

Nuclear Engineering Laboratory

M O N T E C U C C O L I N O

memorandum

Nuclear Reactor Physics

*Department of Energy and Nuclear Engineering
and of Environmental Control (DIENCA)*

University of Bologna

Doc. ID: LIN-M03.2007

Subject: Campinamento di una Maxwelliana

Date: June 24, 2007

Author: Giacomo Grasso

Phone: +39-051-6441708

e-mail: giacomo.grasso@mail.ing.unibo.it

Generazione di numeri pseudocasuali per campionamento da una funzione di distribuzione Maxwelliana

La funzione di distribuzione Maxwelliana (in energia) è espressa dalla relazione

$$f_M(E) = 2\sqrt{\frac{E}{\pi(kT)^3}} e^{-\frac{E}{kT}} \quad (1)$$

in cui k rappresenta la costante di Boltzmann e T la temperatura del sistema, espressa in Kelvin.

Per la generazione di una popolazione di numeri pseudocasuali campionati da una funzione di distribuzione Maxwelliana sono comunemente utilizzati due diversi algoritmi: il primo di questi è piuttosto semplice e per questo didatticamente valido, ma, come spesso accade, piuttosto inefficiente e poco performante, mentre il secondo, noto come algoritmo di Johnk, è più complesso ma sicuramente più elegante e performante.

Generazione per estrazione di componenti

Il primo metodo in uso si basa sull'estrazione di tre numeri iniziali da una funzione di distribuzione gaussiana, mediante i quali è quindi possibile campionare la funzione di distribuzione Maxwelliana secondo la formula

$$r = \frac{1}{\alpha} \sqrt{n_1^2 + n_2^2 + n_3^2}. \quad (2)$$

Il valore della costante α , che in questo primo caso assume solamente il significato di costante di normalizzazione, è dato da

$$\alpha = \sqrt{kT}. \quad (3)$$

È interessante notare il parallelismo, derivante da tale posizione, che viene ad instaurarsi fra i tre numeri estratti dalla popolazione Gaussiana e le componenti di velocità della particella appartenente alla distribuzione Maxwelliana di energia che si desidera riprodurre.

Per il campionamento della funzione di distribuzione Gaussiana, fra i diversi metodi possibili, si può ricorrere all'algoritmo di trasformazione Box-Muller per il campionamento di una funzione di distribuzione binormale: partendo da quest'ultimo e considerato il fatto che nel passaggio dal campionamento di una funzione di distribuzione binormale a quello di una funzione di distribuzione normale si perde la relazione iniziale fra i due valori estratti, che possono quindi essere assunti come indipendenti, si può pensare di estendere tale metodo anche al caso di una distribuzione trinormale,

ottenendo in un unico passaggio, per analogia, i tre numeri desiderati: estratti pertanto tre numeri pseudocasuali ζ_1 , ζ_2 e ζ_3 da una distribuzione uniforme nell'intervallo $[0, 1]$ (operazione comune mediante semplici algoritmi, integrati sovente nei più diffusi linguaggi di programmazione¹) si ha

$$\begin{aligned} n_1 &= \sqrt{-2\ln\zeta_1}\cos(2\pi\zeta_2) \\ n_2 &= \sqrt{-2\ln\zeta_1}\sin(2\pi\zeta_2)\sin(2\pi\zeta_3) \\ n_3 &= \sqrt{-2\ln\zeta_1}\sin(2\pi\zeta_2)\cos(2\pi\zeta_3). \end{aligned} \quad (4)$$

Algoritmo di Johnk

L'ultimo algoritmo in esame deriva dall'osservazione che la funzione di distribuzione Maxwelliana (1) è riconducibile ad una funzione di distribuzione Gamma

$$f_\Gamma(x) = \alpha(\alpha x)^{\beta-1} e^{-\alpha x} \frac{1}{\Gamma(\beta)} \quad (5)$$

qualora si assumano come parametri

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{1}{kT} \\ \beta &= \frac{3}{2} \\ x &= E. \end{aligned} \quad (6)$$

Partendo da questo assunto, l'algoritmo può essere globalmente descritto dalla formula

$$r = -kT(\ln\zeta_1 + \frac{\zeta_2}{\zeta_2^2 + \zeta_3^2} \ln\zeta_4) \quad (7)$$

in cui gli ζ_i rappresentano, secondo la medesima simbologia assunta in precedenza, numeri pseudocasuali estratti da una distribuzione uniforme nell'intervallo $[0, 1]$. L'unica limitazione della formula che descrive l'algoritmo di Johnk è che la somma $\zeta_2^2 + \zeta_3^2$ deve essere maggiore di 1.

Volendo tradurre la formula esposta precedentemente in un algoritmo, si ricava

i si estrae un primo numero pseudocasuale ζ_1 e si pone

$$r = -\ln\zeta_1; \quad (8)$$

¹Ritenendo nota l'esistenza di tali algoritmi se ne omette la descrizione in questa sede, richiamando l'attenzione del lettore all'importanza che ricoprono tali algoritmi generatori nella modellistica numerica in generale, dunque alla cura necessaria alla scelta dell'algoritmo che presenti le migliori proprietà di stabilità alla ricorsività ed il maggior periodo di generazione. Tra i migliori algoritmi attualmente a disposizione della comunità scientifica, si cita in questa sede il cosiddetto Mersenne-Twister (o, più comunemente, *mt19937*), adottato presso questo gruppo di ricerca così come in svariati laboratori, incluso il CERN di Ginevra.

ii si estraggono i successivi numeri pseudocasuali ζ_2 e ζ_3 e si pongono

$$\begin{aligned}\omega_1 &= \zeta_2^2 \\ \omega_2 &= \zeta_3^2 \\ \omega &= \omega_1 + \omega_2 ;\end{aligned}\tag{9}$$

iii se $\omega < 1$ si ritorna al punto **ii**, altrimenti si estrae l'ultimo numero pseudocasuale ζ_4 e si pone

$$r = r - \frac{\omega_1}{\omega} \ln \zeta_4 ;\tag{10}$$

iv si normalizza infine il risultato ottenuto alla specifica funzione di distribuzione ponendo

$$r = \frac{r}{\alpha} .\tag{11}$$