

Η σχέση Klein-Nishina στη σκέδαση Compton

Μ. Βασιλείου, Φ. Διάκονος, Α. Καπόγιαννης

Περίληψη

Γίνεται μελέτη της σχέσης της διαφορικής ενεργού διατομής Klein-Nishina στο φαινόμενο της σκέδασης Compton. Σύμφωνα με την σχέση αυτή, κατασκευάζεται προσομοίωση που επιτρέπει την παραγωγή σκεδαζόμενων φωτονίων οποιασδήποτε αρχικής ενέργειας και την εξαγωγή της κατανομής τους στις διάφορες γωνίες. Σε υποθετικό πείραμα που είναι δυνατή η καταγραφή μόνο της γωνίας σκέδασης φωτονίων εξετάζονται δύο περιπτώσεις: α) Η ύπαρξη μίας πηγής που εκπέμπει μονοχρωματικό φωτόνιο συγκεκριμένης αλλά άγνωστης ενέργειας. β) Η ύπαρξη δύο πηγών που εκπέμπουν δύο φωτόνια άγνωστης ενέργειας αλλά με συγκεκριμένη μεταξύ τους πληθυσμιακή αναλογία. Από την προσαρμογή της σχέσης Klein-Nishina στα δεδομένα υπολογίζεται στην πρώτη περίπτωση η μοναδική τιμή άγνωστης ενέργειας και στη δεύτερη περίπτωση οι δύο άγνωστες ενέργειες.

Αριθμός φοιτητών/τριών: 2

Προαπαιτούμενες γνώσεις: Ευχέρεια προγραμματισμού σε οποιαδήποτε γλώσσα.

Αναλυτική Περιγραφή

Το φαινόμενο Compton είναι η σκέδαση φωτονίου από ηλεκτρόνιο. Αν το ηλεκτρόνιο αρχικά ηρεμεί, τότε, όταν το φωτόνιο, ενέργειας E , σκεδαστεί σε γωνία θ σε σχέση με την αρχική του κατεύθυνση προκαλείται μείωση της ενέργειάς του σε E' , που δίνεται από τη σχέση:

$$E' = E \left[1 + \frac{E}{m_e c^2} (1 - \cos \theta) \right]^{-1}. \quad (1)$$

Το φαινόμενο αυτό αποτέλεσε ένα σημαντικό βήμα στην επικράτηση της κβαντικής θεωρίας, καθώς η κλασική θεωρία προέβλεπε λανθασμένα ότι η ενέργεια του σκεδαζόμενου φωτονίου θα παρέμενε αμετάβλητη.

Η διαφορική ενεργός διατομή Klein-Nishina δίνεται από τη σχέση [1]:

$$\frac{d\sigma^{\text{KN}}}{d\Omega} = \frac{1}{2} r_e^2 (1 + \cos^2 \theta) \left[\frac{1}{1 + \alpha (1 - \cos \theta)} \right]^2 \left\{ 1 + \frac{\alpha^2 (1 - \cos \theta)^2}{(1 + \cos^2 \theta) [1 + \alpha (1 - \cos \theta)]} \right\}, \quad (2)$$

όπου $d\Omega$ είναι η στερεά γωνία στην οποία γίνεται η σκέδαση:

$$d\Omega = d\varphi \sin \theta d\theta = d\varphi d(-\cos \theta), \quad (3)$$

α είναι μία αδιάστατη σταθερά που περιέχει την εξάρτηση από την αρχική ενέργεια του φωτονίου:

$$\alpha = \frac{E}{m_e c^2} \quad (4)$$

και r_e είναι η κλασική ακτίνα του ηλεκτρονίου, η οποία σε φυσικές μονάδες παίρνει τη μορφή:

$$r_e = \frac{e^2}{4\pi m} \quad (5)$$

Αν ολοκληρώσουμε την (3) σε όλες τις στερεές γωνίες $d\Omega$ παίρνουμε την ολική διατομή [1]:

$$\sigma^{\text{KN}} = 2\pi r_e^2 \left\{ \frac{1 + \alpha}{\alpha^2} \left[\frac{2(1 + \alpha)}{1 + 2\alpha} - \frac{\ln(1 + 2\alpha)}{\alpha} \right] + \frac{\ln(1 + 2\alpha)}{2\alpha} - \frac{1 + 3\alpha}{(1 + 2\alpha)^2} \right\} \equiv 2\pi r_e^2 \Phi(\alpha). \quad (6)$$

Για να μετατρέψουμε τη διαφορική ενεργό διατομή (2) σε πυκνότητα πιθανότητας για τη σκέδαση φωτονίου σε γωνία θ , πρέπει αρχικά να διαιρέσουμε με την ολική διατομή (6). Στη συνέχεια πρέπει να ολοκληρώσουμε ως προς τη γωνία φ , που μας δίνει έναν πολλαπλασιαστικό παράγοντα 2π . Έτσι η πιθανότητα σκέδασης μεταξύ γωνίας θ και $\theta+d\theta$, δίνεται από τη σχέση:

$$P(E; \theta) d\theta = \frac{1 + \cos^2 \theta}{2\Phi(\alpha)} \left[\frac{1}{1 + \alpha(1 - \cos \theta)} \right]^2 \left\{ 1 + \frac{\alpha^2 (1 - \cos \theta)^2}{(1 + \cos^2 \theta)[1 + \alpha(1 - \cos \theta)]} \right\} \sin \theta d\theta. \quad (7)$$

Η γωνία θ ολοκληρώνεται από 0 έως π . Επειδή στην (7) εμφανίζεται η γωνία θ μέσα στο συνημίτονο, μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε μία καινούργια μεταβλητή u :

$$u = -\cos \theta \Rightarrow du = \sin \theta d\theta \quad (8)$$

και να υπολογίσουμε την πιθανότητα σκέδασης μεταξύ $u, u+du$:

$$P(E; u) du = \frac{1 + u^2}{2\Phi(\alpha)} \left[\frac{1}{1 + \alpha(1 + u)} \right]^2 \left\{ 1 + \frac{\alpha^2 (1 + u)^2}{(1 + u^2)[1 + \alpha(1 + u)]} \right\} du. \quad (9)$$

Η μεταβλητή u ολοκληρώνεται από -1 έως 1.

Θα κατασκευάσουμε προσομοίωση που να παράγει φωτόνια που να ακολουθούν την κατανομή (9). Για την παραγωγή τυχαίων αριθμών με κατανομή $P(x)$, με x στο διάστημα $[a, b]$ μπορεί να χρησιμοποιηθεί το κριτήριο απόρριψης [2]. Σύμφωνα με το κριτήριο αυτό, έστω P_{max} η μέγιστη τιμή της $P(x)$ στο $[a, b]$. Επιλέγουμε έναν τυχαίο αριθμό r_1 ομοιόμορφα κατανεμημένο στο $[0, 1]$. Μετασχηματίζουμε τον r_1 σύμφωνα με τη σχέση: $x = a + (b - a)r_1$, έτσι ώστε ο τυχαίος αριθμός x να είναι ομοιόμορφα κατανεμημένος στο $[a, b]$. Στη συνέχεια επιλέγουμε έναν δεύτερο τυχαίο αριθμό r_2 ομοιόμορφα κατανεμημένο στο $[0, 1]$. Εφαρμόζουμε το κριτήριο απόρριψης. Συγκεκριμένα αν:

$$r_2 < \frac{P(x)}{P_{max}}, \quad (10)$$

τότε η τιμή x γίνεται αποδεκτή, ενώ στην αντίθετη περίπτωση απορρίπτεται. Αποδεικνύεται ότι το σύνολο των αποδεκτών τιμών του x σε ένα μεγάλο πλήθος επαναλήψεων της διαδικασίας αυτής, ακολουθεί την κατανομή $P(x)$.

Η P_{max} στην περίπτωση της (9) βρίσκεται για $\theta = 0 \Rightarrow u = -1$, οπότε έχουμε:

$$P_{max} = \frac{1}{\Phi(\alpha)}. \quad (11)$$

Στο σημείο αυτό αξίζει να σημειώσουμε ότι, αν αντί της P_{max} χρησιμοποιήσουμε μία άλλη τιμή $P' > P_{max}$, τότε παράγουμε πάλι αριθμούς που ακολουθούν την ίδια κατανομή. Ωστόσο, απορρίπτουμε περισσότερους αριθμούς, πράγμα που σημαίνει ότι κάνουμε περισσότερα βήματα για να παράγουμε συγκεκριμένο πλήθος αποδεκτών αριθμών, οπότε καταναλώνουμε μεγαλύτερο υπολογιστικό χρόνο. Η παρατήρηση αυτή έχει σημασία στην περίπτωση που δεν μπορούμε εύκολα να υπολογίσουμε τη μέγιστη τιμή της πιθανότητας σε ένα διάστημα και ο υπολογισμός της $P(x)$ είναι γρήγορος.

Με αυτόν τον τρόπο μπορούμε να παράγουμε συγκεκριμένο αριθμό N φωτονίων, καταγράφοντας σε αρχείο τη μεταβλητή u που αντιστοιχεί στην κατεύθυνσή τους η οποία καθορίζεται από τη γωνία θ . Για να εξάγουμε την κατανομή χωρίζουμε το διάστημα $[-1, 1]$ στο οποίο βρίσκονται οι τιμές της u σε N_b μικρότερα διαστήματα. Το N_b πρέπει να επιλεγεί κατάλληλα, ώστε να υπάρχουν αρκετά διαστήματα (bins) που θα αποτυπώνουν με επάρκεια την κατανομή, αλλά και ταυτόχρονα ο αριθμός των φωτονίων που υπάρχουν σε κάθε bin να είναι αρκετά μεγάλος περιορίζοντας, έτσι, τα στατιστικά σφάλματα. Για παράδειγμα για $N=10^6$ μία καλή επιλογή είναι $N_b=10^2$. Με τον τρόπο αυτόν το εύρος του bin γίνεται:

$$\Delta u = \frac{2}{N_b}. \quad (12)$$

Προκειμένου να υπολογίσουμε πειραματικά την πυκνότητα πιθανότητας $P(E; u)$ θα πρέπει να διαιρέσουμε τον αριθμό των φωτονίων που περιέχονται σε κάθε bin, N_i , με την ποσότητα $N\Delta u$:

$$a_i = \frac{N_i}{N\Delta u}. \quad (13)$$

Εξάλλου, καθώς ο πληθυσμός στο i bin, N_i , μπορεί να θεωρηθεί ότι έχει σφάλμα μέτρησης $\sqrt{N_i}$, το

σφάλμα στις καταμετρούμενες πυκνότητες πιθανότητας, είναι:

$$\delta a_i = \frac{\sqrt{N_i}}{N\Delta u}. \quad (14)$$

Την τιμή αυτή της πυκνότητας πιθανότητας μπορούμε να την αντιστοιχίσουμε στην κεντρική τιμή του u σε κάθε bin, u_i . Στη συνέχεια μπορούμε να σχεδιάσουμε την κατανομή σε συνάρτηση του u , ή σε συνάρτηση της γωνίας ϑ , τοποθετώντας στο κέντρο του bin τη γωνία:

$$\theta_i = \arccos(-u_i). \quad (15)$$

Με την παραγωγή των φωτονίων σε διάφορες γωνιακές κατευθύνσεις προσομοιώνουμε ένα πείραμα σκέδασης Compton. Στη συνέχεια μπορούμε να κάνουμε το αντίθετο. Θεωρούμε ότι έχουμε πειραματική διάταξη που δεν μπορεί να καταγράψει ενέργεια των φωτονίων, όπως συμβαίνει με τον πολυκαναλικό ανιχνευτή της Άσκησης 3 [1], αλλά μπορεί να καταγράψει αριθμό φωτονίων σε κάθε γωνία ϑ . Από το πείραμα αυτό έχουμε ένα αρχείο με τις τιμές u των καταγεγραμμένων φωτονίων. Κατασκευάζουμε το ιστόγραμμα τους και οι τιμές του:

$$a_i \pm \delta a_i, \quad i = 1, \dots, N_b, \quad (16)$$

αποτελούν τις πειραματικές παρατηρήσεις μας με το σφάλμα τους. Μπορούμε για κάθε παρατήρηση να υπολογίσουμε από την (9) τη θεωρητική τιμή της πιθανότητας σκέδασης στην κατεύθυνση u :

$$a_{i,th}(E) = P_{i,th}(E), \quad i = 1, \dots, N_b. \quad (17)$$

Σκοπός μας είναι η ελαχιστοποίηση της ποσότητας:

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^{N_b} \left[\frac{a_i - a_{i,th}(E)}{\delta a_i} \right]^2. \quad (18)$$

Η ελαχιστοποίηση αυτή θα επιτρέψει τον υπολογισμό της άγνωστης ενέργειας, E , του φωτονίου και του σφάλματός του. Οι βαθμοί ελευθερίας μας σε αυτήν την περίπτωση είναι $dof=N_b-1$.

Σε μία άλλη περίπτωση έχουμε πείραμα όπου εκπέμπονται δύο φωτόνια άγνωστης ενέργειας, αλλά με συγκεκριμένη μεταξύ τους πληθυσμιακή αναλογία που εκφράζεται με τη σταθερή ποσότητα β για την οποία $0 \leq \beta \leq 1$:

$$a_{i,th}(E_1, E_2) = \beta P_{i,th}(E_1) + (1 - \beta) P_{i,th}(E_2), \quad i = 1, \dots, N_b. \quad (19)$$

Σκοπός μας τώρα είναι η ελαχιστοποίηση της ποσότητας:

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^{N_b} \left[\frac{a_i - a_{i,th}(E_1, E_2)}{\delta a_i} \right]^2. \quad (20)$$

Η ελαχιστοποίηση αυτή θα επιτρέψει τον υπολογισμό των άγνωστων ενεργειών, E_1 και E_2 , των φωτονίων και των σφαλμάτων τους. Οι βαθμοί ελευθερίας μας σε αυτήν την περίπτωση είναι $dof=N_b-2$.

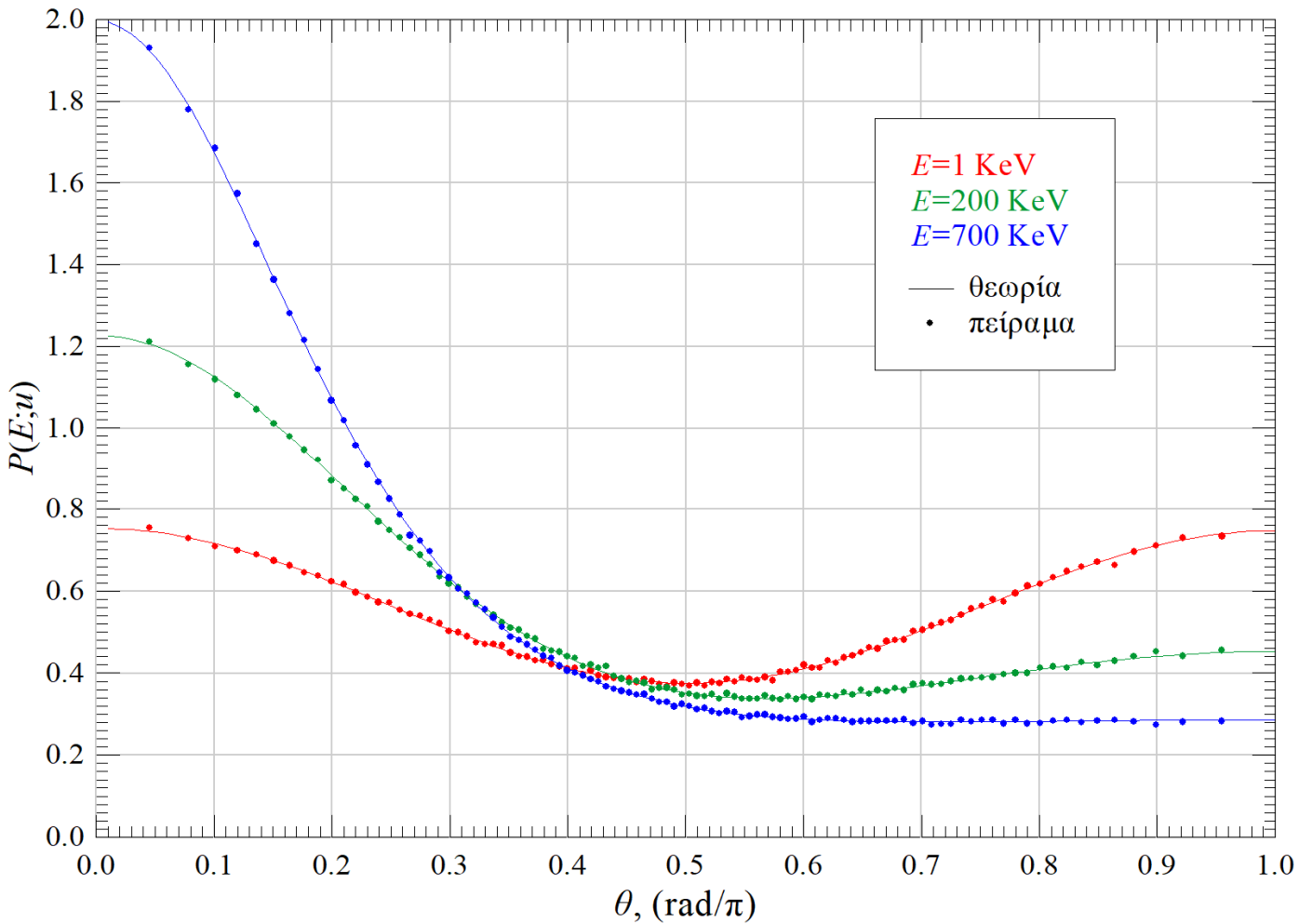
Υλοποίηση

1. Γράψτε υπολογιστικό πρόγραμμα που να προσομοιώνει τη σκέδαση Compton και να παράγει τις κατευθύνσεις σκέδασης N φωτονίων, δοσμένης ενέργειας E και καταγράψτε τις τιμές σε ένα αρχείο.

2. Γράψτε υπολογιστικό πρόγραμμα που να μπορεί να διαβάζει αρχεία σαν αυτό που κατασκευάσατε στο βήμα 1 και να κατασκευάζει το αντίστοιχο ιστόγραμμα το οποίο θα απεικονίζει την πυκνότητα πιθανότητας $P(E;u)$ σε συνάρτηση της γωνίας ϑ ή της μεταβλητής u . Θα πρέπει να μπορείτε να ρυθμίζετε τον αριθμό των bins του ιστογράμματός σας.

3. Για τρεις διαφορετικές ενέργειες φωτονίων που θα σας δοθούν κατασκευάστε τα αρχεία καταγραφής των δεδομένων σας. Στη συνέχεια σε κοινό διάγραμμα σχεδιάστε τις πειραματικές σας μετρήσεις και για κάθε μία την αντίστοιχη θεωρητική κατανομή σύμφωνα με την (9), όπως για παράδειγμα στο Σχ. 1.

4. Θα σας δοθεί ένα αρχείο που περιέχει κατευθύνσεις u από $N=10^6$ σκεδαζόμενα φωτόνια. Η αρχική τιμή E των προσπίπτοντων φωτονίων είναι ίδια για όλα, αλλά άγνωστη. Διαβάστε τις καταγραφές και κατασκευάστε την αντίστοιχη πειραματική κατανομή.



Σχ. 1. Η θεωρητική και πειραματική κατανομή Klein-Nishina για πηγή μονοχρωματικού φωτονίου και για 3 ενέργειες φωτονίων. Η προσομοίωση παρήγαγε 10^6 φωτόνια.

5. Γράψτε υπορουτίνα που υπολογίζει τη συνάρτηση χ^2 (18) χρησιμοποιώντας την πειραματική κατανομή του βήματος 4 και τις θεωρητικές προβλέψεις (17) που εξαρτώνται από μία προσδιοριστέα παράμετρο.

6. Προβείτε σε ελαχιστοποίηση της συνάρτησης χ^2 για το αρχείο που σας δόθηκε εξάγοντας την τιμή E που ελαχιστοποιεί τη συνάρτηση αυτή. Βρείτε και την ελάχιστη τιμή αυτής, χ^2_m και την ποσότητα χ^2_m/dof . Αυτό μπορεί να γίνει χρησιμοποιώντας την 2^η παράγωγο (είναι ο 1x1 πίνακας Hessian) για τη συνάρτηση $\chi^2(E)$ του βήματος 5, ή με όποιο άλλο τρόπο θέλετε.

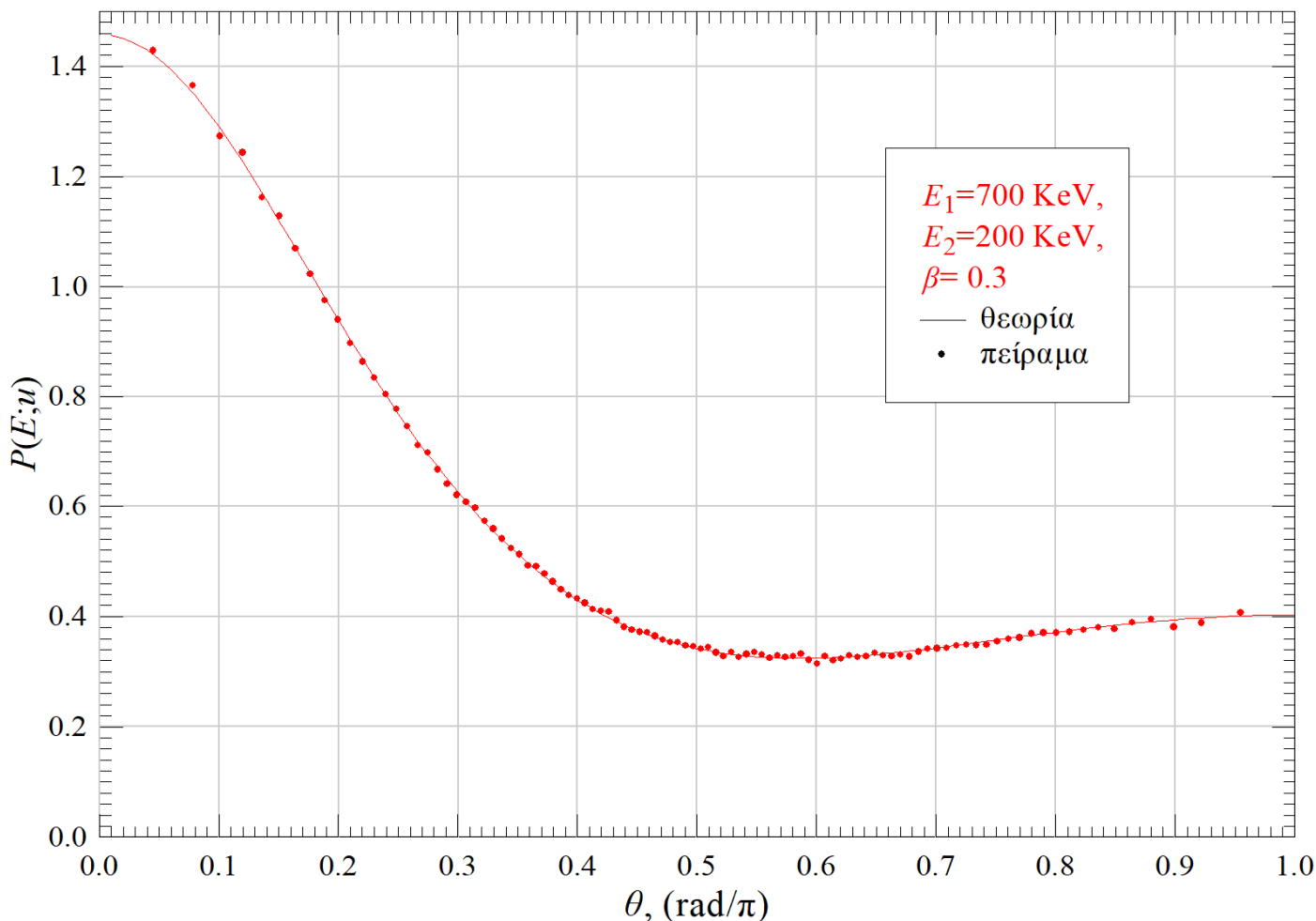
7. Υπολογίστε το σφάλμα δE που αντιστοιχεί στη μεταβλητή E . Αυτό μπορεί να γίνει χρησιμοποιώντας την 2^η παράγωγο για τη συνάρτηση $\chi^2(E)$ του βήματος 6. Αποτυπώστε σε διάγραμμα την πειραματική σας κατανομή και την αντίστοιχη θεωρητική που προκύπτει με τη χρήση της τιμής της ενέργειας που υπολογίσατε στο βήμα 6, αντίστοιχα με το Σχ.1.

8. Θα σας δοθεί ένα δεύτερο αρχείο που περιέχει κατευθύνσεις u από $N=10^6$ σκεδαζόμενα φωτόνια. Τα φωτόνια πριν σκεδαστούν έχουν άγνωστες ενέργειες E_1 και E_2 , ενώ η πληθυσμιακή τους αναλογία είναι γνωστή και θα σας δοθεί. Διαβάστε τις καταγραφές και κατασκευάστε την αντίστοιχη πειραματική κατανομή.

9. Γράψτε υπορουτίνα που υπολογίζει τη συνάρτηση χ^2 (20) χρησιμοποιώντας την πειραματική κατανομή του βήματος 8 και τις θεωρητικές προβλέψεις (19) που εξαρτώνται από δύο προσδιοριστέες παραμέτρους.

10. Προβείτε σε ελαχιστοποίηση της συνάρτησης χ^2 για το αρχείο που σας δόθηκε εξάγοντας τις τιμές E_1 και E_2 που ελαχιστοποιούν τη συνάρτηση αυτή. Βρείτε και την ελάχιστη τιμή αυτής, χ^2_m και την ποσότητα χ^2_m/dof . Αυτό μπορεί να γίνει χρησιμοποιώντας τον πίνακα Hessian για τη συνάρτηση $\chi^2(E)$ του βήματος 9, ή με όποιο άλλο τρόπο θέλετε.

11. Υπολογίστε τα σφάλματα δE_1 και δE_2 που αντιστοιχούν στις μεταβλητές E_1 και E_2 . Αυτό μπορεί να γίνει χρησιμοποιώντας τον πίνακα Hessian για τη συνάρτηση $\chi^2(E)$ του βήματος 10. Αποτυπώστε σε διάγραμμα την πειραματική σας κατανομή και την αντίστοιχη θεωρητική που προκύπτει με χρήση των τιμών των ενεργειών που υπολογίσατε στο βήμα 10, αντίστοιχα με το Σχ.2.



Σχ. 1. Η θεωρητική και πειραματική κατανομή Klein-Nishina για πηγές που παράγουν 2 διαφορετικά φωτόνια με σταθερή μεταξύ τους αναλογία. Η προσομοίωση παράγαγε 10^6 φωτόνια.

Μαθηματικό συμπλήρωμα-Αριθμητικοί υπολογισμοί

1. Αριθμητική λύση εξίσωσης με τη μέθοδο Newton-Raphson

Έστω η εξίσωση:

$$f(x) = 0, \quad (\Sigma 1)$$

την οποία δεν μπορούμε να λύσουμε αναλυτικά. Ξεκινούμε από ένα σημείο x_0 που αποτελεί μία αρχική εκτίμηση της λύσης. Στο x_0 φέρνουμε την εφαπτομένη της καμπύλης $f(x)$ που απαιτεί τη γνώση της παραγώγου της συνάρτησης $f'(x)$. Η εξίσωση της εφαπτόμενης είναι:

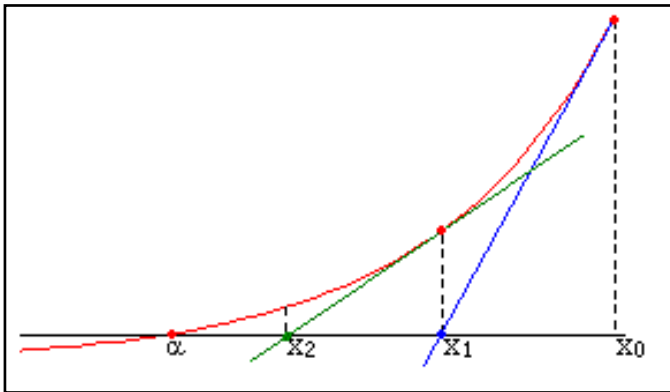
$$y = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) \quad (\Sigma 2)$$

Η εφαπτόμενη τέμνει τον άξονα y στο σημείο x_1 που αποτελεί μία καλύτερη προσέγγιση στη λύση. Το σημείο αυτό είναι η λύση της εξίσωσης:

$$y = 0 \Rightarrow f(x_0) + f'(x_0)(x_1 - x_0) = 0 \Rightarrow x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)} \quad (\Sigma 3)$$

Επαναλαμβάνουμε τη διαδικασία (βλ. Σχ.3) οπότε στο βήμα $n+1$, χρησιμοποιώντας τον υπολογισμό από το βήμα n , η προσέγγιση μας είναι:

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} \quad (\Sigma 4)$$



Σχ. 3. Τα διαδοχικά βήματα της μεθόδου Newton-Raphson για την εύρεση της λύσης της εξίσωσης $f(x)=0$ που είναι το σημείο $x=\alpha$. Με κόκκινο χρώμα απεικονίζεται η συνάρτηση $f(x)$. Το σχήμα έχει ληφθεί από την [3].

Σε κάθε βήμα υπολογίζουμε την τιμή της συνάρτησης $f(x_n)$. Αν βρούμε τιμή μικρότερη από μία ακρίβεια ε που έχουμε θέσει ως κριτήριο σύγκλισης, τερματίζουμε τη διαδικασία. Επομένως η τελική τιμή x_n για τη λύση ικανοποιεί το κριτήριο διακοπής:

$$|f(x_n)| \leq \varepsilon. \quad (\Sigma 4)$$

Καλό είναι να θέσουμε και έναν μέγιστο επιτρεπτό αριθμό επαναλήψεων, έτσι ώστε αν τον υπερβούμε να δοθεί μήνυμα αποτυχίας σύγκλισης στη λύση. Σε αυτήν την περίπτωση δοκιμάζουμε ένα διαφορετικό σημείο έναρξης x_0 .

2. Γενίκευση της μεθόδου Newton-Raphson για τη λύση συστήματος εξισώσεων

Έστω το σύστημα των m εξισώσεων με m αγνώστους:

$$\begin{aligned} f_1(x_1, x_2, \dots, x_m) &= 0 \\ f_2(x_1, x_2, \dots, x_m) &= 0 \\ &\vdots \\ f_m(x_1, x_2, \dots, x_m) &= 0 \end{aligned} \Rightarrow F(\vec{x}) = 0 \quad (\Sigma 5)$$

όπου έχουμε θέσει τις συναρτήσεις στη μορφή πίνακα στήλης F και τις m μεταβλητές στη μορφή διανύσματος. Ορίζουμε τον πίνακα $m \times m$ της Ιακωβιανής J_F της F . Το στοιχείο ij αυτού του πίνακα είναι:

$$(J_F)_{ij} = \frac{\partial f_i}{\partial x_j} \quad (\Sigma 6)$$

Δηλαδή:

$$J_F(\vec{x}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial x_m} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_2}{\partial x_m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_m}{\partial x_1} & \frac{\partial f_m}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_m}{\partial x_m} \end{bmatrix} \quad (\Sigma 7)$$

Βρίσκουμε τον αντίστροφο πίνακα της Ιακωβιανής J_F^{-1} . Τότε, ξεκινώντας από ένα αρχικό σημείο \vec{x}_0 επαναλαμβάνουμε διαδοχικά βήματα προσέγγισης στο διάνυσμα της λύσης της μορφής:

$$\vec{x}_{n+1} = \vec{x}_n - J_F^{-1}(\vec{x}_n) F(\vec{x}_n) \quad (\Sigma 8)$$

3. Ελαχιστοποίηση συνάρτησης

Υπάρχουν διάφορες μέθοδοι ελαχιστοποίησης μίας συνάρτησης g με m μεταβλητές, δηλαδή $g(x_1, x_2, \dots, x_m) = g(\vec{x})$. Μία από αυτές είναι να λύσουμε το σύστημα των m εξισώσεων:

$$\begin{aligned} \frac{\partial g(\vec{x})}{\partial x_1} &= 0 \\ \frac{\partial g(\vec{x})}{\partial x_2} &= 0 \\ &\vdots \\ \frac{\partial g(\vec{x})}{\partial x_m} &= 0 \end{aligned} \Rightarrow F(\vec{x}) = 0 \quad (\Sigma 9)$$

Έτσι το πρόβλημα της ελαχιστοποίησης ανάγεται στην προηγούμενη παράγραφο, όπου οι συναρτήσεις f αποτελούν τις μερικές παραγώγους της g ως προς τις μεταβλητές της, δηλαδή:

$$f_i(\vec{x}) = \frac{\partial g(\vec{x})}{\partial x_i} \quad (\Sigma 10)$$

Με αυτή τη λογική ο πίνακας της Ιακωβιανής της F , που μπορεί να χρησιμοποιηθεί σε μία γενικευμένη μέθοδο Newton-Raphson, αποτελεί ταυτόχρονα τον πίνακα Hessian, H_g , για τη συνάρτηση g . Ο πίνακας αυτός αποτελείται από τις δεύτερες παραγώγους της g ως προς τις μεταβλητές της:

$$(J_F)_{ij} = \frac{\partial f_i}{\partial x_j} \Rightarrow (H_g)_{ij} = \frac{\partial^2 g}{\partial x_i \partial x_j} \quad (\Sigma 11)$$

Δηλαδή:

$$H_g(\vec{x}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 g}{\partial x_1 \partial x_1} & \frac{\partial^2 g}{\partial x_1 \partial x_2} & \dots & \frac{\partial^2 g}{\partial x_1 \partial x_m} \\ \frac{\partial^2 g}{\partial x_2 \partial x_1} & \frac{\partial^2 g}{\partial x_2 \partial x_2} & \dots & \frac{\partial^2 g}{\partial x_2 \partial x_m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 g}{\partial x_m \partial x_1} & \frac{\partial^2 g}{\partial x_m \partial x_2} & \dots & \frac{\partial^2 g}{\partial x_m \partial x_m} \end{bmatrix} \quad (\Sigma 12)$$

Ο τελευταίος πίνακας είναι συμμετρικός.

Η γενικευμένη μέθοδος Newton-Raphson προσφέρει, εκτός από την εύρεση της λύσης που δίνει τις τιμές των παραμέτρων \vec{x}_a που ελαχιστοποιούν τη συνάρτηση g και τον υπολογισμό των σφαλμάτων των παραμέτρων. Ο πίνακας Hessian, που χρειάζεται σε κάθε βήμα της μεθόδου, αν υπολογιστεί στις τελικές τιμές των παραμέτρων μπορεί να μας δώσει εκτίμηση του σφάλματος. Μικρή τιμή της δεύτερης παραγώγου της g ως προς μία μεταβλητή της, σημαίνει ότι η g παρουσιάζει ένα ελάχιστο και γύρω από αυτό η τιμή της μεγαλώνει αργά. Συνεπώς μπορούμε να κινηθούμε γύρω από την τιμή αυτής της μεταβλητής, στο ελάχιστο της g , χωρίς να δούμε σημαντική μεταβολή της g . Επομένως, το σφάλμα στη μεταβλητή μας θα πρέπει να είναι μεγάλο. Άρα το σφάλμα και η τιμή της Hessian στο ελάχιστο συνδέονται με αντίστροφο τρόπο. Αποδεικνύεται ότι:

$$\delta x_i = \sqrt{(H_g^{-1}(\vec{x}_a))_{ii}} \quad (\Sigma 13)$$

Δηλαδή υπολογίζουμε την Hessian στο ελάχιστο, στη συνέχεια υπολογίζουμε τον αντίστροφο πίνακα και η τετραγωνική ρίζα των διαγώνιων στοιχείων μας δίνει τα σφάλματα των παραμέτρων.

Ειδικά στην περίπτωση μίας μόνο μεταβλητής, $g(x)$, μεταπίπτουμε στην περίπτωση της παραγράφου 1,

αλλά τα βήματα για την προσέγγιση της βέλτιστης παραμέτρου δίνονται από τη σχέση:

$$x_{n+1} = x_n - \frac{g'(x_n)}{g''(x_n)}. \quad (\Sigma 14)$$

Το σφάλμα της παραμέτρου στο ελάχιστο της συνάρτησης που βρίσκεται για την τιμή $x=x_a$, προσδιορίζεται από την 2^η παράγωγο:

$$\delta x = [g''(x_a)]^{-1/2}. \quad (\Sigma 15)$$

4. Αντιστροφή πίνακα 2x2

Παραθέτουμε τη γνωστή σχέση για λόγους πληρότητας. Ο αντίστροφος του πίνακα:

$$A = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} \quad (\Sigma 16)$$

είναι ο πίνακας:

$$A^{-1} = \frac{1}{|A|} \begin{bmatrix} d & -b \\ -c & a \end{bmatrix}, \quad |A| = ad - bc \quad (\Sigma 17)$$

5. Αριθμητικός υπολογισμός παραγώγων

Οι παρακάτω σχέσεις παρέχουν την αριθμητική προσέγγιση παραγώγων όταν ο αναλυτικός τους υπολογισμός είναι αδύνατος ή όχι επιθυμητός:

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} \quad (\Sigma 18)$$

$$f''(x) = \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} \quad (\Sigma 19)$$

$$\frac{\partial^2 f(x, y)}{\partial x \partial y} = \frac{f(x+h, y+h) - f(x-h, y+h) - f(x+h, y-h) + f(x-h, y-h)}{4h^2} \quad (\Sigma 20)$$

Η ποσότητα h είναι μία ικανοποιητικά μικρή ποσότητα, ώστε να υπολογίζει σωστά τις παραγώγους, αλλά όχι εξαιρετικά μικρή ώστε να πλησιάζει την ακρίβεια του υπολογιστή, γιατί τότε ο υπολογισμός είναι λανθασμένος (μία πιθανή επιτυχημένη τιμή για το h θα ήταν $h=10^{-5}x$).

Αναφορές

[1] Εργαστηριακές Ασκήσεις Κατεύθυνσης Πυρηνικής Φυσικής & Φυσικής Στοιχειωδών Σωματιδίων, Τμήμα Φυσικής, Εθνικό & Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών

[2] Εργαστηριακές Ασκήσεις Εισαγωγής στην Πυρηνική Φυσική & Φυσική Στοιχειωδών Σωματιδίων, Τμήμα Φυσικής, Εθνικό & Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών

[3] https://en.wikipedia.org/wiki/Newton%27s_method