)|^2$ можно было рассматривать в качестве $f(X)$, необходимо $|\Psi(X)|^2$ нормировать на единицу [5]. В результате для плотности дифракционного распределения вероятностей (ДРВ) получим

$$f(X) = \frac{4}{\pi X^2} \sin^2\left(\frac{X}{2}\right) \cos^2\left(\frac{\xi X}{2}\right). \quad (4)$$

Чтобы создать алгоритм генерации псевдослучайных чисел с плотностью ДРВ (4), воспользуемся, методом принятия-отклонения фон Неймана [9], который состоит в следующем. Подбираем ограничивающую функцию $t(X) \geq f(X)$, для которой задача создания генератора является более простой, чем задача создания генератора случайных чисел с распределением $f(X)$. Нормируем $t(X)$ на единицу и нормированную ограничивающую функцию обозначаем $r(X)$. Генерируем случайную величину Z с плотностью распределения $r(Z)$. Генерируем случайную величину U , равномерно распределенную на отрезке $[0,1]$. Если $U \leq f(Z)/t(Z)$, то возвращаем $X = Z$. В противном случае снова генерируем Z и U до тех пор, пока не выполнится условие $U \leq f(Z)/t(Z)$.

Выберем для плотности ДРВ (4) ограничивающую функцию $t(X)$ в виде

$$t(X) = \frac{4}{\pi X^2} \sin^2\left(\frac{X}{2}\right) \quad (5)$$

Тогда

$$r(X) = \frac{2}{\pi X^2} \sin^2\left(\frac{X}{2}\right). \quad (6)$$

Генератор псевдослучайных чисел с плотностью распределения (6) был разработан в [5]. С учетом этого, алгоритм генерации псевдослучайных чисел с плотностью распределения вероятностей (4) сводится к следующему:

Шаг 1. С помощью генератора из [5] генерируем псевдослучайную величину Z с плотностью распределения (6).

Шаг 2. Независимо от Z генерируем псевдослучайную величину U , равномерно распределенную в интервале $[0,1]$.

Шаг 3. Для каждого Z вычисляем величину $f(Z)/t(Z)$ и сравниваем с U . Если $U > f(Z)/t(Z)$, то возвращаемся к шагу 1 и повторяем шаги 2 и 3. Алгоритм продолжает возвращаться к шагу 1 до тех пор, пока на шагах 2 и 3 не будет сгенерирована пара псевдослучайных чисел (Z,U) , для которой $U \leq f(Z)/t(Z)$, и тогда мы «примем»

значение Z в качестве X . Повторяя процедуру, получим последовательность псевдослучайных чисел X_1, X_2, \dots, X_n с плотностью распределения (4).

Программная реализация и тестирование генератора. Программная реализация разработанного алгоритма генерации псевдослучайных чисел с плотностью ДРВ (4) выполнена в среде разработки Visual Studio на языке C#. Для генерации псевдослучайных чисел, равномерно распределенных на отрезке $[0,1]$, использован класс System.Random платформы .Net. Помимо генерации случайных чисел с плотностью ДРВ, созданная программа позволяет строить гистограммы и рассчитывать числовые характеристики генерируемых случайных последовательностей.

Для исследования качества созданного генератора в работе использованы несколько дополняющих друг-друга методов тестирования: визуальное тестирование динамики генерации случайных точек; графическое сравнение эмпирической и теоретической плотностей распределения случайных точек; сравнение теоретических и эмпирических значений числовых характеристик распределения случайных точек; тестирование с использованием критерия согласия.

Визуальное тестирование. С помощью созданной программы на экране монитора генерировались случайные точки с координатами (X, Y) . Плотность распределения точек вдоль оси Y равномерная, вдоль оси X плотность распределения точек соответствует плотности ДРВ (4). Динамика формирования дифракционной картины на экране монитора для значения параметра $\xi = 4$ представлена на рис. 1. При малом количестве точек n они распределены хаотически. По мере увеличения n из отдельных случайно распределенных точек формируется упорядоченная дифракционная картина, состоящая из чередующихся эквидистантных темных и светлых полос. Динамика формирования дифракционной картины на рис. 1 визуально хорошо соответствует динамике формирования дифракционных картин в натуральных экспериментах [1-4].

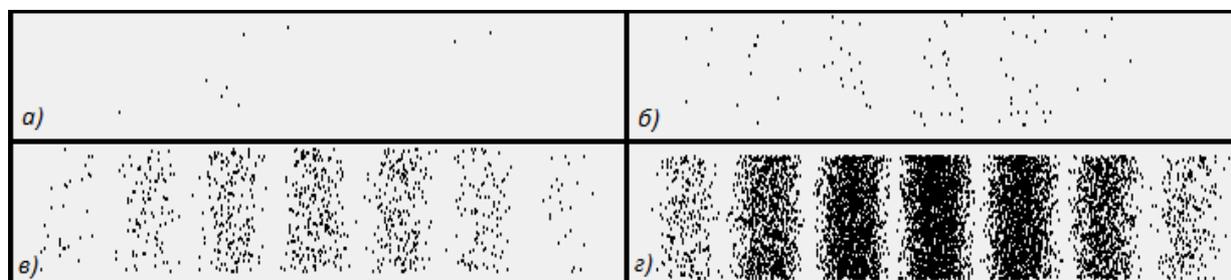


Рис.1. Динамика формирования дифракционной картины на экране монитора для значения параметра $\xi = 4$: а) количество точек $n = 10$, б) количество точек $n = 100$, в) количество точек $n = 1000$, г) количество точек $n = 10000$

Графическое тестирование. Для оценки качества созданного генератора выполнено графическое сравнение эмпирической плотности распределения вероятностей (гистограммы) с теоретической плотностью ДРВ (4). Для различных значений параметра ξ генерировались последовательности, содержащие 10^4 псевдослучайных чисел X_i каждая. Эти последовательности преобразовывались в вариационные ряды $X_{(i)}$ и на их основе строились гистограммы $f_n(X_{(i)})$. На гистограммы накладывались графики теоретической плотности ДРВ (4). Было установлено хорошее графическое совпадение гистограмм с теоретической плотностью ДРВ. Пример гистограммы с наложенным на нее графиком ДРВ (4) для значения параметра $\xi = 4$ представлен на рис. 2.

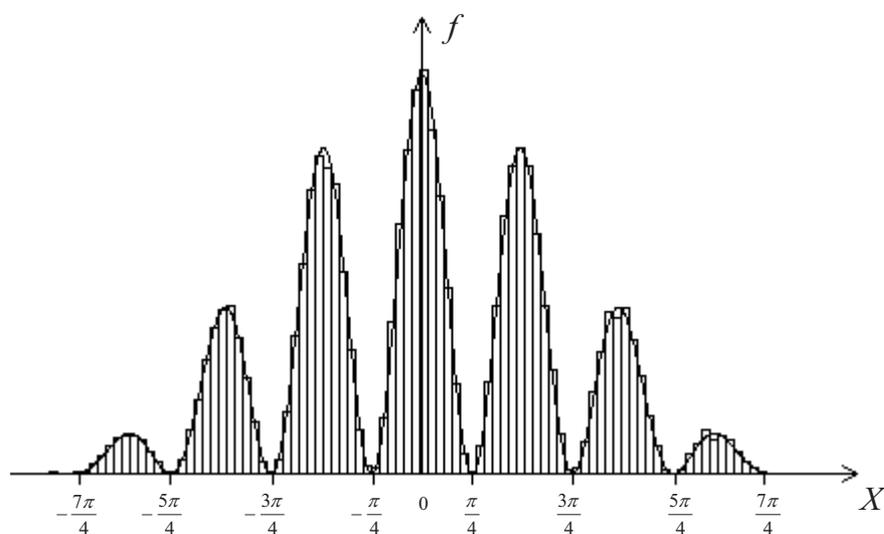


Рис.2. Гистограмма (ступенчатый график) и теоретическая плотность дифракционного распределения вероятностей, определяемая формулой (4), при $\xi = 4$

Числовое тестирование. Под числовым тестированием генератора далее понимается следующее. С помощью созданного генератора вырабатываются последовательности псевдослучайных чисел. На основе этих последовательностей рассчитываются выборочные числовые характеристики и сравниваются с числовыми характеристиками теоретической функции ДРВ. Обычно в качестве числовых характеристик случайной величины выбираются моменты различных порядков. В нашем случае такой выбор невозможен, поскольку для случайной величины X с плотностью распределения (4) расходятся интегралы, определяющие все моменты, начиная с математического ожидания. Такая ситуация типична для распределений с "тяжелыми хвостами". Поэтому, в настоящей работе в качестве числовых характеристик для тестирования генератора выбраны квантили различных уровней.

Для расчета теоретических значений квантилей необходимо вычислить функцию дифракционного распределения вероятностей $F(X)$. Из (4) получим

$$F(X) = \int_{-\infty}^X f(X') dX' = \frac{1}{2} - \frac{4}{\pi X} \sin^2\left(\frac{X}{2}\right) \cos^2\left(\frac{\xi X}{2}\right) + \frac{|X|}{\pi X} \left\{ Si(|X|) - \xi Si(\xi|X|) + \frac{(\xi-1)}{2} Si[(\xi-1)|X|] + \frac{(\xi+1)}{2} Si[(\xi+1)|X|] \right\}, \quad (7)$$

где Si - интегральный синус.

Для расчета квантилей интегральные синусы в (7) удобно аппроксимировать многочленами, формулы для которых приведены в [5]. Абсолютная погрешность такой аппроксимации не превышает 10^{-6} . Теоретические значения квантилей $X_{0.01}$, $X_{0.125}$, $X_{0.25}$, $X_{0.5}$, $X_{0.75}$, $X_{0.875}$ и $X_{0.99}$, рассчитанные по формуле (7), сравнивались с эмпирическими значениями квантилей. Для получения эмпирических значений квантилей с помощью созданной компьютерной программы генерировались 1000 числовых последовательностей по 10000 элементов в каждой. Для каждой последовательности строился вариационный ряд и из него для каждой последовательности находились значения квантилей. За эмпирические значения квантилей $\langle X_{0.01}^* \rangle$, $\langle X_{0.125}^* \rangle$, $\langle X_{0.25}^* \rangle$, $\langle X_{0.5}^* \rangle$, $\langle X_{0.75}^* \rangle$, $\langle X_{0.875}^* \rangle$, $\langle X_{0.99}^* \rangle$ принимались значения квантилей каждого уровня, усредненные по 1000 выборок. В результате было установлено, что отклонение эмпирических значений от теоретических для всех квантилей не превышает 2%.

Тестирование с использованием критерия согласия. Критерии согласия применяются для проверки гипотез о соответствии наблюдаемого эмпирического распределения вероятностей предполагаемому теоретическому распределению (7). Для тестирования генератора в работе использован критерий согласия Колмогорова-Смирнова.

Стандартизованный алгоритм применения критериев согласия состоит в следующем [10]. Рассмотрим в качестве основной гипотезы H_0 гипотезу о том, что генерируемые последовательности случайных чисел являются выборками случайной величины с функцией распределения $F(X)$ (7). Для проверки гипотезы H_0 необходимо вычислить по выборке эмпирическое значение S^* статистики S используемого критерия. Если полученное в эксперименте значение S^* достаточно мало, то считается, что оснований для отклонения гипотезы H_0 нет.

В критерии согласия Колмогорова-Смирнова используется статистика [10]

$$S_K = \frac{6nD_n + 1}{6\sqrt{n}}, \quad (8)$$

где n - число членов генерируемой случайной последовательности,

$$D_n = \max(D_n^+, D_n^-), \quad (9)$$

$$D_n^+ = \max_{1 \leq i \leq n} \left\{ \frac{i}{n} - F(X_{(i)}) \right\}, \quad D_n^- = \max_{1 \leq i \leq n} \left\{ F(X_{(i)}) - \frac{i-1}{n} \right\}, \quad (10)$$

$X_{(i)}$ - i -й член вариационного ряда, $F(X_{(i)})$ - значение теоретической функции ДРВ в точке $X_{(i)}$, определяемое формулой (7).

Статистика S_K является случайной величиной, распределение которой при $n \rightarrow \infty$ описывается функцией распределения вероятностей Колмогорова $K(S_K)$ [11]. Пусть $P\{S_K > S_K^*\}$ - вероятность случайной величине S_K иметь значение большее, чем наблюдаемое в эксперименте значение S_K^* . Если полученное в эксперименте значение S_K^* столь мало, что выполняется неравенство

$$P\{S_K > S_K^*\} = 1 - K(S_K^*) \geq \alpha, \quad (11)$$

где α - заданный уровень значимости (заданная вероятность ошибки первого рода), то нет оснований для отклонения гипотезы H_0 [10].

Тестирование генератора выполнялось следующим образом. Генерировались 1000 случайных выборок по 10000 элементов в каждой. Для каждой выборки строился вариационный ряд и с использованием формул (8)-(10) рассчитывалось значение S_K^* . Далее рассчитывалось усредненное по всем выборкам значение $\langle S_K^* \rangle$. Было получено $\langle S_K^* \rangle = 0.881$. По таблицам функции распределения Колмогорова [11] найдено $K(0.881) = 0.581$ и $P\{S_K > 0.881\} = 0.419$. Следовательно, на уровнях значимости $\alpha \leq 0.419$ нет оснований полагать, что генерируемые псевдослучайные числа распределены по закону, не совпадающему с теоретической функцией ДРВ.

При проверке статистических гипотез наиболее часто используются уровни значимости из интервала $\alpha = (0.005 - 0.2)$. Проведенные расчеты показывают, что на всех наиболее распространенных уровнях значимости критерий согласия Колмогорова-Смирнова не дает оснований усомниться в том, что вырабатываемые генератором последовательности псевдослучайных чисел являются выборками из генеральной совокупности случайной величины X с плотностью дифракционного распределения вероятностей (4).

Суммируя результаты тестирования можно утверждать, что реализованный в работе генератор позволяет вырабатывать последовательности псевдослучайных чисел,

распределение которых не только качественно, но и количественно соответствует плотности дифракционного распределения вероятностей при двухщелевой дифракции одиночных микрочастиц. Разработанный генератор открывает возможность корректного компьютерного моделирования экспериментов [1-4], демонстрирующих корпускулярно-волновой дуализм квантовых объектов.

Список литературы

1. Tonomura A., Endo J., Matsuda T., Kawasaki T., Ezawa H. Demonstration of single-electron buildup of an interference pattern // American Journal of Physics. 1989. Vol. 57, No. 2, P. 117-120. DOI: dx.doi.org/10.1119/1.16104.
2. Garcia N., Saveliev I. G., Sharonov M. Time-resolved diffraction and interference: Young's interference with photons of different energy as revealed by time resolution // Philosophical Transaction of the Royal Society A. 2002. Vol. 360, No. 5, P. 1039-1059. DOI: 10.1098/rsta.2001.0980.
3. Dimitrova T. L., Weis A. The wave-particle duality of light: A demonstration experiment // American Journal of Physics. 2008. Vol. 76, No. 2, P. 137-142. DOI: dx.doi.org/10.1119/1.2815364.
4. Juffmann T., Milic A., Mullneritsch M, et. al. Real-time single-molecule imaging of quantum interference // Nature Nanotechnology. 2012. Vol. 7, No. 5, P. 297-300. DOI: 10.1038/nnano.2012.34.
5. Неустроев А.Л., Романова Т.Н., Скуйбин Б.Г. Компьютерное моделирование динамики формирования дифракционной картины от одиночной щели с использованием генератора псевдослучайных чисел // Вестник МГТУ им. Н.Э.Баумана. Сер. Естественные науки. 2014. №6. С.37-52.
6. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Курс теоретической физики. В 7 т. Т.3. Квантовая механика. М.: Физматлит, 2004. 800 с.
7. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Курс теоретической физики. В 7 т. Т.2. Теория поля. М.: Физматлит, 2003. 536 с.
8. Матвеев А.Н. Оптика. М.: Высшая школа, 1985. 351 с.
9. Кельтон В.Д., Лоу М.Л. Имитационное моделирование. Классика CS: пер. с англ. СПб.: Издат. группа BHV, 2004. 848 с. [Kelton W.D, Averill M.L. Simulation modeling and analysis. 3rd ed. McGraw-Hill, 2000. 803 p.].

10. Рекомендации по стандартизации Р 50.1.037-2002. Прикладная статистика. Правила проверки согласия опытного распределения с теоретическим. Часть II. Непараметрические критерии. М.: Изд-во стандартов, 2002. 64 с.
11. Большев Л. Н., Смирнов Н. В. Таблицы математической статистики. М.: Наука, 1983. 416 с.