

## КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ ФОРМИРОВАНИЯ ДИФРАКЦИОННОЙ КАРТИНЫ ОТ ОДИНОЧНОЙ ЩЕЛИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ГЕНЕРАТОРА ПСЕВДОСЛУЧАЙНЫХ ЧИСЕЛ

А.Л. Неустроев, Т.Н. Романова, Б.Г. Скуйбин

МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, Российская Федерация  
e-mail: a.l.neustroev@mail.ru; rtn.51@mail.ru; bgscuibin@yandex.ru

*Показана возможность компьютерного моделирования важного в квантовой теории процесса формирования дифракционной картины при прохождении одиночных микрочастиц через щель в непрозрачном экране. Один из фундаментальных принципов квантовой механики — корпускулярно-волновой дуализм микрочастиц. Этот принцип максимально ярко проявляется в экспериментах по наблюдению динамики формирования дифракционной картины при прохождении одиночных микрочастиц через одну или несколько щелей в непрозрачном экране. На примере экрана с одиночной щелью выполнено первое комплексное исследование и обоснование возможности корректного компьютерного моделирования динамики формирования дифракционной картины с помощью генератора псевдослучайных чисел. Разработан алгоритм генерации и на его основе реализована компьютерная программа, позволяющая генерировать последовательности псевдослучайных чисел с плотностью распределения, совпадающей с плотностью распределения микрочастиц в дифракционной картине.*

**Ключевые слова:** дифракционная картина, дифракционное распределение вероятностей, компьютерное моделирование, алгоритм генерации псевдослучайных чисел.

## COMPUTER SIMULATION DYNAMICS OF THE BUILD-UP OF A SINGLE-SLIT DIFFRACTION PATTERN USING PSEUDORANDOM- NUMBER GENERATOR

A.L. Neustroev, T.N. Romanova, B.G. Scuibin

Bauman Moscow State Technical University, Moscow, Russian Federation  
e-mail: a.l.neustroev@mail.ru; rtn.51@mail.ru; bgscuibin@yandex.ru

*Shows the possibility of computer simulation important in quantum theory of the process of formation of the diffraction pattern by microparticles passing through wall with single slit. The wave-particle duality of the microparticles is one of fundamental principles of the quantum mechanics. This principle is most evident in viewing experiments on dynamics of the build-up of a diffraction pattern when microparticle passes through opaque wall with single or multiple slits. The first comprehensive research and justification of correct simulation capability for dynamics of the build-up of a diffraction pattern on an example of the screen with a single slit are performed using a pseudorandom-number generator. An algorithm of generation is developed and computer program based on this algorithm is implemented. This computer program allows generating pseudorandom-number sequence with a distribution density which coincides with the distribution density for the microparticles within the diffraction pattern.*

**Keywords:** diffraction pattern, diffractive distribution of probabilities, computer simulation, algorithm of pseudorandom-number generation.

**Введение.** В работе [1] К. Йенсон впервые экспериментально наблюдал дифракцию одиночных электронов на одной и несколь-

ких щелях в плоском экране. Согласно опросу журнала *Physics World* [2], этот эксперимент вошел в число десяти самых красивых экспериментов за всю историю физики.

Эксперимент Йенсона был развит в работах [3, 4], где наблюдалась двухщелевая дифракция одиночных электронных волн. Авторам удалось визуализировать динамику формирования дифракционной картины по мере увеличения числа дифрагированных электронов. В результате поглощения каждого дифрагированного электрона на регистрирующем устройстве возникала светлая точка. При малом числе дифрагированных электронов (около 10...100 шт.) точки в плоскости регистрирующего устройства располагались хаотически. По мере увеличения числа 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 были выполнены эксперименты по исследованию динамики формирования дифракционных картин в результате интерференции одиночных фотонов [5, 6] и одиночных молекул [7] после прохождения ими одной или нескольких щелей в экране. Результаты этих экспериментов аналогичны результатам, приведенным в работах [3, 4]: по мере увеличения числа дифрагированных микрочастиц из отдельных хаотически расположенных точек на регистрирующем устройстве образуется упорядоченная дифракционная картина, состоящая из чередующихся эквидистантных светлых и темных полос.

Значимость экспериментов [3–7] состоит в том, что в них максимально ярко проявляется фундаментальный принцип квантовой физики — корпускулярно-волновой дуализм микрообъектов. В пределах отдельного эксперимента [3–7] каждый электрон, фотон или молекула сначала проявляет волновые, а затем корпускулярные свойства. Каждый электрон, фотон или молекула распространяется в пространстве как волновой пакет, что подтверждается наличием интерференционной картины, но при взаимодействии с регистрирующим устройством происходит пространственная локализация волнового пакета и электрон, фотон или молекула поглощаются как корпускула, оставляя на регистрирующем устройстве след в виде одиночной точки.

Натурная демонстрация экспериментов типа [3–7] в рамках учебного курса квантовой физики проблематична вследствие их технической сложности. Возможная альтернатива натурному эксперименту — имитационное компьютерное моделирование. Динамика формирования дифракционных картин из отдельных случайных точек [3–7] позволяет полагать, что итоговую упорядоченную дифракционную картину из эквидистантных темных и светлых полос можно получить как

усредненный результат большого числа случайных взаимодействий отдельных микрочастиц с дифрагирующим объектом, а для компьютерного моделирования динамики формирования дифракционных (интерференционных) картин можно использовать генераторы случайных чисел.

В настоящей работе на примере экрана с одной щелью проведено первое комплексное исследование и обоснование возможности применения генераторов псевдослучайных чисел для корректного компьютерного моделирования динамики формирования дифракционных картин. Разработан алгоритм генерации псевдослучайных чисел с плотностью распределения, соответствующей плотности распределения микрочастиц в стационарной дифракционной картине. На основе этого алгоритма создана компьютерная программа, позволяющая воспроизводить на экране монитора динамику формирования дифракционной картины. Эта программа также позволяет рассчитывать числовые характеристики генерируемых случайных последовательностей и сравнивать их с числовыми характеристиками распределения микрочастиц в стационарной дифракционной картине.

**Физико-математическая модель и алгоритм генерации.** Рассмотрим виртуальную экспериментальную установку, состоящую из последовательно расположенных источника моноэнергетических микрочастиц, непрозрачного экрана с одиночной щелью и регистрирующего устройства (детектора). Движение микрочастиц от источника до щели в экране и от щели в экране до детектора полагаем 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  $\Delta$  — оператор Лапласа;  $k$  — модуль волнового вектора микрочастицы. Если частицы обладают массой, то величина  $\Psi(\vec{r})$  в (1) это волновая функция микрочастиц [8], для безмассовых частиц (фотонов) величина  $\Psi(\vec{r})$  — одна из проекций векторного потенциала [9]. Общим для всех типов микрочастиц является то, что вероятность обнаружить микрочастицу в некоторой точке пространства  $\vec{r}$  пропорциональна  $|\Psi(\vec{r})|^2$  [8, 9].

Примем, что плоскости экрана и детектора перпендикулярны оси  $Z$ , экран расположен в плоскости  $z = 0$ , а детектор в плоскости  $z = L$ . Щель в экране полагаем бесконечно вытянутой вдоль оси  $Y$  и имеющей ширину  $d$  в направлении оси  $X$ . Тогда величина  $\Psi(\vec{r})$  в области пространства между экраном и детектором является однородной в направлении оси  $Y$ :  $\Psi(\vec{r}) = \Psi(x, z)$ .

В условиях реальных экспериментов [3–7] ширина щели  $d$  мала по сравнению с радиусом кривизны волнового фронта и велика по сравнению с длиной волны  $\lambda$ . Это позволяет полагать падающие на экран волны плоскими в пределах ширины щели, а при решении уравнения (1) использовать приближенные граничные условия Кирхгофа [10]: в области щели 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 [10]:

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

Интегрирование в (2) ведется по ширине щели; знак пропорциональности “ $\sim$ ” обозначает, что решение (2) записано с точностью до постоянных коэффициентов, которые для дальнейших расчетов не имеют значения. В реальных экспериментах [3–7] выполнялось условие дифракции Фраунгофера  $kd^2 \ll L$ . Вычисление интеграла (2) в приближении Фраунгофера дает

$$|\Psi(x, L)|^2 \equiv |\Psi(x)|^2 = \frac{A}{x^2} \sin^2 \left( \frac{\pi dx}{\lambda L} \right), \quad (3)$$

где  $A$  — некоторая константа. Правая часть формулы (3) с точностью до постоянных множителей совпадает с классической формулой для распределения освещенности в дифракционной картине при дифракции света на щели в приближении Фраунгофера.

Задача настоящей 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 величину  $|\Psi(x)|^2$  можно было рассматривать в качестве плотности  $f(x)$ , необходимо эту величину нормировать на единицу:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx = 1. \quad (4)$$

Подставляя (3) в (4) и выполняя интегрирование, получаем  $A = (\lambda L/\pi^2 d)$  и

$$f(x) = \frac{\lambda L}{\pi^2 dx^2} \sin^2 \left( \frac{\pi dx}{\lambda L} \right).$$

Для дальнейших вычислений вместо координаты микрочастиц  $x$  введем безразмерную случайную величину  $X = (x/L)$ . В итоге для нормированной на единицу плотности дифракционного распределения

вероятностей (ДРВ) безразмерной случайной величины  $X$  запишем окончательную формулу:

$$f(X) = \frac{\lambda}{\pi^2 d X^2} \sin^2 \left( \frac{\pi d X}{\lambda} \right). \quad (5)$$

Чтобы создать алгоритм генерации псевдослучайных чисел с плотностью ДРВ (5), воспользуемся методом принятия-отклонения фон Неймана [11], который заключается в следующем. Подбираем ограничивающую функцию  $t(X) \geq f(X)$ , для которой задача создания генератора является более простой, чем задача создания генератора для функции  $f(X)$ . Нормируем функцию  $t(X)$  на единицу и обозначаем как  $r(X)$ . 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 величины  $Z$  и  $U$  до тех пор, пока не выполнится условие  $U \leq f(Z)/t(Z)$ .

В соответствии с изложенным выше выберем для плотности ДРВ (5) ограничивающую функцию  $t(X)$  в виде

$$t(X) = t_1(X) + t_2(X) + t_3(X),$$

где

$$t_1(X) = I_{(-\infty, -X_0)}(X) \frac{\lambda}{\pi^2 d X^2}, \quad t_2(X) = I_{(-X_0, X_0)}(X) \frac{d}{\lambda},$$

$$t_3(X) = I_{(X_0, \infty)}(X) \frac{\lambda}{\pi^2 d X^2},$$

$$I_{(X_1, X_2)}(X) = \begin{cases} 1, & \text{если } X_1 < X < X_2; \\ 0, & \text{если иначе,} \end{cases} \quad X_0 = \lambda/(\pi d).$$

Легко проверить, что  $t(X) \geq f(X)$  при всех значениях  $X$ .

Вычислим нормировочные интегралы

$$c_1 = \int_{-\infty}^{\infty} t_1(X) dX = \frac{1}{\pi}; \quad c_2 = \int_{-\infty}^{\infty} t_2(X) dX = \frac{2}{\pi}; \quad c_3 = \int_{-\infty}^{\infty} t_3(X) dX = \frac{1}{\pi}.$$

Введем нормированные на единицу функции

$$r_1(X) = \frac{t_1(X)}{c_1}; \quad r_2(X) = \frac{t_2(X)}{c_2}; \quad r_3(X) = \frac{t_3(X)}{c_3}.$$

Обозначим через  $r(X)$  нормированную на единицу ограничивающую функцию  $t(X)$ :

$$r(X) = \frac{t(X)}{(c_1 + c_2 + c_3)} = p_1 r_1(X) + p_2 r_2(X) + p_3 r_3(X),$$

где

$$p_1 = \frac{c_1}{(c_1 + c_2 + c_3)} = 0,25; \quad p_2 = \frac{c_2}{(c_1 + c_2 + c_3)} = 0,5;$$
$$p_3 = \frac{c_3}{(c_1 + c_2 + c_3)} = 0,25.$$

Функция распределения вероятностей  $R(X)$ , соответствующая плотности распределения вероятностей  $r(X)$ :

$$R(X) = p_1 R_1(X) + p_2 R_2(X) + p_3 R_3(X).$$

Здесь  $p_i$  — вероятность того, что случайная величина  $X$  попадает в диапазон значений, в котором  $R(X) = R_i(X)$ ;

$$R_1(X) = -I_{(-\infty, -X_0)}(X) \frac{\lambda}{\pi d X}; \quad R_2(X) = I_{(-X_0, X_0)}(X) \left( \frac{1}{2} + \frac{\pi d X}{2\lambda} \right);$$
$$R_3(X) = I_{(X_0, \infty)}(X) \left( 1 - \frac{\lambda}{\pi d X} \right).$$

Для каждой функции распределения  $R_i(Z)$  соответствующий генератор псевдослучайной величины  $Z$  можно найти методом обратного преобразования:

$$Z = -\frac{\lambda}{\pi d R_1}; \quad (6)$$

$$Z = (2R_2 - 1) \frac{\lambda}{\pi d}; \quad (7)$$

$$Z = \frac{\lambda}{\pi d(1 - R_3)}, \quad (8)$$

где  $R_1$ ,  $R_2$  и  $R_3$  — независимые псевдослучайные величины, каждая из которых равномерно распределена на отрезке  $[0, 1]$ .

В рассматриваемом случае  $p_1 = p_3 = 0,25$ ,  $p_2 = 0,5$ . С учетом этого алгоритм генерации псевдослучайной величины  $X$  с плотностью ДРВ (5) сводится к следующему.

**Шаг 1.** Генерируем псевдослучайную величину  $V$ , равномерно распределенную на отрезке  $[0, 1]$ . Если  $0 \leq V < 0,25$ , то запускаем генератор (6) и генерируем случайную величину  $Z$ , если  $0,25 \leq V < 0,75$ , то генерируем величину  $Z$  с помощью генератора (7), если  $0,75 \leq V \leq 1,00$ , то с помощью генератора (8).

**Шаг 2.** Независимо от величины  $Z$  генерируем псевдослучайную величину  $U$ , равномерно распределенную на отрезке  $[0, 1]$ .

**Шаг 3.** Для каждого значения величины  $Z$  вычисляем значение  $f(Z)/t(Z)$  и сравниваем со значением  $U$ . 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 1 и 2 не будет сгенерирована пара псевдослучайных чисел  $(Z, U)$ , для которой

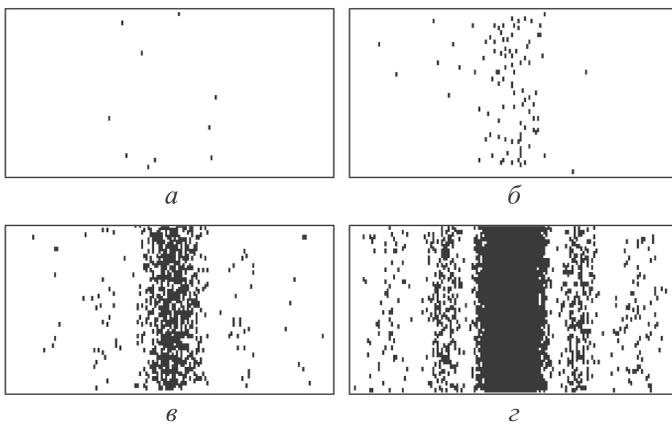
$U \leq f(Z)/t(Z)$  и тогда значение  $Z$  принимается в качестве значения  $X$ . Повторяя процедуру достаточное число раз, получаем последовательность псевдослучайных чисел  $X_1, X_2, \dots, X_n$  с плотностью распределения (5).

**Программная реализация и тестирование генератора.** Программная реализация разработанного алгоритма генерации псевдослучайных чисел с плотностью ДРВ (5) 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. Кроме генерации случайных чисел с плотностью ДРВ созданная программа позволяет строить гистограммы и рассчитывать числовые характеристики генерируемых случайных последовательностей.

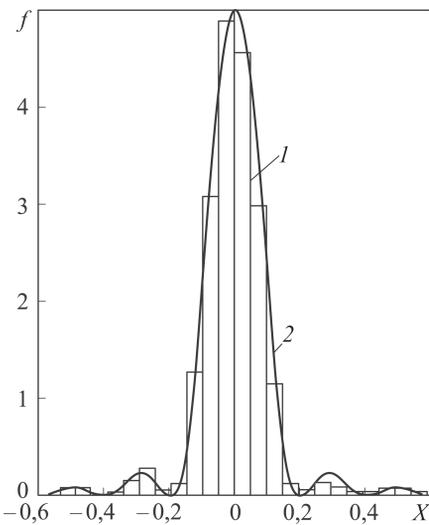
Для исследования качества созданного генератора в работе использованы несколько дополняющих друг друга методов тестирования: визуальное тестирование динамики генерации случайных точек; графическое сравнение эмпирической и теоретической плотностей распределения случайных точек; сравнение теоретических и эмпирических числовых характеристик распределения случайных точек; тестирование с помощью критериев 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  $X$  соответствует плотности ДРВ (5). Динамика формирования дифракционной картины на экране монитора для значений параметров  $d/\lambda = 5$  приведена на рис. 1. При малом числе точек  $n$  они распределены хаотически. По мере увеличения числа точек  $n$  из отдельных случайно распределенных точек формируется упорядоченная дифракционная картина, состоящая из чередующихся эквидистантных темных и светлых полос. Динамика формирования дифракционной картины (см. рис. 1) визуально хорошо соответствует динамике формирования дифракционных картин, полученных в натуральных экспериментах [3–7].

**Графическое тестирование.** Для оценки качества созданного генератора выполнено графическое сравнение эмпирической плотности распределения вероятностей (гистограммы) с теоретической плотностью ДРВ (5). Для различных значений параметра  $d/\lambda$  генерировались последовательности, содержащие каждая  $10^4$  псевдослучайных чисел  $X_i$ . 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 (5). Было



**Рис. 1.** Динамика формирования дифракционной картины на экране монитора для значений параметров  $d/\lambda = 5$  при числе точек  $n = 10$  (а), 100 (б), 1000 (в) и 10 000 (г)



**Рис. 2.** Гистограмма (1) и теоретическая плотность дифракционного распределения вероятностей (2), определяемая по формуле (5), для  $d/\lambda = 5$

установлено хорошее графическое совпадение гистограмм с теоретической плотностью ДРВ. Пример гистограммы с наложенной на нее кривой ДРВ (5) для  $d/\lambda = 5$  приведен на рис. 2.

**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 рассматриваемом случае такой выбор невозможен, поскольку для случайной величины  $X$  с плотностью распределения (5) 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 приняты квантили различных уровней.

Для расчета теоретических значений квантилей необходимо рассчитать функцию дифракционного распределения вероятностей  $F(X)$ .

Чтобы упростить дальнейшие выкладки, выполним в (5) замену переменной  $(2\pi dX/\lambda) \rightarrow X$ . Такая замена соответствует изменению масштаба по оси  $X$ . В новой переменной плотность ДРВ (5) преобразуется к виду

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

Для функции ДРВ  $F(X)$  получим

$$F(X) = \int_{-\infty}^X f(X') dX' = \frac{1}{2} - \frac{2}{\pi X} \sin^2\left(\frac{X}{2}\right) + \frac{|X|}{\pi X} Si(|X|). \quad (9)$$

Здесь  $Si$  – интегральный синус, разложение которого в степенной ряд имеет вид [12]

$$\frac{Si(|X|)}{\pi} = \frac{1}{\pi} \left( |X| - \frac{|X|^3}{18} + \frac{|X|^5}{600} - \frac{|X|^7}{35280} \right) + \varepsilon(|X|), \quad (10)$$

где  $\varepsilon(|X|)$  – остаточный член ряда. При  $|X| < 1$  имеем знакопередающийся убывающий ряд. По теореме Лейбница остаточный член такого ряда по модулю меньше первого отброшенного члена ряда:  $\varepsilon(|X|) < (9\pi 9!)^{-1} < 10^{-7}$ . Таким образом, при  $|X| < 1$  отбрасывание члена  $\varepsilon(|X|)$  в (10) позволяет получить абсолютную погрешность расчета функции  $F(X)$  не более  $10^{-7}$ .

При  $|X| \geq 1$  можно использовать аппроксимацию [12]:

$$Si(|X|) = \frac{\pi}{2} - \varphi(|X|) \cos(|X|) - \gamma(|X|) \sin(|X|);$$

$$\varphi(X) = \frac{1}{X} \left( \frac{X^8 + a_1 X^6 + a_2 X^4 + a_3 X^2 + a_4}{X^8 + b_1 X^6 + b_2 X^4 + b_3 X^2 + b_4} \right) + \varepsilon_1(X), \quad |\varepsilon_1(X)| < 5 \cdot 10^{-7}; \quad (11)$$

$$\gamma(X) = \frac{1}{X^2} \left( \frac{X^8 + a'_1 X^6 + a'_2 X^4 + a'_3 X^2 + a'_4}{X^8 + b'_1 X^6 + b'_2 X^4 + b'_3 X^2 + b'_4} \right) + \varepsilon_2(X), \quad |\varepsilon_2(X)| < 3 \cdot 10^{-7},$$

где

$$\begin{aligned} a_1 &= 38,027264, a_2 = 265,187033, a_3 = 335,677320, a_4 = 38,102495; \\ b_1 &= 40,021433, b_2 = 322,624911, b_3 = 570,236280, b_4 = 157,105423; \\ a'_1 &= 42,242855, a'_2 = 302,757865, a'_3 = 352,018498, a'_4 = 21,821899; \\ b'_1 &= 48,196927, b'_2 = 482,485984, b'_3 = 1114,978885, b'_4 = 449,690326. \end{aligned}$$

Если в (11) отбросить члены  $\varepsilon_1(X)$  и  $\varepsilon_2(X)$ , то из (9)–(11) запишем аппроксимационную формулу, которая при всех значениях  $X$  позво-

ляет определить функцию  $F(X)$  с абсолютной погрешностью не более  $3 \cdot 10^{-7}$ :

$$F(X) = \begin{cases} -\frac{2}{\pi X} \sin^2\left(\frac{X}{2}\right) - \\ -\frac{1}{\pi} [\varphi(X) \cos(X) + \gamma(X) \sin(X)] \text{ при } X \leq -1; \\ \frac{1}{2} - \frac{2}{\pi X} \sin^2\left(\frac{X}{2}\right) + \\ + \frac{X}{\pi} \left(1 - \frac{X^2}{18} + \frac{X^4}{600} - \frac{X^6}{35280}\right) \text{ при } |X| < 1; \\ 1 - \frac{2}{\pi X} \sin^2\left(\frac{X}{2}\right) - \frac{1}{\pi} [\varphi(X) \cos(X) + \\ + \gamma(X) \sin(X)] \text{ при } X \geq 1. \end{cases} \quad (12)$$

Функция ДРВ (12) использована здесь для расчета теоретических значений квантилей ДРВ. Результаты теоретического расчета квантилей  $X_{0,01}$ ,  $X_{0,125}$ ,  $X_{0,25}$ ,  $X_{0,5}$ ,  $X_{0,75}$ ,  $X_{0,875}$  и  $X_{0,99}$ , а также эмпирические значения квантилей разных уровней представлены в таблице (значения округлены до пятого знака).

Для получения эмпирических значений квантилей с помощью созданной компьютерной программы генерировались 1000 числовых последовательностей по 10 000 элементов в каждой. Для каждой последовательности строился вариационный ряд, а затем 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. Согласно таблице, отклонение эмпирических значений от теоретических для всех квантилей не превышает 2 %.

Все серединные точки, рассчитанные по эмпирическим значениям квантилей, отклоняются от центра теоретического распределения  $X = 0$  не более чем на 0,07, что составляет около 1 % теоретической полуширины центральной дифракционной полосы, которая равна  $2\pi$ . Это подтверждает, что плотность распределения генерируемых случайных чисел является симметричной относительно начала координат.

**Тестирование с использованием критериев согласия.** Критерии согласия применяются для проверки гипотез о соответствии наблюдаемого эмпирического распределения вероятностей предполагаемому теоретическому распределению (12). Для тестирования генератора в работе использованы критерий согласия Колмогорова – Смирнова и два варианта критерия  $\omega^2$ : критерий на основе статистики Крамера – Мизеса – Смирнова и критерий на основе статистики Андерсона – Дарлингга.

## Теоретические и эмпирические числовые характеристики ДРВ

Квантили	
Медиана	Уровней 0,01 и 0,99
Квартили	Октили
Теоретические значения	
$X_{0,5} = 0$	$X_{0,01} = -32,75924$ $X_{0,99} = 32,75924$ Срединная точка $(X_{0,01} + X_{0,99}) / 2 = 0$ Межквантильная полуширина $(X_{0,99} - X_{0,01}) / 2 = 32,75924$
Эмпирические значения	
$\langle X_{0,5}^* \rangle = 0,00019$	$\langle X_{0,01}^* \rangle = -32,22358$ $\langle X_{0,99}^* \rangle = 32,23578$ Срединная точка $\frac{\langle X_{0,01}^* \rangle + \langle X_{0,99}^* \rangle}{2} = 0,0061$ Межквантильная полуширина $\frac{\langle X_{0,99}^* \rangle - \langle X_{0,01}^* \rangle}{2} = 32,22968$
$\langle X_{0,25} \rangle = -1,69955$ $\langle X_{0,75} \rangle = 1,69955$ Срединная точка $(X_{0,25} + X_{0,75}) / 2 = 0$ Межквантильная полуширина $(X_{0,75} - X_{0,25}) / 2 = 1,69955$	$\langle X_{0,125} \rangle = -2,96765$ $\langle X_{0,875} \rangle = 2,96765$ Срединная точка $(X_{0,125} + X_{0,875}) / 2 = 0$ Межквантильная полуширина $(X_{0,875} - X_{0,125}) / 2 = 2,96765$
$\langle X_{0,25}^* \rangle = -1,70021$ $\langle X_{0,75}^* \rangle = 1,70025$ Срединная точка $\frac{\langle X_{0,25}^* \rangle + \langle X_{0,75}^* \rangle}{2} = 0,00004$ Межквантильная полуширина $\frac{\langle X_{0,75}^* \rangle - \langle X_{0,25}^* \rangle}{2} = 1,70023$	$\langle X_{0,125}^* \rangle = -2,96905$ $\langle X_{0,875}^* \rangle = 2,96809$ Срединная точка $\frac{\langle X_{0,125}^* \rangle + \langle X_{0,875}^* \rangle}{2} = -0,00048$ Межквантильная полуширина $\frac{\langle X_{0,875}^* \rangle - \langle X_{0,125}^* \rangle}{2} = 2,96857$

Далее будем использовать стандартизованный алгоритм применения критериев согласия [13]. Рассмотрим в качестве основной гипотезы  $H_0$  гипотезу о том, что генерируемые последовательности случайных чисел являются выборками случайной величины с функцией распределения  $F(X)$  (12). 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 оснований для отклонения гипотезы  $H_0$  нет.

*Критерий согласия Колмогорова – Смирнова.* В этом критерии используется статистика вида [13]

$$S_K = \frac{6nD_n + 1}{6\sqrt{n}}, \quad (13)$$

где  $n$  – число членов генерируемой случайной последовательности;

$$D_n = \max(D_n^+, D_n^-); \quad (14)$$

$$D_n^+ = \max_{1 \leq i \leq n} \left\{ \frac{i}{n} - F(X_{(i)}) \right\}, \quad D_n^- = \max_{1 \leq i \leq n} \left\{ F(X_{(i)}) - \frac{i-1}{n} \right\}; \quad (15)$$

$X_{(i)}$  –  $i$ -й член вариационного ряда;  $F(X_{(i)})$  – значение теоретической функции ДРВ в точке  $X_{(i)}$ , определяемое по (12).

Статистика  $S_K$  – случайная величина, распределение которой при  $n \rightarrow \infty$  описывается функцией распределения вероятностей Колмогорова  $K(S_K)$  [14]. 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

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

где  $\alpha$  – заданный уровень значимости (заданная вероятность ошибки первого рода), то нет оснований для отклонения гипотезы  $H_0$  [13].

Тестирование генератора выполнялось следующим образом. Генерировались 1000 случайных выборок по 10 000 элементов в каждой. Для каждой выборки строился вариационный ряд и с использованием формул (12)–(15) рассчитывалось значение  $S_K^*$ . Далее вычислялось усредненное по всем выборкам значение  $\langle S_K^* \rangle$ . Получено  $\langle S_K^* \rangle = 0,86822$ . По таблицам функции распределения Колмогорова [14] найдено  $K(0,86822) = 0,5596$  и  $P\{S_K > 0,86822\} = 0,44$ . Следовательно, на уровнях значимости  $\alpha \leq 0,44$  нет оснований полагать, что генерируемые псевдослучайные числа распределены по закону, не совпадающему с теоретической функцией ДРВ.

*Критерий согласия Крамера–Мизеса–Смирнова.* В этом критерии используется статистика вида [13]

$$S_{\omega} = \frac{1}{12n} + \sum_{i=1}^n \left[ F(X_{(i)}) - \frac{2i-1}{2n} \right]^2. \quad (16)$$

При  $n \rightarrow \infty$  статистика  $S_{\omega}$  (16) подчиняется закону с функцией распределения вероятностей  $a1(S_{\omega})$ . Формула для  $a1(S_{\omega})$  очень громоздкая и здесь не приведена. Имеются подробные таблицы [14] функции распределения  $a1(S_{\omega})$ .

Алгоритм тестирования генератора по критерию согласия Крамера–Мизеса–Смирнова аналогичен алгоритму тестирования критерия Колмогорова–Смирнова. Для тех же случайных выборок, что и в предыдущем случае, рассчитывалось усредненное по всем выборкам значение критерия  $\langle S_{\omega}^* \rangle$ . Получено  $\langle S_{\omega}^* \rangle = 0,16403$ . По таблицам значений функции распределения  $a1$  [14] было найдено  $a1(0,16403) = 0,642$ . Основная гипотеза  $H_0$  не противоречит критерию согласия, если

$$P\{S_{\omega} > 0,16403\} = 1 - a1(0,16403) = 0,358 \geq \alpha.$$

Таким образом, на уровнях значимости  $\alpha \leq 0,358$  основная гипотеза  $H_0$  не противоречит критерию согласия Крамера–Мизеса–Смирнова.

*Критерий согласия Андерсона–Дарлингга.* Этот критерий оперирует со статистикой [13]

$$S_{\Omega} = -n - 2 \sum_{i=1}^n \left\{ \frac{(2i-1)}{2n} \ln F(X_{(i)}) + \left[ 1 - \frac{(2i-1)}{2n} \right] \ln [1 - F(X_{(i)})] \right\}.$$

При  $n \rightarrow \infty$  статистика  $S_{\Omega}$  подчиняется закону с функцией распределения вероятностей  $a2(S_{\Omega})$ . Формула для функции  $a2(S_{\Omega})$  очень громоздкая и здесь не приведена. В работе [14] имеются подробные таблицы функции распределения  $a2(S_{\Omega})$ . Как и в двух рассмотренных выше случаях, рассчитывалось усредненное по 1000 выборок эмпирическое значение статистики  $\langle S_{\Omega}^* \rangle$ . Получено  $\langle S_{\Omega}^* \rangle = 0,99101$ . По таблицам значений функции распределения  $a2$  [14] найдено  $a2(\langle S_{\Omega}^* \rangle) = a2(0,99101) = 0,63845$ . Основная гипотеза  $H_0$  не противоречит критерию согласия, если

$$P\{S_{\Omega} > 0,99101\} = 1 - a2(0,99101) = 0,362 \geq \alpha.$$

Следовательно, на уровнях значимости  $\alpha \leq 0,362$  основная гипотеза  $H_0$  не противоречит критерию согласия Андерсона–Дарлингга.

При проверке статистических гипотез наиболее часто используются уровни значимости  $\alpha = 0,005 \dots 0,200$ . Проведенные расчеты показывают следующее: на всех наиболее распространенных уровнях

значимости ни один из трех использованных критериев согласия не дает оснований усомниться в том, что вырабатываемые генератором последовательности псевдослучайных чисел являются выборками из генеральной совокупности случайной величины  $X$  с плотностью ДРВ.

Суммируя результаты выполненного тестирования, можно утверждать, что реализованный генератор позволяет вырабатывать последовательности псевдослучайных чисел, распределение которых не только качественно, но и количественно соответствует плотности ДРВ. Разработанный генератор открывает возможность корректного компьютерного моделирования экспериментов [3–7], демонстрирующих корпускулярно-волновой дуализм квантовых объектов.

*Результаты настоящей статьи используются в компьютерных лабораторных работах “Принцип неопределенности Гейзенберга” и “Формирование дифракционной картины при прохождении одиночных микрочастиц через щель в непрозрачном экране” в студенческой экспериментальной лаборатории кафедры “Физики” МГТУ им. Н.Э. Баумана.*

## ЛИТЕРАТУРА

1. Jonsson C. Electron Diffraction at Multiple Slits // American Journal of Physics. 1974. Vol. 42. No. 1. P. 4–11.
2. Crease R.P. The most Beautiful Experiment // Physics World. 2002. Vol. 15. No. 9. P. 19–20.
3. Merly P.G., Missiroli G.F., Pozzi G. On the statistical aspect of electron interference phenomena // American Journal of Physics. 1974. Vol. 44. No. 3. P. 306–307.
4. Demonstration of single-electron buildup of an interference pattern / A. Tonomura, J. Endo, T. Matsuda, T. Kawasaki, H. Ezawa // American Journal of Physics. 1989. Vol. 57. No. 2. P. 117–120.
5. 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.
6. 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.
7. Real-time single-molecule imaging of quantum interference / T. Juffmann, A. Milic, M. Mullneritsch et. al. // Nature Nanotechnology. 2012. Vol. 7. No. 5. P. 297–300.
8. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Курс теоретической физики. Т. 3. Квантовая механика. М.: Физматлит, 2004. 800 с.
9. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Курс теоретической физики. Т. 2. Теория поля. М.: Физматлит, 2003. 536 с.
10. Матвеев А.Н. Оптика. М.: Высш. шк., 1985. 351 с.
11. Кельтон В., Лоу А. Имитационное моделирование. Классика CS. СПб.: Издат. группа BHV, 2004. 848 с.
12. Абрамовиц М., Стиган И. Справочник по специальным функциям. М.: Наука, 1979. 832 с.
13. Рекомендации по стандартизации Р 50.1.037–2002. Прикладная статистика. Правила проверки согласия опытного распределения с теоретическим. Ч. II. Непараметрические критерии. М.: Изд-во стандартов, 2002. 64 с.

## REFERENCES

- [1] Jonsson C. Electron diffraction at multiple slits. *Am. J. Phys.*, 1974, vol. 42, no. 1, pp. 4–11. DOI: dx.doi.org/10.1119/1.1987592
- [2] Crease R.P. The most Beautiful Experiment. *Physics World*, 2002, vol. 15, no. 9, pp. 19–20.
- [3] Merly P.G., Missiroli G.F., Pozzi G. On the statistical aspect of electron interference phenomena. *Am. J. Phys.*, 1974, vol. 44, no. 3, pp. 306–307. DOI: dx.doi.org/10.1119/1.10184
- [4] Tonomura A., Endo J., Matsuda T., Kawasaki T., Ezawa H. Demonstration of single-electron buildup of an interference pattern. *Am. J. Phys.*, 1989, vol. 57, no. 2, pp. 117–120. DOI: dx.doi.org/10.1119/1.16104
- [5] 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. *Roy. Soc. of London Phil. Tr. A*, 2002, vol. 360, no. 5, pp. 1039–1059. DOI: 10.1098/rsta.2001.0980
- [6] Dimitrova T.L., Weis A. The wave-particle duality of light: a demonstration experiment. *Am. J. Phys.*, 2008, vol. 76, no. 2, pp. 137–142. DOI: dx.doi.org/10.1119/1.2815364
- [7] Juffmann T., Milic A., Mullneritsch M. Real-time single-molecule imaging of quantum interference. *Nature Nanotech.*, 2012, vol. 7, no. 5, pp. 297–300. DOI: 10.1038/nnano.2012.34
- [8] Landau L.D., Lifshits E.M. *Teoreticheskaja fizika. V 10 t. T. 3. Kvantovaya mekhanika* [Theoretical physics. Ten-volume set. Vol. 3. Quantum Mechanics]. Moscow, Fizmatlit Publ., 2004. 800 p. (Eng. Ed.: Landau L.D., Lifshitz E.M. *Quantum Mechanics: Non-Relativistic Theory. Vol. 3. Course of Theoretical Physics S. 2nd Ed.* Oxford, Pergamon Press, 1965. 615 p.).
- [9] Landau L.D., Lifshits E.M. *Teoreticheskaja fizika. V 10 t. T. 2. Teoriya polya* [Theoretical physics. Ten-volume set. Vol. 3. The Classical Theory of Fields]. Moscow, Fizmatlit Publ., 2003. 536 p. (Eng. Ed.: Landau L.D., Lifshitz E.M. *The Classical Theory of Fields. Vol. 2. Course of Theoretical Physics S. 2nd ed.* Oxford, Pergamon Press, 1959. 387 p.).
- [10] Matveev A.N. *Optika* [The optics]. Moscow, Vysshaya Shkola Publ., 1985. 351 p.
- [11] Law A. M., Kelton W. D. *Simulation modeling and analysis*. 3rd ed. McGraw Hill Higher Education, 2000. 784 p. (Russ. Ed.: Kel'ton V., Lou A. *Imitatsionnoe modelirovanie. Klassika CS. SPb, Piter Publ.*, 2004. 848 p.).
- [12] Abramowitz M, Stegun I. *Handbook of mathematical functions with formulas, graphs, and mathematical tables*. The U.S. National Bureau of Standards, 1964. 1046 p. (Russ. Ed.: Abramovits M., Stigan I. *Spravochnik po spetsial'nym funktsiyam*. Moscow, Nauka Publ., 1979. 732 p.).
- [13] Rekomendatsii po standartizatsii RF R 50.1.037-2002. *Prikladnaya statistika. Pravila proverki soglasiya opytnogo raspredeleniya s teoreticheskim. Ch. II. Neparаметрические критерии*. [Recommendations for standardization RF P 50.1.037-2002. Applied statistics. Rules of check of experimental and theoretical distribution of the consent. Part II. Nonparametric goodness-of-fit test.]. Moscow, Izd. Standartov Publ., 2002. 64 p.
- [14] Bol'shev L.N., Smirnov N.V. *Tablitsy matematicheskoy statistiki* [Tables of Mathematical Statistics]. Moscow, Nauka Publ., 1983. 416 p.

Статья поступила в редакцию 13.12.2013

Неустроев Антон Леонидович — студент кафедры “Программное обеспечение ЭВМ и информационные технологии” МГТУ им. Н.Э. Баумана. Автор двух научных работ в области математического моделирования случайных процессов.

МГТУ им. Н.Э. Баумана, Российская Федерация, 105005, Москва, 2-я Бауманская ул., д. 5.

Neustroev A.L. — student of “Computer Software and Information Technologies” department of the Bauman Moscow State Technical University. Author of two publications in the field of mathematical simulation of random processes.

Bauman Moscow State Technical University, 2-ya Baumanskaya ul. 5, Moscow, 105005 Russian Federation.

Романова Татьяна Николаевна — канд. физ.-мат. наук, доцент кафедры “Программное обеспечение ЭВМ и информационные технологии” МГТУ им. Н.Э. Баумана. Автор 32 научных работ в области математики, физики, математического моделирования и программной инженерии.

МГТУ им. Н.Э. Баумана, Российская Федерация, 105005, Москва, 2-я Бауманская ул., д. 5.

Romanova T.N. — Cand. Sci. (Phys.-Math.), assoc. professor of “Computer Software and Information Technologies” department of the Bauman Moscow State Technical University. Author of 32 publications in the field of mathematic, physics, mathematical simulation and program engineering.

Bauman Moscow State Technical University, 2-ya Baumanskaya ul. 5, Moscow, 105005 Russian Federation.

Скуйбин Борис Георгиевич — канд. физ.-мат. наук, доцент кафедры “Физика” МГТУ им. Н.Э. Баумана. Автор более 50 научных работ в области физики.

МГТУ им. Н.Э. Баумана, Российская Федерация, 105005, Москва, 2-я Бауманская ул., д. 5.

Scuibin B.G. — Cand. Sci. (Phys.-Math.), assoc. professor of “Physics” department of the Bauman Moscow State Technical University. Author of more than 50 publications in the field of physics.

Bauman Moscow State Technical University, 2-ya Baumanskaya ul. 5, Moscow, 105005 Russian Federation.