УДК 539.122:518.5

ВЕСОВОЙ МНОЖИТЕЛЬ И МЕТОДЫ ОТБОРА. МОДЕЛИРОВАНИЕ КОГЕРЕНТНОГО РАССЕЯНИЯ ФОТОНОВ

Д. Г. Модестов
(РФЯЦ-ВНИИТФ)

При использовании весовых методов, которые позволяют увеличить эффективность расчетов, возникает необходимость оценки плотности распределения. В то же время в широко применяемых методах отбора нередко возникает ситуация, когда известна только ненормированная плотность. Предлагается использовать в этом случае некоторую условную случайную величину, математическое ожидание которой равняется плотности распределения для произвольного значения параметра. Приводятся реализация метода для моделирования когерентного рассеяния фотонов и сравнение с другими методами.

Ключевые слова: уравнение переноса, рассеяние фотонов, статистическое моделирование, методы повышения эффективности.

Введение

Важной составляющей методов статистического моделирования являются весовые методы. Эти методы применяются либо для повышения эффективности расчетов, либо для построения оценок, которые невозможно реализовать другим способом. Например, при решении задач переноса широко используются методы выборки по важности и оценки потока в точке, описание которых дается в книге [1]. Общим для всех этих методов является оценка весового множителя, математическое ожидание которого пропорционально плотности распределения рассматриваемой случайной величины при заданном значении последней. Коэффициент пропорциональности зависит только от применяемой методики оценки и здесь рассматриваться не будет. Что же касается самого распределения, то для оценки его плотности обычно используется значение этой плотности. Однако вычислить данное значение не всегда представляется возможным. В частности, такая ситуация возникает при использовании методов отбора [2] (частный случай под названием метода исключения приводится также в [1]) с ненормированной плотностью распределения.

Характерным примером может служить моделирование когерентного рассеяния фотонов на атомах вещества, построенное на основе данных, сохраненных в библиотеках формата ENDF [3]. При этом подходе задается дифференциальное сечение рассеяния в виде функции, зависящей от энергии фотона (в этой реакции энергия частицы не меняется) и косинуса угла рассеяния. Дополнительно задается интегральное сечение этой реакции в виде табличной функции от энергии. В идеале между сечениями должно быть соответствие: при одном и том же значении энергии интеграл от дифференциального по косинусу угла рассеяния должен равняться интегральному. В этом случае в качестве плотности распределения можно использовать отношение сечений. Однако в реальности точного соответствия не получается по двум причинам. Во-первых, табличное представление интегрального сечения приводит к погрешностям в вычислении функции в междоузлиях. Во-вторых, вследствие сложности самой функции интегрирование ее может быть проведено только численно, что приводит к появлению погрешностей и в самих узлах сетки. Хотя указанные неточности намного меньше неточностей самих данных и практически не сказываются на моделировании реакции, при использовании весовых методов небольшая ошибка в нормировке может привести к заметной ошибке в оцениваемых функционалах.

Таким образом, в ряде задач появляется необходимость вычисления весового множителя без использования нормировочных постоянных.

Оценка значения плотности распределения в методах отбора

Так как все методы отбора можно рассматривать как выборку из усеченного распределения, реализация которой описана в [2], оценку плотности можно также описывать в терминах этого распределения. Для этого удобно ввести следующие обозначения: X_0 — множество значений случайной величины x; $f_0(x)$ — плотность распределения последней. Если $X \subset X_0$ — измеримое подмножество, то усеченное распределение (см., например, [2]) определяется своей плотностью

$$f(x) = \frac{f_0(x)}{\int\limits_{y \in X} f_0(y)\, dy}, \tag{1}$$

которая определена на X. Выборка значения случайной величины из этого распределения производится моделированием конечной последовательности независимых испытаний для случайных величин, распределенных с плотностью $f_0(x)$. Условием обрыва последовательности является попадание текущего значения в множество X. Это последнее значение и используется как реализация искомой случайной величины x. В [2] указывается, что эта величина распределена с плотностью (1).

Однако при всей простоте процедуры выборки оценка значения плотности часто представляется достаточно сложной задачей вследствие трудности вычисления интеграла, стоящего в знаменателе (1). Здесь следует отметить, что в общем случае при вычислении весового множителя может использоваться случайная величина, математическое ожидание которой равняется значению плотности распределения в указанной точке.

Для построения этой величины можно воспользоваться тем, что в алгоритме выборки в качестве побочного продукта получается еще одна, независимая с x случайная величина n — длина последовательности независимых испытаний, определенная на множестве натуральных чисел. Вероятность реализации конкретной длины имеет вид

$$P(n) = p(1-p)^{n-1}, \tag{2}$$

где $p = \int\limits_X f_0(x)\, dx$ — вероятность того, что $x \in X$. С использованием n можно построить случайную величину, применяемую при расчете весового множителя:

$$w(x) = f_0(x)\, n. \tag{3}$$

Учитывая (1) и (2), несложно вычислить ее математическое ожидание:

$$\mathrm{M}w(x) = f_0(x)\frac{1}{p} = f(x). \tag{4}$$

Это соотношение и позволяет применять (3) при оценке весового множителя. Следует заметить, что при использовании весовых методов обычно производится и выборка из распределения (1), что, в свою очередь, позволяет получать реализацию n без дополнительных временных затрат.

Хотя (3) дает выражение для весового множителя в общем случае, представляется полезным привести его для частного, но, наверное, наиболее широко используемого на практике метода, который в [1] называется методом исключения, а в [2] — методом Неймана. Выборка с его использованием строится следующим образом.

Пусть имеется ненормированная плотность распределения $g(y)$ для случайной величины, принимающей значения на множестве Y. Пусть, кроме того, на этом же множестве известна ненормированная *мажорирующая* плотность распределения $g_0(y)$ такая, что

$$g(y) \le g_0(y). \tag{5}$$

При этом для $g_0(y)$ известна процедура выборки случайной величины и значение нормировочного интеграла

$$C_0 = \int\limits_Y g_0(y)\, dy. \tag{6}$$

Для построения процедуры выборки из распределения $g(y)$ вводится вспомогательное пространство $X_0 = Y \times [0{,}1]$. На этом пространстве определяется вспомогательная плотность

$$f_0(y,z) = \frac{g_0(y)}{C_0}. \tag{7}$$

В качестве множества X для построения усеченного распределения используется следующее:

$$(y,z) \in X \Leftrightarrow \Big((y,z) \in X_0\Big) \wedge \Big(g_0(y)\, z < g(y)\Big). \tag{8}$$

Можно показать (см., например, [1] и [2]), что плотность усеченного распределения, проинтегрированная по всем значениям z, пропорциональна $g\left(y\right)$.

Таким образом, выражение для вычисления весового множителя получается подстановкой (6) и (7) в (3) и интегрированием по второй переменной с учетом (8):

$$w\left(y\right) = \int\limits_{0}^{g(y)/g_0(y)} f_0\left(y,z\right) n dz = \frac{g\left(y\right)}{C_0} n. \qquad (9)$$

Из этого выражения, в частности, можно видеть, что использование различных мажорирующих плотностей в алгоритме отбора приводит при оценке весового множителя только к различию сомножителя n/C_0, математическое ожидание которого в соответствии с (4) равняется нормировочному множителю:

$$\mathrm{M}\frac{n}{C_0} = \frac{1}{\int\limits_{Y} g\left(y\right) dy}.$$

Таким образом, если процедура статистического моделирования построена так, что сначала производится выборка *аналоговой* величины из распределения $g\left(y\right)$, а после применяется весовая методика, то реализация последней выполнится аналогично случаю, когда известен нормировочный множитель, с использованием вместо него отношения n/C_0, которое было получено во время выборки.

Когерентное рассеяние фотонов

Как уже было отмечено, ситуация с невозможностью вычисления нормировочного множителя возникает, в частности, при моделировании когерентного рассеяния фотонов. Однако, прежде чем дать описание самой реакции, необходимо сказать несколько слов о весовой методике.

Здесь будет описан подход, используемый в программе ПРИЗМА [4]. В этой программе весовая методика при моделировании реакций используется для повышения эффективности оценки интегралов от потоков частиц в удаленном детекторе. Для этого вспомогательные *неаналоговые* частицы направляются в сторону детектора, и для сохранения математического ожидания требуется вычислять весовой множитель в зависимости от выбранного направления. При этом в качестве координат используются проекция направления движения вторичной частицы на выделенную ось и соответствующий азимутальный угол (несложно показать, что значение весового множителя не зависит от выбора оси). В частности, для реакций, распределение вторичных частиц которых имеет азимутальную симметрию, в качестве оси удобно выбрать направление движения первичной частицы. При таком выборе единственным параметром остается косинус угла рассеяния, для которого и вычисляется весовой множитель.

К реакциям указанного типа относится и реакция когерентного рассеяния фотонов, параметры которой представлены в формате ENDF [3]. Дифференциальное сечение в этом формализме задается следующим образом:

$$\frac{d\sigma\left(E,\mu\right)}{d\mu} = \pi r_0^2\left(1+\mu^2\right) \times \\ \times \left[\left(F\left(q\right) + F_R\left(E\right)\right)^2 + F_I\left(E\right)^2\right], \quad (10)$$

где E — энергия фотона (в результате рассеяния не меняется); μ — косинус угла рассеяния; $q = \alpha\sqrt{2\left(1-\mu\right)}$ — величина, пропорциональная переданному импульсу; πr_0 и $\alpha \sim E$ — некоторые величины, не зависящие от μ, значения которых здесь несущественны. Функция $F\left(q\right)$ называется форм-фактором, а $F_R\left(E\right)$ и $F_I\left(E\right)$ — действительной и мнимой частями аномального фактора рассеяния. При этом $F\left(q\right)$ всюду удовлетворяет соотношениям

$$\begin{gathered} F\left(q\right) \geq 0,\ \frac{dF\left(q\right)}{dq} \leq 0, \\ F_R\left(E\right),\ F_I\left(E\right) \underset{E\to\infty}{\longrightarrow} 0. \end{gathered} \qquad (11)$$

Все эти функции являются табличными. В результате рассматриваемого взаимодействия образуется один фотон с энергией, равной энергии налетающего фотона, и косинусом угла рассеяния, распределенным с плотностью, пропорциональной (10).

Приведенное дифференциальное сечение позволяет построить процедуру выборки косинуса угла рассеяния, но не позволяет вычислить его плотность распределения, так как неизвестен нормировочный множитель. Теоретически этот множитель может быть найден с использованием интегрального сечения, зависимость которого от энергии представлена в той же самой библиотеке данных в табличном виде. Однако практика показывает, что такой подход приводит к большим погрешностям. Эти погрешности являются следствием небольших погрешностей самого сечения, появляющихся как из-за табличного представления, так и из-за использования приближенных численных алгоритмов при расчете узловых значений. Поэтому для вычисления весового множителя наиболее оптимальным представляется использование оценки (9).

Однако прежде чем дать выражение случайной величины, соответствующей весовому множителю, необходимо описать саму выборку. Как можно видеть, приведенный переданный импульс при заданной энергии фотона не может превышать некоторого значения:

$$q \in [0, q_{\max}], \quad q_{\max} = 2\alpha.$$

Можно предложить несколько алгоритмов выборки значения косинуса угла рассеяния, каждый из которых наиболее эффективен в своем интервале энергий. Здесь будет описано два алгоритма.

Первый дает наибольшую эффективность при малых значениях энергии, а следовательно, и $q_{\max}$, т. е. когда $F(q_{\max})$ близко к $F(0)$. Для его построения удобно определить

$$F^2_{\max}(E) \equiv F_I(E)^2 + \max_{q\in(0,q_{\max})}\Big(F(q) + F_R(E)\Big)^2.$$

С учетом свойства (10) это значение легко находится:

$$F^2_{\max}(E) = F_I(E)^2 + \\ + \max\Big\{\Big(F(0) + F_R(E)\Big)^2, \Big(F(q_{\max}) + F_R(E)\Big)^2\Big\}.$$

Таким образом, получаются действительная ненормированная плотность

$$g^1(\mu) = \left(1+\mu^2\right)\left[\Big(F(q) + F_R(E)\Big)^2 + F_I(E)^2\right]$$

и соответствующая ей мажорирующая

$$g^1_0(\mu) = \left(1+\mu^2\right) F^2_{\max}, \tag{12}$$

которые удовлетворяют соотношению (5).

Построение процедуры выборки в соответствии с ненормированной плотностью (12) не вызывает затруднений. Несложно вычислить и нормировочный интеграл (6):

$$C^{(1)}_0 = F^2_{\max}\int\limits_{-1}^{1}\left(1+\mu^2\right)d\mu = \frac{8}{3}F^2_{\max}. \tag{13}$$

Таким образом, подставляя вычисленные значения величин в (9) и учитывая (13), можно получить следующее выражение для весового множителя в первом алгоритме при заданном значении косинуса угла рассеяния:

$$w^{(1)}(\mu) = \left(1+\mu^2\right)\times \\ \times\left[\Big(F(q) + F_R(E)\Big)^2 + F_I(E)^2\right]\frac{3n}{8F^2_{\max}}. \tag{14}$$

Если сначала разыгрывается угол рассеяния, то удобно сохранить значение $n\dfrac{3}{8F^2_{\max}}$, которое в дальнейшем будет использоваться при вычислении весового множителя.

Далее будет рассмотрен второй алгоритм. Для организации выборки при высоких энергиях, учитывая (11), удобно в качестве независимой переменной использовать переданный импульс. Как будет видно ниже, эффективность алгоритма при высоких энергиях будет приближаться к 1. В то же время при низких энергиях, когда $F_R(E) < 0$, эффективность мала (впрочем, если аномальный фактор не учитывается, его выгодно применять во всем диапазоне энергий).

Принимая во внимание, что

$$\mu(q,E) = 1 - 2\left(\frac{q}{q_{\max}}\right)^2; \quad \frac{d\mu}{dq} = -\frac{4q}{q^2_{\max}}, \tag{15}$$

ненормированную плотность распределения удобно представить в виде

$$g^2(q) = \Big(1+\mu(q,E)^2\Big)\, q\,\Big(F(q)^2 + \\ + 2F_R(E)\,F(q) + F_R(E)^2 + F_I(E)^2\Big). \tag{16}$$

Мажорирующая плотность в соответствии с (16) может быть представлена выражением

$$g^2_0(q) = 2q\Big(h_2(q) + R(E)\,h_1(q) + \\ + F_R(E)^2 + F_I(E)^2\Big), \tag{17}$$

где

$$R(E) = \max\Big\{2F_R(E), 0\Big\} \geq 0,$$

а функции h_k должны удовлетворять соотношениям

$$h_2(q) \geq F(q)^2; \quad h_1(q) \geq F(q).$$

Дополнительным условием для этих функций является то, что выражения

$$H_k(q) = \int_0^q q' h_k(q')\, dq'$$

должны вычисляться аналитически и, кроме того, аналитически должны вычисляться значения обратных функций. Учитывая, что $F(q)$ является табличной функцией, выбрать h_k вполне возможно. В частности, можно использовать $h_k(q) = F(q)^k$ $(k = 1, 2)$, хотя для практики удобно аппроксимировать их ступенчатыми функциями.

С учетом указанных свойств выборка из распределения (17) делается методом суперпозиции в сочетании с методом обратных функций [2]. Несложно вычислить нормировочный интеграл для (17):

$$C_0^{(2)} = 2\Big(H_2(q_{\max}) + R(E)\, H_1(q_{\max})\Big) + \\ + \Big(F_R(E)^2 + F_I(E)^2\Big)\, q_{\max}^2.$$

Подставляя вычисленные значения величин в (9), можно получить явное выражение для весового множителя при заданном значении приведенного переданного импульса:

$$\widetilde{w}^{(2)}(q) = \left(1+\mu^2\right)\left[\Big(F(q) + F_R(E)\Big)^2 + \\ + F_I(E)^2\right] \frac{q}{C_0^{(2)}} n.$$

Однако для весовых методов требуется оценка весового множителя при определенном значении косинуса угла рассеяния. С учетом (15) связь между этими множителями дается выражением

$$w^{(2)}(\mu) = \widetilde{w}^2(q) \left|\frac{dq}{d\mu}\right| = \widetilde{w}^2(q)\, \frac{q_{\max}^2}{4q}.$$

Или, подставляя явный вид $\widetilde{w}^2(q)$, можно получить следующее выражение:

$$w^{(2)}(\mu) = \left(1+\mu^2\right)\left[\Big(F(q) + F_R(E)\Big)^2 + \\ + F_I(E)^2\right] \frac{q_{\max}^2 n}{4C_0^2}. \qquad (18)$$

Как уже было отмечено в замечании к выражению (9), весовые множители (14) и (18) различаются только последним сомножителем $\left(\dfrac{3n}{8F_{\max}^2} \text{ и } \dfrac{q_{\max}^2 n}{4C_0^2} \text{ соответственно}\right)$, который определяется во время выборки значения косинуса угла рассеяния из распределения (10). То обстоятельство, что математические ожидания обоих этих сомножителей одинаковы, позволяет использовать их для выбора алгоритма (первого или второго) при моделировании реакции. Действительно, этот выбор оптимален тогда, когда среднее значение n минимально, т. е. если $\dfrac{3}{8F_{\max}^2} > \dfrac{q_{\max}^2}{4C_0^2}$, то выбирается первый алгоритм, иначе второй.

Расчет модельной задачи

В качестве примера использования приведенной выше методики можно рассмотреть расчет следующей модельной задачи. В центре уранового шарика радиусом 5 см и плотностью 18,7 г/см^3 находится изотропный точечный источник фотонов с энергией 5 МэВ. На расстоянии 100 см от источника, в вакууме, находится детектор, в котором оценивается плотность числа фотонов. Размер детектора должен быть пренебрежимо малым.

При расчете по программе ПРИЗМА в качестве детекторов использовались шар радиусом 0,1 см (оценка по пробегу) и круговая площадка с тем же радиусом (оценка по пересечениям). Следует отметить, что различие в результатах, полученных с использованием этих оценок, не превышает статистической погрешности последних и тем более значительно меньше эффекта неточной нормировки весового множителя. Следовательно, можно считать, что результаты расчета с меньшими размерами детектора или с использованием оценки потока в точке [1] будут близки к представленным ниже.

Для моделирования взаимодействий фотонов использовались данные библиотеки EPDL-97, которые можно получить на сайте Ливерморской национальной лаборатории [5].

Всего было посчитано четыре варианта, различающихся моделированием когерентного рассеяния:

вариант 1 – при вычислении весового множителя использовалась нормировка на интегральное сечение, представленное в библиотеке;

вариант 2 – при моделировании когерентного рассеяния применялись только методы расщепления и рулетки [1];

вариант 3 – для оценки весового множителя использовалась методика, предлагаемая в настоящей работе;

вариант 4 – когерентное рассеяние не учитывалось.

Последний вариант рассчитывался для того, чтобы оценить влияние когерентного рассеяния на результаты данной задачи. Априори можно предположить, что это влияние должно быть невелико, так как во всей области изменения энергий рассматриваемая реакция нигде не является ведущей. Однако полезно оценить ее вклад численно.

В таблице представлены результаты расчета, нормированные на один фотон источника. Все варианты считались одно и то же время. Относительные статистические погрешности в одно стандартное уклонение во втором варианте приблизительно равняются 10^{-3}, а во всех остальных случаях 10^{-4}.

Большая погрешность второго варианта обусловлена использованием менее эффективного метода расщепления и рулетки. Видно, что относительное различие между первым и вторым (или между первым и третьим) вариантами составляет более 11%, что значительно само по себе и существенно выходит за рамки статистической погрешности. В то же время различие между вторым и третьим вариантами находится в рамках этой погрешности. Что касается четвертого варианта, то его относительное различие со вторым или третьим составляет примерно 1%.

Таким образом, погрешность, вносимая несогласованностью интегрального и дифференциального сечений, на порядок превышает погрешность, вносимую учетом самой реакции, что, конечно, недопустимо при расчете прикладных задач.

Следует также отметить, что статистические погрешности первого и второго вариантов практически совпадают. И, следовательно, рост дисперсии, вызванный использованием в качестве весового множителя случайной величины вместо среднего значения, несущественен, по крайней мере, в задачах подобного типа.

Таблица

Оценка плотности числа фотонов для разных вариантов (в 10^7см$^{-3}$)

Вариант	Оценка по пробегу	Оценка по пересечениям
1	3,8027	3,8027
2	3,4130	3,4170
3	3,4135	3,4136
4	3,4660	3,4650

Заключение

Таким образом, представлены явные выражения для вычисления весового множителя в случае использования ненормированных распределений в методах отбора. В общем случае значение дается выражением (3). При использовании алгоритмов типа метода Неймана можно воспользоваться формулой (9), где проведено интегрирование по дополнительному параметру. Данный подход является точным (в отличие, например, от использования приближенного значения нормировочного множителя), в то же время он не требует дополнительных вычислительных затрат и легко реализуется для произвольного алгоритма отбора.

Также показано применение представленного метода для моделирования когерентного рассеяния фотонов. На модельной задаче продемонстрировано, что использование этого метода позволяет получать точный результат, в то время как приближенная нормировка, с использованием интегрального сечения, приводит к погрешности, намного превышающей даже вклад учета самой реакции в оцениваемые функционалы. При этом использование предлагаемого метода не приводит к заметному росту дисперсии и, таким образом, эффективность моделирования практически не уменьшается.

Список литературы

1. *Спанье Дж., Гелбард З.* Метод Монте-Карло и задачи переноса нейтронов. М.: Атомиздат, 1972.
2. *Соболь И. М.* Численные методы Монте-Карло. М.: Наука, 1973.
3. ENDF-102. Data Formats and Procedures for

the Evaluated Nuclear Data File ENDF-6 / Ed. by V. McLane. National Nuclear Data Center. Brookhaven National Laboratory. Upton, N.Y. http://www.nndc.bnl.gov/nndcscr/documents/endf/endf102/endf102.pdf.

4. *Arnautova M. A., Kandiev Ya. Z., Lukhminsky B. E., Malyshkin G. N.* Monte-Carlo simulation in nuclear geophysics. In comparison of the PRIZMA Monte-Carlo program and benchmark experiments // Nucl. Geophys. 1993. Vol. 7 (3). P. 407—418.

5. Lawrence Livermore National Laboratory. http://www.llnl.gov/cullen1/atomic.htm.

Статья поступила в редакцию 16.06.09.