

ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО ПО ОБРАЗОВАНИЮ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
МОСКОВСКИЙ ИНЖЕНЕРНО-ФИЗИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ
(ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ)

М.П.Панин

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕРЕНОСА ИЗЛУЧЕНИЯ

*Рекомендовано УМО «Ядерные физика и технологии»
в качестве учебного пособия
для студентов высших учебных заведений*

Москва 2008

УДК 539.125.5
ББК 22ю382я7
П16

Панин М.П. **Моделирование переноса излучения**: Учебное пособие. – М.: МИФИ, 2008. – 212 с.

В пособии даны величины и основные уравнения, описывающие распространение ионизирующего излучения, а также приведены алгоритмы моделирования переноса излучения методом Монте-Карло как для прямого, так и сопряженного уравнений. Рассмотрен перенос нейтральных частиц, а моделирование столкновения излагается на примере гамма-излучения. Алгоритмы даны с математическим обоснованием на физическом уровне строгости.

Предназначено для студентов, обучающихся по инженерно-физическим и ядерно-физическим специальностям. Может быть полезно студентам, специализирующимся в области прикладной математики.

Пособие подготовлено в рамках выполнения Инновационной образовательной программы МИФИ.

Рецензенты:

д.т.н., проф. МИФИ В.А. Климанов,
к.ф.-м.н., в.н.с. ИФВЭ И.С. Байшев

ISBN 978-5-7262-0946-3

© Московский инженерно-физический институт
(государственный университет), 2008

Редактор Т.В. Волвенкова

Подписано в печать 01.09.2008. Формат 60×84¹/₁₆

Печ. л. 13,25. Уч.-изд. л. 13,25. Тираж 150 экз.

Изд. № 4/71. Заказ № 1-2052

*Московский инженерно-физический институт
(государственный университет)
115409, Москва, Каширское ш., 31*

*Типография издательства «Троянт»
г.Троицк Московской обл.*

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие	7
Список используемых обозначений и специальных функций	9
ЧАСТЬ 1. ВВЕДЕНИЕ В ТЕОРИЮ ПЕРЕНОСА ИЗЛУЧЕНИЙ	10
Глава 1. Основные понятия	10
§1.1. Источники излучения	10
§1.2. Поточковые характеристики поля излучения	11
§1.3. Токовые характеристики поля излучения	14
§1.4. Плотность частиц	17
Глава 2. Взаимодействие излучения с веществом	19
Глава 3. Прямое уравнение переноса излучения	27
§3.1. Стационарное прямое интегродифференциальное уравнение переноса	27
§3.2. Граничные условия уравнения переноса	29
3.2.1. Внутренние границы	29
3.2.2. Внешние границы	32
§3.3. Уравнение переноса в плоской геометрии	33
§3.4. Операторная форма уравнения переноса	34
§3.5. Функция Грина	35
Глава 4. Интегральная форма уравнения переноса излучения	38
§4.1. Оптическое расстояние.....	38
§4.2. Интегральная форма уравнения переноса	39
§4.3. Уравнение переноса для плотности столкновений ...	43
§4.4. Разложение в ряд Неймана и метод последовательных столкновений	47
Глава 5. Сопряженные функции теории переноса	50
§5.1. Функция детектора	50
§5.2. Сопряженный оператор переноса	51
§5.3. Сопряженное интегродифференциальное уравнение переноса	53
§5.4. Интегральная форма сопряженного уравнения переноса	56
§5.5. Разложение в ряд Неймана сопряженных функций и функционалов	61

ЧАСТЬ 2. МЕТОД МОНТЕ-КАРЛО В ЗАДАЧАХ ПЕРЕНОСА ИЗЛУЧЕНИЯ.....	65
Глава 6. Основы метода Монте-Карло	65
§6.1. Краткий очерк истории метода Монте-Карло	65
§6.2. Случайные величины	67
§6.3. Розыгрыш случайной величины	70
§6.4. Генераторы случайных чисел	71
§6.5. Метод обратных функций	74
§6.6. Метод исключения	76
§6.7. Метод суперпозиции	79
§6.8. Метод оценки математического ожидания	82
§6.9. Вычисление определенных интегралов методом Монте-Карло	85
6.9.1. Метод выделения главной части	86
6.9.2. Метод понижения порядка интегрирования	87
6.9.3. Метод выборки по важности	88
Глава 7. Общая схема применения метода Монте-Карло для расчета характеристик поля излучения	93
Глава 8. Моделирование функции источника	99
§8.1. Пространственные характеристики	99
§8.2. Угловое распределение излучения	102
§8.3. Энергетическое распределение излучения	104
Глава 9. Моделирование транспортного ядра	107
§9.1. Общая схема розыгрыша длины свободного пробега в среде	107
§9.2. Универсальные геометрические модули	110
9.2.1. Описание геометрии	111
9.2.2. Язык задания геометрии	115
9.2.3. Алгоритмическая реализация	117
§9.3. Метод дельта-рассеяния	123
Глава 10. Моделирование ядра столкновений	127
§10.1. Общая схема моделирования столкновения	127
§10.2. Розыгрыш комптоновского рассеяния	130
10.2.1. Метод Коблингера	131
10.2.2. Метод Кана	132
10.2.3. Метод Карлсона	135
§10.3. Розыгрыш некогерентного рассеяния на связанных электронах	137

§10.4. Розыгрыш когерентного рассеяния на связанных электронах	138
§10.5. Множественность частиц при рассеянии	141
Глава 11. Оценка функционалов	144
§11.1 Основные оценки в методе Монте-Карло	144
11.1.1. Оценка по столкновениям	145
11.1.2. Оценка по поглощениям	145
11.1.3. Оценка по пробегам	146
§11.2. Локальные оценки	147
11.2.1. Оценка по пересечениям	148
11.2.2. Локальная оценка потока	149
11.2.3. Другие локальные оценки	153
Глава 12. Методы уменьшения дисперсии	158
§12.1. Неаналоговое моделирование	158
12.1.1. Статистический вес по выживанию	161
12.1.2. Статистический вес по вылету	162
12.1.3. Статистический вес по рождению	162
12.1.4. Смещение индикатрисы рассеяния	163
12.1.5. Экспоненциальное преобразование	164
§12.2. Моделирование по ценности	165
§12.3. Расщепление и русская рулетка	169
Глава 13. Моделирование сопряженного уравнения переноса методом Монте-Карло	173
§13.1. Выбор стратегии	173
§13.2. Базовые уравнения для сопряженного моделирования	177
§13.3. Общий алгоритм сопряженного моделирования	178
§13.4. Сопряженное ядро столкновений при комптоновском рассеянии	181
§13.5. Сингулярные сопряженные ядра столкновений	185
§13.6. Сопряженные оценки	191
13.6.1. Распределенный источник	191
13.6.2. Распределенный источник с дискретным спектром излучения	191
13.6.3. Точечный источник с дискретным спектром излучения	195
Глава 14. Аппарат сопряженных функций в задачах радиационной физики	199
§14.1. Вычисление линейных функционалов	199

§14.2. Вычисление билинейных функционалов	200
§14.3. Расчет возмущений функционалов	204
Список литературы	210

Предисловие

Данное пособие написано по материалам лекций, которые автор в течение ряда лет читает студентам старших курсов Московского инженерно-физического института (государственного университета). Весь материал состоит из двух частей.

В первой части излагаются основные понятия и уравнения, описывающие перенос излучения в веществе. В ней нет специального рассмотрения вопросов физики взаимодействия излучения с веществом, которое обычно присутствует в такого рода книгах. На эту тему имеется многочисленная литература, например [1, 2, 3, 6, 9, 10, 18, 19, 22], в которой можно найти достаточно подробное описание физической картины взаимодействия излучения. Соответствующая глава пособия «Взаимодействие излучения с веществом» включает только обсуждение такого базового понятия, как сечение взаимодействия, поскольку оно многократно используется во всей книге. Кроме этого, лишь при описании метода Монте-Карло в контексте моделирования исхода столкновения частицы даются отдельные, необходимые для понимания, сведения о физике взаимодействия.

Целью первой части является подготовка к восприятию материала второй части, посвященной применению метода Монте-Карло для решения задач переноса излучения. При изложении метода Монте-Карло была сделана попытка уйти от описания метода как «численного эксперимента», целиком базирующегося на моделировании реального процесса распространения частиц в веществе. Такое представление, весьма полезное в начале изучения метода, сильно ограничивает понимание применения неаналоговых форм моделирования. При использовании же сопряженного уравнения физическая аналогия в целом отсутствует. В настоящей работе, в силу данных причин, изложение метода Монте-Карло отталкивается от основных уравнений: прямого и сопряженного. Большинство уравнений и расчетных схем приведены с математическим выводом, чтобы у читателя не возникало необходимости просто верить приводимым формулам. Получаемые формулы в большинстве случаев снабжены комментариями, поясняющими физический смысл получаемых выражений и вытекающую из этого размерность.

Сделана попытка, где только возможно, давать практические рекомендации, которые могли бы быть полезны при реализации метода на компьютере.

В данную работу включено описание технологии моделирования сопряженного уравнения переноса (для ценности), которое в учебной литературе автору ранее не встречалось.

Изложение в данном пособии основных уравнений и метода Монте-Карло для решения задач переноса излучения ориентировано в первую очередь на нейтральные частицы (фотоны и нейтроны). Несмотря на то, что основные уравнения справедливы и для заряженных частиц, моделирование переноса заряженных частиц имеет существенную специфику, описание которой выходит за рамки этой работы.

Каждая глава снабжена контрольными вопросами из числа тех, которые обычно задают студентам на экзаменах.

Пособие рассчитано на студентов старших курсов с инженерно-физическим и ядерно-физическим профилем подготовки. Оно также может быть полезно студентам, специализирующимся в области прикладной математики. Для понимания пособия требуется предварительное знакомство с курсом ядерной физики (раздел, посвященный взаимодействию излучения с веществом), а также знание высшей математики в объеме технического вуза.

Автор считает своим приятным долгом выразить сердечную признательность заведующему кафедрой МИФИ профессору В.А. Климанову и ведущему научному сотруднику ИФВЭ И.С. Байшеву за нелегкий труд рецензирования этой книги и сделанные в ходе рецензирования ценные замечания.

Список используемых обозначений и специальных функций

- t – время;
 \vec{r} – радиус-вектор точки в пространстве;
 E – энергия;
 $\vec{\Omega}$ – единичный вектор для обозначения направления движения частиц;
 $\Delta\Omega$ – телесный угол;
 $d\Omega$ – элемент телесного угла;
 $d\vec{r}$ – элемент объема (то же самое, что и dV);
 \vec{x} – точка в фазовом пространстве, обозначающая одновременно $(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$;
 $\langle f \rangle$ – интегрирование от функции f по всему фазовому пространству.

Скалярная дельта-функция:

$$\delta(x-a) = \begin{cases} \infty, & x = a \\ 0, & x \neq a \end{cases}, \quad \text{для } \forall \varepsilon > 0: \int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} \delta(x-a) dx = 1.$$

Векторные дельта-функции:

$$\delta(\vec{\Omega} - \vec{\Omega}_0) = \begin{cases} \infty, & \vec{\Omega} = \vec{\Omega}_0 \\ 0, & \vec{\Omega} \neq \vec{\Omega}_0 \end{cases}, \quad \text{для } \forall \Delta\Omega, \vec{\Omega}_0 \in \Delta\Omega: \int_{\Delta\Omega} \delta(\vec{\Omega} - \vec{\Omega}_0) d\Omega = 1$$

с размерностью $[\text{ср}^{-1}]$;

$$\delta(\vec{r} - \vec{r}_0) = \begin{cases} \infty, & \vec{r} = \vec{r}_0 \\ 0, & \vec{r} \neq \vec{r}_0 \end{cases}, \quad \text{для } \forall \Delta V, \vec{r}_0 \in \Delta V: \int_{\Delta V} \delta(\vec{r} - \vec{r}_0) d\vec{r} = 1$$

размерностью $[\text{см}^{-3}]$.

ЧАСТЬ 1. ВВЕДЕНИЕ В ТЕОРИЮ ПЕРЕНОСА ИЗЛУЧЕНИЙ

Глава 1. Основные понятия

*Что уж и так мой бедный слог
Пестреть гораздо меньше мог
Иноплеменными словами...
А.С. Пушкин*

Ионизирующее излучение – такое излучение, при взаимодействии которого с веществом, в веществе образуются положительные и отрицательные ионы, т.е. происходит ионизация.

§1.1. Источники излучения

Источник излучения – вещество или прибор, испускающие ионизирующее излучение.

- *Функция источника* $Q(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)$ равна количеству частиц, которые в единицу времени в момент t
- испускаются источником из единицы объема вокруг точки \vec{r} ,
- имеют энергию в единичном интервале энергий вокруг значения E ,
- летят в единице телесного угла вокруг направления $\vec{\Omega}$ (рис.1.1)

$$Q(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) = \frac{d^4 N}{dt dV dE d\Omega}.$$

Размерность функции источника: $\left[\frac{1}{\text{с} \cdot \text{см}^3 \cdot \text{МэВ} \cdot \text{ср}} \right]$.

В данном определении впервые использованы выражения «в единичном интервале энергий», «в единице телесного угла», «из единицы объема». Они и подобные им будут в дальнейшем встречаться многократно, поэтому уточним, как их следует понимать. Несмотря на то, что «единичный интервал энергий» приводит к появлению МэВ в знаменателе размерности, это не

означает, что подсчитываются все частицы в интервале $E \pm 0,5$ МэВ. На самом деле вокруг E рассматривается бесконечно малый интервал энергий, а само количество частиц делится на величину этого интервала, измеренную в мегаэлектрон-вольтах. Точно так же вокруг направления $\vec{\Omega}$ выбирается бесконечно малый телесный угол, и полное количество частиц относится к величине этого малого телесного угла, измеренной в стерadians. Аналогично надо относиться к единицам времени и объема.

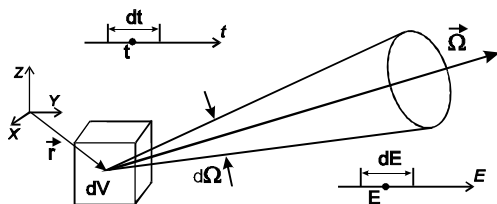


Рис. 1.1. Схема определения функции источника

Полная мощность источника показывает суммарное количество частиц, испускаемое всем источником в единицу времени безотносительно их энергии и направления движения

$$Q(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{4\pi} \int Q(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) d\vec{r} dE d\Omega.$$

В приведенном тройном интеграле первый берется по всему трехмерному физическому пространству координат, что символически обозначено знаком « ∞ », а последний – по полному телесному углу, который соответствует всевозможным направлениям вектора $\vec{\Omega}$.

§1.2. Поточковые характеристики поля излучения

Дифференциальная энергоугловая плотность потока частиц $\varphi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)$ равна количеству частиц, которые в единицу времени в момент t

- пересекают единичную площадку с центром в точке \vec{r} , ориентированную нормалью вдоль направления движения частиц,

- имеют энергию в единичном интервале энергий вокруг значения E ,
- движутся в единице телесного угла вокруг направления $\vec{\Omega}$ (рис.1.2)

$$\varphi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) = \frac{d^4 N}{dt dS dE d\Omega}.$$

Размерность дифференциальной энергоугловой плотности потока частиц: $\left[\frac{1}{\text{с} \cdot \text{см}^2 \cdot \text{МэВ} \cdot \text{ср}} \right]$.

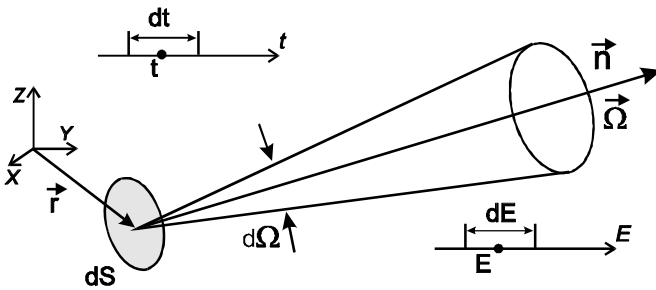


Рис.1.2. Схема определения дифференциальной плотности потока

Дифференциальная энергоугловая плотность потока энергии (интенсивность) $I(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) = E \cdot \varphi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)$ равна энергии, переносимой частицами, которые в единицу времени в момент t

- пересекают единичную площадку с центром в точке \vec{r} , ориентированную нормалью вдоль направления движения частиц,
- имеют энергию в единичном интервале энергий вокруг значения E ,
- движутся в единице телесного угла вокруг направления $\vec{\Omega}$

$$I(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) = \frac{d^4 W}{dt dS dE d\Omega}.$$

Размерность дифференциальной энергоугловой плотности потока энергии: $\left[\frac{\text{МэВ}}{\text{с} \cdot \text{см}^2 \cdot \text{МэВ} \cdot \text{ср}} \right]$.

Интегральная плотность потока частиц $\varphi(\vec{r}, t)$ равна количеству частиц, которые в единицу времени в момент t проникают внутрь единичной сферы¹ с центром в точке \vec{r} :

$$\varphi(\vec{r}, t) = \int_0^{\infty} \int_{4\pi} \varphi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) dE d\Omega,$$

$$\varphi(\vec{r}, t) = \frac{d^2 N}{dt dS}.$$

Размерность интегральной плотности потока частиц: $\left[\frac{1}{\text{с} \cdot \text{см}^2} \right]$.

Интегральная плотность потока энергии $I(\vec{r}, t)$ равна количеству энергии, переносимой частицами, которые в единицу времени в момент t проникают внутрь единичной сферы с центром в точке \vec{r} (рис.1.3):

$$I(\vec{r}, t) = \int_0^{\infty} \int_{4\pi} E \varphi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) dE d\Omega,$$

$$\varphi(\vec{r}, t) = \frac{d^2 N}{dt dS}.$$

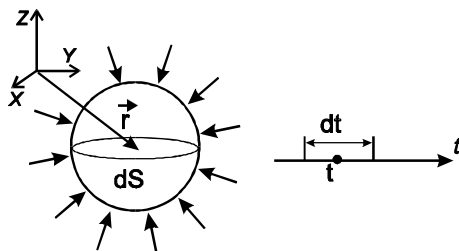


Рис.1.3. Схема определения интегральной плотности потока

¹ Единичная сфера – сфера с единичной площадью поперечного сечения.

Размерность интегральной плотности потока энергии:
 $\left[\frac{\text{МэВ}}{\text{с} \cdot \text{см}^2} \right]$.

Интегрированием плотности потока по времени определяется *флюенс*, при этом

флюенс частиц $F_N(\vec{r}, t) = \int_0^t \varphi(\vec{r}, \tau) d\tau$ имеет размерность $\left[\frac{1}{\text{см}^2} \right]$,

флюенс энергии $F_E(\vec{r}, t) = \int_0^t I(\vec{r}, \tau) d\tau$ имеет размерность $\left[\frac{\text{МэВ}}{\text{см}^2} \right]$.

Физический смысл флюенса частиц (энергии): полное количество частиц (энергии), вошедших (вошедшей) внутрь единичной сферы с центром в точке \vec{r} за все время наблюдения t .

Для краткости величина φ далее будет называться просто «плотность потока». Степень ее дифференциальности должна быть понятна из аргументов. Например, $\varphi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)$ – дифференциальная энергоугловая, $\varphi(\vec{r}, \vec{\Omega}, t)$ – дифференциальная угловая, а $\varphi(\vec{r}, t)$ – интегральная плотность потока. У них разная размерность, поскольку последующая получается из предыдущей интегрированием по одной из переменных и исчезновением ее из списка аргументов. Исключением является зависимость от времени. Обозначения $\varphi(\vec{r}, t)$ и $\varphi(\vec{r})$ относятся к одной и той же физической величине с одинаковой размерностью, но $\varphi(\vec{r})$ соответствует стационарному (не зависящему от времени) полю излучения.

§1.3. Токовые характеристики поля излучения

Дифференциальная энергоугловая плотность тока частиц $\vec{j}_\varphi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) = \vec{\Omega} \cdot \varphi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)$ есть вектор, длина которого численно равна величине дифференциальной энергоугловой плотности потока частиц, а направление совпадает с направлением их движения. Размерность дифференциальной плотности тока частиц

равна размерности дифференциальной плотности потока частиц:

$$\left[\frac{1}{\text{с} \cdot \text{см}^2 \cdot \text{МэВ} \cdot \text{ср}} \right].$$

Дифференциальная энергоугловая плотность тока энергии $\vec{j}_E(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) = \vec{\Omega} \cdot E \cdot \varphi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)$ есть вектор, длина которого численно равна величине дифференциальной энергоугловой плотности потока энергии, а направление совпадает с направлением движения частиц. Размерность дифференциальной плотности тока энергии равна размерности дифференциальной плотности потока энергии: $\left[\frac{\text{МэВ}}{\text{с} \cdot \text{см}^2 \cdot \text{МэВ} \cdot \text{ср}} \right]$.

Интегральная плотность тока частиц определяется как интеграл от дифференциальной плотности тока частиц по всем энергиям и направлениям:

$$\begin{aligned} \vec{J}_N(\vec{r}, t) &= \int_0^\infty \int_{4\pi} \vec{j}_N(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) dE d\Omega = \int_0^\infty \int_{4\pi} \vec{\Omega} \cdot \varphi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) dE d\Omega = \\ &= \int_{4\pi} \vec{\Omega} \cdot \varphi(\vec{r}, \vec{\Omega}, t) d\Omega. \end{aligned}$$

Размерность интегральной плотности тока частиц совпадает с размерностью интегральной плотности потока частиц $\left[\frac{1}{\text{с} \cdot \text{см}^2} \right]$.

Аналогично определяется *интегральная плотность тока энергии*:

$$\begin{aligned} \vec{J}_E(\vec{r}, t) &= \int_0^\infty \int_{4\pi} \vec{j}_E(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) dE d\Omega = \int_0^\infty \int_{4\pi} \vec{\Omega} \cdot E \cdot \varphi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) dE d\Omega = \\ &= \int_{4\pi} \vec{\Omega} \cdot I(\vec{r}, \vec{\Omega}, t) d\Omega. \end{aligned}$$

Ее размерность: $\left[\frac{\text{МэВ}}{\text{с} \cdot \text{см}^2} \right]$.

Определим количество (алгебраическую сумму) частиц, которое в заданном поле излучения пересекает малую ориентированную площадку. «Малая» означает, что плотность потока во всех точках площадки можно считать одинаковой. Ориентация площадки задается вектором нормали \vec{n} (рис. 1.4).

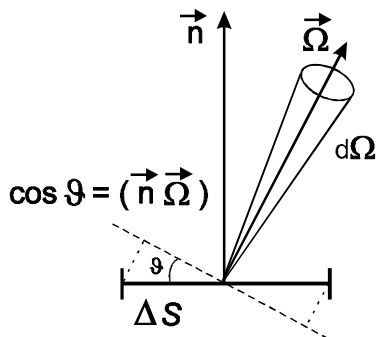


Рис. 1.4. Схема расчета числа пересечений ориентированной площадки

Количество частиц, движущихся в элементарном телесном угле и пересекающих площадку, равно:

$$dN = (\vec{\Omega} \cdot \vec{n}) \varphi(\vec{r}, \vec{\Omega}, t) \cdot \Delta S \cdot d\Omega.$$

Обратим внимание на то, что суммирование пересекающих частиц алгебраическое, т.е. частицы, движущиеся против направления нормали, дадут отрицательный вклад в количество пересечений. Для получения полного количества пересечений проинтегрируем это выражение по всем направлениям:

$$\Delta N = \int_{4\pi} (\vec{\Omega} \cdot \vec{n}) \varphi(\vec{r}, \vec{\Omega}, t) \Delta S d\Omega = \Delta S \vec{n} \int_{4\pi} \vec{\Omega} \varphi(\vec{r}, \vec{\Omega}, t) d\Omega = \Delta S \cdot (\vec{n} \cdot \vec{J}_N).$$

Очевидно, количество пересечений единичной площадки есть проекция вектора интегральной плотности тока на ее нормаль:

$$\frac{\Delta N}{\Delta S} = \vec{n} \cdot \vec{J}_N.$$

Это количество максимально, если нормаль совпадает с вектором интегральной плотности тока, и численно равно модулю интегральной плотности тока.

Таким образом, физический смысл вектора интегральной плотности тока:

- направление вектора показывает такую ориентацию нормали единичной площадки, при которой количество пересекающих ее частиц алгебраически максимально;
- модуль вектора показывает максимальное алгебраическое количество частиц, пересекающих единичную площадку, находящуюся в заданном поле излучения.

§1.4. Плотность частиц

Пусть $n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)$ обозначает плотность (концентрацию) частиц, т.е. количество частиц в единице объема вокруг точки \vec{r} , которые в момент времени t имеют энергию в единичном интервале энергий вокруг значения E и летят в единице телесного угла вокруг направления $\vec{\Omega}$, т.е.

$$n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) = \frac{d^4 N}{dV dE d\Omega}.$$

Размерность концентрации частиц: $\left[\frac{1}{\text{см}^3 \cdot \text{МэВ} \cdot \text{ср}} \right]$.

Найдем связь между концентрацией частиц и плотностью их потока. Для этого рассмотрим цилиндрический объем с основанием dS , перпендикулярным направлению движения частиц $\vec{\Omega}$, и длиной dl , равной расстоянию, которое пройдут частицы фиксированной энергии E за малый отрезок времени dt . Пусть $v(E)$ – скорость частиц, соответствующая энергии E , тогда $dl = v(E) \cdot dt$.

Очевидно, за время dt все частицы, находящиеся в объеме, пересекут основание dS . Их полное количество, отнесенное к единицам телесного угла и энергии, равно $n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) \cdot dS dt \cdot v(E)$. Из определения дифференциальной энергоугловой плотности потока частиц получаем

$$\varphi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) = v(E) \cdot n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t). \quad (1.1)$$

Интегрируя обе части этого уравнения по энергиям и углам, найдем выражение для интегральной плотности потока через концентрацию летящих частиц:

$$\varphi(\vec{r}, t) = \int_0^{\infty} \int_{4\pi} v(E) \cdot n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) d\Omega dE. \quad (1.2)$$

Понятие концентрации используется только по отношению к нейтронам.

Контрольные вопросы

- Дайте определение и укажите размерность функции источника.
- Напишите функцию точечного моноэнергетического изотропного источника единичной мощности.
- Что показывает мощность источника?
- Что представляет собой дифференциальная энергоугловая плотность потока частиц?
- Что такое интегральная плотность потока частиц, какова ее размерность?
- Как связаны между собой интегральная и дифференциальная плотности потока частиц?
- Объясните физический смысл интегральной плотности тока частиц (модуля и направления).
- Что такое флюенс частиц, и в каких единицах он измеряется?

Глава 2. Взаимодействие излучения с веществом

*Отрядом книг уставил полку,
Читал, читал, а все без толку...
А.С. Пушкин*

В зависимости от вида излучения его взаимодействие с веществом имеет различную природу: ядерное взаимодействие нейтронов, электромагнитное – фотонов и заряженных частиц. Для последних это взаимодействие обусловлено дальнедействующими кулоновскими силами.

Взаимодействие излучения имеет статистический характер. Это означает, что нельзя точно предсказать, произойдет взаимодействие данной частицы с веществом или нет. Можно говорить только о вероятности такого взаимодействия.

Частицы ионизирующего излучения взаимодействуют с веществом независимо друг от друга. Это верно практически всегда – до тех пор, пока флюенс частиц не настолько велик, чтобы воздействие излучения существенно изменило свойства самого вещества или нельзя было пренебречь взаимодействием частиц между собой (например, в результате возникновения объемного заряда). Далее везде считается, что условие независимости выполняется, т.е. рассматривается *линейная* теория переноса излучения.

В зависимости от свойств излучения его взаимодействие с веществом происходит на разных физических объектах – мишенях. Такими мишенями могут быть: электрон, ядро, атом, молекула или даже целый кристалл.

Представим себе, что малый образец вещества, содержащий N_M мишеней, облучают частицами с флюенсом F . Пусть в результате облучения ν частиц провзаимодействовали с веществом. Тогда *микроскопическим сечением* взаимодействия назовем:

$$\sigma_M = \frac{\nu}{N_M \cdot F}. \quad (2.1)$$

Малым будем называть такое количество облучаемого вещества, при котором величину флюенса во всем его объеме можно считать неизменной.

Физический смысл микроскопического сечения: оно показывает среднее количество частиц, приходящихся на одну мишень, которые провзаимодействовали с веществом при облучении его (вещества) единичным флюенсом частиц.

Размерность микроскопического сечения $[\text{см}^2]$. Обычно используется единица *барн*: $1 \text{ б} = 10^{-24} \text{ см}^2$.

Пусть облучаемый образец вещества в форме цилиндра (рис.2.1) имеет бесконечно малый элемент объема: $dV = dS \cdot dl$. Тогда количество мишеней в нем $dN_M = dV \cdot n_M$, где n_M – концентрация мишеней. Общее количество попавших на образец вещества частиц излучения $\nu_0 = F \cdot dS$. Выразим долю частиц, которые вступили во взаимодействие в веществе

$$\frac{d\nu}{\nu_0} = \frac{\sigma_M dN_M F}{F dS} = \sigma_M dl n_M.$$

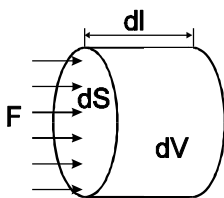


Рис.2.1. Схема к определению макроскопического сечения

Назовем произведение $\sigma_M \cdot n_M$ *макроскопическим сечением* взаимодействия:

$$\Sigma = \sigma_M \cdot n_M = \frac{d\nu/\nu_0}{dl}. \quad (2.2)$$

Размерность макроскопического сечения $[\text{см}^{-1}]$, и оно показывает вероятность взаимодействия излучения на единице длины.

Если разделить обе части выражения (2.2) на плотность ρ , то получится определение *массового* макроскопического сечения Σ_m :

$$\Sigma_m = \frac{\Sigma}{\rho} = \frac{\sigma_M \cdot n_M}{\rho} = \frac{d\nu/\nu_0}{dl_m}, \quad (2.3)$$

где элемент массовой длины $dl_m = dl \cdot \rho$ имеет размерность $[\text{г}/\text{см}^2]$.

Очевиден физический смысл массового макроскопического сечения: оно показывает вероятность взаимодействия излучения

на единице массовой длины. Его связывает с микроскопическим сечением величина n_M/ρ , которая есть количество мишеней в единице массы вещества. Размерность массового сечения [$\text{см}^2/\text{г}$].

Полное сечение взаимодействия состоит из сечения поглощения и сечения рассеяния: $\sigma = \sigma_a + \sigma_s$. Под поглощением будем понимать всякий процесс, при котором первичная частица исчезает, а рассеяние – такой процесс, когда первичная частица сохраняется, возможно, меняя при этом свои энергию и направление движения.

Используя описанный ранее мысленный опыт с облучением образца вещества единичным флюенсом частиц, определим сечения поглощения и рассеяния.

Полное *микроскопическое* сечение поглощения σ_a равно среднему количеству частиц, приходящихся на одну мишень образца, которые поглотились при облучении малого количества вещества единичным флюенсом частиц.

Полное (интегральное) *микроскопическое* сечение рассеяния σ_s равно среднему количеству частиц, приходящихся на одну мишень образца, которые рассеялись при облучении малого количества вещества единичным флюенсом частиц.

Дифференциальное *микроскопическое* сечение рассеяния $\sigma_s(E, \vec{\Omega} \rightarrow E', \vec{\Omega}')$ равно среднему количеству частиц, приходящихся на одну мишень, которые рассеялись в единичный телесный угол вокруг направления $\vec{\Omega}'$, имея после рассеяния энергию внутри единичного интервала энергий вокруг значения E' , при облучении малого количества вещества единичным флюенсом частиц энергии E , летящих из направления $\vec{\Omega}$.

$$\sigma_s(E, \vec{\Omega} \rightarrow E', \vec{\Omega}') = \frac{d^2 \sigma_s}{dE d\Omega}. \quad (2.4)$$

Размерность дифференциального микроскопического сечения рассеяния $\left[\frac{\text{см}^2}{\text{ср} \cdot \text{МэВ}} \right]$. Связь дифференциального сечения рассеяния с полным (интегральным) сечением рассеяния:

$$\sigma_s(E) = \int_0^\infty \int_{0 \ 4\pi} \sigma_s(E, \vec{\Omega} \rightarrow E', \vec{\Omega}') dE' d\Omega'. \quad (2.5)$$

В левой части равенства (2.5) осталась зависимость только от энергии частиц, входящих в рассеяние. Мы считаем, что свойства вещества изотропны, поэтому процесс рассеяния не зависит от того, из какого направления происходит облучение образца. В связи с этим и дифференциальное сечение рассеяния зависит только от *изменения* направления движения, а не от абсолютной ориентации векторов $\vec{\Omega}$ и $\vec{\Omega}'$. Изменение направления движения задается двумя параметрами: косинусом угла рассеяния $\mu_s = \cos \theta_s = (\vec{\Omega}, \vec{\Omega}')$ и азимутальным углом поворота плоскости рассеяния ψ (рис. 2.2). При этом элемент телесного угла $d\Omega' = d\mu_s d\psi$.

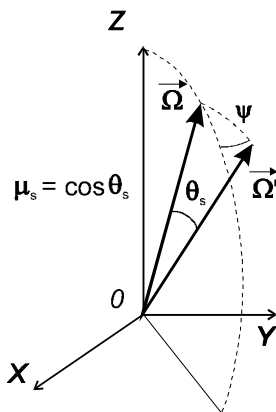


Рис.2.2. Определение углов рассеяния

Таким образом, дифференциальное сечение рассеяния можно записать в виде:

$$\sigma_s(E, \vec{\Omega} \rightarrow E', \vec{\Omega}') = \sigma_s(E \rightarrow E', \mu_s, \psi), \quad (2.6)$$

а формулу (2.5) – следующим образом:

$$\sigma_s(E) = \int_0^{\infty} \int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} \sigma_s(E \rightarrow E', \mu_s, \psi) dE' d\mu_s d\psi. \quad (2.7)$$

Следует сказать, что почти всегда дифференциальное сечение рассеяния можно считать не зависящим от азимутального угла ψ . Это верно с точностью до поляризационных эффектов, влиянием которых обычно пренебрегают.

$$\sigma_s(E \rightarrow E', \mu_s, \psi) = \frac{d^3 \sigma_s}{dE d\mu_s d\psi} = \frac{1}{2\pi} \cdot \frac{d^2 \sigma_s}{dE d\mu_s} = \frac{\sigma_s(E \rightarrow E', \mu_s)}{2\pi}. \quad (2.8)$$

Аналогично формуле (2.2) введем *макроскопическое* сечение поглощения

$$\Sigma_a = \sigma_a \cdot n_M$$

и *макроскопическое* полное (интегральное) сечение рассеяния

$$\Sigma_s = \sigma_s \cdot n_M.$$

Физический смысл макроскопического сечения поглощения – вероятность частице поглотиться на единице длины, а полного макроскопического сечение рассеяния – вероятность рассеяться на единице длины. Разделив данные величины на плотность, как в формуле (2.3), получим массовые макроскопические сечения поглощения и рассеяния. В их физическом смысле вероятность отнесена к единице массовой длины.

Дифференциальное *макроскопическое* сечение рассеяния образуется из микроскопического умножением на концентрацию мишеней n_M :

$$\begin{aligned} \Sigma_s(E, \bar{\Omega} \rightarrow E', \bar{\Omega}' | \vec{r}) &= \frac{d^2 \Sigma_s}{dE d\Omega} = \Sigma_s(E \rightarrow E', \mu_s, \psi | \vec{r}) = \\ &= n_M(\vec{r}) \cdot \sigma_s(E, \bar{\Omega} \rightarrow E', \bar{\Omega}'). \end{aligned}$$

Обратим внимание на то, что, в отличие от микроскопического, макроскопическое сечение зависит от точки рассеяния \vec{r} , поскольку концентрация мишеней в каждой точке пространства может варьировать.

Физический смысл дифференциального *макроскопического* сечения рассеяния: вероятность частице, имеющей энергию E и движущейся вдоль направления $\bar{\Omega}$, на единице длины вблизи точки \vec{r} рассеяться в единичный телесный угол вокруг направления $\bar{\Omega}'$, имея после рассеяния энергию внутри единичного интервала энергий вокруг значения E' .

Размерность дифференциального макроскопического сечения рассеяния $\left[\frac{\text{см}^{-1}}{\text{ср} \cdot \text{МэВ}} \right]$.

Индикатриса рассеяния показывает распределение рассеянных частиц по направлениям вылета из рассеяния безотносительно к их выходящей энергии:

$$f(E, \mu_s, \psi) = \frac{\int_0^\infty \sigma_s(E \rightarrow E', \mu_s, \psi) dE'}{\sigma_s(E)}.$$

Она численно равна плотности вероятности получить при рассеянии направление движения, задаваемое параметрами ψ и μ_s . Ее размерность $[\text{ср}^{-1}]$, а полный интеграл нормирован на единицу:

$$\int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} f(E, \mu_s, \psi) d\mu_s d\psi = 1.$$

Имея в виду замечания о независимости рассеяния от азимутального угла ψ , будем использовать и азимутально-независимую форму индикатрисы:

$$2\pi \cdot \int_{-1}^1 f(E, \mu_s) d\mu_s = 1.$$

Рассмотрим образование сечений для сложных веществ, представляющих собой смесь N элементов. Выше был определен физический смысл макроскопического сечения как вероятность взаимодействия излучения на единице длины. Полная вероятность есть сумма вероятностей взаимодействия на отдельных компонентах, поскольку они соответствуют независимым неперекрывающимся событиям взаимодействия на каждом из элементов смеси. Для сечения смеси это означает следующую сумму парциальных сечений на компонентах

$$\Sigma_{\text{смеси}} = \sum_{i=1}^N \Sigma_i. \quad (2.9)$$

Обычно смесь задается в виде массовых долей компонентов p_{mi} . Преобразуем формулу (2.9) с помощью микроскопического атомарного сечения σ_i , а также объемной n_i и массовой n_{mi} концентраций отдельных элементов:

$$\Sigma_{\text{смеси}} = \sum_{i=1}^N \sigma_i n_i = \sum_{i=1}^N \sigma_i n_{mi} \rho_i. \quad (2.10)$$

Парциальная плотность элемента ρ_i обычно неизвестна, но выражается через массовую долю компонента и плотность смеси:

$$\rho_i = p_{mi} \rho_{\text{смеси}} .$$

Окончательно для массового макроскопического сечения смеси получим:

$$\Sigma_{m \text{ смеси}} = \frac{\Sigma_{\text{смеси}}}{\rho_{\text{смеси}}} = \sum_{i=1}^N \sigma_i n_{mi} p_{mi} = \sum_{i=1}^N \Sigma_{mi} p_{mi} . \quad (2.11)$$

Если известна химическая формула сложного вещества, то можно считать заданным количество атомов i -го элемента в молекуле k_i , а массовая доля элемента просто находится из атомной массы элемента A_i

$$p_{mi} = \frac{A_i k_i}{\sum_{i=1}^N A_i k_i} .$$

В некоторых случаях более удобным может быть следующий вариант формулы (2.10) для макроскопического сечения вещества, состоящего из молекул:

$$\Sigma_M = \sum_{i=1}^N \sigma_i n_i = \sum_{i=1}^N \sigma_i n_M k_i, \quad (2.12)$$

где n_M представляет собой объемную концентрацию молекул, которая легко находится через число Авогадро N_A , молекулярную массу M и плотность молекул ρ_M :

$$n_M = \frac{N_A}{M} \rho_M = \frac{N_A}{\sum_{i=1}^N A_i k_i} \rho_M .$$

Микроскопическое сечение, рассчитанное на одну молекулу вещества, образуется следующим суммированием атомарных сечений элементов

$$\sigma^{(M)} = \sum_{i=1}^N \sigma_i k_i . \quad (2.13)$$

Все приведенные выше формулы суммирования (2.9)–(2.13) справедливы как для полных сечений, так и для сечений отдельных процессов. Для рассеяния же они могут применяться и к интегральному, и дифференциальному сечениям.

Контрольные вопросы

- ❑ Что показывает микроскопическое сечение взаимодействия?
- ❑ Каков физический смысл макроскопического сечения взаимодействия и в каких единицах оно измеряется?
- ❑ Напишите связь между микроскопическим и макроскопическим сечениями.
- ❑ Что такое массовое сечение взаимодействия и чем оно отличается от обычного сечения?
- ❑ Дайте определение дифференциального макроскопического сечения рассеяния и укажите его размерность.
- ❑ От чего зависит макроскопическое сечение взаимодействия?
- ❑ Какова связь полного и дифференциального сечения рассеяния?
- ❑ Что показывает индикатриса рассеяния?
- ❑ Какие процессы взаимодействия можно отнести к рассеянию?

Глава 3. Прямое уравнение переноса излучения

*Он знал довольно по латыне,
Чтоб эпитафы разбирать...
А.С. Пушкин*

§3.1. Стационарное прямое интегродифференциальное уравнение переноса

В стационарном поле излучения рассмотрим баланс частиц в точке \vec{r} , движущихся вдоль направления $\vec{\Omega}$ внутри элементарного телесного угла $d\Omega$ и имеющих энергию от E до $E+dE$. Для этого построим вокруг точки \vec{r} элементарный цилиндрический объем, так что образующая его боковой поверхности параллельна направлению $\vec{\Omega}$ (рис. 3.1). Баланс – это равенство суммарных прибыли и убыли частиц в данном объеме.

Прибыль №1 – частицы, которые каждую секунду влетают в объем через левый торец:

$$dN_1^+ = \varphi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \cdot dS dE d\Omega. \quad (3.1)$$

Убыль №1 – частицы, которые каждую секунду вылетают из объема через правый торец:

$$dN_1^- = \left[\varphi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) + \frac{\partial \varphi(\vec{r}, E, \vec{\Omega})}{\partial l} \cdot dl \right] \cdot dS dE d\Omega. \quad (3.2)$$

В квадратных скобках записано выражение для дифференциальной плотности потока в точке \vec{r} .

Убыль №2 – частицы, которые каждую секунду сталкиваются с веществом внутри объема. Они поглощаются или рассеиваются, но во всех случаях после столкновения уже не имеют энергии E или направления движения $\vec{\Omega}$, поэтому все такие случаи – это убыль.

$$dN_2^- = \varphi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) dS dE d\Omega dl \Sigma(\vec{r}, E) = \varphi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) dE d\Omega dV \Sigma(\vec{r}, E). \quad (3.3)$$

Множитель $dl \Sigma(\vec{r}, E)$ равен вероятности частице испытать взаимодействие на длине dl .

Прибыль №2 – это частицы, которые влетели в объем с другими направлениями $\vec{\Omega}'$ и энергиями E' , испытали там

рассеяние и в результате рассеяния получили энергию E и направление движения $\vec{\Omega}$.

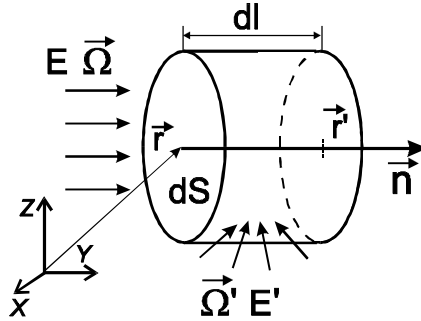


Рис.3.1. Схема баланса частиц

$$dN_2^+ = dE \cdot d\Omega \cdot dV \cdot \int_{E'} \int_{4\pi} \varphi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') \cdot \Sigma_s(E', \vec{\Omega}' \rightarrow E, \vec{\Omega} | \vec{r}) \cdot dE' \cdot d\Omega'. \quad (3.4)$$

Прибыль №3 – это частицы, которые родились в источнике внутри объема:

$$dN_3^+ = Q(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \cdot dV \cdot dE \cdot d\Omega. \quad (3.5)$$

Таким образом, закон сохранения числа частиц (баланс):

$$dN_1^- + dN_2^- = dN_1^+ + dN_2^+ + dN_3^+. \quad (3.6)$$

Перенесем член dN_1^+ в левую часть и отдельно рассмотрим разницу $dN_1^- - dN_1^+$:

$$dN_1^- - dN_1^+ = \frac{\partial \varphi(\vec{r}, E, \vec{\Omega})}{\partial l} \cdot dV \cdot dE \cdot d\Omega. \quad (3.7)$$

Входящая в нее производная вдоль l есть, очевидно, проекция градиента функции $\varphi(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$ на направление $\vec{\Omega}$

$$\frac{\partial \varphi(\vec{r}, E, \vec{\Omega})}{\partial l} = \vec{\Omega} \cdot \nabla \varphi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}). \quad (3.8)$$

Подставим в уравнение (3.6) выражения (3.1) – (3.5) с учетом (3.8) и разделим обе его части на $dV dE d\Omega$:

$$\begin{aligned} & \bar{\Omega} \nabla \varphi(\vec{r}, E, \bar{\Omega}) + \Sigma(\vec{r}, E) \cdot \varphi(\vec{r}, E, \bar{\Omega}) = \\ & = \int_0^\infty \int_{4\pi} \varphi(\vec{r}, E', \bar{\Omega}') \cdot \Sigma_s(E', \bar{\Omega}' \rightarrow E, \bar{\Omega} | \vec{r}) dE' d\bar{\Omega}' + Q(\vec{r}, E, \bar{\Omega}). \end{aligned} \quad (3.9)$$

Уравнение (3.9) называется стационарным интегродифференциальным уравнением переноса излучения (кинетическим уравнением Больцмана, транспортным уравнением). Будем называть его *прямым*, отличая тем самым от *сопряженного*, которое рассмотрено в главе 5.

§3.2. Граничные условия уравнения переноса

3.2.1. Внутренние границы

Рассмотрим, как ведет себя плотность потока $\varphi(\vec{r}, E, \bar{\Omega})$ на внутренней границе системы, где значения сечений могут резко меняться. Для этого на границе Γ выделим малую произвольную площадку ΔS с центром в точке \vec{r} и около нее построим цилиндр с образующей боковой поверхности, параллельной вектору направления движения частиц $\bar{\Omega}$ (рис.3.2). Малость площадки означает, что всюду на ней плотность потока можно считать одинаковой, а кривизной поверхности Γ можно пренебречь.

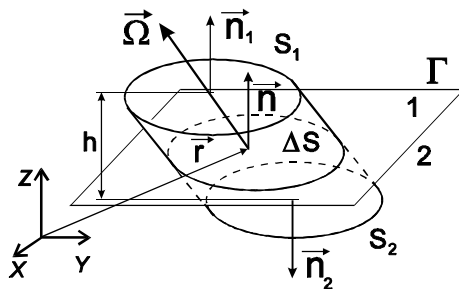


Рис. 3.2. К условиям на внутренней границе

Проинтегрируем уравнение (3.9) по объему этого цилиндра $\Delta V = \Delta S \cdot h$. Интегрирование градиентного члена выглядит так:

$$I_1 = \int_{\Delta V} \bar{\Omega} \nabla \varphi dv = \int_{\Delta V} \nabla (\bar{\Omega} \varphi) dv = \int_{\Delta V} \text{div}(\bar{\Omega} \varphi) dv.$$

Последний интеграл по теореме Гаусса–Остроградского может быть преобразован в интеграл по полной поверхности этого объема:

$$\int_{\Delta V} \operatorname{div}(\vec{\Omega}\varphi)dv = \int_S (\vec{n}\vec{\Omega})\varphi ds = \vec{\Omega} \cdot \int_S \vec{n}(\vec{r}_s)\varphi(\vec{r}_s) ds. \quad (3.10)$$

Здесь вектор $\vec{\Omega}$ вынесен из-под знака интеграла, поскольку он во всех точках одинаковый, а вот вектор внешней нормали \vec{n} к поверхности, как и плотность потока φ , зависит от точки интегрирования, что специально подчеркнуто.

Полная поверхность объема $S = S_0 + S_1 + S_2$, где S_0 – боковая поверхность цилиндра, S_1 – поверхность верхней крышки, а S_2 – поверхность нижней крышки. На боковой поверхности вектор нормали всегда перпендикулярен вектору $\vec{\Omega}$ (так строили цилиндр), поэтому интеграл (3.10) по S_0 равен 0. На верхней крышке вектор нормали постоянен $\vec{n}_1(\vec{r}_s) = \vec{n}$. На нижней он тоже постоянен, но противоположен по направлению: $\vec{n}_2(\vec{r}_s) = -\vec{n}$. Это дает возможность переписать интеграл (3.10) как разность:

$$I_1 = \vec{\Omega} \cdot \int_S \vec{n}(\vec{r}_s)\varphi(\vec{r}_s) ds = (\vec{\Omega} \cdot \vec{n}) \cdot \left[\int_{S_1} \varphi(\vec{r}_s) ds - \int_{S_2} \varphi(\vec{r}_s) ds \right]. \quad (3.11)$$

Устремим высоту цилиндра h к нулю и рассмотрим предел $\lim_{h \rightarrow 0} I_1$. Очевидно, что при этом крышки S_1 и S_2 стремятся к ΔS . С учетом этого и обозначений $\tilde{h} = h/\Omega_z$ получим

$$\lim_{h \rightarrow 0} I_1 = \lim_{h \rightarrow 0} (\vec{\Omega} \cdot \vec{n}) \cdot \int_{\Delta S} [\varphi(\vec{r}_s + \vec{\Omega} \cdot \tilde{h} / 2) - \varphi(\vec{r}_s - \vec{\Omega} \cdot \tilde{h} / 2)] ds.$$

Проделаем такую же операцию (интегрирование по объему и устремление к нулю высоты цилиндра h) и для всех остальных членов уравнения (3.9). Члены, содержащие сечения, в силу конечности всех подынтегральных функций, обладают нулевым пределом. Предел интеграла от функции источника:

$$\lim_{h \rightarrow 0} I_Q = \lim_{h \rightarrow 0} \int_{\Delta S - h/2}^{h/2} \int Q(\vec{r}) ds dz,$$

где переменная z соответствует нормали к поверхности раздела.

Таким образом, после интегрирования и предельного перехода уравнение переноса (3.9) будет выглядеть следующим образом:

$$\int_{\Delta S} \lim_{h \rightarrow 0} \int_{-h/2}^{h/2} Q(\vec{r}) ds dz = \int_{\Delta S} (\vec{\Omega} \cdot \vec{n}) \cdot \lim_{h \rightarrow 0} [\varphi(\vec{r}_s + \vec{\Omega} \cdot \vec{h} / 2) - \varphi(\vec{r}_s - \vec{\Omega} \cdot \vec{h} / 2)] ds .$$

В силу произвольности выбора области интегрирования ΔS из равенства интегралов делаем вывод о равенстве подынтегральных выражений.

$$\lim_{h \rightarrow 0} [\varphi(\vec{r}_s + \vec{\Omega} \cdot \vec{h} / 2) - \varphi(\vec{r}_s - \vec{\Omega} \cdot \vec{h} / 2)] = \frac{1}{(\vec{\Omega} \cdot \vec{n})} \cdot \lim_{h \rightarrow 0} \int_{-h/2}^{h/2} Q(z) dz . \quad (3.12)$$

Рассмотрим два случая, относящиеся к характеру функции источника $Q(z)$:

1. Функция источника – регулярная. Регулярной будем называть функцию, которая не содержит δ -функции по переменной z . Для нее, очевидно, предел интеграла в правой части уравнения (3.12) равен 0. Это означает, что для функции источника, регулярной на границе, плотность потока является непрерывной, как бы сильно ни отличались свойства среды по обе стороны от границы.

2. Функция источника – сингулярная, т.е. она содержит δ -функцию по переменной z .

$$\begin{aligned} & \lim_{h \rightarrow 0} [\varphi(\vec{r}_s + \vec{\Omega} \cdot \vec{h} / 2) - \varphi(\vec{r}_s - \vec{\Omega} \cdot \vec{h} / 2)] = \\ & = \frac{1}{(\vec{\Omega} \cdot \vec{n})} \cdot \lim_{h \rightarrow 0} \int_{-h/2}^{h/2} \sigma_q(\vec{r}_s) \cdot \delta(z) dz = \frac{\sigma_q(\vec{r}_s)}{(\vec{\Omega} \cdot \vec{n})} . \end{aligned}$$

В этой записи $\sigma_q(\vec{r}_s)$ обозначает поверхностную плотность источников. Точная ее запись $\sigma_q(\vec{r}_s, E, \vec{\Omega})$, а смысл – количество частиц, испускаемых каждую секунду в единичный телесный угол вокруг направления $\vec{\Omega}$ в единичный энергетический интервал энергий вокруг значения E с единицы площади. Ее размерность

$$\left[\frac{1}{\text{см}^2 \cdot \text{ср} \cdot \text{МэВ}} \right] .$$

Таким образом, если функция источника имеет на внутренней границе особенность типа δ -функции, плотность потока испытывает разрыв

$$\Delta\varphi(\vec{r}_s, E, \vec{\Omega}) = \frac{\sigma(\vec{r}_s, E, \vec{\Omega})}{(\vec{\Omega} \cdot \vec{n})}. \quad (3.13)$$

3.2.2. Внешние границы

Будем везде далее считать, что внешняя граница Γ невогнутая, т.е. луч, выходящий из любой ее точки и имеющий положительную проекцию на ее внешнюю нормаль, нигде более границу не пересекает. Данное условие никак не ограничивает общность наших рассуждений. Если граница области все-таки вогнутая, мы всегда можем дополнить ее до выпуклой, включив соответствующую подобласть в геометрию задачи.

Условия на внешних границах могут иметь несколько видов:

1. Свободная граница: $\varphi(\vec{r}, E, \vec{\Omega})\Big|_{\vec{r} \in \Gamma, \vec{n} \cdot \vec{\Omega} < 0} = 0$.
2. Задан внешний поток: $\varphi(\vec{r}, E, \vec{\Omega})\Big|_{\vec{r} \in \Gamma, \vec{n} \cdot \vec{\Omega} < 0} = f(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$.
3. Задан поверхностный источник, не включенный в функцию источника уравнения переноса:

$$\varphi(\vec{r}, E, \vec{\Omega})\Big|_{\vec{r} \in \Gamma, \vec{n} \cdot \vec{\Omega} < 0} = \frac{\sigma_q(\vec{r}, E, \vec{\Omega})}{|\vec{n} \cdot \vec{\Omega}|}.$$

4. Задано отражение (альбеда) излучения от границы в виде:

$$\begin{aligned} & \varphi(\vec{r}, E, \vec{\Omega})\Big|_{\vec{r} \in \Gamma, \vec{n} \cdot \vec{\Omega} < 0} = \\ & = \int_0^\infty \int_{\vec{n} \cdot \vec{\Omega}' > 0} a(E', \vec{\Omega}' \rightarrow E, \vec{\Omega} | \vec{r}) \varphi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') \frac{\vec{n}(\vec{r}) \cdot \vec{\Omega}'}{\vec{n}(\vec{r}) \cdot \vec{\Omega}} dE' d\vec{\Omega}'. \end{aligned}$$

Альбеда излучения $a(E', \vec{\Omega}' \rightarrow E, \vec{\Omega} | \vec{r})$ численно равно вероятности для частицы с энергией E' , падающей на отражатель в точке \vec{r} из направления $\vec{\Omega}'$, отразиться от него в единичный телесный угол вокруг $\vec{\Omega}$, имея энергию в единичном энергетическом интервале вокруг E . При этом считается, что отражение происходит в той же точке \vec{r} . Последнее является приближением, справедливым только если пробег излучения в веществе отражателя пренебрежимо мал по сравнению с характерными размерами задачи.

§3.3. Уравнение переноса в плоской геометрии

Пусть все параметры задачи зависят только от одной переменной z , так что:

$$\Sigma(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \Sigma(z, E, \vec{\Omega}), \quad \Sigma_s(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \Sigma_s(z, E, \vec{\Omega}),$$

$$Q(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = Q(z, E, \vec{\Omega}).$$

Из этого следует, что и плотность потока может зависеть только от z : $\varphi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \varphi(z, E, \vec{\Omega})$.

Зададим направление движения $\vec{\Omega} = (\mu, \psi)$ углами относительно оси \vec{Z} и плоскости ZOX (рис.3.3).

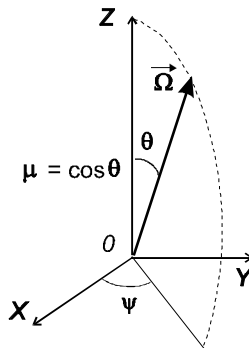


Рис. 3.3. Задание углов для плоской задачи

Введем обозначения:

$$\varphi(\vec{r}, E, \mu) = \frac{1}{2\pi} \cdot \int_0^{2\pi} \varphi(z, E, \mu, \psi) d\psi,$$

$$Q(\vec{r}, E, \mu) = \frac{1}{2\pi} \cdot \int_0^{2\pi} Q(z, E, \mu, \psi) d\psi,$$

$$\Sigma_s(E, \mu \rightarrow E', \mu' | \vec{r}) = \int_0^{2\pi} \Sigma_s(E, \mu, \psi \rightarrow E', \mu', \psi' | \vec{r}) d\psi'.$$

Несмотря на то, что в последнем равенстве интегрирование было выполнено только по ψ' , сечение $\Sigma_s(E', \mu' \rightarrow E, \mu | \vec{r})$ не зависит в

том числе и от ψ , поскольку дифференциальное сечение, стоящее под интегралом, фактически зависит только от разности углов $\psi - \psi'$.

После усреднения обеих частей уравнения (3.9) по ψ получим:

$$\mu \cdot \frac{\partial \varphi(z, E, \mu)}{\partial z} + \Sigma(z, E) = \int_0^1 \int_{-1}^1 \Sigma_s(E', \mu' \rightarrow E, \mu | z) \cdot \varphi(z, E, \mu) dE' d\mu' + Q(z, E, \mu). \quad (3.14)$$

От градиентного члена осталась только производная по z , так как производные по другим координатам равны 0. Полученное уравнение есть уравнение переноса для плоской задачи.

§3.4. Операторная форма уравнения переноса

Оператором называется совокупность некоторых действий над функцией. Оператор ставит одну функцию в соответствие другой.

Оператор \hat{A} называется *линейным*, если для любых функций f и g (из области определения оператора) и константы c справедливо следующее:

$$\hat{A}(f + g) = \hat{A}f + \hat{A}g \text{ и } \hat{A}(c \times f) = c \times \hat{A}f. \quad (3.15)$$

Например, оператор дифференцирования – линейный, а оператор возведения в степень (не равную 1) – нет.

Определим *оператор Больцмана* следующим образом:

$$\hat{L} \equiv \bar{\Omega} \nabla \dots + \Sigma(\vec{r}, E) \times \dots - \int_0^{\infty} \int_{4\pi} \Sigma_s(E', \bar{\Omega}' \rightarrow E, \bar{\Omega} | \vec{r}) \times \dots dE' d\bar{\Omega}', \quad (3.16)$$

где вместо знака «...» надо подставить функцию, на которую он должен действовать.

Оператор \hat{L} – линейный, поскольку все операции, входящие в него (дифференцирование, умножение на функцию, интегрирование), линейные.

В дальнейшем для компактности будем использовать фазовую векторную переменную $\vec{x} \equiv (\vec{r}, E, \bar{\Omega})$ вместо совокупности пространственной, энергетической и угловой переменных. Тогда в

такой компактной *операторной* форме уравнение переноса имеет вид:

$$\hat{L}\varphi(\vec{x}) = Q(\vec{x}). \quad (3.17)$$

Пусть функцию источника $Q(\vec{x})$ можно представить как сумму более простых источников:

$$Q(\vec{x}) = \sum_i Q_i(\vec{x}), \quad (3.18)$$

таких, что для каждого i -го источника удастся решить уравнение переноса

$$\hat{L}\varphi_i(\vec{x}) = Q_i(\vec{x}).$$

Тогда сумма (3.18) будет выглядеть так:

$$\hat{L}\varphi(\vec{x}) = Q(\vec{x}) = \sum_i Q_i(\vec{x}) = \sum_i \hat{L}\varphi_i(\vec{x}) = \hat{L}\sum_i \varphi_i(\vec{x}). \quad (3.19)$$

Последнее равенство в выражении (3.19) записано на основании свойства линейности оператора Больцмана.

Это означает, что если разложить источник на простые составляющие, для которых решения уравнения переноса могут быть найдены, то решение уравнения для полного источника есть сумма (суперпозиция) простых решений:

$$\varphi(\vec{x}) = \sum_i \varphi_i(\vec{x}). \quad (3.20)$$

В дальнейшем этот принцип суперпозиции источников будет неоднократно использован.

§3.5. Функция Грина

Функция Грина есть решение уравнения переноса для точечного мононаправленного моноэнергетического источника единичной мощности:

$$G(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, \vec{r}_0, E_0, \vec{\Omega}_0) = \varphi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \Big|_{Q(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \delta(\vec{r} - \vec{r}_0) \delta(E - E_0) \delta(\vec{\Omega} - \vec{\Omega}_0)}. \quad (3.21)$$

Функция Грина, конечно, зависит от пространственного распределения функций сечения (интегрального сечения взаимодействия и дифференциального сечения рассеяния), а также от граничных условий. Поэтому более правильно говорить о функции Грина данной конкретной задачи.

В операторной записи определение функции Грина выглядит компактно:

$$\hat{L}G(\vec{x}, \vec{x}_0) = \delta(\vec{x} - \vec{x}_0). \quad (3.22)$$

Итак, если в фазовой точке $\vec{x}_0 = (\vec{r}_0, E_0, \vec{\Omega}_0)$ находится точечный мононаправленный моноэнергетический источник единичной мощности, то решение уравнения переноса в любой точке $\vec{x} \equiv (\vec{r}, E, \vec{\Omega})$ есть функция Грина $\varphi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = G(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, \vec{r}_0, E_0, \vec{\Omega}_0)$. В то же время из свойства линейности оператора Больцмана следует, что при увеличении мощности источника в несколько раз, во столько же раз возрастет и величина решения φ . Пусть, например, в точке \vec{x}_0 находится элементарный источник мощностью $Q(\vec{r}_0, E_0, \vec{\Omega}_0) d\vec{r}_0 dE_0 d\Omega_0$. Создаваемая им плотность потока в произвольной точке \vec{x} будет равна

$$d\varphi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = G(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, \vec{r}_0, E_0, \vec{\Omega}_0) \cdot Q(\vec{r}_0, E_0, \vec{\Omega}_0) d\vec{r}_0 dE_0 d\Omega_0.$$

Теперь можно выразить решение уравнения переноса для произвольного источника через функцию Грина данной задачи:

$$\varphi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \int_{\infty}^{\infty} \int_{0}^{\infty} \int_{4\pi} G(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, \vec{r}_0, E_0, \vec{\Omega}_0) Q(\vec{r}_0, E_0, \vec{\Omega}_0) d\vec{r}_0 dE_0 d\Omega_0. \quad (3.23)$$

Первый интеграл в формуле (3.23) берется по всему трехмерному пространству, что символически показано значком ∞ , а последний – по всевозможным направлениям движения.

Запишем последнее уравнение в операторной форме, введя оператор Грина

$$\hat{G} = \int_{\infty}^{\infty} \int_{0}^{\infty} \int_{4\pi} G(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, \vec{r}_0, E_0, \vec{\Omega}_0) \times \dots d\vec{r}_0 dE_0 d\Omega_0,$$

в котором под интегралом в качестве ядра присутствует функция Грина. С его помощью решение уравнения переноса находится так:

$$\varphi(\vec{x}) = \hat{G} Q(\vec{x}). \quad (3.24)$$

Отметим, что оператор Грина является обратным по отношению к оператору Больцмана: $\hat{G} = \hat{L}^{-1}$. Действительно,

$Q = \hat{L}\varphi = \hat{L}\hat{G}Q$. Следовательно, $\hat{L}\hat{G} = \hat{I}$ (тождественный оператор), а значит, операторы Больцмана и Грина являются обратными друг другу.

Для односкоростной задачи, где нет зависимости сечений от энергии, для функции Грина имеет место следующее равенство:

$$G(\vec{r}, \vec{\Omega}, \vec{r}_0, \vec{\Omega}_0) = G(\vec{r}_0, -\vec{\Omega}_0, \vec{r}, -\vec{\Omega}), \quad (3.25)$$

которое называют теоремой взаимности для односкоростного уравнения.

Фактически оно означает следующее. Пусть точечный мононаправленный источник испускал из точки \vec{r}_0 частицы в направлении $\vec{\Omega}_0$, а точечный детектор в точке \vec{r} регистрировал плотность потока частиц, летящих из направления $\vec{\Omega}$. Поменяем местами источник и детектор, т.е. детектор поместим в точку источника, а источник – в прежнюю точку детектирования. Пусть теперь частицы источника летят в направлении, противоположном прежнему направлению детектирования, т.е. $-\vec{\Omega}$. Тогда из направления, противоположного прежнему направлению излучения (т.е. $-\vec{\Omega}_0$), детектор будет регистрировать прежнюю плотность потока.

Контрольные вопросы

- Назовите основные типы граничных условий.
- В каких случаях решение уравнения переноса терпит разрыв на внутренней границе?
- Что такое плоская задача?
- Какой закон сохранения отражает прямое интегро-дифференциальное уравнение переноса?
- Каково основное свойство оператора Больцмана?
- Напишите уравнение переноса в операторной форме.
- Что такое функция Грина и какова ее размерность?
- Какая связь между операторами Больцмана и Грина?

Глава 4. Интегральная форма уравнения переноса излучения

...страшные рассказы
Зимой в темноте ночей
Пленяли большие сердце ей...
А.С. Пушкин

§4.1. Оптическое расстояние

В главе 2 было рассмотрено макроскопическое сечение взаимодействия Σ как вероятность частице провзаимодействовать на единице длины траектории. Можно показать, что средний свободный пробег в веществе частиц с энергией E между столкновениями есть величина, обратная макроскопическому сечению:

$$\bar{x}(E) = 1/\Sigma(E).$$

Представим себе однородную среду и частицу с энергией E , летящую от точки \vec{r}' к точке \vec{r} . Для того, чтобы оценить, сколько столкновений в среднем испытает эта частица на своем пути, достаточно *линейное* расстояние между точками $l = |\vec{r}' - \vec{r}|$ разделить на среднюю длину пробега:

$$n_l = l/\bar{x}(E) = |\vec{r}' - \vec{r}| \cdot \Sigma(E).$$

Таким образом, произведение $|\vec{r}' - \vec{r}| \cdot \Sigma(E)$ есть на самом деле расстояние между точками \vec{r}' и \vec{r} , измеренное в длинах свободного пробега $1/\Sigma(E)$. Такое расстояние от точки \vec{r}' до точки \vec{r} будем называть *оптическим расстоянием* для частиц с энергией E .

В общем случае среды с произвольно изменяющимся сечением $\Sigma(\vec{r}, E)$ оптическое расстояние от точки \vec{r}' до точки \vec{r} для частиц с энергией E будет вычисляться как интеграл:

$$\tau(\vec{r}' \rightarrow \vec{r}, E) = \int_0^{|\vec{r}' - \vec{r}|} \Sigma(\vec{r}' + \xi \cdot \frac{\vec{r} - \vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|}) d\xi. \quad (4.1)$$

Оптическое расстояние не имеет размерности, единицей его измерения служит «д.с.п.» – длина свободного пробега.

Пусть на вещество вдоль оси X падает пучок частиц с энергией E в количестве N_0 . Количество частиц, которые до глубины x не испытали ни одного взаимодействия, обозначим $N(x)$. Из определения макроскопического сечения следует, что на элементарном отрезке dx относительное уменьшение числа частиц, не вступивших во взаимодействие, есть

$$\frac{dN}{N(x)} = -\Sigma(x, E) dx.$$

Интегрируя это уравнение, нетрудно получить:

$$N(x) = N_0 \exp\left(-\int_0^x \Sigma(\xi, E) d\xi\right).$$

Видно, что в аргументе экспоненты (с точностью до знака) стоит оптическое расстояние от точки падения до глубины x . Таким образом, последнее равенство, переписанное в общем виде следующим образом

$$P(\vec{r}' \rightarrow \vec{r}, E) = \frac{N(\vec{r})}{N_0} = \exp(-\tau(\vec{r}' \rightarrow \vec{r}, E)), \quad (4.2)$$

показывает вероятность для частицы с энергией E преодолеть расстояние между точками \vec{r}' и \vec{r} без взаимодействия.

§4.2. Интегральная форма уравнения переноса

Запишем уравнение переноса в интегро-дифференциальной форме (3.9) для точки \vec{r}' , лежащей на направлении $-\vec{\Omega}$ относительно точки \vec{r}

$$\begin{aligned} & \vec{\Omega} \nabla \varphi(\vec{r}', E, \vec{\Omega}) + \Sigma(\vec{r}', E) \cdot \varphi(\vec{r}', E, \vec{\Omega}) = \\ & = \int_0^\infty \int_{4\pi} \varphi(\vec{r}', E', \vec{\Omega}') \cdot \Sigma_s(E', \vec{\Omega}' \rightarrow E, \vec{\Omega} | \vec{r}') dE' d\vec{\Omega}' + Q(\vec{r}', E, \vec{\Omega}). \end{aligned}$$

Выразим точку \vec{r}' через расстояние до точки \vec{r} : $\vec{r}' = \vec{r} - \xi \cdot \vec{\Omega}$, а всю правую часть уравнения (4.3) обозначим как некоторую новую функцию источника $\tilde{Q}(\vec{r}', E, \vec{\Omega})$. Величина ξ_0 соответствует пересечению границы области переноса (рис.4.1)

Обратим внимание, что производная плотности потока по ξ :

$$\frac{d\varphi}{d\xi} = \frac{\partial\varphi}{\partial x'} \frac{dx'}{d\xi} + \frac{\partial\varphi}{\partial y'} \frac{dy'}{d\xi} + \frac{\partial\varphi}{\partial z'} \frac{dz'}{d\xi} = -\Omega_x \frac{\partial\varphi}{\partial x'} - \Omega_y \frac{\partial\varphi}{\partial y'} - \Omega_z \frac{\partial\varphi}{\partial z'} = -\bar{\Omega} \nabla \varphi.$$

Тогда, опуская для краткости все переменные, кроме ξ , уравнение (4.3) можно переписать как обыкновенное дифференциальное уравнение:

$$-\varphi'_\xi(\xi) + \Sigma(\xi) \cdot \varphi(\xi) = \tilde{Q}(\xi). \quad (4.4)$$

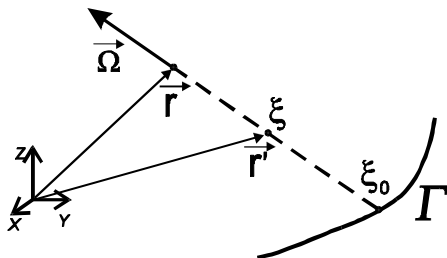


Рис.4.1. Схема точек к выводу интегральной формы уравнения переноса

Если бы уравнение (4.4) было однородным (без правой части), то его решение имело бы вид:

$$\varphi(\xi) = \tilde{\varphi} \cdot \exp\left(\int_0^\xi \Sigma(\xi'') d\xi''\right). \quad (4.5)$$

Решение неоднородного уравнения (4.4) будем искать методом вариации постоянной $\tilde{\varphi}$. Подстановкой в него решения (4.5) для функции $\tilde{\varphi}(\xi)$ получим:

$$-\tilde{\varphi}'_\xi(\xi) \cdot \exp\left(\int_0^\xi \Sigma(\xi'') d\xi''\right) = \tilde{Q}(\xi).$$

Проинтегрируем полученное уравнение от ξ до ξ_0 :

$$\tilde{\varphi}(\xi) = \tilde{\varphi}(\xi_0) + \int_{\xi_0}^{\xi} \tilde{Q}(\xi') \exp\left(-\int_0^{\xi'} \Sigma(\xi'') d\xi''\right) d\xi'.$$

Интегрирование означает, что мы собираем вклады в функцию $\tilde{\varphi}(\xi)$ от всех точек правее ξ вплоть до самой границы, т.е. до координаты ξ_0 (см. рис.4.1).

Значение функции $\tilde{\varphi}(\xi_0)$ найдем с помощью граничных условий, считая, что на границе задан внешний поток частиц f : $\varphi(\xi_0) = f$. Из них получим

$$\tilde{\varphi}(\xi_0) = f \cdot \exp\left(-\int_0^{\xi_0} \Sigma(\xi'') d\xi''\right). \quad (4.6)$$

Теперь мы готовы вернуться к нахождению собственно плотности потока, которая, напомним, связана с функцией $\tilde{\varphi}(\xi)$ уравнением (4.5). Подставим в него все, что нам удалось узнать про $\tilde{\varphi}(\xi)$:

$$\varphi(\xi) = f \cdot \exp\left(-\int_{\xi}^{\xi_0} \Sigma(\xi'') d\xi''\right) + \int_{\xi}^{\xi_0} \tilde{Q}(\xi') \exp\left(-\int_{\xi}^{\xi'} \Sigma(\xi'') d\xi''\right) d\xi'. \quad (4.7)$$

Таким образом, плотность потока состоит из двух частей. Первая – это внешний поток, а вторая – сумма (точнее, интеграл) всех источников, откуда в точку ξ могут попасть частицы. Экспоненциальный множитель при внешнем потоке имеет прозрачный физический смысл. В его аргументе (с точностью до знака) стоит оптическое расстояние между границей и точкой ξ . Сам же он есть вероятность того, что частица, влетевшая в среду извне, без взаимодействия достигнет точки ξ . Точно так же для частиц, рожденных на интервале $d\xi'$ функцией источника $\tilde{Q}(\xi')$, экспонента содержит оптическое расстояние $\tau(\vec{r} - \xi' \vec{\Omega} \rightarrow \vec{r} - \xi \vec{\Omega}, E)$ между точками ξ' и ξ . Сама же она есть вероятность для таких частиц без взаимодействия пролететь это расстояние.

Если теперь уравнение (4.7) записать при $\xi = 0$, то это будет означать переход от рассматриваемой точки \vec{r}' к точке \vec{r} . Итак, для плотности потока в точке \vec{r} справедливо:

$$\begin{aligned} \varphi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) &= f(\vec{r} - \xi_0 \cdot \vec{\Omega}, E, \vec{\Omega}) \cdot e^{-\tau(\vec{r} - \xi_0 \cdot \vec{\Omega} \rightarrow \vec{r}, E)} + \\ &+ \int_0^{\xi_0} \tilde{Q}(\vec{r} - \xi \cdot \vec{\Omega}, E, \vec{\Omega}) \cdot e^{-\tau(\vec{r} - \xi \cdot \vec{\Omega} \rightarrow \vec{r}, E)} d\xi. \end{aligned} \quad (4.8)$$

В уравнении (4.2) функцией \tilde{Q} была обозначена сумма настоящей функции источника и интеграла рассеяния. Подставим эту сумму в (4.8) и выделим в полученном уравнении плотность потока нерассеянного излучения в виде:

$$\begin{aligned} \varphi_0(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) &= f(\vec{r} - \xi_0 \cdot \vec{\Omega}, E, \vec{\Omega}) \cdot e^{-\tau(\vec{r} - \xi_0 \cdot \vec{\Omega} \rightarrow \vec{r}, E)} + \\ &+ \int_0^{\xi_0} Q(\vec{r} - \xi \cdot \vec{\Omega}, E, \vec{\Omega}) \cdot e^{-\tau(\vec{r} - \xi \cdot \vec{\Omega} \rightarrow \vec{r}, E)} d\xi. \end{aligned} \quad (4.9)$$

С учетом этого для полной плотности потока частиц получим:

$$\begin{aligned} \varphi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) &= \varphi_0(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) + \\ &+ \int_0^{\xi_0} e^{-\tau(\vec{r} - \xi \cdot \vec{\Omega} \rightarrow \vec{r}, E)} \int_0^{\infty} \int_{4\pi} \varphi(\vec{r} - \xi \vec{\Omega}, E', \vec{\Omega}') \Sigma_s(E', \vec{\Omega}' \rightarrow E, \vec{\Omega} | \vec{r} - \xi \vec{\Omega}) dE' d\Omega' d\xi. \end{aligned} \quad (4.10)$$

Уравнение (4.10) вместе с (4.9) представляет собой интегральное стационарное уравнение переноса. Осталось записать его в виде объемного интеграла по пространству, а не одномерного по лучу $\vec{r} - \xi \cdot \vec{\Omega}$. Сделаем это следующим образом.

Рассмотрим произвольную точку \vec{r}' . Она может быть выражена через точку \vec{r} с помощью расстояния между ними $\xi = |\vec{r}' - \vec{r}|$ и единичного вектора направления $\vec{\omega} = (\vec{r}' - \vec{r}) / |\vec{r}' - \vec{r}|$: $\vec{r}' = \vec{r} - \xi \cdot \vec{\omega}$. Элемент объема вокруг точки \vec{r}' будет равен в этих обозначениях $d\vec{r}' = \xi^2 d\xi d\omega$, где $d\omega$ – элементарный телесный угол вокруг направления $\vec{\omega}$. Тогда интеграл по лучу $-\vec{\Omega}$ от произвольной функции g может выглядеть как интеграл по объему:

$$\int_0^{\xi_0} g(\vec{r} - \xi \cdot \vec{\Omega}) d\xi = \int_V g(\vec{r}') \frac{\delta(\vec{\Omega} + \vec{\omega})}{|\vec{r} - \vec{r}'|^2} d\vec{r}'.$$

Здесь пришлось добавить в числитель дельта-функцию, чтобы скомпенсировать стоящее в правой части интегрирование по направлениям $\vec{\omega}$.

В результате для плотности потока нерассеянного излучения получим:

$$\begin{aligned} \varphi_0(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = & \int_{\Gamma} \frac{f(\vec{r}'_s, E, \vec{\Omega})}{|\vec{r} - \vec{r}'_s|^2} \cdot \delta(\vec{\Omega} - \frac{\vec{r} - \vec{r}'_s}{|\vec{r} - \vec{r}'_s|}) e^{-\tau(\vec{r}'_s \rightarrow \vec{r}, E)} d\vec{r}'_s + \\ & + \int_V \frac{Q(\vec{r}', E, \vec{\Omega})}{|\vec{r} - \vec{r}'|^2} \cdot \delta(\vec{\Omega} - \frac{\vec{r} - \vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|}) e^{-\tau(\vec{r}' \rightarrow \vec{r}, E)} d\vec{r}'. \end{aligned} \quad (4.11)$$

В приведенной записи первый интеграл поверхностный и берется по границе области переноса, а второй – по объему области. Полную же плотность потока в виде объемного интеграла по пространству запишем так:

$$\begin{aligned} \varphi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = & \varphi_0(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) + \\ & + \iiint_V \int_{E, 4\pi} \frac{\varphi(\vec{r}', E', \vec{\Omega}') \Sigma_s(E', \vec{\Omega}' \rightarrow E, \vec{\Omega} | \vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|^2} \delta(\vec{\Omega} - \frac{\vec{r} - \vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|}) e^{-\tau(\vec{r}' \rightarrow \vec{r}, E)} dE' d\Omega' d\vec{r}'. \end{aligned} \quad (4.12)$$

Полученный результат представляет собой интегральную форму уравнения переноса для плотности потока частиц.

§4.3. Уравнение переноса для плотности столкновений

Назовем величину $\psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \Sigma(\vec{r}, E) \cdot \varphi(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$ плотностью *входящих* столкновений. Она показывает количество столкновений, происходящих в единицу времени в единице объема вокруг точки \vec{r} , в которые частицы *входят*, двигаясь внутри единичного телесного угла вокруг направления $\vec{\Omega}$ и имея энергию внутри единичного интервала энергий вокруг значения E . Размерность плотности входящих столкновений: $[\text{см}^{-3} \cdot \text{ср}^{-1} \cdot \text{МэВ}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}]$. В справедливости такого утверждения нетрудно убедиться, воспользовавшись связью (1.1) между плотностью потока частиц и их плотностью.

Назовем величину

$$\chi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \int_0^\infty \int_{4\pi} \Sigma_s(E', \vec{\Omega}' \rightarrow E, \vec{\Omega} | \vec{r}) \cdot \varphi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') dE' d\vec{\Omega}' \quad (4.13)$$

плотностью *выходящих* столкновений. Она показывает количество столкновений, происходящих в единицу времени в единице объема вокруг точки \vec{r} , из которых частицы *выходят*, двигаясь внутри единичного телесного угла вокруг направления $\vec{\Omega}$ и имея энергию внутри единичного интервала энергий вокруг значения E . Размерность плотности выходящих столкновений: $[\text{см}^{-3} \cdot \text{ср}^{-1} \cdot \text{МэВ}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}]$.

Умножим уравнение (4.12) на полное сечение $\Sigma(\vec{r}, E)$:

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) &= \psi_1(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) + \int_V \frac{\Sigma(\vec{r}, E)}{|\vec{r} - \vec{r}'|^2} \cdot e^{-\tau(\vec{r}' \rightarrow \vec{r}, E)} \times \\ &\times \delta(\vec{\Omega} - \frac{\vec{r} - \vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|}) \int_0^\infty \int_{4\pi} \frac{\Sigma_s(E', \vec{\Omega}' \rightarrow E, \vec{\Omega} | \vec{r})}{\Sigma(\vec{r}, E')} \psi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') dE' d\vec{\Omega}' d\vec{r}'. \end{aligned} \quad (4.14)$$

В этом уравнении плотность первых входящих столкновений представляет собой

$$\begin{aligned} \psi_1(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) &= \int_V \frac{\Sigma(\vec{r}, E)}{|\vec{r} - \vec{r}'|^2} e^{-\tau(\vec{r}' \rightarrow \vec{r}, E)} \delta(\vec{\Omega} - \frac{\vec{r} - \vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|}) Q(\vec{r}', E, \vec{\Omega}) d\vec{r}' + \\ &+ \int_\Gamma \frac{\Sigma(\vec{r}, E)}{|\vec{r} - \vec{r}'_s|^2} e^{-\tau(\vec{r}'_s \rightarrow \vec{r}, E)} \cdot \delta(\vec{\Omega} - \frac{\vec{r} - \vec{r}'_s}{|\vec{r} - \vec{r}'_s|}) \cdot f(\vec{r}'_s, E, \vec{\Omega}) d\vec{r}'_s. \end{aligned} \quad (4.15)$$

Первый интеграл (по $d\vec{r}'$) в уравнении трехмерный и берется по всему объему области переноса V , а второй (по $d\vec{r}'_s$) – поверхностный двухмерный по границе области Γ . Дельта-функция в обоих интегралах – векторная двухмерная. Это значит, что для получения единицы ее надо интегрировать по телесному углу.

Для компактной записи уравнений типа (4.13) и (4.14) определим ядра *интегрального уравнения переноса*.

Транспортное ядро:

$$T(\vec{r}' \rightarrow \vec{r} | E, \vec{\Omega}) = \frac{\Sigma(\vec{r}, E)}{|\vec{r} - \vec{r}'|^2} \cdot e^{-\tau(\vec{r}' \rightarrow \vec{r}, E)} \cdot \delta(\vec{\Omega} - \frac{\vec{r} - \vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|}) \quad (4.16)$$

показывает плотность вероятности для частицы, вылетающей из точки \vec{r}' в направлении $\vec{\Omega}$ с энергией E , испытать очередное столкновение в точке \vec{r} . Его размерность $[\text{см}^{-3}]$.

Ядро столкновений:

$$C(E', \vec{\Omega}' \rightarrow E, \vec{\Omega} | \vec{r}) = \frac{\Sigma_s(E', \vec{\Omega}' \rightarrow E, \vec{\Omega} | \vec{r})}{\Sigma(\vec{r}, E')} \quad (4.17)$$

показывает плотность вероятности для частицы, входящей в столкновение в точке \vec{r} с энергией E' из направления $\vec{\Omega}'$, покинуть столкновение с энергией E и направлением движения $\vec{\Omega}$. Размерность ядра столкновений: $[\text{ср}^{-1} \cdot \text{МэВ}^{-1}]$.

Интеграл от ядра столкновений по всем выходящим состояниям:

$$\nu = \int_0^\infty \int_{4\pi} C(E', \vec{\Omega}' \rightarrow E, \vec{\Omega} | \vec{r}) \cdot dE d\vec{\Omega} = \frac{\Sigma_s(\vec{r}, E')}{\Sigma(\vec{r}, E')}, \quad (4.18)$$

очевидно, равен полной вероятности того, что частица выживет в результате столкновения. Если же, однако, при столкновении имеет место *размножение* частиц (например, при делении ядер под действием нейтронов), интеграл (4.18) больше 1. Тогда ν имеет смысл коэффициента размножения, т.е. среднего числа частиц, покидающих столкновение. Тогда и ядро столкновения правильней определить как среднее число частиц, покидающих столкновение, имея энергию в единичном интервале вокруг E и двигаясь внутри единичного телесного угла вокруг $\vec{\Omega}$.

Помимо T - и C -ядер введем *кинетическое ядро* в виде их произведения:

$$\begin{aligned} K(\vec{r}', E', \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{r}, E, \vec{\Omega}) &= T(\vec{r}' \rightarrow \vec{r} | E, \vec{\Omega}) \cdot C(E', \vec{\Omega}' \rightarrow E, \vec{\Omega} | \vec{r}) \\ K(\vec{r}', E', \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{r}, E, \vec{\Omega}) &= \frac{\Sigma_s(E', \vec{\Omega}' \rightarrow E, \vec{\Omega} | \vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|^2} \cdot \frac{\Sigma(\vec{r}, E)}{\Sigma(\vec{r}', E')} \times \\ &\times e^{-\tau(\vec{r}' \rightarrow \vec{r}, E)} \cdot \delta(\vec{\Omega} - \frac{\vec{r} - \vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|}), \end{aligned} \quad (4.19)$$

которое показывает плотность вероятности для частицы, входящей в столкновение в точке \vec{r}' с энергией E' и направлением движения $\vec{\Omega}'$, испытать очередное столкновение в точке \vec{r} , имея

энергию E и направление движения $\vec{\Omega}$. Размерность кинетического ядра столкновений: $[cm^{-3} \cdot cp^{-1} \cdot MэВ^{-1}]$.

Размерности величин Q и χ одинаковы, а физический смысл их близок. Будем трактовать функцию источника как часть плотности выходящих столкновений. Это означает, что частицы, вылетающие из источника, будем считать покидающими некоторое условное «нулевое» столкновение. Тогда уравнения (4.13) и (4.14) в терминах ядер можно записать следующим образом:

$$\chi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = Q(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) + \int_0^{\infty} \int_{4\pi} C(E', \vec{\Omega}' \rightarrow E, \vec{\Omega} | \vec{r}) \cdot \psi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') dE' d\Omega', \quad (4.20)$$

$$\psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \int_{-\infty}^{\infty} T(\vec{r}' \rightarrow \vec{r} | E, \vec{\Omega}) \cdot \chi(\vec{r}', E, \vec{\Omega}) d\vec{r}'. \quad (4.21)$$

При получении уравнения (4.20) пришлось умножить и разделить подынтегральное выражение в (4.13) на полное сечение взаимодействия.

Рис.4.2 схематически иллюстрирует взаимосвязь плотности входящих и выходящих столкновений, обусловленную уравнениями (4.20) и (4.21).

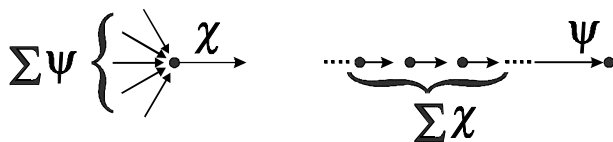


Рис.4.2. Взаимосвязь плотности входящих и выходящих столкновений

Совокупность входящих плотностей с разными направлениями влета и энергиями частиц образует плотность выходящих столкновений, что соответствует уравнению (4.20). С другой стороны, плотности выходящих столкновений во множестве разных точек пространства формируют плотность входящих столкновений в заданной точке, как и описывает уравнение (4.21).

§4.4. Разложение в ряд Неймана и метод последовательных столкновений

Детектор, находящийся в поле излучения, регистрирует частицы, которые попали в него сразу после вылета из источника или же в результате одно-, дву- или многократных столкновений с веществом. Таким образом, плотность потока в точке детектирования складывается из плотности потока, сформированного нерассеянным, однократно, двукратно, ..., многократно рассеянным излучением:

$$\varphi = \sum_{n=0}^{\infty} \varphi_n . \quad (4.22)$$

Компонент φ_n представляет собой плотность потока, образованную частицами, испытавшими n столкновений, а φ_0 есть плотность потока нерассеянного излучения. Ряд (4.22) называется разложением по кратностям столкновений или *разложением (рядом) Неймана* для плотности потока.

Аналогично для плотностей входящих и выходящих столкновений:

$$\psi = \sum_{n=1}^{\infty} \psi_n . \quad (4.23)$$

$$\chi = \sum_{n=0}^{\infty} \chi_n . \quad (4.24)$$

Компоненты ψ_n и χ_n – плотности n -х входящих и выходящих столкновений. Обратим внимание, что индекс суммирования для «входящей» плотности начинается с единицы, поскольку не бывает нулевого входящего столкновения. А вот выходящие столкновения имеют нулевой индекс: он соответствует вылету из источника.

Определим связь между компонентами неймановского разложения:

$$\psi_n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \varphi_{n-1}(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \cdot \Sigma(\vec{r}, E), \quad (4.25)$$

$$\chi_0(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \equiv Q(\vec{r}, E, \vec{\Omega}), \quad (4.26)$$

$$\psi_n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \int_{-\infty}^{\infty} T(\vec{r}' \rightarrow \vec{r} | E, \vec{\Omega}) \cdot \chi_{n-1}(\vec{r}', E, \vec{\Omega}) d\vec{r}', \quad (4.27)$$

$$\chi_n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \int_0^{\infty} \int_{4\pi} C(E', \vec{\Omega}' \rightarrow E, \vec{\Omega} | \vec{r}) \cdot \psi_n(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') dE' d\Omega'. \quad (4.28)$$

На данном разложении основан *метод последовательных столкновений*. Суть его в следующем.

Подставим в уравнение (4.27) функцию $\chi_0(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$. Она известна, поскольку представляет собой функцию источника. Интегрированием из (4.27) найдем $\psi_1(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$. Подставим результат в уравнение (4.28), из которого вычисляется $\chi_1(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$. Последовательно повторяя эту процедуру, можно найти компоненты любой кратности рассеяния ψ_n, χ_n .

$$\chi_0 \rightarrow \psi_1 \rightarrow \chi_1 \rightarrow \psi_2 \rightarrow \chi_2 \rightarrow \dots \rightarrow \psi_n \rightarrow \chi_n. \quad (4.29)$$

Если ряд Неймана сходится, что справедливо для поглощающих сред без размножения, компоненты ряда убывают. Поле оценивают по конечной сумме, пренебрегая остатком ряда.

На практике, однако, в общем случае реализация данного метода напрямую исключительно трудоемка, поскольку каждое вычисление интегралов вида (4.27) или (4.28) – это вычисление функции шести переменных, каждое значение которой есть трехмерный интеграл. В связи с этим метод применим только для простых задач с высокой степенью симметрии или для задач, в которых вклад от столкновений большой кратности невелик (например, вблизи источника).

В качестве примера приведем решение методом последовательных столкновений задачи о нахождении плотности потока фотонов в бесконечной однородной среде, равномерно заполненной изотропными источниками. В силу симметрии задачи относительно любых пространственных перемещений и поворотов плотность потока в таком поле изотропна и не зависит от пространственной координаты. Следовательно, кинетическое уравнение (3.9) будет выглядеть очень просто:

$$\Sigma(E) \cdot \varphi(E) = \int_0^{\infty} \varphi(E') \cdot \Sigma_s(E' \rightarrow E | \vec{r}) dE' + Q(E).$$

Рекуррентное соотношение для членов неймановского разложения (сравните с уравнениями (4.25) – (4.28)):

$$\varphi_n(E) = \frac{1}{\Sigma(E)} \times \int_0^\infty \varphi_{n-1}(E') \cdot \Sigma_S(E' \rightarrow E|\bar{r}) dE', \quad \text{для } n > 0$$

$$\varphi_0(E) = \frac{Q(E)}{\Sigma(E)}.$$

Легко видеть, что вычисление плотности потока любой кратности в данном случае не представляет большого труда.

Контрольные вопросы

- Поясните физический смысл оптического расстояния, в чем оно измеряется?
- Напишите выражение для вычисления оптического расстояния в однородной, кусочно-однородной среде, а также в среде с произвольно меняющимися свойствами.
- Что такое плотность столкновений, и какова ее размерность?
- Какие существуют ядра интегрального уравнения переноса, и что они показывают?
- Как связаны между собой плотность столкновений и плотность потока частиц?
- Каков физический смысл транспортного ядра, в каких единицах оно измеряется?
- Напишите выражение для транспортного ядра.
- Что показывает ядро столкновений и какова его размерность?
- Напишите выражение для ядра столкновений.
- Какова нормировка транспортного ядра? Ядра столкновений?
- Какой ряд называется рядом Неймана?
- Что показывает n-й компонент неймановского разложения для плотности потока частиц, для плотности столкновений?
- Какова связь между компонентами неймановского разложения для плотности входящих и выходящих столкновений?
- Как можно интерпретировать плотность нулевых выходящих столкновений?
- В чем заключается идея метода последовательных столкновений?

Глава 5. Сопряженные функции теории переноса

*Так нас природа сотворила,
К противуречию склонна.
А.С. Пушкин*

§5.1. Функция детектора

Представим себе детектор, который находится в поле излучения и регистрирует некоторую величину, мгновенное значение которой характеризует это поле в данный момент времени. Ею может быть мощность дозы или, например, скорость счета импульсов и т.п. В любом случае эта регистрируемая величина зависит от плотности потока частиц как ее функционал и может быть выражена в виде интеграла:

$$J_p = \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{4\pi} \int P(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \cdot \varphi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) d\vec{r} dE d\Omega. \quad (5.1)$$

Функция $P(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$, стоящая под знаком интеграла (5.1) рядом с плотностью потока частиц, называется *функцией детектора*. Иногда – функцией отклика (чувствительности) детектора. Заданная таким образом функция детектора имеет следующий смысл. Она равна вкладу в функционал J_p , который создает вокруг точки \vec{r} единица длины траектории, принадлежащей частице с энергией E , движущейся в направлении $\vec{\Omega}$. Размерность функции детектора определяется размерностью искомого функционала: $[P] = [J_p \cdot \text{см}^{-1}]$.

Например, для вычисления интегральной плотности потока в точке \vec{r}_0 функция детектора $P(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \delta(\vec{r} - \vec{r}_0)$.

Если же ищется дифференциальная плотность частиц в фазовой точке $(\vec{r}_0, E_0, \vec{\Omega}_0)$, то нужная функция детектора будет состоять из трех дельта-функций:

$$P(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \delta(\vec{r} - \vec{r}_0) \times \delta(E - E_0) \times \delta(\vec{\Omega} - \vec{\Omega}_0).$$

Для вычисления мощности дозы гамма-излучения в точке \vec{r}_0 необходимо использовать $P(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \delta(\vec{r} - \vec{r}_0) \cdot E \cdot \mu_{en,m}(\vec{r}, E)$, где $\mu_{en,m}(\vec{r}, E)$ – массовый коэффициент поглощения энергии в точке \vec{r} для гамма-квантов с энергией E .

Уравнение (5.1) иногда будем записывать в компактной операторной форме:

$$\dot{J}_p = \langle P, \varphi \rangle. \quad (5.2)$$

При этом скобки $\langle \rangle$ означают интегрирование по всему фазовому пространству (объему, энергии и направлениям).

Разделим и умножим подынтегральное выражение в (5.2) на полное сечение взаимодействия. В результате мы получим новую формулу для нахождения искомого функционала:

$$\dot{J}_p = \langle P^*, \psi \rangle. \quad (5.3)$$

Здесь плотность входящих столкновений ψ есть результат произведения плотности потока и сечения взаимодействия. Новую форму функции детектора определим так:

$$P^*(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = P(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) / \Sigma(\vec{r}, E). \quad (5.4)$$

Ее физический смысл – это непосредственный вклад в показания детектора (в функционал J_p) от одного столкновения в точке \vec{r} , в которое частица входит с параметрами $(E, \vec{\Omega})$.

§5.2. Сопряженный оператор переноса

Для линейного оператора переноса \hat{L} введем сопряженный ему оператор \hat{L}^+ по следующему общему правилу. Для любых двух действительных функций f и g (из области определения оператора \hat{L}) для сопряженного оператора выполняется следующее равенство:

$$\langle f, \hat{L}g \rangle = \langle g, \hat{L}^+ f \rangle, \quad (5.5)$$

где, как и ранее, угловые скобки $\langle \dots \rangle$ означают интегрирование по всему фазовому пространству.

Запишем, пока только формально, сопряженное уравнение переноса в операторной форме подобно тому, как было записано прямое уравнение (3.17):

$$\hat{L}^+ \varphi^+(\vec{x}) = Q^+(\vec{x}). \quad (5.6)$$

Решение этого уравнения $\varphi^+(\vec{x})$ при неизменном операторе \hat{L}^+ будет зависеть от того, какая именно функция $Q^+(\vec{x})$ стоит в

правой части. Если в равенстве (5.5) в качестве функций g и f взять соответствующие решения прямого и сопряженного уравнений, то получим следующий результат:

$$\langle \varphi^+, \hat{L}\varphi \rangle = \langle \varphi, \hat{L}^+\varphi^+ \rangle$$

или, с учетом прямого (3.17) и сопряженного (5.6) уравнений переноса,

$$\langle \varphi^+, Q \rangle = \langle \varphi, Q^+ \rangle. \quad (5.7)$$

Среди всевозможных функций $Q^+(\vec{x})$ будет интересна только такая, которая представляет собой функцию детектора: $Q^+(\vec{x}) \equiv P(\vec{x})$. Действительно, тогда равенство (5.7) имеет практический смысл:

$$\langle \varphi^+, Q \rangle = \langle \varphi, P \rangle = \dot{J}_p. \quad (5.8)$$

В последнем уравнении так же, как ранее в уравнениях (5.1) и (5.2), J_p есть интересующий нас функционал поля излучения.

В дальнейшем будем рассматривать только такие сопряженные уравнения, у которых в правой части стоит функция детектора

$$\hat{L}^+\varphi^+(\vec{x}) = P(\vec{x}). \quad (5.9)$$

Таким образом, имеются две возможности определения искомого функционала поля излучения:

- 1) решить прямое уравнение переноса $\hat{L}\varphi(\vec{x}) = Q(\vec{x})$ и затем рассчитать \dot{J}_p как $\dot{J}_p = \langle P, \varphi \rangle$;
- 2) решить сопряженное уравнение переноса $\hat{L}^+\varphi^+(\vec{x}) = P(\vec{x})$ и потом найти \dot{J}_p как $\dot{J}_p = \langle Q, \varphi^+ \rangle$.

Для того чтобы уяснить физический смысл сопряженной функции $\varphi^+(\vec{x})$, детально запишем последнюю формулу

$$\dot{J}_p = \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^4 \int_{4\pi} Q(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \cdot \varphi^+(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) d\vec{r} dE d\Omega. \quad (5.10)$$

Поскольку величина $Q(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) d\vec{r} dE d\Omega$ представляет собой количество частиц, испускаемых источником вблизи точки $\vec{x} = (\vec{r}, E, \vec{\Omega})$, функция $\varphi^+(\vec{x})$ есть не что иное, как вклад в функционал J_p от одной частицы, запущенной в систему в точке

$\vec{x} = (\vec{r}, E, \vec{\Omega})$. Вот почему функцию $\varphi^+(\vec{x})$ называют *ценностью* частиц в фазовой точке \vec{x} по отношению к некоторому конкретному функционалу. Если заменить рассматриваемый функционал, изменится и функция ценности во всем пространстве. Это видно из сопряженного уравнения переноса (5.9), где в правой части стоит функция детектора, определяющая функционал. Решение этого уравнения и есть функция ценности. Размерность ценности равна размерности рассматриваемого функционала: $[\varphi^+(\vec{x})] = [J_p]$.

Введенная таким образом ценность и плотность потока частиц суть логически сопряженные друг другу функции. Плотность потока $\varphi(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$ есть по существу показания δ -детектора (т.е. детектора, регистрирующего в точке \vec{r} частицы с заданной энергией E , движущиеся точно вдоль $\vec{\Omega}$) в поле произвольного источника. В то время как ценность $\varphi^+(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$ представляет собой показания произвольного детектора в поле δ -источника (точечного, моноэнергетического и мононаправленного).

§5.3. Сопряженное интегродифференциальное уравнение переноса

Рассмотрим баланс ценности на малом отрезке длиной Δl вдоль направления движения частиц $\vec{\Omega}$ (рис.5.1). Пусть на левой границе отрезка (в точке \vec{r}) количество частиц с энергией E , движущихся вдоль $\vec{\Omega}$, равно N . Их совокупная ценность, очевидно, равна $N \cdot \varphi^+(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$. Эта ценность определена тем вкладом в функционал, который в дальнейшем будет сделан частицами, влетающими в точку \vec{r} . Данный вклад может быть внесен несколькими путями.

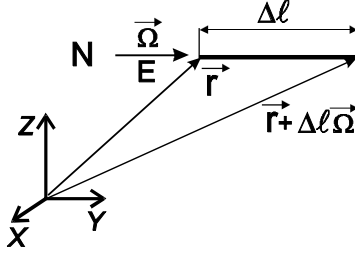


Рис.5.1. Схема к рассмотрению баланса ценности

1. Часть частиц, равная $1 - \Sigma \cdot \Delta l$, без взаимодействия пролетит отрезок и, достигнув точки $\vec{r} + \Delta l \cdot \vec{\Omega}$, приобретет ценность $\varphi^+(\vec{r} + \Delta l \cdot \vec{\Omega}, E, \vec{\Omega})$.

2. Часть частиц, равная $\Sigma_s \cdot \Delta l$, испытает рассеяние. Для того, чтобы определить их ценность, необходимо учесть все результаты такого рассеяния

$$\Delta l \cdot \int_0^\infty \int_{4\pi} \Sigma_s(E, \vec{\Omega} \rightarrow E', \vec{\Omega}' | \vec{r}) \cdot \varphi^+(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') dE' d\Omega'.$$

3. Помимо всего, каждая частица, двигаясь вдоль отрезка Δl , внесет непосредственный вклад в функционал, равный $P(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \times \Delta l$. Это следует из определения функции детектора.

Таким образом, ценность частиц, входящих в точку \vec{r} , складывается из трех компонентов:

$$\begin{aligned} N \cdot \varphi^+(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) &= N(1 - \Sigma \cdot \Delta l) \cdot \varphi^+(\vec{r} + \Delta l \cdot \vec{\Omega}, E, \vec{\Omega}) + \\ &+ N \Delta l \int_0^\infty \int_{4\pi} \Sigma_s(E, \vec{\Omega} \rightarrow E', \vec{\Omega}' | \vec{r}) \varphi^+(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') dE' d\Omega' + N P(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \cdot \Delta l \end{aligned}$$

Разделим обе части уравнения на $N\Delta l$ и, совершив предельный переход при $\Delta l \rightarrow 0$, получим сопряженное интегродифференциальное уравнение переноса частиц, отражающее баланс ценности:

$$\begin{aligned} -\vec{\Omega} \cdot \nabla \varphi^+(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) + \Sigma(\vec{r}, E) \cdot \varphi^+(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) &= \\ = \int_0^\infty \int_{4\pi} \Sigma_s(E, \vec{\Omega} \rightarrow E', \vec{\Omega}' | \vec{r}) \cdot \varphi^+(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') dE' d\vec{\Omega}' + P(\vec{r}, E, \vec{\Omega}). \end{aligned} \quad (5.11)$$

Оператором полученного сопряженного уравнения будет

$$\hat{L}^+ \equiv -\vec{\Omega}\nabla \dots + \Sigma(\vec{r}, E) \times \dots - \int_0^\infty \int_{4\pi} \Sigma_S(E, \vec{\Omega} \rightarrow E', \vec{\Omega}' | \vec{r}) \times \dots dE' d\Omega' . \quad (5.12)$$

Осталось убедиться, что этот оператор действительно является сопряженным по отношению к прямому оператору (3.16).

Будем, как и ранее в п. 3.2.2, считать, что граница области переноса невогнутая. Кроме этого положим, что плотность потока имеет на ней свободные граничные условия: $\varphi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \Big|_{\vec{r} \in \Gamma, \vec{n} \cdot \vec{\Omega} < 0} = 0$.

Это ни в коей мере не является ограничением общности наших рассуждений. Если внешний поток $f(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$ все-таки существует, его всегда можно включить в функцию источника:

$$Q'(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \Big|_{\vec{r} \in \Gamma, \vec{n} \cdot \vec{\Omega} < 0} = Q(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) + f(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \times |\vec{n} \cdot \vec{\Omega}| .$$

Наложим вполне естественное граничное условие на ценность:

$$\varphi^+(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \Big|_{\vec{r} \in \Gamma, \vec{n} \cdot \vec{\Omega} > 0} = 0 , \quad (5.13)$$

которое отражает тот факт, что частицы, вылетающие из области переноса, более в нее не возвращаются и вклада в детектор внести не могут.

Для доказательства сопряженности операторов умножим прямое интегродифференциальное уравнение переноса (3.9) на ценность φ^+ , а сопряженное уравнение (5.11) – на φ . Вычтем второе из первого и проинтегрируем разность по всем энергиям E и направлениям $\vec{\Omega}$. При этом интегралы столкновений, стоящие в правых частях обоих уравнений, взаимно уничтожаются, поскольку они идентичны с точностью до изменения порядка интегрирования. Оставшееся будет выглядеть так:

$$\int_0^\infty \int_{4\pi} \left[\varphi^+(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \vec{\Omega}\nabla \varphi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) + \varphi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \vec{\Omega}\nabla \varphi^+(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \right] dE d\Omega = \int_0^\infty \int_{4\pi} \left[\varphi^+(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) Q(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) - \varphi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) P(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \right] dE d\Omega . \quad (5.14)$$

Очевидно, первое подынтегральное выражение может быть записано как

$$\varphi^+ \cdot \vec{\Omega}\nabla \varphi + \varphi \cdot \vec{\Omega}\nabla \varphi^+ = \text{div}(\vec{\Omega} \varphi^+ \varphi) .$$

Проинтегрируем уравнение (5.14) по объему области переноса и воспользуемся тем, что объемный интеграл от дивергенции вектора равен поверхностному интегралу (по границе) от потока вектора. Кроме того, заметим, что после интегрирования по пространственной переменной \vec{r} правая часть уравнения будет содержать полные (по всем фазовым переменным) интегралы от произведений $Q \cdot \varphi^+$ и $P \cdot \varphi$.

$$\int_{\Gamma} \int_0^{4\pi} \int \bar{\Omega} \bar{n}(\vec{r}_S) \varphi^+(\vec{r}_S, E, \bar{\Omega}) \varphi(\vec{r}_S, E, \bar{\Omega}) dE d\Omega d\vec{r}_S = \langle Q, \varphi^+ \rangle - \langle P, \varphi \rangle. \quad (5.15)$$

В уравнении (5.15) интегрирование по пространственной переменной идет по поверхности границы. При этом $\bar{n}(\vec{r}_S)$ – внешняя нормаль к границе, и ее направление, разумеется, зависит от конкретной точки. В каждой такой точке \vec{r}_S полный телесный угол 4π в интеграле по направлениям может быть представлен как сумма двух углов:

$$4\pi = 2\pi \Big|_{\bar{\Omega} \cdot \bar{n} < 0} + 2\pi \Big|_{\bar{\Omega} \cdot \bar{n} > 0}.$$

В силу граничных условий для $\bar{\Omega} \cdot \bar{n} > 0$ нулю равна ценность, а для $\bar{\Omega} \cdot \bar{n} < 0$ нулю равна плотность потока. Следовательно, весь интеграл в левой части уравнения (5.15) равен нулю, т.е. $\langle Q, \varphi^+ \rangle = \langle P, \varphi \rangle$.

Это свидетельствует о том, что уравнение, полученное исходя из физического смысла ценности как потенциального вклада в показания детектора, действительно является сопряженным по отношению к прямому уравнению переноса для плотности потока частиц. Аналогичное равенство (5.8) было получено, считая, что $\varphi^+(\vec{x})$ есть решение *сопряженного* уравнения (5.6).

§5.4. Интегральная форма сопряженного уравнения переноса

Введем следующие сопряженные функции.

Ценность *входящих* столкновений $\psi^*(\vec{r}, E, \bar{\Omega})$ представляет собой потенциальный средний вклад в показания детектора от одного столкновения в точке \vec{r} , в которое частица *входит*, имея

параметры $(E, \vec{\Omega})$. Ее размерность равна размерности искомого функционала: $[\psi^*] = [J_P]$.

Ценность *выходящих* столкновений $\chi^*(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$ представляет собой потенциальный средний вклад в показания детектора от одного столкновения в точке \vec{r} , которое частица *покидает*, имея энергию E и направление движения $\vec{\Omega}$. Размерность: $[\chi^*] = [J_P]$.

Вспомним, что ранее (см. формулы (5.3) и (5.4)) уже была введена $P^*(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$ как непосредственный вклад в показания детектора (в функционал J_P) от одного столкновения в точке \vec{r} , в которое частица входит с параметрами $(E, \vec{\Omega})$. Слова «непосредственный вклад» означают, что отклик детектора создается именно этим столкновением. Это может быть вспышка света (сцинтилляционный детектор), ионизация газа (газоразрядный детектор) и т.п.

Ценность ψ^* , в отличие от P^* , определяется не только вкладом данного столкновения, но и всеми возможными будущими взаимодействиями с веществом, которые последуют за данным столкновением. Для нее справедливо следующее уравнение:

$$\psi^*(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = P^*(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) + \int_0^\infty \int_{4\pi} \frac{\Sigma_S(E, \vec{\Omega} \rightarrow E', \vec{\Omega}' | \vec{r})}{\Sigma(\vec{r}, E)} \chi^*(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') dE' d\Omega' \quad (5.16)$$

Действительно, ценность входящего столкновения складывается из непосредственного вклада в функционал и ценности всевозможных результатов рассеяния. Под интегралом стоит произведение вероятности для частицы в результате столкновения получить энергию в интервале dE' вокруг E' , а направление движения внутри телесного угла $d\Omega'$ вокруг $\vec{\Omega}'$, и ценности частиц, покидающих столкновение именно с такими энергией и направлением движения.

Чем может быть ценно выходящее столкновение? Покидающее столкновение частица уже не может создать никакого вклада в детектор в данной точке, поэтому единственная польза от нее – в ее будущих столкновениях. Уже известно, как

выглядит плотность вероятности испытать очередное столкновение в точке \vec{r}' . Она задается транспортным ядром (4.16). Тогда ценность выходящих столкновений вполне естественно приравнять следующему интегралу по всему пространству:

$$\chi^*(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \int_{\infty} \frac{\Sigma(\vec{r}', E)}{|\vec{r} - \vec{r}'|^2} \cdot e^{-\tau(\vec{r} \rightarrow \vec{r}', E)} \cdot \delta(\vec{\Omega} - \frac{\vec{r}' - \vec{r}}{|\vec{r}' - \vec{r}|}) \cdot \psi^*(\vec{r}', E, \vec{\Omega}) d\vec{r}' \quad (5.17)$$

Подобно рис.4.2 для плотности столкновений, рис.5.2 показывает взаимосвязь ценности входящих и выходящих столкновений, обусловленную уравнениями (5.16) и (5.17). Ценность входящего столкновения, помимо непосредственного вклада в детектор, обусловлена общей ценностью частиц после рассеяния, обладающих разными направлениями вылета и энергиями, что соответствует уравнению (5.16). С другой стороны, ценность выходящих столкновений в заданной точке складывается из ценностей входящих столкновений во множестве разных точек пространства, как и описывает это уравнение (5.17).

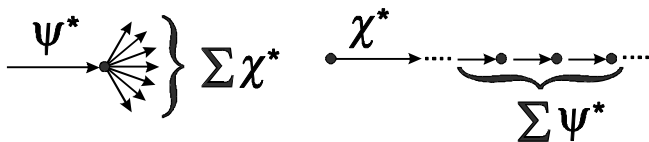


Рис.5.2. Взаимосвязь ценности входящих и выходящих столкновений

Приведем запись полученных интегральных сопряженных уравнений с помощью транспортного ядра и ядра столкновений:

$$\psi^*(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = P^*(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) + \int_0^{\infty} \int_{4\pi} C(E, \vec{\Omega} \rightarrow E', \vec{\Omega}' | \vec{r}) \cdot \chi^*(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') dE' d\Omega', \quad (5.18)$$

$$\chi^*(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \int_{\infty} T(\vec{r} \rightarrow \vec{r}' | E, \vec{\Omega}) \cdot \psi^*(\vec{r}', E, \vec{\Omega}) d\vec{r}'. \quad (5.19)$$

Полученная пара сопряженных уравнений для ценности столкновений по форме близка соответствующей паре прямых уравнений для плотности столкновений (4.20), (4.21). Можно рассматривать эти, а также исходное интегродифференциальное (5.11), уравнения как уравнения переноса некоторых виртуальных

«сопряженных частиц» или *псевдочастиц* (*псевдофотонов*, *псевдонейтронов* и т.д.). Отметим при этом, что псевдочастицы обладают, несмотря на свою виртуальность, обычными физическими сечениями взаимодействия, и такими же, как и реальные частицы, T - и S -ядрами. Их (псевдочастиц) фазовое состояние также описывается обычными координатами \vec{r} , энергией E и единичным вектором $\vec{\Omega}$, совпадающим с вектором скорости.

Обратим, однако, внимание и на имеющиеся отличия прямых и сопряженных уравнений.

- В прямом уравнении (4.20) стоит функция источника, а в сопряженном (5.18) – функция детектора, который играет роль «сопряженного источника». Псевдочастицы, таким образом, рождаются в детекторе.

- В сопряженном уравнении (5.11) перед градиентным членом стоит знак «-», который указывает на то, что псевдочастицы движутся против вектора своей скорости. Как следствие этого, транспортное ядро в уравнении (5.19) транспонировано по отношению к аналогичному ядру в прямом уравнении (4.21). Действительно, в прямом уравнении интегрирование ведется по начальным состояниям, а в сопряженном – по конечным.

- Ядро столкновений в сопряженном уравнении (5.18) также транспонировано по сравнению с прямым аналогом (4.20). Это означает, что псевдочастицы при рассеянии не теряют, а увеличивают свою энергию.

- Наконец, в отличие от обычных частиц, которые регистрируются в детекторе, сопряженные частицы детектируются источником. На это указывает эквивалентность расчета искомого функционала J_p через решения прямого и сопряженного уравнений (см. равенство (5.8)).

Для того, чтобы завершить анализ сходства и различия прямых и сопряженных уравнений, сведем каждую пару интегральных уравнений (4.20), (4.21) и (5.18), (5.19) в одно, соответственно, для плотности входящих и ценности выходящих столкновений.

Получим прямое уравнение для плотности входящих столкновений подстановкой уравнения (4.20) в (4.21) и использованием ранее введенного кинетического ядра (4.19):

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) &= \psi_1(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) + \\ &+ \int_{\infty}^{\infty} \int_0 \int_{4\pi} K(\vec{r}', E', \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{r}, E, \vec{\Omega}) \cdot \psi(\vec{r}', E', \vec{\Omega}') d\vec{r}' dE' d\Omega', \end{aligned} \quad (5.20)$$

где плотность первых входящих столкновений:

$$\psi_1(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \int_{\infty} T(\vec{r}' \rightarrow \vec{r} | E, \vec{\Omega}) \cdot Q(\vec{r}', E, \vec{\Omega}) d\vec{r}'. \quad (5.21)$$

Сопряженное уравнение для ценности входящих столкновений получим подстановкой уравнения (5.19) в (5.18):

$$\begin{aligned} \psi^*(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) &= P^*(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) + \\ &+ \int_{\infty}^{\infty} \int_0 \int_{4\pi} K(\vec{r}, E, \vec{\Omega} \rightarrow \vec{r}', E', \vec{\Omega}') \cdot \psi^*(\vec{r}', E', \vec{\Omega}') d\vec{r}' dE' d\Omega'. \end{aligned} \quad (5.22)$$

В полученных объединенных уравнениях (5.20) и (5.22) кинетические ядра, конечно же, взаимно транспонированы.

В заключение этого параграфа обратим внимание читателя на то, что введенная в нем ценность выходящих столкновений $\chi^*(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$ и введенная в самом начале данной главы функция ценности $\varphi^+(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$ суть одна и та же функция:

$$\varphi^+(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \equiv \chi^*(\vec{r}, E, \vec{\Omega}).$$

Они обе отражают одну и ту же физическую сущность: ожидаемый вклад в функционал от одной частицы, находящейся в точке \vec{r} с энергией E и направлением движения $\vec{\Omega}$. И для этого вклада совершенно неважно, как появилась частица в данной точке: только что вылетев из столкновения, родившись в источнике или как-то еще. Разумеется, факт тождественности функций можно показать строго, получив для ценности φ^+ интегральное уравнение, примерно так же, как в §4.2 было получено прямое интегральное уравнение. Полученное уравнение будет в точности совпадать с уравнением для χ^* .

§5.5. Разложение в ряд Неймана сопряженных функций и функционалов

В §4.4 было рассмотрено разложение плотности потока и плотности столкновений в ряд Неймана по кратностям столкновений. Построим аналогичное разложение для ценности столкновений:

$$\psi^* = \sum_{n=0}^{\infty} \psi_n^*, \quad (5.23)$$

$$\chi^* = \sum_{n=1}^{\infty} \chi_n^*. \quad (5.24)$$

Компоненты ценности ψ_n^* и χ_n^* суть средние ожидаемые вклады в детектор, которые будут созданы от одного, соответственно, входящего и выходящего столкновения в данной фазовой точке через n промежуточных столкновений. При этом индекс суммирования для «входящей» ценности начинается с нуля, что отвечает непосредственному вкладу в детектор от данного столкновения. Такой нулевой компонент существует:

$$\psi_0^*(\vec{x}) \equiv P^*(\vec{x}). \quad (5.25)$$

А вот для того, чтобы выходящее столкновение внесло вклад в детектор, понадобится, по крайней мере, еще одно последующее столкновение, и индекс суммирования начинается с единицы.

Определим связь между компонентами неймановского разложения ценности:

$$\chi_n^*(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \int_{\infty} T(\vec{r} \rightarrow \vec{r}' | E, \vec{\Omega}) \cdot \psi_{n-1}^*(\vec{r}', E, \vec{\Omega}) d\vec{r}', \quad (5.26)$$

$$\psi_n^*(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \int_{0}^{\infty} \int_{4\pi} C(E, \vec{\Omega} \rightarrow E', \vec{\Omega}' | \vec{r}) \cdot \chi_n^*(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') dE' d\vec{\Omega}'. \quad (5.27)$$

Используя введенные понятия ценности частиц φ^+ и связанные с нею ценности входящих ψ^* и выходящих χ^* столкновений, разложим в ряд Неймана функционал поля излучения \dot{J}_p .

Как мы уже установили, он может быть вычислен двояко: либо как свертка функции источника с ценностью частиц

(ценностью выходящих столкновений), либо как свертка функции детектора для столкновений с плотностью столкновений:

$$J_P = \langle \chi^*, Q \rangle = \langle \psi, P^* \rangle. \quad (5.28)$$

Преобразуя это выражение с помощью пары сопряженных интегральных уравнений (5.18) и (5.19), получим

$$J_P = \langle \chi^*, Q \rangle = \int Q(\bar{x}) \int T(\bar{x} \rightarrow \bar{x}') \cdot \psi^*(\bar{x}') d\bar{x}' d\bar{x}.$$

Если воспользоваться связью между компонентами неймановского разложения плотности столкновений:

$$\begin{cases} \chi_0(\bar{x}) = Q(\bar{x}) \\ \psi_n(\bar{x}) = \int T(\bar{x}' \rightarrow \bar{x}) \cdot \chi_{n-1}(\bar{x}') d\bar{x}', \\ \chi_n(\bar{x}) = \int C(\bar{x}' \rightarrow \bar{x}) \cdot \psi_n(\bar{x}') d\bar{x}' \end{cases} \quad (5.29)$$

то нетрудно выражение для функционала представить в виде суммы компонентов нерассеянного и рассеянного излучений:

$$\begin{aligned} J_P &= \int Q(\bar{x}) \int T(\bar{x} \rightarrow \bar{x}') \psi^*(\bar{x}') d\bar{x}' d\bar{x} = \langle \psi_1, \psi^* \rangle = \\ &= \langle \psi_1, P^* \rangle + \int \psi_1(\bar{x}) \int C(\bar{x} \rightarrow \bar{x}') \chi^*(\bar{x}') d\bar{x}' d\bar{x} \end{aligned}$$

Заменим в последнем слагаемом свертку ψ_1 с ядром столкновений C на компонент χ_1 из уравнения (5.29):

$$J_P = \langle \chi^*, Q \rangle = \langle \psi_1, \psi^* \rangle = \langle \psi_1, P^* \rangle + \langle \chi_1, \chi^* \rangle.$$

Последовательно используя для этой формулы систему прямых уравнений для разложений (5.29) и систему сопряженных интегральных уравнений (5.18) и (5.19), после n шагов будем иметь:

$$J_P = \sum_{i=1}^n \langle \psi_i, P^* \rangle + \langle \chi_n, \chi^* \rangle = \sum_{i=1}^n \langle \psi_i, P^* \rangle + \langle \psi_{n+1}, \psi^* \rangle. \quad (5.30)$$

Точно такие же рассуждения можно построить для представления функционала в виде

$$J_P = \langle \psi, P^* \rangle.$$

Для этого потребуется система прямых интегральных

уравнений

$$\chi(\bar{x}) = Q(\bar{x}) + \int C(\bar{x}' \rightarrow \bar{x}) \cdot \psi(\bar{x}') d\bar{x}', \quad (5.31)$$

$$\psi(\bar{x}) = \int T(\bar{x}' \rightarrow \bar{x}) \cdot \chi(\bar{x}') d\bar{x}' \quad (5.32)$$

и соотношения между компонентами разложения в ряд Неймана для ценностей столкновений (5.25) – (5.27).

Сначала заменим плотность входящих столкновений на свертку транспортного ядра и плотность выходящих столкновений:

$$\dot{J}_P = \langle \psi, P^* \rangle = \int P^*(\bar{x}) \int T(\bar{x}' \rightarrow \bar{x}) \chi(\bar{x}') d\bar{x}' d\bar{x}.$$

Трактуя функцию детектора P^* как нулевой компонент ценности входящих столкновений и используя уравнение (5.26), приведем искомый функционал к виду:

$$\dot{J}_P = \int P^*(\bar{x}) \int T(\bar{x}' \rightarrow \bar{x}) \chi(\bar{x}') d\bar{x}' d\bar{x} = \langle \chi_1^*, \chi \rangle.$$

Представляя плотность выходящих столкновений как сумму источника и интеграла столкновений (5.31) и преобразуя последнее слагаемое, получим:

$$\dot{J}_P = \langle \chi_1^*, Q \rangle + \int \chi_1^*(\bar{x}) \int C(\bar{x}' \rightarrow \bar{x}) \cdot \psi(\bar{x}') d\bar{x}' d\bar{x} = \langle \chi_1^*, Q \rangle + \langle \psi_1^*, \psi \rangle.$$

Теперь следует проделать аналогичные действия для второго слагаемого данной суммы: плотность входящих столкновений выразим через интеграл от T -ядра и плотности выходящих столкновений, а образовавшуюся свертку ψ_1^* с транспортным ядром представим с помощью уравнения (5.26) как компонент χ_1^* :

$$\dot{J}_P = \langle \chi_1^*, Q \rangle + \int \psi_1^*(\bar{x}) \int T(\bar{x}' \rightarrow \bar{x}) \chi(\bar{x}') d\bar{x}' d\bar{x} = \langle \chi_1^*, Q \rangle + \langle \chi_1^*, \chi \rangle.$$

Второе слагаемое содержит плотность выходящих столкновений, которая есть сумма функции источника и интеграла столкновений. Это позволяет привести его к виду:

$$\dot{J}_P = \langle \chi_1^*, Q \rangle + \langle \chi_1^*, \chi \rangle = \langle \chi_1^*, Q \rangle + \langle \chi_2^*, Q \rangle + \langle \psi_2^*, \psi \rangle.$$

Последовательно повторив все эти шаги n раз, в итоге получим формулу для искомого функционала:

$$\dot{J}_P = \sum_{i=1}^n \langle \chi_i^*, Q \rangle + \langle \chi_{n+1}^*, \chi \rangle = \sum_{i=1}^n \langle \chi_i^*, Q \rangle + \langle \psi_n^*, \psi \rangle. \quad (5.33)$$

Формулы (5.30) и (5.33) позволяют оценить отбрасываемый остаток при использовании метода последовательных

столкновений, когда бесконечный ряд Неймана заменяется конечной суммой. Кроме того, в дальнейшем мы будем использовать их для конструирования оценок при расчете функционалов методом Монте-Карло.

Контрольные вопросы

- Что показывает функция детектора, и какова ее размерность?
 - Какие операторы называют сопряженными?
 - Что такое ценность частиц, и в каких единицах она измеряется?
 - Дайте определение ценности столкновений и укажите ее размерность.
 - Запишите интегродифференциальную форму сопряженного уравнения переноса.
 - Запишите сопряженное уравнение в интегральной форме.
 - Сохранение какой величины отражает сопряженное уравнение переноса?
 - Каковы могут быть внешние граничные условия для ценности частиц?
 - Поясните смысл n -го компонента неймановского разложения для ценности?
 - Как связаны между собой компоненты неймановского разложения для ценности входящих и выходящих столкновений?
 - Чем отличаются транспортные ядра в прямом и сопряженном уравнениях?
- В чем разница ядер столкновения в прямом и сопряженном уравнениях?

ЧАСТЬ 2. МЕТОД МОНТЕ-КАРЛО В ЗАДАЧАХ ПЕРЕНОСА ИЗЛУЧЕНИЯ

Глава 6. Основы метода Монте-Карло

*Мы все учились понемногу
Чему-нибудь и как-нибудь...
А. С. Пушкин*

Общепринятого определения метода Монте-Карло нет. Чаще всего так называют численные методы решения математических задач при помощи моделирования случайных величин.

Моделирование случайных величин означает воспроизведение на компьютере модели реального явления, имеющего случайную природу. Например, компьютер может имитировать карточную игру. Или довольно часто на компьютерах получают синтетические данные измерений, которые выглядят как настоящие. Такие данные используются при тестировании работы различных систем, предназначенных для их обработки.

Обратим внимание на то, что в приведенном выше определении метода Монте-Карло целью моделирования случайных величин является получение некоторого математического результата. Важнейший прием этого метода есть приведение решаемой задачи к расчету математических ожиданий. В этой связи *имитация* на компьютере карточной (а также любой другой азартной) игры или экспериментальных результатов не относится к методам Монте-Карло.

§6.1. Краткий очерк истории метода Монте-Карло

Название *Монте-Карло* было впервые использовано для класса математических методов группой ученых (Дж. Фон Нейман, Э. Ферми, С. Улам, Н. Метрополис), работавших в начале 40-х годов XX века в лаборатории Лос-Аламос (США) над созданием ядерного оружия. Существо метода заключалось в применении случайных чисел для решения математических задач. Поскольку к случайным числам имеют непосредственное отношение все азартные игры, имя новому методу было дано по

названию небольшого городка в княжестве Монако, известного своими игорными домами.

Первое упоминание о математическом методе с таким названием относится к 1949 году. Станислав Улам, находясь дома из-за болезни, в течение нескольких дней развлекался раскладыванием пасьянса. Задавшись целью определить вероятность того, что пасьянс сойдется, он сделал безуспешную попытку вычислить ее с помощью методов комбинаторики. После этого ему пришла в голову мысль, что вероятность такого сложного события проще установить экспериментально, разложив большое количество пасьянсов и подсчитав процент успешных исходов.

Однако самое раннее использование случайных событий для вычисления математических величин принадлежит, по-видимому, графу Де Бюффону. Он в 1777 году описал эксперимент со случайным бросанием иголки на горизонтальную поверхность, расчерченную параллельными прямыми. Граф показал, что если расстояние d между линиями больше длины иголки L , то вероятность того, что иголка пересечет линию $P = 2L/\pi d$. Позднее (в 1886 году) Лаплас предложил применить этот эксперимент для нахождения числа π . По существу, это было первым использованием метода Монте-Карло: с помощью моделирования случайного процесса вычислялась математическая величина. В 1901 году один из основоположников термодинамики лорд Кельвин с помощью случайных чисел оценивал некоторые интегралы в кинетической теории газов.

Интенсивное развитие самого метода Монте-Карло, как и его практическое использование, началось после Второй мировой войны вместе с появлением производительных вычислительных машин.

В настоящее время данный метод – один из наиболее распространенных для решения задач переноса излучений. Его преимуществом является способность решать сложные трехмерные нестационарные задачи, не внося никаких упрощений в физическую модель взаимодействия излучения с веществом. Он требует относительно небольшого объема оперативной памяти компьютера и хорошо приспособлен для параллельных вычислений.

Результаты, полученные методом Монте-Карло, носят, однако, статистический характер, а скорость их сходимости – низкая. В этом причина того, что на стационарных задачах с малой размерностью метод Монте-Карло проигрывает по эффективности обычным численным методам.

Метод Монте-Карло основан на использовании случайных величин, он широко применяет базовые понятия теории вероятностей и математической статистики. Их следует вспомнить, прежде чем познакомиться с самим методом.

§6.2. Случайные величины

Случайной величиной называют любую количественную характеристику опыта, которая при его неоднократном воспроизведении непредсказуемо принимает одно из ряда возможных значений. Будем называть *событием* тот факт, что в ходе наблюдения случайная величина принимает определенное значение. Когда мы сами создаем условия, чтобы случайная величина приняла какое-то определенное значение, мы производим *испытание*. Например, мы подбрасываем монету, чтобы узнать, на какую именно сторону в данном *испытании* она упадет.

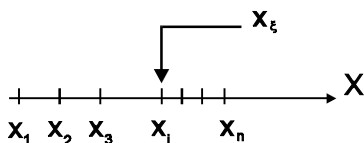
Случайная величина x_ξ называется *дискретной*, если она может случайным образом принимать значения только из определенного фиксированного набора

$$\{x_i\}: x_1, x_2, \dots, x_n.$$

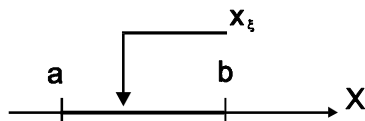
Каждому i -му значению из этого набора сопоставляется вероятность того, что случайная величина примет именно это значение: P_i . Эти вероятности *нормированы*, т.е.

$$\sum_{i=1}^n P_i = 1. \quad (6.1)$$

Нормировка (6.1) означает, что при испытании случайная величина обязательно примет какое-нибудь значение из данного набора.



Случайная величина x_ξ называется *непрерывной*, если в процессе испытаний она может принимать любое значение из некоторого интервала (a, b) .



Любая случайная величина (дискретная, непрерывная) характеризуется *функцией распределения* $F(x)$, которая равна вероятности того, что при очередном испытании x_ξ не превзойдет значения x :

$$F(x) = P\{x_\xi \leq x\} \quad (6.2)$$

Функция распределения является неотрицательной: $F(x) \geq 0$ и неубывающей: если $x_2 > x_1$, то $F(x_2) \geq F(x_1)$. Кроме того, ее значения на бесконечности всегда известны:

$$F(-\infty) = 0, \quad F(+\infty) = 1.$$

Из определения функции распределения (см. формулу (5.2)) для любых $x_1 \leq x_2$ сразу следует:

$$F(x_2) - F(x_1) = P\{x_1 < x_\xi \leq x_2\}. \quad (6.3)$$

Непрерывную случайную величину удобно характеризовать *плотностью вероятности* (*плотностью распределения*) $p(x)$. *Плотность вероятности* в точке x равна вероятности того, что значение x_ξ окажется внутри бесконечно малого интервала значений dx вокруг x , отнесенной к величине интервала dx :

$$p(x) = \frac{P\{x < x_\xi \leq x + dx\}}{dx}.$$

Отсюда, а также из формулы (6.3) следует связь между функцией распределения и плотностью вероятности:

$$p(x) = \frac{dF}{dx}; \quad F(x) = \int_{-\infty}^x p(x') dx' \quad (6.4)$$

Плотность вероятности обладает следующими важными свойствами:

- неотрицательности: $p(x) \geq 0;$ (6.5a)

- нормированности: $\int_{-\infty}^{+\infty} p(x') dx' = 1.$ (6.5б)

Свойство (6.5а) следует из неотрицательности самой вероятности, а нормировка (6.5б) показывает, что при испытании случайная величина обязательно примет какое-нибудь значение на интервале $(-\infty, +\infty)$.

Можно записать функцию плотности вероятности и для дискретной случайной величины

$$p(x) = \sum_{i=1}^n P_i \cdot \delta(x - x_i), \quad (6.6)$$

если воспользоваться дельта-функцией Дирака $\delta(x - x_i)$. Пример плотности вероятности для непрерывной и дискретной случайных величин приведен на рис.6.1. Изображение дельта-функции на рис. 6.1б условно.

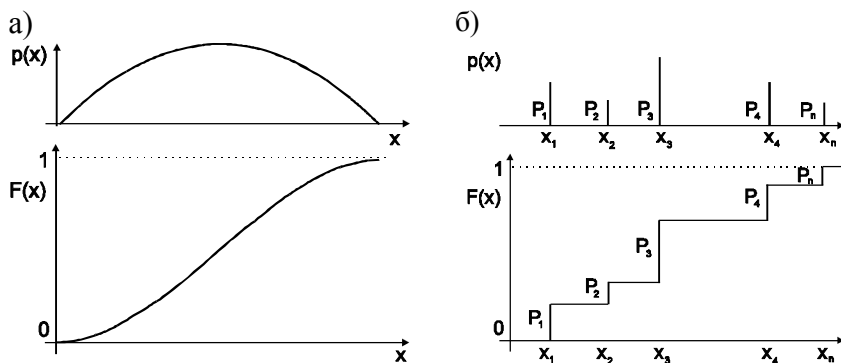


Рис.6.1. Плотности вероятности и функции распределения для непрерывной (а) и дискретной (б) случайных величин

Представим себе испытание, в котором участвуют сразу две случайные величины x_ξ и y_ξ . Для описания такого испытания будем использовать *совместную плотность вероятности* $p(x,y)$, а распределение одной из случайных величин будем задавать *частичной плотностью вероятности*

$$p(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} p(x, y) dy. \quad (6.7)$$

Для *независимых* величин совместная плотность вероятности равна произведению их *частичных плотностей*: $p(x, y) = p(x) \cdot p(y)$.

Если в испытании участвуют две случайные величины, рассматривают их *условную плотность вероятности* $p(x|y)$. Она представляет собой плотность вероятности величины x_ξ при условии, что другая случайная величина примет некоторое конкретное значение: $y_\xi = y$. Для условной вероятности существует известная формула Байеса:

$$p(x|y) = \frac{p(x, y)}{p(y)}. \quad (6.8)$$

В дальнейшем понадобятся следующие два функционала плотности вероятности:

Математическое ожидание (среднее значение) случайной величины:

$$Mx_\xi = \overline{x_\xi} = \int_{-\infty}^{+\infty} x \cdot p(x) dx. \quad (6.9)$$

Среднее значение дискретной случайной величины вычисляется как простая сумма

$$\overline{x_\xi} = \sum_{i=1}^n P_i \cdot x_i.$$

Дисперсия случайной величины x_ξ :

$$Dx_\xi = M(x_\xi - \overline{x_\xi})^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} (x - \overline{x_\xi})^2 \cdot p(x) dx = \overline{x_\xi^2} - \overline{x_\xi}^2.$$

Для дисперсии суммы независимых случайных величин справедливо:

$$D(x_\xi + y_\xi) = Dx_\xi + Dy_\xi,$$

а для произвольного постоянного множителя α выполняется равенство $D(\alpha x_\xi) = \alpha^2 Dx_\xi$.

§6.3. Розыгрыш случайной величины

Для решения вычислительных задач методом Монте-Карло нужны наборы значений случайных величин, подчиняющихся различным законам распределения. Получение таких наборов называется *случайной выборкой* или *розыгрышем* случайной величины.

Пусть на множестве X значений случайной величины x задана ее плотность вероятности $p(x)$, так что выполняется условие нормировки:

$$\int_X p(x)dx = 1.$$

Разыграть случайную величину x означает получить такую последовательность $\{x_1, x_2, \dots, x_k, \dots\}$, что для любого подмножества $X_0 \in X$ справедливо:

$$P\{x_k \in X_0\} = \int_{X_0} p(x)dx.$$

Например, для простой одномерной случайной величины можно взять в качестве X_0 малый интервал значений $x \div x+dx$. Для него сформулированное условие будет выглядеть очевидно:

$$P\{x_k \in X_0\} = p(x)dx.$$

Существует набор методов, позволяющий разыграть случайную величину, какова бы ни была ее плотность вероятности. Все эти методы, однако, используют базовую последовательность случайных чисел, равномерно распределенных на полусегменте $[0,1)$. Всюду далее эти числа будут обозначены значком ξ . Физические устройства или программы, которые способны создавать такую последовательность, называются *генераторами* (или *датчиками*) *случайных чисел*.

§6.4. Генераторы случайных чисел

Результатом работы генератора (датчика) случайных чисел является случайная последовательность $\{\xi_i\} = \xi_1, \xi_2, \xi_3, \dots, \xi_n, \dots$, представляющая собой выборку случайной величины ξ , имеющей плотность вероятности

$$p(x) = \begin{cases} 1, & 0 \leq x < 1 \\ 0, & x < 0, x \geq 1 \end{cases}.$$

Датчики случайных чисел могут быть *физическими* или *программными*.

Физический датчик преобразует в числовую последовательность результат какого-либо природного случайного процесса (шум в радиозлектронном устройстве и т.п.). Он

обладает тем несомненным преимуществом, что дает действительно случайную неповторяющуюся последовательность. Однако работоспособность такого прибора нуждается в периодической проверке (например, дрейфа нуля). Кроме того, невозможность воспроизведения одной и той же случайной последовательности вновь крайне неудобна при отладке расчетных программ.

Чаще всего датчик в компьютере реализован в виде специальной *программы*, которая при каждом обращении к ней возвращает *псевдослучайное* число. Это означает, что последовательно получаемые таким образом числа не являются на самом деле по-настоящему случайными, а только выглядят таковыми. Если датчик качественный, то последовательность образуемых им чисел удовлетворяет статистическим тестам на независимость и равномерность (тесты частот, пар, интервалов, комбинаций и др.).

Надо иметь в виду, что все, и даже очень хорошие, генераторы псевдослучайных чисел имеют конечный период. Следовательно, только те числа, количество которых не достигло периода, могут считаться удовлетворительно независимыми. После достижения периода вся (или часть) уже полученной последовательности в точности повторяется вновь. Рекомендуется, впрочем, использовать только несколько процентов от полного периода датчика, чтобы получить качественную с точки зрения независимости выборку случайных чисел. Период многих популярных датчиков не превышает на современных компьютерах величины $2^{32}-1$, хотя уже опубликованы генераторы с периодом 2^{144} и даже 10^{165} .

Широко распространенные компиляторы современных языков программирования имеют в своем составе функции для генерации псевдослучайных чисел, в основе которых, как правило, лежит *конгруэнтный мультипликативно-аддитивный датчик случайных чисел*.

Этот датчик задается следующими параметрами (целые беззнаковые числа):

- стартовое число x_0 ,
- мультипликатор a ,
- приращение c ,
- модуль M .

Псевдослучайная последовательность образуется по правилу:

$$x_{n+1} = a \cdot x_n + c \pmod{M}. \quad (6.10)$$

Операция \pmod{M} означает вычисление остатка от деления нацело и относится ко всей сумме в (6.10). В выражении

$$A = B \pmod{M}$$

число A будет *конгруэнтно* числу B по модулю M .

Результатом алгоритма (6.10) являются целые числа на полусегменте $[0, M)$. Для получения действительного (т.е. не целого) случайного числа на $[0, 1)$ необходимо выполнить деление на модуль для чисел с плавающей точкой:

$$\xi_n = (\text{float}) x_n / (\text{float}) M.$$

Период такого датчика не может быть больше, чем M , поэтому модуль выбирают как максимально возможное целое число без знака. Так, если p – количество бит, используемых для записи целого числа, то лучше всего взять $M = 2^p - 1$.

Для того чтобы достичь максимально возможного для такого датчика периода, необходимо правильно подобрать мультипликатор a . Например, рекомендуется подбирать его так, чтобы $a \pmod{8} = 5$ или 3 . При этом для него должно выполняться неравенство:

$$\sqrt{M} < a < M - \sqrt{M}.$$

Хорошие результаты дают мультипликаторы вида $a = 5^k$, где $k = 9, 11, 13, 19$.

Выбор приращения c не столь важен для качества датчика. В частности, в конгруэнтных мультипликативных датчиках $c = 0$.

В качестве стартового может быть взято любое целое число x_0 . Желательно избегать наличия регулярных образований в его двоичной записи (например, $\dots 00111001100110011\dots$), иначе некоторое количество первых псевдослучайных чисел будет показывать значительную взаимную корреляцию.

Линейные конгруэнтные датчики вида (6.10) являются очень быстрыми, так как используют для получения очередного числа только несколько простых операций. К сожалению, они образуют числа с заметной последовательной корреляцией. Это означает следующее. Представим себе, что мы используем каждые последовательные k чисел для выбора координат точки в k -мерном пространстве. Мы ожидаем, что по мере роста количества точек

они случайным образом равномерно заполняют весь объем единичного k -мерного куба. На самом же деле они будут сосредоточены в $(k-1)$ -мерных гиперплоскостях, и таких плоскостей будет не более $M^{1/k}$. Например, в обычном 3-мерном кубе при $M = 2^{32}$ плоскостей будет около 1600. Если используется датчик на основе 2-байтовых целых чисел, и $M = 2^{16}$, то плоскостей будет всего лишь 40. В случае же неудачного выбора параметров a и M количество плоскостей будет еще меньше.

Практические выводы, которые должны быть сделаны, таковы. Следует крайне осторожно относиться к программам-генераторам случайных чисел, которые поставляются в пакетах стандартного программного обеспечения. Датчики на основе 2-байтовой арифметики должны быть заведомо отброшены, а остальные проверены с помощью статистических тестов. Доброкачественные датчики для серьезных вычислений могут быть получены в известных научных центрах, занимающихся разработкой и применением метода Монте-Карло, или из специальной литературы.

§6.5. Метод обратных функций

Пусть необходимо осуществить выборку случайного числа x_R , распределенного на интервале $[a, b]$ с заданной плотностью $p(x)$. Соответствующая этой плотности функция распределения показана на рис.6.2. Она монотонна, и $F(a) = 0$, а $F(b) = 1$.

Рассмотрим вероятность того, что x_R , которую возьмем в качестве результата розыгрыша, принадлежит малому интервалу значений $(x, x+dx)$. Границы этого интервала отвечают на оси ординат значениям $F(x)$ и $F(x+dx)$. Получим от датчика случайное число ξ , равномерно распределенное на $[0, 1)$. Очевидно, вероятность того, что ξ окажется внутри указанного интервала значений, равна длине самого интервала: $F(x+dx) - F(x)$.

1. Пусть функция $F(x)$ – монотонно *возрастающая*. Это частный случай, при котором плотность вероятности $p(x)$ нигде на $[a, b]$ не обращается в 0. Тогда существует решение уравнения $x_\xi = F^{-1}(\xi)$, которое позволяет каждому числу ξ *однозначно* сопоставить значение на оси абсцисс x_ξ (см. рис.6.2). В силу этой однозначности вероятность того, что $x_\xi \in (x, x+dx)$ равна вероятности того, что $\xi \in (F(x), F(x+dx))$:

$$P\{x_\xi \in (x, x + dx)\} = P\{\xi \in (F(x), F(x + dx))\} = F(x + dx) - F(x) = p(x)dx.$$

Таким образом, x_ξ , полученное как решение уравнения

$$\xi = \int_a^{x_\xi} p(x)dx, \quad (6.11)$$

распределено с заданной плотностью $p(x)$.

2. Более общий случай: функция $F(x)$ – *неубывающая*. Он допускает, чтобы плотность вероятности $p(x)$ на отдельных участках отрезка $[a, b]$ равнялась 0.

Наиболее выразительным является пример плотности вероятности дискретной случайной величины (рис.6.3). Для случайных значений типа ξ_1 , попадающих на «вертикальные» отрезки, уравнение $x_\xi = F^{-1}(\xi)$ имеет однозначное решение. Для значений ξ_2 , соответствующим «плато» функции $F(x)$, такая однозначность утрачена.

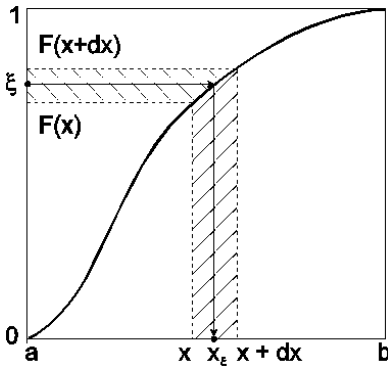


Рис.6.2. Метод обратных функций

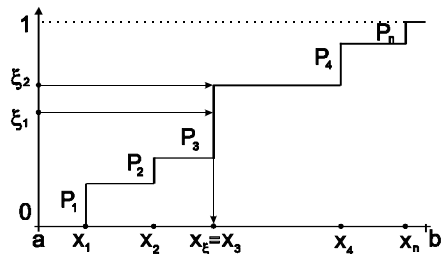


Рис.6.3. Метод обратных функций для дискретной случайной величины

Для того чтобы восстановить однозначность, будем выбирать x_ξ по следующему правилу:

$$x_\xi = \sup x, x: F(x) < \xi. \quad (6.12)$$

В случае дискретной случайной величины вероятность P_i выпадения конкретного значения x_i есть

$$P_i = F(x_i + 0) - F(x_i - 0),$$

$$F(x_i + 0) = F_i = \sum_{k=1}^i P_k; \quad F(x_i - 0) = F_{i-1} = \sum_{k=1}^{i-1} P_k. \quad (6.13)$$

Строгое неравенство в формуле (6.12) означает, что случайный номер точки i_ξ должен выбираться из следующего двойного неравенства:

$$i_\xi : F_{i_\xi-1} < \xi \leq F_{i_\xi}$$

или

$$i_\xi : \sum_{j=1}^{i_\xi-1} P_j < \xi \leq \sum_{j=1}^{i_\xi} P_j. \quad (6.14)$$

Формула (6.14) представляет собой алгоритм розыгрыша дискретной случайной величины, которая полностью задается своим номером $x_R = x_\xi$.

§6.6. Метод исключения

Он представляет собой точный метод розыгрыша функций, для которых не может быть использован метод обратных функций. Итак, пусть требуется разыграть «плохую» плотность вероятности $p(x)$, заданную на отрезке $[a, b]$ (рис.6.4), для которой уравнение $x = F^{-1}(\xi)$ не имеет аналитического решения.

Допустим, что удалось подобрать «хорошую» функцию $g(x)$, которая

- является плотностью вероятности на том же отрезке $[a, b]$, т.е. неотрицательна на нем и нормирована;
- удобна для розыгрыша (например, методом обратной функции: $x = G^{-1}(\xi)$);
- близка к функции $p(x)$.

Будем называть такую функцию $g(x)$ *моделирующей*. Тогда функция распределения для исходной плотности $p(x)$ может быть записана в виде:

$$F(x) = \int_a^x p(t) dt = \int_a^x g(t)h(t) dt,$$

где фигурирует *исключающая* функция $h(x) \equiv p(x) / g(x)$. Требование близости функций $p(x)$ и $g(x)$ предполагает, что на

отрезке $[a, b]$ функция $h(x)$ будет колебаться вокруг 1. Это не очень строгое требование. Мы, однако, жестко потребуем, чтобы она на данном отрезке была, по крайней мере, ограниченной, т.е. существовала мажоранта h_m , такая что $h(x) \leq h_m$ для любого $x \in [a, b]$. Отнормируем исключаяющую функцию на эту мажоранту: $\tilde{h}(x) = h(x)/h_m$. Полученная функция, очевидно, на отрезке $[a, b]$ не превышает 1 (рис.6.5).

С помощью моделирующей $g(x)$ и нормированной исключаяющей $\tilde{h}(x)$ функций сформулируем следующий алгоритм метода исключений:

- а) выберем случайное число ξ_1 ;
- б) разыграем случайное значение из функции $g(x)$: $x_\xi = G^{-1}(\xi_1)$;
- в) выберем случайное число ξ_2 ;
- г) если $\tilde{h}(x_\xi) < \xi_2$, исключаем точку x_ξ и возвращаемся на шаг «а», в противном случае принимаем ее в качестве результата розыгрыша: $x_R = x_\xi$.

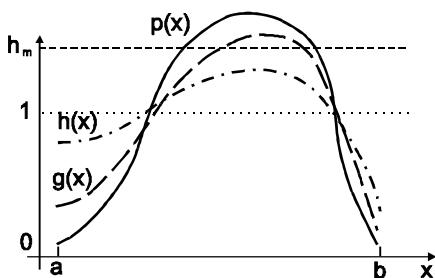


Рис.6.4. Исходная $p(x)$, моделирующая $g(x)$ и исключаяющая $h(x)$ функции

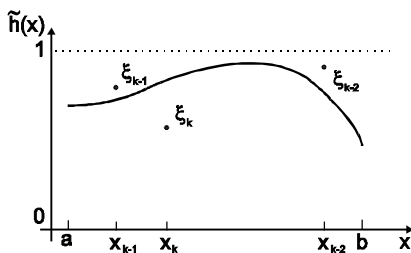


Рис.6.5. Метод исключения: точки x_{k-1} , x_{k-2} отброшены, точка x_k принята

Докажем, что полученная с помощью данного алгоритма величина x_R действительно имеет плотность распределения $p(x)$. Значение x_R может быть выбрано в результате одной из попыток: либо первой, либо второй, либо третьей и т.д. События, связанные с конкретным номером удачной попытки, являются неперекрывающимися. Полная вероятность того, что значение x_R принадлежит малому интервалу вблизи x , есть сумма

соответствующих вероятностей по всем этим неперекрывающимся событиям:

$$\begin{aligned}
 P\{x < x_R \leq x + dx\} &= P\{x_R = x_1 | x < x_1 \leq x + dx\} \cdot P\{x < x_1 \leq x + dx\} + \\
 &+ P\{x_R \neq x_1\} \cdot P\{x_R = x_2 | x < x_2 \leq x + dx\} \cdot P\{x < x_2 \leq x + dx\} + \dots = \\
 &= \sum_{i=1}^{\infty} \left(\prod_{k=1}^{i-1} P\{x_R \neq x_k\} \right) \cdot P\{x_R = x_i | x < x_i \leq x + dx\} \times \\
 &\times P\{x < x_i \leq x + dx\}.
 \end{aligned} \tag{6.15}$$

Вычислим вероятность того, что результат k -й попытки не будет принят:

$$P\{x_R \neq x_k\} = \int_a^b g(x) \cdot [1 - \tilde{h}(x)] dx = \int_a^b g(x) dx - \int_a^b \frac{p(x)}{h_m} dx = 1 - \frac{1}{h_m}.$$

Вероятность того, что результат любой попытки будет принят при условии, что он находится вокруг значения x , есть

$$P\{x_R = x_i | x < x_i \leq x + dx\} = \tilde{h}(x).$$

Вероятность же того, что выбранное значение лежит в заданном интервале, в силу использования для его розыгрыша моделирующей функции, равна:

$$P\{x < x_i \leq x + dx\} = g(x) dx.$$

Подставляя найденные вероятности в формулу (6.15), будем иметь:

$$P\{x < x_R \leq x + dx\} = \sum_{i=1}^{\infty} (1 - h_m^{-1})^{i-1} \tilde{h}(x) g(x) dx = h_m \tilde{h}(x) g(x) dx = p(x) dx.$$

Таким образом, доказательство получено и значит, алгоритм верен. Для преобразований была использована формула суммирования бесконечного ряда геометрической прогрессии.

Метод исключения точен: выбранные с его помощью случайные числа в точности соответствуют исходной плотности вероятности. Он, однако, обладает существенным недостатком, поскольку часть чисел приходится отбрасывать. Эффективность метода равна

$$\varepsilon = \frac{1}{h_m}.$$

В связи с этим ясно, что с точки зрения эффективности следует как можно точнее выбирать мажоранту h_m . Лучше всего,

если она будет равна максимальному значению $h(x)$ на данном отрезке $[a, b]$. Кроме того, эффективность будет тем выше, чем меньше значения $\tilde{h}(x)$ отклоняются от единицы, т.е. чем ближе к исходной функции $p(x)$ нам удалось подобрать моделирующую $g(x)$.

Впрочем, желание добиться высокой эффективности может привести к выбору громоздкого и дорогого с точки зрения вычислительных затрат розыгрыша моделирующей функции. Важно помнить, что всегда можно использовать тривиальную функцию $g(x) = (b - a)^{-1}$, которая не обязательно обладает высокой эффективностью, но зато исключительно проста в розыгрыше. Нередко дешевле выбрать лишнюю пару случайных чисел, чем вычислять сложную аналитическую функцию разложением в ряд. В конечном счете, все решает суммарное процессорное время, затрачиваемое на розыгрыш.

В заключение обратим внимание, что исходная функция $p(x)$, вообще говоря, не требует собственной нормировки, поскольку выборка случайных x_ξ происходит из другой (нормированной) функции $g(x)$, которая была названа моделирующей. Отбраковка выбранных значений также происходит с помощью нормированной исключаяющей функции $\tilde{h}(x)$.

§6.7. Метод суперпозиции

Идея метода заключается в разложении сложной функции на сумму (суперпозицию) более простых. Метод суперпозиции так же, как и метод исключения, относится к точным методам розыгрыша функций. Для его реализации необходимо, чтобы исходная плотность вероятности $p(x)$, заданная на отрезке $[a, b]$, была представима в виде:

$$p(x) = C_1 \cdot g_1(x) + C_2 \cdot g_2(x) + \dots + C_n \cdot g_n(x). \quad (6.16)$$

При этом все функции $g_i(x)$ являются неотрицательными и нормированными:

$$\int_a^b g_i(x) dx = 1; \quad g_i(x) \geq 0,$$

что позволяет каждую из них считать плотностью вероятности. Кроме того, коэффициенты C_i также неотрицательны, и их сумма нормирована на 1:

$$\sum_1^n C_i = 1; \quad C_i \geq 0.$$

Условия, наложенные на коэффициенты C_i , позволяют трактовать каждый из них как вероятность для дискретной случайной величины η принять какое-то конкретное значение i_ξ из набора $\{1, 2, \dots, n\}$.

Разложение (6.16), разумеется, имеет смысл, только если розыгрыш функций $g_i(x)$ проще розыгрыша исходной плотности $p(x)$.

Алгоритм метода суперпозиции для получения случайного значения x_{ξ} , распределенного по $p(x)$, следующий:

- а) выберем первое случайное число ξ_1 ;
- б) с его помощью разыграем случайный номер функции i_ξ из условия:

$$i_\xi : \sum_{j=1}^{i_\xi-1} C_j < \xi_1 \leq \sum_{j=1}^{i_\xi} C_j ; \quad (6.17)$$

- в) выберем другое случайное число ξ_2 ;
- г) с его помощью разыграем (например, методом обратных функций) функцию $g_{i_\xi}(x)$:

$$x_{\xi} = G_{i_\xi}^{-1}(\xi_2).$$

Полученное значение будем считать результатом розыгрыша: $x_R = x_{\xi}$.

Докажем, что найденное с помощью этого алгоритма x_R действительно имеет плотность распределения $p(x)$. Значение x_R может быть выбрано в результате розыгрыша одной из функций: либо первой, либо второй, ..., либо n -й. События, связанные с выпадением конкретного случайного номера i_ξ разыгрываемой функции, являются неперекрывающимися. Полная вероятность того, что значение x_R принадлежит малому интервалу вблизи x , есть сумма соответствующих вероятностей по всем этим неперекрывающимся событиям:

$$P\{x < x_R \leq x + dx\} = \sum_{k=1}^n P\{x < x_R \leq x + dx | i_\xi = k\} \cdot P\{i_\xi = k\}.$$

Вероятность того, что случайный номер функции окажется равным k , есть, очевидно,

$$P\{i_\xi = k\} = C_k.$$

Условная вероятность того, что значение x_R принадлежит малому дельта-интервалу вблизи x при конкретном (k -м) номере разыгрываемой функции:

$$P\{x < x_R \leq x + dx | i_\xi = k\} = g_k(x) dx.$$

Это позволяет привести полную вероятность к виду:

$$P\{x < x_R \leq x + dx\} = \sum_{k=1}^n g_k(x) C_k dx = p(x) dx,$$

который и доказывает правильность алгоритма.

Пример

Рассмотрим технологию реализации метода суперпозиции на примере розыгрыша функции $f(x) = 1 + x + x^2 + x^3$, заданной на отрезке $[0, 1]$.

1. Сконструируем из нее плотность вероятности $p(x)$ случайной величины. На данном отрезке она неотрицательна, и нужно только ее отнормировать, т.е. $p(x) = k f(x)$, где k определяется из условия:

$$\int_0^1 k \cdot f(x) dx = 1.$$

После вычислений найдем $k = 12/25$.

2. Сконструируем набор плотностей вероятности $g_i(x)$ на данном отрезке. Выделим в функции $f(x)$ четыре слагаемых-«заготовки» будущих функций:

$$\tilde{g}_1(x) = 1; \quad \tilde{g}_2(x) = x; \quad \tilde{g}_2(x) = x^2; \quad \tilde{g}_3(x) = x^3.$$

«Заготовки» хороши тем, что на $[0, 1]$ неотрицательность каждой из них обеспечена. Для превращения в настоящие плотности вероятности $g_i(x)$ остается их отнормировать:

$$g_i(x) = k_i \cdot \tilde{g}_i(x); \quad k_i : \int_0^1 k_i \cdot \tilde{g}_i(x) dx = 1.$$

После вычислений найдем: $k_1 = 1, k_2 = 2, k_3 = 3, k_4 = 4$.

3. Установим набор коэффициентов C_i . Для этого в числитель и знаменатель каждого слагаемого плотности $p(x)$ внесем соответствующий множитель k_i . Тогда

$$C_i = k/k_i$$

$$C_1 = 12/25; \quad C_2 = 6/25; \quad C_3 = 4/25; \quad C_4 = 3/25.$$

Нетрудно видеть, что коэффициенты C_i автоматически получились нормированными.

4. Разыграем номер функции i_ξ . Для этого обратимся к датчику случайных чисел за первым числом ξ_l . В данном случае правило розыгрыша (6.17) означает:

- $i_\xi = 1$, если $0 < \xi_l \leq 12/25$;
- $i_\xi = 2$, если $12/25 < \xi_l \leq 18/25$;
- $i_\xi = 3$, если $18/25 < \xi_l \leq 22/25$;
- $i_\xi = 4$, если $22/25 < \xi_l \leq 1$.

5. Разыграем x_ξ с помощью плотности, номер которой установлен на шаге 4. Получим из датчика второе случайное число ξ_2 . По нему методом обратных функций найдем:

- если $i_\xi = 1$, $x_\xi = \xi_2$;
- если $i_\xi = 2$, $x_\xi = \sqrt{\xi_2}$;
- если $i_\xi = 3$, $x_\xi = \sqrt[3]{\xi_2}$;
- если $i_\xi = 4$, $x_\xi = \sqrt[4]{\xi_2}$.

§6.8. Метод оценки математического ожидания

Рассмотрим произвольную случайную величину x_ξ , у которой, однако, существует математическое ожидание Mx_ξ .

Выберем N независимых реализаций этой величины $\{x_i\}_N$ и вычислим на них *выборочное среднее* случайной величины

$$\bar{x}_N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i. \quad (6.18)$$

Оно, конечно же, тоже является случайной величиной, поскольку зависит от конкретного выпавшего набора N случайных чисел. В отличие от него, математическое ожидание Mx_ξ есть величина детерминированная, однозначно определенная.

По теореме Колмогорова, которая представляет собой усиленный закон *больших чисел*, существования математического

ожидания достаточно, чтобы выборочное среднее (6.18) сходилось к математическому ожиданию случайной величины: $\overline{x_N} \xrightarrow{P} Mx_\xi$ при $N \rightarrow \infty$. Символ P означает сходимость по вероятности. Иными словами, при росте N вероятность того, что выборочное среднее отклонится от математического ожидания больше любого наперед заданного числа Δx_β , неограниченно стремится к нулю:

$$\text{для } \forall \Delta x_\beta : P\left\{ \left| \overline{x_N} - Mx_\xi \right| > \Delta x_\beta \right\} \rightarrow 0 \text{ при } N \rightarrow \infty.$$

Закон больших чисел, впрочем, не дает никакой количественной оценки величины этой вероятности в зависимости от Δx_β и числа выбранных реализаций N .

Такую оценку дает *центральная предельная теорема*. Она справедлива для любой случайной величины x_ξ , у которой существует дисперсия Dx_ξ . Математически формулировка центральной предельной теоремы выглядит так:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} P\left\{ \left| \overline{x_N} - Mx_\xi \right| < x_\beta \sqrt{\frac{Dx_\xi}{N}} \right\} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^{x_\beta} \exp\left(-\frac{t^2}{2}\right) dt = \Phi(x_\beta) = 1 - \beta. \quad (6.19)$$

По сути, теорема оценивает вероятность того, что отклонение выборочного среднего от математического ожидания будет находиться в пределах некоторого доверительного интервала

$$\Delta x_\beta = x_\beta \sqrt{\frac{Dx_\xi}{N}}. \quad (6.20)$$

Оценка этой вероятности (справедливая, правда, для больших N) выражается через известную функцию ошибок $\Phi(x_\beta)$, которая отличается от единицы на величину уровня значимости β . Последний показывает вероятность того, что по случайным причинам выборочное среднее выйдет за пределы доверительного интервала. Такое отклонение называют *значимым*.

То, что вероятность отклонения оценивается функцией ошибок, фактически означает, что сумма большого количества независимых одинаково распределенных случайных величин всегда распределена по нормальному закону. При этом неважно, по какому закону распределены сами случайные величины. На

самом деле, на практике уже $N = 10$ можно считать достаточно большим, чтобы пользоваться оценкой (6.19).

Как уже отмечалось, выборочное среднее $\overline{x_N}$ представляет собой случайную величину. Она обладает своей дисперсией $D\overline{x_N}$. Из формулы (6.18) и общих свойств дисперсии (см. §6.2) следует: $D\overline{x_N} = Dx_\xi / N$. Таким образом, среднее квадратическое отклонение для $\overline{x_N}$ есть $\sigma_{\overline{x_N}} = \sqrt{Dx_\xi / N}$. Теперь понятен и смысл величины x_β в формуле (6.20): она представляет собой доверительный интервал, выраженный в единицах среднего квадратического отклонения $\sigma_{\overline{x_N}}$.

Правда, для того, чтобы использовать формулу (6.19) необходимо знать дисперсию случайной величины. Если дисперсия заранее неизвестна, ее приходится оценивать по конечному числу реализаций (по *выборке*) случайной величины, т.е. *по выборочной дисперсии*.

Наилучшей оценкой для выборочной дисперсии случайной величины x_ξ является следующая:

$$(Dx_\xi)_N = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N x_i^2 - \frac{1}{N(N-1)} \left(\sum_{i=1}^N x_i \right)^2. \quad (6.21)$$

Выборочная дисперсии для выборочного среднего будет в N раз меньше:

$$(D\overline{x_N})_N = (Dx_\xi)_N / N. \quad (6.22)$$

Таким образом, имея большую выборку случайной величины, закон распределения которой неизвестен, можем

- оценить выборочное среднее по формуле (6.18),
- оценить дисперсию этого выборочного среднего, используя формулы (6.21) и (6.22),
- определить, с помощью формулы (6.19), с какой вероятностью выборочное среднее будет лежать в пределах некоторого доверительного интервала.

§6.9. Вычисление определенных интегралов методом Монте-Карло

Пусть нам предстоит вычислить определенный интеграл вида

$$J = \int_a^b f(x) dx.$$

Очевидно, всегда данный интеграл может быть приведен к виду

$$J = \int_a^b \tilde{f}(x) \cdot p(x) dx, \quad (6.23)$$

где от функции $p(x)$ требуется только удовлетворять условиям положительности и нормированности (6.5б) на интервале (a, b) . При этих предположениях функцию $p(x)$ можно рассматривать как плотность вероятности какой-то случайной величины x_ξ , распределенной на участке (a, b) . Значения вновь введенной функции $\tilde{f}(x_\xi) = f(x_\xi) / p(x_\xi)$, взятой от случайной величины x_ξ , будут также, очевидно, случайными. Интеграл (6.23) есть не что иное, как формула для математического ожидания (среднего значения) случайной функции $\tilde{f}(x_\xi)$

$$M\tilde{f} = J = \int_a^b \tilde{f}(x) \cdot p(x) dx. \quad (6.24)$$

Запись (6.24) означает, что интеграл J может быть вычислен точно так же, как вычислялось выборочное среднее по формуле (6.18). Для этого достаточно:

- получить набор из N случайных чисел $\{x_i\}$, распределенных с плотностью $p(x)$, т.е. разыграть функцию $p(x)$,
- определить на полученных числах выборочное значение

$$J_N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \tilde{f}(x_i), \quad (6.25)$$

а закон больших чисел гарантирует, что $\lim_{N \rightarrow \infty} J_N = J$.

Более того, если существует конечная дисперсия для случайной величины $\tilde{f}(x_\xi)$, то с помощью центральной предельной теоремы (6.19), может быть оценена погрешность

(доверительный интервал) полученного результата, соответствующий определенной доверительной вероятности $1 - \beta$.

Выбор функции плотности вероятности $p(x)$ при представлении интеграла в виде (6.23), конечно же, не единственный. В связи с этим естественным является вопрос о сравнении разных представлений (6.23), отличающихся дисперсией D величины $\tilde{f}(x_\xi)$ и процессорным временем t на розыгрыш из плотности вероятности $p(x)$ одной случайной точки x_ξ . Пусть, например, известны два представления (6.23), для которых соответствующие параметры равны D_1, t_1 и D_2, t_2 . Эффективность методов разумно сравнивать по общему процессорному времени, затрачиваемому на достижение одинаковой точности. Зададим для них одинаковую погрешность Δx_β при одинаковой доверительной вероятности $1 - \beta$, которая означает для двух методов одну и ту же величину x_β .

Общая трудоемкость расчетов есть произведение затрат процессорного времени на одну точку и необходимого числа точек, обеспечивающих заданную точность:

$$T_i = t_i N_i = D_i \frac{x_\beta^2}{\Delta x_\beta^2} t_i.$$

В последней формуле число точек заменено с помощью формулы (6.20). Таким образом, относительная эффективность FOM (от англ. *figure of merit*) метода определяется произведением:

$$FOM = [D \cdot t]^{-1}.$$

Рассмотрим несколько методов повышения эффективности путем уменьшения дисперсии.

6.9.1. Метод выделения главной части

Метод предполагает, что в интеграле

$$J = \int_a^b f(x) \cdot p(x) dx \quad (6.26)$$

возможно аналитическое интегрирование по существенной части функции $f(x)$, а методом Монте-Карло вычисляется только оставшаяся часть (в обозначении функции $f(x)$, в дальнейшем не

будет использоваться знак \sim). Другими словами, существует такая функция $h(x)$, близкая к $f(x)$, что интеграл

$$C = \int_a^b h(x) \cdot p(x) dx$$

вычисляется аналитически. «Близкая» означает следующее условие

$$\int_a^b |h(x) - f(x)| p(x) dx < \varepsilon,$$

выполняющееся для малых ε . Методом Монте-Карло оценивается интеграл только от разности двух функций, дисперсия которого и определяет дисперсию общего результата:

$$D = \int_a^b |h(x) - f(x)|^2 p(x) dx - [J - C]^2.$$

Очевидно, полученная дисперсия при хорошо подобранной функции $h(x)$ может быть сколь угодно малой.

6.9.2. Метод понижения порядка интегрирования

Рассматривает многомерные интегралы от функций нескольких переменных, совокупность которых обозначим вектором $\vec{r} = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$:

$$J = \int_G f(\vec{r}) \cdot p(\vec{r}) d\vec{r},$$

где G – n -мерная область интегрирования. Пусть, однако, имеется возможность хотя бы по части переменных вычислить данный интеграл аналитически. Обозначим их совокупность как \vec{r}_2 , а соответствующую подобласть – G_2

$$J = \int_{G_1} d\vec{r}_1 \int_{G_2} f(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \cdot p(\vec{r}_1, \vec{r}_2) d\vec{r}_2. \quad (6.27)$$

Определим частичную плотность вероятности, заданную на пространстве остальных переменных как

$$p_1(\vec{r}_1) = \int_{G_2} p(\vec{r}_1, \vec{r}_2) d\vec{r}_2,$$

и будем считать, что она известна. В силу сказанного можно считать известной и функцию

$$f_1(\vec{r}_1) = \frac{\int_{G_2} f(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \cdot p(\vec{r}_1, \vec{r}_2) d\vec{r}_2}{p_1(\vec{r}_1)}.$$

Теперь искомый функционал представим как интеграл только по совокупности переменных \vec{r}_1 :

$$J = \int_{G_1} f_1(\vec{r}_1) \cdot p_1(\vec{r}_1) d\vec{r}_1.$$

Его оценка строится как выборочное среднее значений функции $f_1(\vec{r}_1)$, взятых на наборе случайных точек $\{\vec{r}_1\}$, распределенных с плотностью $p_1(\vec{r}_1)$.

Для сравнения дисперсии D_1 такого результата с дисперсией D_0 непосредственно вычисляемого интеграла (6.27) запишем, на основе неравенства Коши-Буняковского, следующее соотношение:

$$\begin{aligned} [f_1(\vec{r}_1) \cdot p_1(\vec{r}_1)]^2 &= \left[\int_{G_2} f(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \cdot p^{1/2}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \cdot p^{1/2}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) d\vec{r}_2 \right]^2 \leq \\ &\leq \int_{G_2} f^2(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \cdot p(\vec{r}_1, \vec{r}_2) d\vec{r}_2 \times \int_{G_2} p(\vec{r}_1, \vec{r}_2) d\vec{r}_2. \end{aligned}$$

Из него следует, что

$$f_1^2(\vec{r}_1) \cdot p_1(\vec{r}_1) \leq \int_{G_2} f^2(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \cdot p(\vec{r}_1, \vec{r}_2) d\vec{r}_2.$$

Проинтегрировав последнее неравенство по переменным \vec{r}_1 , получим

$$\int_{G_1} f_1^2(\vec{r}_1) \cdot p_1(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 \leq \int_{G_1} \int_{G_2} f^2(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \cdot p(\vec{r}_1, \vec{r}_2) d\vec{r}_2 d\vec{r}_1,$$

что дает основание записать соотношение между дисперсиями:

$$D_1 \leq D_0.$$

Доказано, что при интегрировании по части переменных дисперсия не возрастает. На самом же деле такое интегрирование ведет к уменьшению дисперсии.

6.9.3. Метод выборки по важности

Представление исходного интеграла в виде (6.26) не является единственным. Если по каким-то причинам покажется, что новая функция $\tilde{p}(x)$ более удобна для розыгрыша случайных точек,

интеграл всегда может быть преобразован:

$$J = \int_a^b \frac{f(x) \cdot p(x)}{\tilde{p}(x)} \tilde{p}(x) dx. \quad (6.28)$$

Выборочное среднее при этом будет вычисляться для случайных значений новой функции

$$\tilde{f}(x) = \frac{f(x) \cdot p(x)}{\tilde{p}(x)}.$$

Величина самого интеграла при этом не изменится, а дисперсия новой оценки будет, очевидно, зависеть от конкретного выбора плотности $\tilde{p}(x)$:

$$D = \int_a^b \frac{f^2(x) \cdot p^2(x)}{\tilde{p}(x)} dx - J^2. \quad (6.29)$$

Для отыскания такой функции $\tilde{p}(x)$, которая обеспечивает минимум дисперсии (6.29), воспользуемся методом Лагранжа. Учтем условие нормировки плотности $\tilde{p}(x)$ как одну наложенную связь, и тогда предстоит найти минимум следующего лагранжиана:

$$L\{\tilde{p}\} = \int_a^b \frac{f^2(x) \cdot p^2(x)}{\tilde{p}(x)} dx + \lambda \cdot \int_a^b \tilde{p}(x) dx.$$

Приравнявая нулю его вариацию по функции $\tilde{p}(x)$, получим

$$-\frac{f^2(x) \cdot p^2(x)}{\tilde{p}^2(x)} + \lambda = 0.$$

Неопределенный множитель λ в последнем уравнении может быть найден из условия нормировки для $\tilde{p}(x)$. С учетом этого окончательно для искомой плотности можем записать:

$$\tilde{p}(x) = \frac{|f(x) \cdot p(x)|}{\int_a^b |f(x) \cdot p(x)| dx}.$$

Если подынтегральная функция $f(x)$ неотрицательна, наилучшая плотность вероятности

$$\tilde{p}(x) = \frac{f(x) \cdot p(x)}{\int_a^b f(x) \cdot p(x) dx} = \frac{f(x) \cdot p(x)}{J} \quad (6.30)$$

обеспечивает, как нетрудно видеть из формулы (6.29), нулевую дисперсию.

В общем случае произвольной функции $f(x)$ минимальная достижимая дисперсия равна

$$D_{\min} = \left[\int_a^b |f(x)p(x)| dx \right]^2 - J^2. \quad (6.31)$$

В задачах переноса излучения подынтегральные функции, чаще всего, неотрицательные, поэтому результат (6.30) с нулевой дисперсией выглядит заманчивым. Обратим, однако, внимание, что для конструирования оптимальной плотности вероятности, в соответствии с формулой (6.30), необходимо знать значение интеграла J , который априори, конечно же, неизвестен.

Полученный результат, тем не менее, интересен не только академически. Он дает важный практический вывод: разыгрываемые точки должны выбираться из плотности, в максимальной степени пропорциональной подынтегральному выражению. Таким образом, принцип выборки по важности состоит в следующем: чем больший вклад в интеграл дают соответствующие точки (чем больше их важность), тем чаще они должны выбираться.

Пусть, например, необходимо методом Монте-Карло вычислить интеграл

$$J = \int_0^1 \frac{1+x}{\sqrt{x}} dx.$$

Фрагмент графика подынтегральной функции приведен на рис. 6.6. Точки вблизи левой границы интегрирования должны выбираться чаще, чем вблизи правой.

Приведенный пример интересен тем, что подынтегральная функция имеет особенность в 0, что не мешает интегралу оставаться конечным. Если при интегрировании методом Монте-Карло точки будут выбираться равномерно в интервале $[0, 1]$, то дисперсия такого результата будет бесконечной:

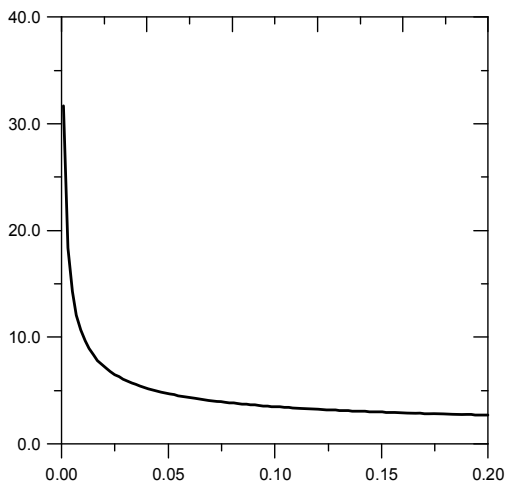


Рис.6.6. График функции $f(x) = (1+x)/\sqrt{x}$

$$D = \int_0^1 \frac{(1+x)^2}{x} dx - 7.1111.$$

Она расходится на нижнем пределе как логарифм. Если же, однако, включить особенность подынтегральной функции в плотность, взяв

$$p(x) = 0.5/\sqrt{x},$$

то дисперсия результата станет конечной:

$$D = \int_0^1 2 \frac{(1+x)^2}{\sqrt{x}} dx - 7.1111.$$

Включение особенности подынтегральной функции в плотность можно рекомендовать во всех случаях.

Контрольные вопросы

- Чем отличаются дискретные случайные величины от непрерывных?
- Какую функцию можно считать плотностью вероятности?
- Что такое датчик случайных чисел?
- Какие числа называют псевдослучайными?
- Каковы преимущества и недостатки физических датчиков случайных чисел?

- ❑ Что такое период псевдослучайной последовательности и от чего он зависит?
- ❑ Что собой представляет розыгрыш случайного числа?
- ❑ Назовите основные методы получения случайных чисел с заданным законом распределения.
- ❑ Каковы критерии выбора моделирующей функции для метода исключения?
- ❑ От чего зависит эффективность метода исключения?
- ❑ Какие этапы включает метод суперпозиции?
- ❑ Каково основное уравнение, реализующее метод обратных функций?
- ❑ Как должен выглядеть определенный интеграл, чтобы его можно было вычислить методом Монте-Карло?
- ❑ Как можно уменьшить дисперсию при вычислении интеграла методом Монте-Карло?
- ❑ В чем основная идея выборки по важности?
- ❑ Напишите формулу для выборочной дисперсии.

Глава 7. Общая схема применения метода Монте-Карло для расчета характеристик поля излучения

Вперед, вперед, моя история!

А.С. Пушкин

Решение уравнения переноса, т.е. плотность потока частиц $\varphi(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$ или плотность их столкновений $\psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$, есть функция шести переменных. Метод Монте-Карло не способен определить эту функцию поля излучения во всем фазовом пространстве. Он может вычислить только некоторый *функционал поля излучения*. Таким образом, нас будет интересовать по существу одно число – некоторая величина, зависящая от решения уравнения переноса.

Вспомним, как ранее в (5.3) был записан функционал поля излучения через интеграл по всему фазовому пространству:

$$J_P = \int_{\infty 0}^{\infty} \int_{4\pi} P^*(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \cdot \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) d\vec{r} dE d\Omega. \quad (7.1)$$

Решим задачу вычисления этого интеграла методом Монте-Карло подобно тому, как это делали для интеграла (6.24). Здесь роль плотности вероятности будет играть функция плотности входящих столкновений $\psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$, заданная на шестимерном фазовом пространстве $\{\vec{r}, E, \vec{\Omega}\}$.

Для этого нам потребуется:

- разыграть в фазовом пространстве набор случайных точек $(\vec{r}_\xi, E_\xi, \vec{\Omega}_\xi)$ в соответствии с плотностью входящих столкновений $\psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$, т.е. *смоделировать фазовые состояния*;
- вычислить в этих точках функцию детектора $P^*(\vec{r}_\xi, E_\xi, \vec{\Omega}_\xi)$, т.е. *построить оценку*;
- определить для числа испытаний N выборочное среднее

$$J_N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N P_i^*, \quad (7.2)$$

которое, как известно, сходится к истинному значению \dot{J}_p при достаточно большом N .

Для розыгрыша фазовых точек входящих столкновений воспользуемся системой интегральных уравнений переноса (4.26) – (4.28).

Если используем первое из уравнений $\chi_0(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \equiv Q(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$ для розыгрыша случайных фазовых точек $(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$, плотность расположения этих точек будет, очевидно, соответствовать плотности нулевых выходящих столкновений, т.е. функции источника. Для того чтобы разыграть функцию источника, необходимо, чтобы она была неотрицательной и нормированной. Первое требование, конечно, всегда выполняется: $Q(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \geq 0$. Второе же – нет. Если полная мощность источника не равна единице:

$$Q_0 = \int_{\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} \int_{4\pi} Q(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) d\vec{r} dE d\vec{\Omega} \neq 1,$$

будем действовать в два этапа. Сначала вычислим функционал (7.1) для решения $\psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$, полученного при нормированной функции источника: $\tilde{Q}(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \equiv Q(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) / Q_0$, а затем, пользуясь свойством линейности уравнения переноса и линейности функционала (7.1), просто умножим полученное значение \dot{J}_p на Q_0 . Таким образом, всегда можно считать, что функция источника не только неотрицательная, но и нормированная, и в дальнейшем знак \sim над нормированной функцией источника ставить не будем.

Итак, на **шаге 1**, используя функцию источника как плотность вероятности, разыграем фазовую точку $(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$, соответствующую плотности нулевых выходящих столкновений $\chi_0(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$.

Перейдем к **шагу 2** и рассмотрим второе из уравнений упомянутой выше системы (4.27):

$$\psi_n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \int_{\infty}^{\infty} T(\vec{r}' \rightarrow \vec{r} | E, \vec{\Omega}) \cdot \chi_{n-1}(\vec{r}', E, \vec{\Omega}) d\vec{r}' .$$

Сравним его с уравнением для частичной плотности вероятности, полученной из формулы Байеса (6.8):

$$p(x) = \int p(x, y) dy = \int p(x|y) \cdot p(y) dy. \quad (7.3)$$

Видно, что по форме они совершенно одинаковы. Наступлению события x в формуле (7.3) соответствует входящее столкновение в точке \vec{r} в уравнении (4.27). Оно связано с предшествующим событием – вылетом частицы (выходящее столкновение) из точки \vec{r}' . Интеграл берется по всем возможным исходам этого предыдущего события, т.е. по всем точкам \vec{r}' , где могло произойти выходящее столкновение. В формуле (7.3) такое связанное с x событие обозначено как y . События x и y скрепляет условная плотность вероятности $p(x|y)$, т.е. плотность вероятности того, что наступит событие x при условии, что наступило событие y . В уравнении (4.27) роль условной плотности вероятности играет транспортное ядро $T(\vec{r}' \rightarrow \vec{r} | E, \vec{\Omega})$. Оно действительно показывает плотность вероятности частице испытать столкновение в точке \vec{r} при условии, что частица покинет столкновение в точке \vec{r}' .

Таким образом, на **шаге 2**, зная, что частица выходит из столкновения в точке \vec{r}' , и желая получить точку ее очередного столкновения, мы должны разыграть транспортное ядро. Если под интегралом в правой части уравнения (4.27) стояла плотность нулевых выходящих столкновений, то, разыгрывая транспортное ядро, моделируем плотность первых входящих столкновений.

Подобно методу последовательных столкновений (см. алгоритм 4.29), перейдем к **шагу 3**, т.е. моделированию фазовой точки, соответствующей плотности первых выходящих столкновений. Воспользуемся уравнением (4.28)

$$\chi_n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \int_0^\infty \int_{4\pi} C(E', \vec{\Omega}' \rightarrow E, \vec{\Omega} | \vec{r}) \cdot \psi_n(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') dE' d\vec{\Omega}'$$

и также сравним его с уравнением (7.3). Теперь роль события x играет выходящее столкновение со своими параметрами (энергия E и направление движения $\vec{\Omega}$ частицы), а события y – входящее столкновение частицы с энергией E' и направлением движения $\vec{\Omega}'$. В качестве условной плотности вероятности выступает ядро столкновения $C(E', \vec{\Omega}' \rightarrow E, \vec{\Omega} | \vec{r})$. Оно равно плотности вероятности для частицы, влетевшей в столкновение с $(E', \vec{\Omega}')$,

покинуть его с параметрами $(E, \bar{\Omega})$. Интегрирование в формуле (4.28) ведется по всем входящим состояниям частицы.

Получив после шага 2 параметры входящего столкновения, на **шаге 3** разыгрываем ядро столкновения. Это означает моделирование фазового состояния, соответствующего плотности выходящих столкновений.

Проделав шаги 2 и 3 один раз, смоделируем плотность *первых* входящих и выходящих столкновений. Последовательно повторяя эти шаги, как и в методе последовательных столкновений (4.29), можно смоделировать столкновения любой кратности. При этом трудоемкость каждой пары шагов одинакова. Шаги всегда состоят из моделирования транспортного ядра и ядра столкновений, которые представляют собой условные (в методе Монте-Карло говорят *переходные*) вероятности.

Схема изложенного алгоритма приведена на рис. 7.1.

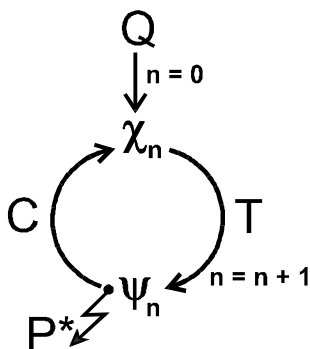


Рис.7.1. Общая схема вычисления функционала поля излучения методом Монте-Карло

Обратим внимание на то, что участвующие в розыгрыше (на шаге 2 и 3) ядра зависят только от входящего и выходящего состояний частицы. Вся предыдущая история частицы никак не влияет на вид ядер: сколько раз и как именно частица сталкивалась с веществом, большие или малые пробеги она совершала. Такой процесс, когда переходные вероятности между состояниями объекта (частицы) зависят только от его входящего и выходящего состояния и не зависят от всех предшествующих состояний, называется *марковским процессом*, а сама последовательность таких состояний – *цепью Маркова*.

Оценка $P^*(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$ вычисляется в той точке алгоритма, где фазовое состояние частицы соответствует плотности входящих столкновений, т.е. сразу после розыгрыша транспортного ядра T – в конце шага 2 и перед началом шага 3.

Для того чтобы марковский процесс, представленный на рис. 7.1, не продолжался бесконечно, он должен быть оборван. Существует по крайней мере 3 точки, в которых такой обрыв возможен (позже будет ясно, что на самом деле их может быть больше). Они показаны на рис. 7.2.

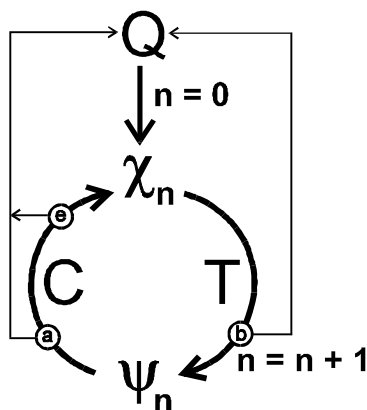


Рис.7.2. Схема обрывов марковской цепи

Точка «а» соответствует случаю, когда в результате розыгрыша ядра столкновения частица поглощается. Точка «b» встречается, если при розыгрыше транспортного ядра частица пересекает внешнюю границу области переноса. Обрыв «e» имеет место, когда после столкновения энергия частицы оказывается меньше заданного порога, равного, например, нижней границе чувствительности детектора. При обрыве цепи (или, как говорят, *истории частицы*) управление передается на розыгрыш функции источника для рождения новой частицы.

Важно отметить, что в качестве N в формуле (7.2) для выборочного среднего берется не общее количество произошедших столкновений, а количество смоделированных частиц (*историй*), а роль P^* играет сумма оценок, полученных в результате одной (i -й) истории.

Контрольные вопросы

- ❑ Какова основная идея вычисления функционала поля излучения методом Монте-Карло?
- ❑ Напишите базовые уравнения для моделирования фазовых состояний методом Монте-Карло.
- ❑ Что называется марковским процессом?
- ❑ Назовите основные алгоритмические этапы моделирования переноса излучения.
- ❑ Укажите возможные причины обрыва истории частицы.

Глава 8. Моделирование функции источника

*Прости ж и ты, моя свобода!
Куда, зачем стремлюся я?
Что мне сулит судьба моя?*
А.С. Пушкин

Будем считать, что функция источника нормирована

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{4\pi} \int Q(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) d\vec{r} dE d\vec{\Omega} = 1. \quad (8.1)$$

Технология розыгрыша функции источника будет зависеть от ее конкретного вида. Рассмотрим наиболее простой, но часто встречающийся на практике случай, когда источник описывается произведением трех независимых функций

$$Q(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = Q_r(\vec{r}) \cdot Q_E(E) \cdot Q_{\Omega}(\vec{\Omega}).$$

При этом каждая из них в силу общей нормировки (8.1) будет нормирована.

§8.1. Пространственные характеристики

Данные характеристики задаются функцией $Q_r(\vec{r})$. В результате ее розыгрыша будет получена случайная точка рождения частицы \vec{r}_{ξ} . Рассмотрим несколько типовых вариантов.

1. Точечный источник в точке \vec{r}_0 :

$$Q_r(\vec{r}) = \delta(\vec{r} - \vec{r}_0).$$

Его розыгрыш тривиален: $\vec{r}_{\xi} = \vec{r}_0$.

2. Источник представляет собой параллелепипед (со сторонами $x_1 \div x_2$, $y_1 \div y_2$, $z_1 \div z_2$), равномерно заполненный радиоактивным веществом. Функция источника равна константе и разложима на три независимые функции по отдельным декартовым координатам:

$$Q_r(\vec{r}) = \frac{1}{V} = Q_x(x) \cdot Q_y(y) \cdot Q_z(z).$$

Функция $Q_x(x) = 1/(x_2 - x_1)$ может быть легко разыграна методом обратной функции:

$$x_\xi = x_1 + \xi_1 \cdot (x_2 - x_1).$$

Для остальных координат аналогичный розыгрыш даст

$$y_\xi = y_1 + \xi_2 \cdot (y_2 - y_1),$$

$$z_\xi = z_1 + \xi_3 \cdot (z_2 - z_1).$$

Обратим внимание, что для сохранения независимости координат при их розыгрыше были использованы три разных случайных числа: ξ_1, ξ_2, ξ_3 .

3. Пусть равномерный источник образует неправильную геометрическую фигуру объемом V . Функция источника для него:

$$Q_r(\vec{r}) = \begin{cases} 1/V, & \vec{r} \in V \\ 0, & \vec{r} \notin V \end{cases} \quad (8.2)$$

Опишем эту фигуру параллелепипедом со сторонами $x_1 \div x_2, y_1 \div y_2, z_1 \div z_2$ и объемом V_0 . Можно считать, что функция $Q_r(\vec{r})$ задана на этом параллелепипеде при сохранении условия (8.2). Для розыгрыша точки рождения частицы применим метод исключения (см. §6.6), введя моделирующую функцию $g(\vec{r}) = 1/V_0$. При этом отнормированная исключающая функция будет равна

$$\tilde{h}(\vec{r}) = \frac{Q_r(\vec{r})}{g(\vec{r}) \cdot h_m} = \begin{cases} 1, & \vec{r} \in V \\ 0, & \vec{r} \notin V \end{cases} \quad (8.3)$$

В результате будем иметь следующий алгоритм розыгрыша точки \vec{r}_ξ :

а) разыгрываем случайную точку \vec{r}_ξ равномерно в параллелепипеде в соответствии с моделирующей функцией $g(\vec{r}) = 1/V_0$;

б) затем надо бы сравнить дополнительное случайное число ξ со значением нормированной исключающей функции $\tilde{h}(\vec{r}_\xi)$. Однако заведомо ясно, что в любой точке $\vec{r}_\xi \in V$ условие метода $\xi \leq \tilde{h}(\vec{r}_\xi)$ будет выполнено. При получении же точки вне объема V ее надо отбрасывать и выбирать точку заново.

Эффективность полученного алгоритма $\varepsilon = V/V_0$.

4. Обобщим предыдущий случай: источник не только неправильный по форме, но и неравномерный. Потребуем, однако, чтобы функция источника была ограниченной: $Q_r(\vec{r}) \leq Q_m$. Тогда в целом применим подход варианта 3.

Исключающая функция $h(\vec{r}) = Q_r(\vec{r})/g(\vec{r})$ останется внутри параллелепипеда ограниченной сверху, причем мажоранта $h_m = Q_m \cdot V_0$. Тогда отнормированная исключаяющая функция будет равна

$$\tilde{h}(\vec{r}) = \begin{cases} Q_r(\vec{r})/Q_m, & \vec{r} \in V \\ 0, & \vec{r} \notin V \end{cases}$$

Это предполагает следующий алгоритм розыгрыша:

- а) разыгрываем случайную точку \vec{r}_ξ равномерно в параллелепипеде;
- б) если $\vec{r}_\xi \notin V$, она отбрасывается, возвращаемся к п. «а»;
- в) если $\xi \leq Q_r(\vec{r}_\xi)/Q_m$, точка \vec{r}_ξ принимается в качестве результата, в противном случае отбрасывается, и возвращаемся к п. «а».

Эффективность полученного алгоритма $\varepsilon = 1/Q_m V_0$.

Набор рассмотренных вариантов позволяет разыгрывать источники для широкого круга практических задач.

В дополнение к ним, для источников правильных геометрических форм (цилиндр, шар, конус и т.п.) путем выбора подходящей системы координат могут быть составлены высокоэффективные алгоритмы прямого розыгрыша, не использующие метода исключения. Рассмотрим в качестве примера алгоритм получения случайной точки рождения частицы в цилиндрическом равномерном источнике, ось которого совпадает с осью Z . Функция такого источника выражается через его радиус R и координаты крышек z_1 и z_2 следующим образом:

$$Q_r(\vec{r}) = \frac{1}{V} = \frac{1}{(z_2 - z_1) \cdot \pi R^2}.$$

Нормированная на единицу функция источника играет роль плотности вероятности рождения частицы, которую выразим через соответствующую функцию распределения F_V

$$Q_r(\vec{r}) = \frac{dF_V}{dV}.$$

Точка \vec{r} в цилиндрических координатах задается координатой z , удалением от оси ρ и азимутальным углом ψ относительно плоскости ZOX , а элемент объема вокруг нее равен $dV = dz \rho d\rho d\psi$. Разделим переменные в функции распределения $F_V = F_z \cdot F_\rho \cdot F_\psi$. Для пространственной функции источника получим:

$$Q_r(\vec{r}) = \frac{dF_z dF_\rho dF_\psi}{dz \rho d\rho d\psi} = \frac{p_z(z) p_\rho(\rho) p_\psi(\psi)}{\rho} = \frac{1}{V},$$

где $p_z(z)$, $p_\rho(\rho)$ и $p_\psi(\psi)$ – плотности вероятности для переменных z , ρ и ψ . Явный вид этих плотностей таков:

$$p_z(z) = \frac{1}{z_2 - z_1}; \quad p_\rho(\rho) = \frac{2\rho}{R^2}; \quad p_\psi(\psi) = \frac{1}{2\pi}.$$

Отсюда методом обратной функции для розыгрыша случайных координат будем иметь:

$$z_\xi = z_1 - \xi(z_2 - z_1); \quad \rho_\xi = R\sqrt{\xi}; \quad \psi_\xi = 2\pi\xi.$$

Случайная точка \vec{r}_ξ получена.

Если источник представляет собой набор из нескольких простых по форме тел, может быть полезен метод суперпозиции.

§8.2. Угловое распределение излучения

Определяется функцией $Q_\Omega(\vec{\Omega})$. Разыграв ее, получаем случайное направление вылета рожденной частицы $\vec{\Omega}_\xi$. Рассмотрим два типовых варианта.

1. Мононаправленный источник («тонкий луч» вдоль направления $\vec{\Omega}_0$)

$$Q_\Omega(\vec{\Omega}) = \delta(\vec{\Omega} - \vec{\Omega}_0)$$

для розыгрыша прост: $\vec{\Omega}_\xi = \vec{\Omega}_0$.

2. Изотропный источник: $Q_\Omega(\vec{\Omega}) = 1/4\pi$.

Поскольку функция $Q_\Omega(\vec{\Omega})$ нормирована на единицу, она представляет собой плотность вероятности вылета частицы в

направлении $\vec{\Omega}$ или, используя соответствующую функцию распределения F_{Ω}

$$Q_{\Omega}(\vec{\Omega}) = \frac{dF_{\Omega}}{d\Omega}.$$

Вектор направления $\vec{\Omega}$ задается в сферических координатах независимыми углами θ и ψ , а дифференциал телесного угла вокруг него $d\Omega = \sin\theta d\theta d\psi = d\mu d\psi$ (см. рис. 3.3). Разделим переменные в функции распределения $F_{\Omega} = F_{\mu} \cdot F_{\psi}$. Для угловой функции источника получим:

$$Q_{\Omega}(\vec{\Omega}) = \frac{dF_{\Omega}}{d\Omega} = \frac{dF_{\mu} dF_{\psi}}{d\mu d\psi} = p_{\mu}(\mu) \cdot p_{\psi}(\psi) = \frac{1}{4\pi}, \quad (8.4)$$

где $p_{\mu}(\mu)$ и $p_{\psi}(\psi)$ – плотности вероятности для переменных μ и ψ .

Поскольку μ изменяется от -1 до 1 , а ψ – от 0 до 2π , а также из формулы (8.4), следует что

$$p_{\mu}(\mu) = 1/2; \quad p_{\psi}(\psi) = 1/2\pi. \quad (8.5)$$

Случайный $\mu_{\xi} = \cos\theta_{\xi}$ легко разыгрывается методом обратной функции:

$$\mu_{\xi} = 2\xi_1 - 1. \quad (8.6)$$

Для розыгрыша азимутального угла вылета тоже может быть использован метод обратной функции:

$$\psi_{\xi} = 2\pi \cdot \xi_2. \quad (8.7)$$

В дальнейшем, однако, при вычислении декартовых координат вектора $\vec{\Omega}_{\xi}$ понадобится не сам угол ψ_{ξ} , а его тригонометрические функции $\cos\psi_{\xi}$ и $\sin\psi_{\xi}$. Вычислять их по значению ψ_{ξ} – довольно длительная операция, поэтому разумно воспользоваться алгоритмом, предложенным Дж. Фон Нейманом для розыгрыша непосредственно косинуса и синуса угла, равномерно распределенного на сегменте $[0, 2\pi]$:

- а) выбираем два случайных числа ξ_1, ξ_2 ;
- б) если $\xi_1^2 + \xi_2^2 > 1$, отбрасываем их и возвращаемся на шаг «а»;

в) вычисляем

$$\cos\psi_{\xi} = \frac{\xi_1^2 - \xi_2^2}{\xi_1^2 + \xi_2^2}; \quad \sin\psi_{\xi} = \frac{2\xi_1 \xi_2}{\xi_1^2 + \xi_2^2} \cdot \text{sign}(0.5 - \xi_3), \quad (8.8)$$

где функция $\text{sign}(x)$ равна 1 при $x \geq 0$ и -1 при $x < 0$.

После того как получены случайные значения μ_ξ , $\cos\psi_\xi$ и $\sin\psi_\xi$, могут быть вычислены направляющие косинусы единичного вектора $\bar{\Omega}_\xi$:

$$\Omega_{\xi x} = \sqrt{1 - \mu_\xi^2} \cos\psi_\xi; \quad \Omega_{\xi y} = \sqrt{1 - \mu_\xi^2} \sin\psi_\xi; \quad \Omega_{\xi z} = \mu_\xi. \quad (8.9)$$

Кроме описанного выше метода моделирования случайного направления вылета частицы из изотропного источника, может быть использован следующий алгоритм:

а) выбираем три случайных значения $\gamma_1 = 2\xi_1 - 1$, $\gamma_2 = 2\xi_2 - 1$, $\gamma_3 = 2\xi_3 - 1$;

б) если $\gamma_1^2 + \gamma_2^2 + \gamma_3^2 > 1$, отбрасываем их и возвращаемся на шаг «а»;

в) вычисляем $d = \sqrt{\gamma_1^2 + \gamma_2^2 + \gamma_3^2}$;

г) вычисляем $\Omega_{\xi x} = \gamma_1/d$; $\Omega_{\xi y} = \gamma_2/d$; $\Omega_{\xi z} = \gamma_3/d$.

Как видим, реализован метод исключения. Эффективность розыгрыша равна $\pi/6$.

§8.3. Энергетическое распределение излучения

Определяется спектральной функцией $Q_E(E)$. После ее розыгрыша получим случайную энергию рожденной частицы E_ξ .

Рассмотрим два часто встречающихся на практике варианта задания спектра.

1. Радионуклид, обладающий N линиями излучения.

Для получения нормированной спектральной функции обратимся к справочнику и установим набор энергий E_i и выходов (% на распад) η_i каждой из линий: $\{E_i, \eta_i\}, i=1, \dots, N$. Относительные доли излучения каждой линии вычисляются просто:

$$P_i = \eta_i / \sum_{j=1}^N \eta_j.$$

С их помощью нормированная спектральная функция

$$Q_E(E) = \sum_{i=1}^N P_i \cdot \delta(E - E_i)$$

легко разыгрывается методом суперпозиции, поскольку энергия представляет собой дискретную случайную величину. Находим номер линии:

$$k_\xi : \sum_{j=1}^{k_\xi-1} P_j < \xi_1 \leq \sum_{j=1}^{k_\xi} P_j \quad (8.10)$$

и случайное значение энергии $E_\xi = E_{k_\xi}$.

2. Спектр задан в виде результата эксперимента.

Пусть требуется разыграть энергию по спектру, полученному в результате измерения (рис.8.1). Во-первых, следует убедиться, что представленный спектр отражает именно количество *частиц*, испущенных в единицу энергетического интервала, а не испущенную источником энергию, или поглощенную энергию в кристалле спектрометра, или какую-то другую величину.

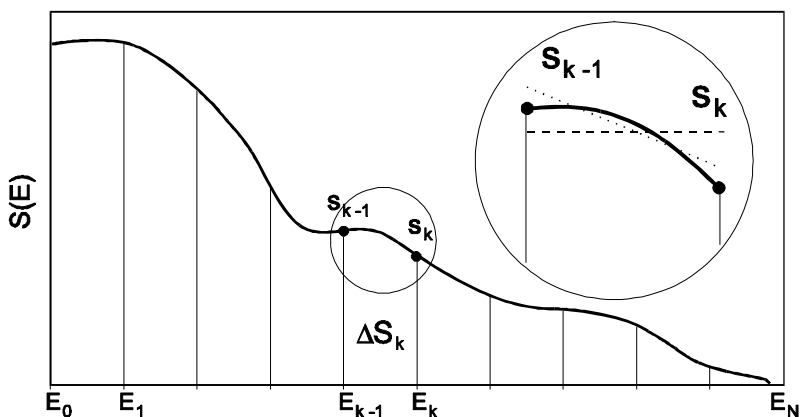


Рис.8.1. Обработка экспериментального спектра

Если с физическим смыслом экспериментальных данных все в порядке, необходимо отнормировать полученный спектр. Для этого весь энергетический диапазон разбивается на N интервалов, так что k -й интервал имеет границы $[E_{k-1}, E_k]$, а значения функции в них – s_{k-1} и s_k . Подсчитаем площадь под функцией на k -м интервале и обозначим ее ΔS_k . Вычислим вероятность того, что испускаемая частица принадлежит k -му интервалу:

$$P_k = \Delta S_k / \sum_{i=1}^N \Delta S_i .$$

После этого случайный номер интервала k_ξ находим из формулы (8.10). В зависимости от желаемой точности представления спектральную плотность вероятности *внутри интервала* можно приблизить:

а) константой (штриховая линия на рис.8.1),

б) линейной зависимостью (пунктирная линия на рис.8.1).

Оба этих приближения обеспечивают простые схемы розыгрыша энергии методом обратной функции:

а) $E_\xi = E_{k-1} + \xi_2(E_k - E_{k-1}),$

б) $E_\xi = E_{k-1} + \frac{E_k - E_{k-1}}{s_k - s_{k-1}} \left(\sqrt{s_{k-1}^2 + \xi_2(s_k^2 - s_{k-1}^2)} - s_{k-1} \right).$

Приведенный алгоритм фактически реализует метод суперпозиции, поэтому обратим внимание, что случайные числа при выборе интервала k_ξ (8.10) и самой энергии E_ξ должны быть разными.

Контрольные вопросы

- ❑ Перечислите основные этапы моделирования источника.
- ❑ Напишите плотность вероятности точки рождения частицы в равномерном объемном источнике.
- ❑ Как может быть разыграна точка рождения частицы в равномерном источнике неправильной геометрической формы?
- ❑ Какова последовательность розыгрыша энергии частицы, вылетающей из радионуклидного источника?
- ❑ Как можно разыграть энергию частицы, если спектр источника задан графически?
- ❑ Напишите алгоритм розыгрыша направления вылета частицы из изотропного источника.

Глава 9. Моделирование транспортного ядра

Когда ж, и где, в какой пустыне...?

А.С. Пушкин

§9.1. Общая схема розыгрыша длины свободного пробега в среде

Транспортное ядро имеет смысл вероятности для частицы, вылетающей из точки \vec{r}' в направлении $\vec{\Omega}$ с энергией E , испытать очередное столкновение в единице объема вокруг точки \vec{r} . Оно было введено ранее формулой (4.16) в следующем виде:

$$T(\vec{r}' \rightarrow \vec{r} | E, \vec{\Omega}) = \frac{\Sigma(\vec{r}, E)}{|\vec{r} - \vec{r}'|^2} \cdot e^{-\tau(\vec{r}' \rightarrow \vec{r}, E)} \cdot \delta(\vec{\Omega} - \frac{\vec{r} - \vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|}),$$

где оптическое расстояние $\tau(\vec{r}' \rightarrow \vec{r}, E)$ между точками \vec{r}' и \vec{r} задается выражением (4.1).

Представим конечную точку полета частицы \vec{r} через точку вылета \vec{r}' в сферических координатах: $\vec{r} = \vec{r}' + t \cdot \vec{\omega}$. В этой записи $t = |\vec{r} - \vec{r}'|$, т.е. расстояние между точками, а $\vec{\omega}$ есть единичный вектор направления: $\vec{\omega} = (\vec{r} - \vec{r}') / |\vec{r} - \vec{r}'|$.

Розыгрыш случайной точки следующего столкновения \vec{r}_ξ эквивалентен розыгрышу случайного направления $\vec{\omega}_\xi$ т.е. луча, на котором будет находиться эта точка, и случайного пробега t_ξ , который преодолет частица вдоль этого луча.

Исходя из физического смысла транспортного ядра, представим ядро в виде плотности вероятности:

$$T(\vec{r}' \rightarrow \vec{r} | E, \vec{\Omega}) = \frac{dF}{dV} = \frac{d^2 F}{t^2 dt d\omega} = \frac{p_T(t, \vec{\omega})}{t^2}.$$

Для совместной плотности вероятности получим следующее явное выражение:

$$p_T(t, \vec{\omega}) = \Sigma(\vec{r}, E) \cdot e^{-\tau(\vec{r}' \rightarrow \vec{r}, E)} \cdot \delta(\vec{\Omega} - \vec{\omega}).$$

Ввиду того, что в плотности присутствует δ -функция, розыгрыш случайного вектора $\vec{\omega}$ очевиден: $\vec{\omega}_\xi = \vec{\Omega}$. Тогда плотность вероятности для пробега:

$$p_t(t) = \Sigma(\vec{r}' + t \cdot \vec{\Omega}, E) \cdot e^{-\tau(\vec{r}' \rightarrow \vec{r}' + t \cdot \vec{\Omega}, E)}.$$

Если от линейного пробега t перейти к оптическому τ , то для него, используя выражение (4.1), можно найти плотность вероятности

$$p_\tau(\tau) = p_t(t) \frac{dt}{d\tau} = e^{-\tau}. \quad (9.1)$$

Случайный оптический пробег, распределенный с плотностью (9.1) на полуоси $[0, \infty)$, легко разыгрывается методом обратных функций:

$$\tau_\xi = -\ln \xi. \quad (9.2)$$

Определение случайного *линейного* пробега t_ξ по разыгранному *оптическому* пробегу τ_ξ зависит от свойств среды, в которой происходит перенос излучения.

Однородная среда предполагает, что сечение взаимодействия во всех точках среды одинаково, т.е. $\Sigma(\vec{r}, E) = \Sigma(E)$. В этом простом случае

$$t_\xi = \frac{\tau_\xi}{\Sigma(E)} = -\frac{1}{\Sigma(E)} \ln \xi. \quad (9.3)$$

Если среда ограничена, и полученный пробег превосходит расстояние до границы, частица считается вылетевшей, и ее история заканчивается.

Кусочно-однородная среда является более общим случаем, при котором вся среда состоит из областей, в каждой из которых сечение неизменно. Отрезок между двумя произвольными точками \vec{r}_1 и \vec{r}_2 разбивается на набор интервалов $\{\Delta l_i\}$, $i = 1, \dots, n$ с постоянными значениями сечений (рис.9.1).

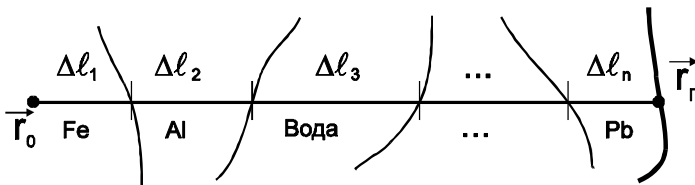


Рис.9.1. Схема пробега в кусочно-однородной среде

В этом случае линейный пробег t_ξ находится последовательным сравнением разыгранного оптического пробега

с оптической толщиной каждого интервала. Один из возможных алгоритмов нахождения t_ξ приведен на рис.9.2.

Практические задачи, требующие расчета переноса в средах с плавно меняющимися свойствами среды, встречаются редко. Примером такой задачи является расчет переноса излучения от источника, расположенного в верхних слоях атмосферы. На больших высотах плотность воздуха настолько мала, что на расстояниях, сравнимых с пробегом излучения, она может заметно изменяться. Закон изменения плотности с высотой хорошо известен и на ограниченных интервалах может быть описан аналитической зависимостью. Однако общим подходом в таких расчетах является разбиение атмосферы на слои с постоянной плотностью внутри слоя и сведением задачи к случаю кусочно-однородной среды.

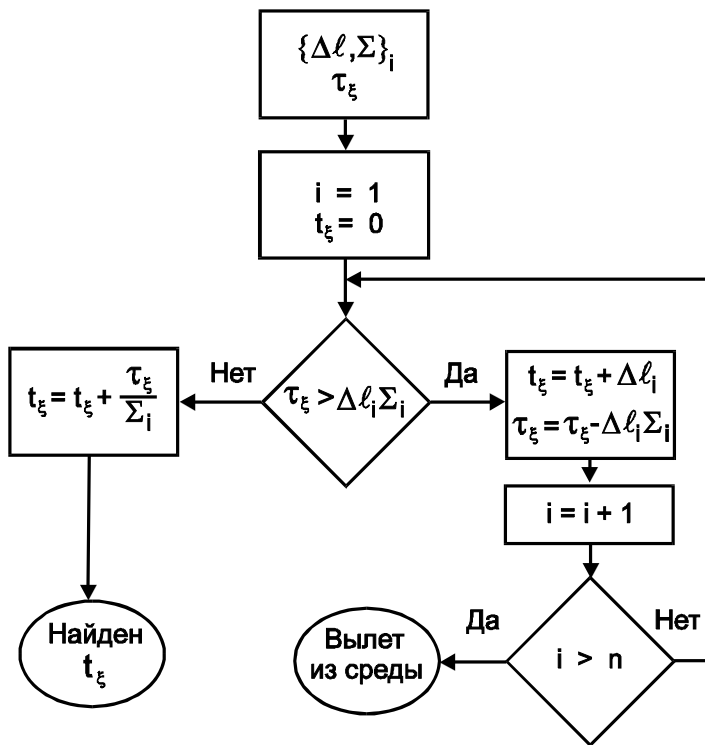


Рис.9.2. Блок-схема алгоритма розыгрыша пробега в кусочно-однородной среде

§9.2. Универсальные геометрические модули

Геометрический модуль программы, реализующей метод Монте-Карло, решает следующие задачи:

1. Описание геометрии, в которой происходит перенос излучения.

Модуль должен предоставить программе исчерпывающую информацию о том, какие вещества входят в область переноса и какова геометрическая конфигурация подобластей, которые заполнены этими веществами.

2. Определение вещества в любой точке и оптического вектора между двумя произвольными точками области переноса.

В данной главе будем считать, что пространство, в котором происходит перенос излучения, представляет собой кусочно-однородную по характеристикам вещества область. Тогда отрезок прямой, соединяющий две произвольные точки \vec{r}_1 и \vec{r}_2 , может быть представлен как набор из n интервалов Δ_i между границами однородных подобластей (рис. 9.1). В каждой подобласти неизменны номер m_i и плотность ρ_i вещества. Это набор будем называть оптическим вектором между двумя точками $\{\Delta_i, \rho_i, m_i\}$, $i = 1, \dots, n$.

Существуют два альтернативных подхода к построению геометрических модулей.

1. *Специализированные* геометрические модули предусматривают *программирование* отдельного модуля для каждой конкретной расчетной задачи наряду с программированием собственно алгоритма решения задачи. Этот подход позволяет написать более экономные по затрачиваемым ресурсам и быстрые модули. Полученные модули, однако, совершенно негибкие, и в случае изменения геометрии их приходится перепрограммировать заново. Такой подход оправдан, если геометрия простая (например, двухкомпонентная бесконечная область, разделенная плоской внутренней границей: воздух-земля, воздух-вода и т.п.), а создаваемая программа предназначена для решения одной конкретной задачи.

2. *Универсальные* геометрические модули, в отличие от специальных, получаются более медленными и требовательными к используемым ресурсам. Они, однако, обладают неоспоримым

преимуществом: задание геометрии области переноса происходит не на этапе программирования алгоритма решения, а при задании исходных данных задачи. Этим достигается универсальность и высокая гибкость к изменениям геометрии задачи, поскольку изменения не требуют репрограммирования выполняемого алгоритма. Достаточно изменить входные геометрические данные, для работы с которыми используется специальный язык.

Будем называть *ячейкой* или *зоной* область пространства (не обязательно односвязанную или замкнутую), однородную по своим физическим и логическим свойствам. Однородность по физическим свойствам означает, что все точки ячейки имеют одинаковое линейное сечение взаимодействия. Логическая однородность предполагает, что никакие точки ячейки не имеют, по сравнению с остальными точками, каких бы то ни было дополнительных свойств в связи с решаемой задачей. Представим себе, например, объем, равномерно заполненный веществом. Физически он однороден. В то же время в части этого объема может находиться источник излучения или задана область детектора, которые нарушают его логическую однородность.

Будем называть *системой* или *геометрией* исчерпывающую совокупность ячеек. Слово «исчерпывающая» говорит о том, что в системе нет точек, которые не принадлежат какой-нибудь из ячеек. Каждая точка принадлежит одной и только одной ячейке.

Для описания геометрии используются операторы булевой алгебры множеств:

- Пересечение (умножение): $A \cdot B \equiv A \cap B$ соответствует логическому «И»;
- Объединение (сложение): $A + B \equiv A \cup B$ соответствует логическому «ИЛИ»;
- Дополнение (отрицание): $-A \equiv \bar{A}$ соответствует логическому «НЕ»;

Старшинство булевых операций: 1) $\langle \neg \rangle$, 2) $\langle \cdot \rangle$, 3) $\langle + \rangle$. Обратим внимание, что запись вида $A - B$ имеет смысл $A \cdot (-B)$ (в отличие от обычной алгебры, где она эквивалентна $A + (-B)$).

9.2.1. Описание геометрии

В широко распространенных универсальных расчетных программах геометрия описывается с помощью задания набора простейших типовых элементов (*примитивов*) и действий над

ними булевых операторов алгебры множеств. Известны два подхода к трактовке примитива.

В первом из них в качестве примитивов используются *замкнутые простые объемы* (куб, параллелепипед, сфера, цилиндр и т.п.). Так организованы, например, известные программы «MORSE» (ORNL¹) или «MCU-GDL» (РНИИ КИ²).

Второй подход, реализованный в «MCNP» (LANL³) и «FASTER» (ORNL), в качестве примитивов рассматривает *типовые поверхности* (плоскости, а также цилиндрические, сферические, конические и другие поверхности), с помощью которых отделяются определенные области пространства.

В данном пособии будет рассмотрен только второй подход. Используемая его универсальная программа MCNP к настоящему времени обрела широкую популярность.

Итак, базовым элементом является типовая поверхность 1-го, 2-го порядка, исчерпывающие соответствующие классы поверхностей: плоские, цилиндрические, параболические, эллиптические, гиперболические, конические, а также уравнение 4-го порядка для задания поверхности тора. Список поверхностей-примитивов с их мнемоническими обозначениями приведен в табл. 9.1. В табл. 9.2 приведены соответствующие уравнения и список параметров, которые надо задать, чтобы однозначно определить поверхность.

Для задания с их помощью областей вводится понятие *знака* точки относительно поверхности. В общем случае уравнение поверхности имеет вид

$$F(x,y,z) = 0. \quad (9.4)$$

Поверхность делит все пространство на три области:

1. Точки, где $F(x,y,z) > 0$, назовем положительными относительно данной поверхности (*знак* = +1),
2. Точки, где $F(x,y,z) < 0$, назовем отрицательными относительно данной поверхности (*знак* = -1)
3. Точки, принадлежащие поверхности $F(x,y,z) = 0$, будут иметь нулевой *знак* (0).

¹ Окриджская национальная лаборатория (США).

² Российский научный центр «Курчатовский институт».

³ Лос-Аламосская национальная лаборатория (США).

Таблица 9.1. Список примитивов

Код	Тип	Описание
P	Плоскость	Произвольная
PX	Плоскость	Перпендикулярна оси X
PY	Плоскость	Перпендикулярна оси Y
PZ	Плоскость	Перпендикулярна оси Z
S0	Сфера	Центр в начале координат
SX	Сфера	Центр на оси X
SY	Сфера	Центр на оси Y
SZ	Сфера	Центр на оси Z
S	Сфера	Произвольная
CX	Цилиндр	Вокруг оси X
CY	Цилиндр	Вокруг оси Y
CZ	Цилиндр	Вокруг оси Z
C/X	Цилиндр	Параллелен оси X
C/Y	Цилиндр	Параллелен оси Y
C/Z	Цилиндр	Параллелен оси Z
KX	Конус	Вокруг оси X
KY	Конус	Вокруг оси Y
KZ	Конус	Вокруг оси Z
K/X	Конус	Параллелен оси X
K/Y	Конус	Параллелен оси Y
K/Z	Конус	Параллелен оси Z
SQ	Эллипсоид, гиперболоид, параболоид	Оси параллельны координатным осям
CQ	Произвольная поверхность 1-го или 2-го порядка	Оси ориентированы произвольно
TX	Тор	Ось параллельна оси X
TY	Тор	Ось параллельна оси Y
TZ	Тор	Ось параллельна оси Z

Таблица 9.2. Уравнения примитивов

Код	Уравнение	Параметры
P	$Ax + By + Cz + D = 0$	A, B, C, D
PX	$x - D = 0$	D
PY	$y - D = 0$	D
PZ	$Z - D = 0$	D
S0	$x^2 + y^2 + z^2 - R^2 = 0$	R
SX	$(x-x_0)^2 + y^2 + z^2 - R^2 = 0$	x_0, R
SY	$(y-y_0)^2 + x^2 + z^2 - R^2 = 0$	y_0, R
SZ	$(z-z_0)^2 + y^2 + x^2 - R^2 = 0$	z_0, R
S	$(x-x_0)^2 + (y-y_0)^2 + (z-z_0)^2 - R^2 = 0$	x_0, y_0, z_0, R
CX	$y^2 + z^2 - R^2 = 0$	R
CY	$x^2 + z^2 - R^2 = 0$	R
CZ	$y^2 + x^2 - R^2 = 0$	R
C/X	$(y-y_0)^2 + (z-z_0)^2 - R^2 = 0$	y_0, z_0, R
C/Y	$(x-x_0)^2 + (z-z_0)^2 - R^2 = 0$	x_0, z_0, R
C/Z	$(x-x_0)^2 + (y-y_0)^2 - R^2 = 0$	x_0, y_0, R
KX	$y^2 + z^2 - t(x-x_0)^2 = 0$	x_0, t, sign^*
KY	$x^2 + z^2 - t(y-y_0)^2 = 0$	y_0, t, sign^*
KZ	$x^2 + y^2 - t(z-z_0)^2 = 0$	z_0, t, sign^*
K/X	$(y-y_0)^2 + (z-z_0)^2 - t(x-x_0)^2 = 0$	$x_0, y_0, z_0, t, \text{sign}^*$
K/Y	$(x-x_0)^2 + (z-z_0)^2 - t(y-y_0)^2 = 0$	$x_0, y_0, z_0, t, \text{sign}^*$
K/Z	$(y-y_0)^2 + (x-x_0)^2 - t(z-z_0)^2 = 0$	$x_0, y_0, z_0, t, \text{sign}^*$
SQ	$A(x-x_0)^2 + B(y-y_0)^2 + C(z-z_0)^2 + 2D(x-x_0) + 2E(y-y_0) + 2F(z-z_0) + G = 0$	A, B, C, D, E, F, G, x_0, y_0, z_0
CQ	$Ax^2 + By^2 + Cz^2 + Dxy + Eyz + Fxz + Gx + Hy + Jz + K = 0$	A, B, C, D, E, F, G, H, J, K
TX	$(x - x_0)^2 / B^2 + \left(\sqrt{(y - y_0)^2 + (z - z_0)^2} - A \right)^2 / C^2 = 1$	x_0, y_0, z_0, A, B, C
TY	$(y - y_0)^2 / B^2 + \left(\sqrt{(x - x_0)^2 + (z - z_0)^2} - A \right)^2 / C^2 = 1$	x_0, y_0, z_0, A, B, C
TZ	$(z - z_0)^2 / B^2 + \left(\sqrt{(y - y_0)^2 + (x - x_0)^2} - A \right)^2 / C^2 = 1$	x_0, y_0, z_0, A, B, C

*) sign – указывает, которую половину конуса следует рассматривать: +1 (в направлении положительной оси), -1 (в направлении отрицательной оси)

9.2.2. Язык задания геометрии

Задание геометрии включает три основных блока: материалов, поверхностей и ячеек.

Блок материалов представляет собой список, в котором для каждого из используемых материалов указан уникальный номер-идентификатор и состав из тех веществ, которые имеются в библиотеке сечений.

В приведенном ниже примере используется четыре вещества, три из которых с точки зрения библиотеки сечений простые (1, 2 и 5), т.е. состоят из одного компонента. При этом NaI уже записан в библиотеку ранее, поэтому задан в примере как простое вещество. Окись кремния SiO₂ (вещество №4) задается как смесь с указанием массовых долей компонентов в относительных единицах.

```
1  NA_I  100.0
2  AL    100.0
5  FE    100.0
4  SI    46.7  O  53.3
```

Блок описания поверхностей содержит их перечисление. При этом каждая поверхность получает уникальный порядковый номер, содержит ссылку на одно из стандартных уравнений и значения соответствующих коэффициентов этого уравнения. Кроме того, описание поверхности может содержать ссылку на номер используемого преобразования координат, если оно необходимо.

Ниже на языке MCNP приведен пример описания некоторых поверхностей с номерами 9, 15 и 16:

```
9    0  C/Z    0 -3.8  11.30
15   0  PX     22
16   0  SQ    0.25  0.16  0  0  0  0  -1  0  5.5  0
```

Следующим за номером поверхности идет код преобразования координат. В приведенном примере он равен 0, т.е. ни одна из поверхностей не использует преобразования координат. Преобразования координат в MCNP задаются специальным блоком, который здесь не показан. Третий параметр в строке – мнемонический код типа поверхности. В данном случае 9-я поверхность это круговой цилиндр, параллельный оси Z, 15-я

поверхность – плоскость, перпендикулярная оси X , а 16-я – эллипсоид, параболоид или гиперboloид. Расшифровка кодов поверхности содержится в табл. 9.1. После кода идет набор коэффициентов, количество и смысл которых определяются видом поверхности (табл. 9.2).

Блок описания ячеек содержит строки следующего вида:

```

77 2 1.04 88 -89 -26 (-86:87:9)#6#72#38#39#40#41
79 1 1.04 157 20 -184
75 3 0.001 4 75 76:157 184:-157 153 181:-160 : -168
159

```

Первое число означает номер ячейки, второе – номер вещества в данной ячейке, третье – плотность вещества ячейки. Далее идет описание комбинаторики поверхностей, определяющей геометрическую конфигурацию ячейки. На поверхности ссылаются по их номерам из списка поверхностей. Если перед номером поверхности стоит знак минус "-", то берется область с отрицательным знаком по отношению к данной поверхности. По умолчанию – с положительным.

Отсутствие знаков операции между номерами поверхностей (пробел), например, "157 20", на языке MCNP следует читать как логическое умножение – пересечение областей, имеющих положительный знак относительно 157-й и 20-й поверхностей. Следовательно, ячейка 79 образована пересечением трех подпространств: обладающих положительным знаком к 157-й и к 20-й поверхностям и отрицательным – к 184-й.

Знак ":" на языке MCNP эквивалентен логическому сложению. Например, "-86:87:9" подразумевает объединение множеств точек, которые либо имеют положительный знак по 9-й поверхности, либо положительный знак по 87-й, либо отрицательный – по 86-й.

Язык MCNP использует знак "#" для логического отрицания на уровне ячейки, т.е. "-26#5#6" означает: "все точки, имеющие отрицательный знак по 26-й поверхности, кроме тех из них, которые входят в ячейки 5 или 6". Скобки имеют обычный смысл. Язык описания задания допускает несколько уровней вложенности скобок.

9.2.3. Алгоритмическая реализация

Введем в описание фазового состояния частицы кроме обычных координат $(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$ дополнительный параметр m , равный номеру ячейки, в которой находится частица.

Геометрический модуль должен быть способен решить две следующие основные вычислительно-логические задачи: для любого заданного фазового состояния частицы

- определить расстояние до границы текущей зоны,
- определить, каков номер зоны, начинающейся за этой границей.

Для их решения алгоритм геометрического модуля должен уметь:

А) устанавливать знак произвольной точки по отношению к любому примитиву;

Б) устанавливать знак данной точки по отношению к набору примитивов, связанных операцией умножения;

В) устанавливать знак данной точки по отношению к набору объектов, связанных операцией сложения;

Г) находить точки пересечения траектории движения частицы со всеми поверхностями-примитивами, входящими в описание данной ячейки;

Д) определять точки пересечения траектории с совокупностью объектов, связанных операцией умножения;

Е) определять точки пересечения с совокупностью объектов, связанных операцией сложения.

Рассмотрим возможную алгоритмическую реализацию подзадач «А» - «Е».

Задача «А», очевидно, решается наиболее просто. Для нахождения знака произвольной точки ее координаты подставляются в характеристическое выражение $F(x,y,z)$, соответствующее описанию данного примитива (9.4), и по его (выражения) знаку устанавливается знак. Если знак положительный, будем называть точку *внутренней* по отношению к данной поверхности, а если отрицательный – *внешней*.

Задача «Б» состоит в том, чтобы установить, внешней или внутренней является произвольная точка \vec{r} по отношению к произведению

$$M = \prod_{i=1}^n P_i . \quad (9.5)$$

В записи произведения P_i обозначают поверхности-примитивы, взятые со своими знаками. Точка будет внутренней по отношению к произведению M , если она является внутренней по отношению *ко всем* его сомножителям с учетом их знаков. Если в записи произведения перед сомножителем стоит «-», то внутренней точкой будет считаться та, которая имеет отрицательный знак характеристического выражения (9.4), а внешней – положительный.

Задача «В» состоит в том, чтобы установить, внешней или внутренней является произвольная точка \vec{r} по отношению к сумме

$$S = \sum_{j=1}^m M_j . \quad (9.6)$$

Под знаком суммирования стоят некоторые объекты, которые являются произведениями, состоящими из одного или нескольких сомножителей. Точка будет внутренней по отношению к сумме S , если она является внутренней по отношению *хотя бы к одному* из слагаемых с учетом их знаков.

Под знаками суммирования и произведения могут находиться в том числе и объекты, представляющие собой выражения, заключенные в скобки. Это не нарушает общего алгоритма, поскольку каждый такой скобочный объект является в общем случае суммой нескольких произведений. Следовательно, правила установления отношения точки и данного объекта уже описаны.

Задача «Г» – вычислительная. В ней устанавливаются точки пересечения траектории движения частицы с поверхностью, соответствующей произвольному примитиву из табл. 9.1.

Уравнения 1-го и 2-го порядка (9.4) в общем случае могут быть записаны в виде:

$$F(\vec{r}) = a_0 + a_x x + a_y y + a_z z + a_{xx} x^2 + a_{yy} y^2 + a_{zz} z^2 + a_{xy} xy + a_{yz} yz + a_{xz} xz = 0. \quad (9.7)$$

Траектория движения частицы, вылетающей из точки \vec{r}_0 с вектором $\vec{\Omega}$, описывается уравнением:

$$\vec{r} = \vec{r}_0 + R \cdot \vec{\Omega} \quad (9.8)$$

Найти точку пересечения траектории с поверхностью – это значит подставить выражение (9.8) в формулу (9.7) и решить полученное квадратное уравнение. Последнее может быть приведено к удобному виду относительно расстояния R от начальной точки \vec{r}_0 до точек пересечения:

$$F(\vec{r}) = A(\vec{r}_0, \vec{\Omega}) \cdot R^2 + 2 \cdot B(\vec{r}_0, \vec{\Omega}) \cdot R + F(\vec{r}_0) = 0. \quad (9.9)$$

В частном случае линейного уравнения коэффициент при второй степени $A(\vec{r}_0, \vec{\Omega})$ равен 0. Существует несколько методов решения квадратного уравнения:

$$R_{1,2} = \frac{-B \pm \sqrt{B^2 - AF}}{A}, \quad (9.10)$$

$$R_{1,2} = \frac{F}{-B \pm \sqrt{B^2 - AF}}, \quad (9.11)$$

$$Q = -B - \text{sign}(B)\sqrt{B^2 - AF}, \quad R_1 = Q/A, \quad R_2 = F/Q. \quad (9.12)$$

С точки зрения вычислений последний метод предпочтительней. Формулы (9.10) и (9.11) при малых значениях A или F предполагают для одного из корней операцию вычитания двух близких величин, что может привести к большим погрешностям результата. Формула (9.12) этого не требует. В ней $\text{sign}(B)$ есть $+1$ при $B > 0$ и -1 при $B < 0$.

Если дискриминант $B^2 - AF$ отрицательный, точек пересечения нет. При положительном дискриминанте имеются два корня, из которых надо оставить только положительные, поскольку именно они в уравнении (9.9) означают точки, лежащие вдоль направления движения частицы. Отрицательные корни лежат на полупрямой от точки \vec{r}_0 в направлении $-\vec{\Omega}$.

Если характеристическое уравнение (9.4) описывает тор, то решая его совместно с (9.8), получаем уравнение 4-й степени. Его можно решать методами Декарта–Эйлера или Феррари или же численно. Количество его возможных положительных корней – от 0 до 4.

Таким образом, в результате решения задачи «Г» было установлено количество положительных корней K и получен набор самих корней, упорядоченный по их возрастанию:

$$R_i, i = 1, \dots, K.$$

Задача «Д» заключается в обработке операции умножения. Представим себе, что у нас имеется произведение сомножителей, для каждого из которых уже известны количество и соответствующий список корней.

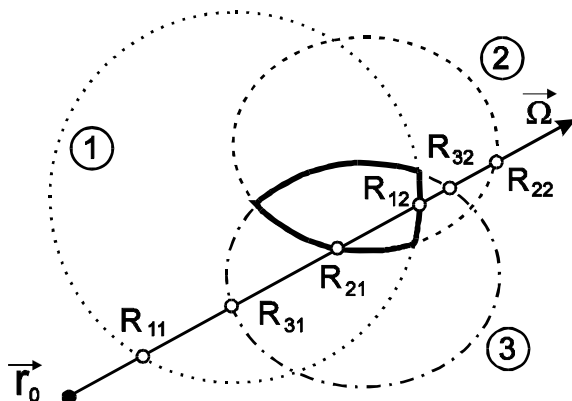


Рис.9.3. Схема обработки корней произведения

На рис.9.3 приведен пример трех поверхностей, пересечение которых образует заданную область, показанную сплошной жирной линией.

Алгоритм обработки корней произведения (пересечения) должен отбросить фиктивные корни (на рис.9.3 это корни R_{11} , R_{31} , R_{32} , R_{22}) и предъявить в качестве результата истинные корни входа и выхода из пересечения областей (R_{21} , R_{12}).

Результат достигается последовательным просмотром полного списка из n сомножителей (см. формулу (9.5)). Все корни каждого из сомножителей проверяются на удовлетворение знака по отношению ко всем остальным сомножителям, входящим в запись данного произведения. Иными словами, решается задача «Б» относительно произведения, из которого исключен проверяемый сомножитель. Если корень не удовлетворяет по знаку хотя бы одному из оставшихся сомножителей, он

отбрасывается. Например, корень R_{31} на рис.9.3, принадлежащий 3-й поверхности, будет проверен на знак по отношению к 1-й и 2-й. Он является внутренним для 1-й поверхности, но будет отброшен, т.к. оказывается внешним по отношению ко 2-му сомножителю. Очевидно, что только корни R_{21} , R_{12} полностью удовлетворяют поставленным условиям. Они и являются истинными.

Задача «Е» состоит в обработке операции сложения (объединения областей). Пусть у нас имеется сумма объектов, для каждого из которых уже известны количество и соответствующий список корней. Любое слагаемое есть произведение объектов, и алгоритм отыскания его корней нам знаком.

Рис.9.4 дает пример объединения трех слагаемых, которое показано сплошной жирной линией.

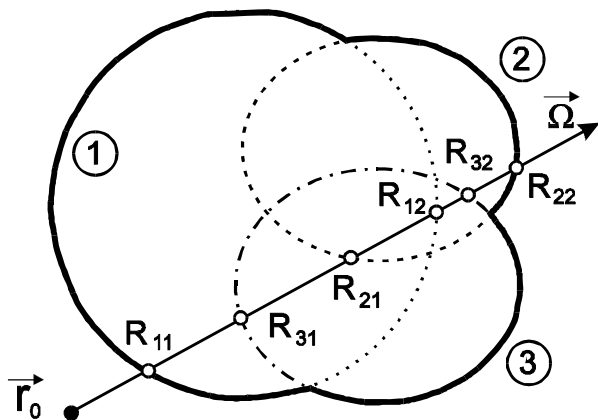


Рис.9.4. Схема обработки корней объединения

Алгоритм обработки корней должен отбросить фиктивные (на рис.9.4 это корни R_{21} , R_{31} , R_{32} , R_{12}) и предъявить в качестве результата истинные корни входа и выхода из объединения областей (R_{11} , R_{22}).

Это достигается последовательным просмотром всего списка из m слагаемых (см. формулу (9.6)). Все корни каждого из слагаемых проверяются на удовлетворение знака по отношению ко всем остальным слагаемым, входящим в запись данной суммы. Иными словами, решается задача «В» относительно суммы, из которой исключено проверяемое слагаемое. Если корень является

внутренним в отношении хотя бы одного из оставшихся слагаемых, он отбрасывается. Например, корень R_{31} на рис.9.4, принадлежащий 3-му слагаемому, будет проверен на знак по отношению к 1-му и 2-му. Он является внешним для 2-го слагаемого, но будет отброшен как внутренний по отношению к 1-му слагаемому. В данном примере только корни R_{11} , R_{22} полностью удовлетворяют поставленным условиям. Они и оказываются точками входа и выхода из объединения областей.

Некоторые языки задания исходных данных могут предусматривать отрицание не только на уровне поверхности или скобочного выражения, которое записывается знаком " - ", но и на уровне целой ячейки. В языке MCNP этому служит знак "#". Алгоритмически такое отрицание реализуется на базе рассмотренных выше методов.

Таким образом, мы научились находить координаты истинных точек входа и выхода из ячейки, и следовательно, знаем расстояние до границы текущей зоны.

Осталось разобраться с тем, как установить номер новой зоны (ячейки входа), начинающейся за границей текущей ячейки. Представим себе многозонную систему, показанную на рис.9.5. Пусть текущей ячейкой нахождения частицы является Z_4 . Известно, как определить точку выхода из ячейки R . Но какая же ячейка лежит по другую сторону этого корня? Можно последовательно просмотреть все ячейки, которые потенциально могут быть ее соседями, пока не найдется та, для которой корень R является истинным входным.

Алгоритм, реализующий метод задания примитивов типа «MORSE», т.е. в виде замкнутых простых объемов, ничего не знает о соседних ячейках. Он вынужден просматривать весь список известных системе ячеек. Полный список ячеек может быть очень большим (для сложной геометрии это несколько сотен), и его просмотр займет много процессорного времени.

Алгоритм, основанный на подходе типа «MCNP» и оперирующий поверхностями, по выходному корню однозначно устанавливает поверхность, которой принадлежит корень (на рис. 9.5 это поверхность №2). Для того, чтобы обнаружить ячейку входа, ему надо просмотреть только часть списка остальных ячеек: те, у которых в списке поверхностей упомянута поверхность корня с противоположным знаком. На примере рис.9.5 такими кандидатами будут ячейки Z_7 , Z_8 , Z_9 , Z_{11} , Z_{12} и другие, не

показанные на рисунке, примыкающие к поверхности № 2 справа. Этот список существенно меньше, но тоже может быть достаточно велик.

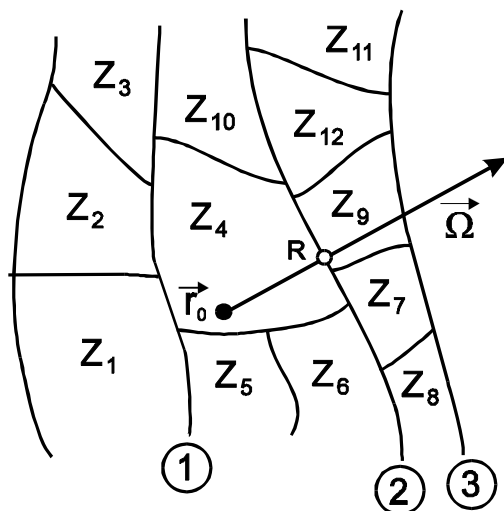


Рис.9.5. Схема определения номера ячейки входа

Для ускорения решения этой задачи разработаны самообучающиеся алгоритмы. Когда частица впервые покидает ячейку Z_4 , алгоритм просматривает всех потенциально возможных соседей. Обнаружив истинную ячейку входа, он записывает ее в магазин соседей ячейки Z_4 . При следующем попадании частицы в Z_4 алгоритм начнет поиски с имеющихся записей в магазине соседей. Постепенно алгоритм самообучится, т.е. заполнит магазины соседей для всех ячеек, и начнет работать значительно быстрее.

§9.3. Метод дельта-рассеяния

Реализация полноценного геометрического модуля с отслеживанием пересечений всех поверхностей требует значительных вычислительных ресурсов. С целью упрощения моделирования переноса излучения в многокомпонентной среде нередко используют метод дельта-рассеяния, суть которого состоит в следующем.

Обозначим максимальное сечение, которое существует в области переноса V , как

$$\Sigma_m(E) = \max_{\vec{r} \in V} \{\Sigma(\vec{r}, E)\} .$$

Запишем очевидное тождество

$$\begin{aligned} & [\Sigma_m(E) - \Sigma(\vec{r}, E)] \varphi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \\ & = \int_0^\infty \int_{4\pi} [\Sigma_m(E) - \Sigma(\vec{r}, E)] \varphi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') \delta(E - E') \delta(\vec{\Omega} - \vec{\Omega}') dE' d\vec{\Omega}' \end{aligned}$$

и сложив его с интегродифференциальной формой уравнения переноса (3.9), получим следующий результат:

$$\begin{aligned} & \vec{\Omega} \nabla \varphi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) + \Sigma_m(E) \cdot \varphi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \\ & = \int_0^\infty \int_{4\pi} \left\{ \Sigma_S(E', \vec{\Omega}' \rightarrow E, \vec{\Omega} | \vec{r}) + [\Sigma_m(E) - \Sigma(\vec{r}, E)] \delta(E - E') \delta(\vec{\Omega} - \vec{\Omega}') \right\} \times \\ & \times \varphi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') dE' d\vec{\Omega}' + Q(\vec{r}, E, \vec{\Omega}). \end{aligned}$$

Он тоже представляет собой уравнение переноса, однако в качестве полного сечения стоит величина $\Sigma_m(E)$, не зависящая от координаты. Кроме того, под интегралом столкновений присутствует видоизмененное дифференциальное сечение рассеяния, состоящее теперь из суммы сечения обычного физического рассеяния $\Sigma_S(E', \vec{\Omega}' \rightarrow E, \vec{\Omega} | \vec{r})$ и дифференциального сечения дельта-рассеяния, при котором ни энергия, ни направления движения частиц не меняются $[\Sigma_m(E) - \Sigma(\vec{r}, E)] \delta(E - E') \delta(\vec{\Omega} - \vec{\Omega}')$.

С точки зрения моделирования это означает, что пробег надо разыгрывать, исходя из однородной среды с одинаковым во всех точках сечением $\Sigma_m(E)$ независимо от пересечения каких бы то ни было границ. При этом нет необходимости вычислять (сортировать, селективировать и т.п.) корни пересечения траектории с границами. По разыгранному оптическому пробегу τ_ξ сразу находим линейный пробег

$$t_\xi = \frac{\tau_\xi}{\Sigma_m(E)} .$$

Все это значительно ускоряет нахождение очередной точки столкновения.

Однако существенно меняется розыгрыш направления и энергии частицы после рассеяния. Подробно моделирование ядра столкновений рассматривается в главе 10. Сейчас отметим только, что при использовании метода дельта-рассеяния необходимо разыграть тип происходящего взаимодействия:

- с вероятностью $\Sigma_a(\vec{r}, E)/\Sigma_m(E)$ должно происходить поглощение частицы;
- с вероятностью $\Sigma_s(\vec{r}, E)/\Sigma_m(E)$ частица будет испытывать обычное физическое рассеяние;
- с вероятностью $\Sigma_\delta(\vec{r}, E)/\Sigma_m(E)$ необходимо моделировать дельта-рассеяние.

Вероятность физического рассеяния выражена через интегральное сечение рассеяния $\Sigma_s(\vec{r}, E)$, а вероятность дельта-рассеяния – через соответствующее интегральное сечение данного процесса, равное

$$\Sigma_\delta(\vec{r}, E) = \int_0^\infty \int_{4\pi} [\Sigma_m(E) - \Sigma(\vec{r}, E)] \delta(E - E') \delta(\vec{\Omega} - \vec{\Omega}') dE' d\vec{\Omega}'.$$

При поглощении частицы ее история заканчивается, а при физическом рассеянии необходимо разыграть ее новую энергию и направление движения (см. главу 10). Если же происходит дельта-рассеяние, частица продолжает движение с прежними энергией и направлением.

Как видим, для розыгрыша результата столкновения потребуется знать величины физических сечений $\Sigma(\vec{r}, E)$, $\Sigma_s(\vec{r}, E)$ в точке взаимодействия. Это означает, что необходимо установить и ячейку, в которой столкновение произошло. Эта задача, впрочем, значительно проще, чем задача нахождения корней пересечения со всеми границами промежуточных ячеек.

При использовании метода дельта-рассеяния надо иметь в виду, что весь полученный выигрыш может быть сведен на нет, если в области переноса сечения отличаются очень сильно. Представим себе заполненную воздухом область переноса с характерным размером несколько сотен метров, в которой присутствует малый свинцовый объект. Формальное применение метода дельта-рассеяния приведет к тому, что моделирование во всем пространстве будет проведено по сечениям свинца, которые

на 4-5 порядков выше сечений для воздуха. Вместо реальных пробегов в воздушной среде порядка 100 м будут моделироваться сантиметровые пробеги. При столкновении в воздухе с вероятностью только на $10^{-5} \dots 10^{-4}$ отличающейся от 1 будет моделироваться дельта-рассеяние. На это моделирование впустую и будут расходоваться все вычислительные ресурсы.

Контрольные вопросы

- ❑ Напишите формулу розыгрыша оптического пробега.
- ❑ По какому алгоритму разыгрывается пробег частиц в кусочно-однородной среде?
- ❑ Что такое знак поверхности?
- ❑ Задайте фигуру в виде шара, усеченного двумя плоскостями, с помощью входного языка MCNP.
- ❑ Как исключить ложные корни пересечения траектории движения частицы с простой поверхностью?
- ❑ Как исключаются ложные корни при обработке операции логического умножения?
- ❑ Как исключаются ложные корни при обработке операции логического сложения?
- ❑ В чем преимущества использования метода дельта-рассеяния?
- ❑ Каковы особенности применения метода дельта-рассеяния в многокомпонентной среде?

Глава 10. Моделирование ядра столкновений

*Паду ли я стрелой пронзенный,
Иль мимо пролетит она...*

А.С. Пушкин

§10.1. Общая схема моделирования столкновения

Ядро столкновений в записанном ранее (4.17) виде для неразмножающих сред представляет собой вероятность для частицы, влетающей в столкновение в точке \vec{r} с параметрами $(E', \vec{\Omega}')$, покинуть его, двигаясь внутри единичного телесного угла вокруг направления $\vec{\Omega}$ и имея энергию в единичном энергетическом интервале вокруг значения E :

$$C(E', \vec{\Omega}' \rightarrow E, \vec{\Omega} | \vec{r}) = \frac{\Sigma_s(E', \vec{\Omega}' \rightarrow E, \vec{\Omega} | \vec{r})}{\Sigma(\vec{r}, E')}. \quad (10.1)$$

Будем считать, что столкновение происходит в многокомпонентном веществе, содержащем N разных элементов. Все сечения взаимодействия представляют собой суммы парциальных сечений на каждом элементе. В частности, для полного сечения взаимодействия и дифференциального сечения рассеяния можно записать:

$$\Sigma(\vec{r}, E') = \sum_{i=1}^N \Sigma_i(\vec{r}, E'); \quad \Sigma_s(E', \vec{\Omega}' \rightarrow E, \vec{\Omega} | \vec{r}) = \sum_{i=1}^N \Sigma_{si}(E', \vec{\Omega}' \rightarrow E, \vec{\Omega} | \vec{r}). \quad (10.2)$$

Это позволяет сделать некоторые преобразования над формулой (10.1) для подлежащего розыгрышу C -ядра:

$$C(E', \vec{\Omega}' \rightarrow E, \vec{\Omega} | \vec{r}) = \sum_{i=1}^N \frac{\Sigma_{si}(E', \vec{\Omega}' \rightarrow E, \vec{\Omega} | \vec{r}) \cdot \Sigma_i(\vec{r}, E')}{\Sigma_i(\vec{r}, E') \cdot \Sigma(\vec{r}, E')}. \quad (10.3)$$

В числитель и знаменатель последней суммы добавлено полное сечение взаимодействия на i -м элементе $\Sigma_i(\vec{r}, E')$. После этого формулу (10.3) можно представить в виде, удобном для метода суперпозиции (см. (6.16)), обозначив в виде функций

$$g_i(E', \vec{\Omega}' \rightarrow E, \vec{\Omega} | \vec{r}) = \frac{\Sigma_{si}(E', \vec{\Omega}' \rightarrow E, \vec{\Omega} | \vec{r})}{\Sigma_i(\vec{r}, E')} \quad (10.4)$$

и коэффициентов

$$K_i = \frac{\Sigma_i(\vec{r}, E')}{\Sigma(\vec{r}, E')}.$$

В отличие от формулы (6.16), мы использовали для обозначения коэффициентов разложения K_i , чтобы не возникло путаницы с C -ядром. Все эти коэффициенты, очевидно, положительны и нормированы на единицу. Таким образом, C -ядро будем разыгрывать методом суперпозиции:

$$C(E', \vec{\Omega}' \rightarrow E, \vec{\Omega} | \vec{r}) = \sum_{i=1}^N K_i \cdot g_i(E', \vec{\Omega}' \rightarrow E, \vec{\Omega} | \vec{r}). \quad (10.5)$$

Розыгрыш начинается с выбора случайного номера функции i , что в данном случае соответствует типу атома, на котором происходит взаимодействие. Точно так же, как мы делали раньше (см. (6.17)), выберем случайный номер атома из условия

$$i_\xi: \sum_{j=1}^{i_\xi-1} K_j < \xi_1 \leq \sum_{j=1}^{i_\xi} K_j.$$

В терминах сечений оно выглядит так:

$$i_\xi: \sum_{j=1}^{i_\xi-1} \frac{\Sigma_j(\vec{r}, E')}{\Sigma(\vec{r}, E')} < \xi_1 \leq \sum_{j=1}^{i_\xi} \frac{\Sigma_j(\vec{r}, E')}{\Sigma(\vec{r}, E')}. \quad (10.6)$$

Нетрудно видеть, что элемент с наибольшим парциальным сечением в смеси будет выбираться чаще всего и наоборот.

После того как номер элемента i_ξ выбран, следует приступить к розыгрышу функции $g_{i_\xi}(E', \vec{\Omega}' \rightarrow E, \vec{\Omega} | \vec{r})$.

Дифференциальное сечение рассеяния, которое стоит в числителе выражения (10.4), вообще говоря, представляет собой сумму нескольких разных процессов рассеяния. Для гамма-излучения радионуклидных энергий это когерентное рассеяние и некогерентное рассеяние на связанных электронах. Кроме того, если пренебречь величиной пробега позитрона, возникающего при эффекте образования пар, и рассматривать этот эффект и последующую аннигиляцию $e^+ + e^- \rightarrow 2\gamma$ как единый процесс рассеяния, то дифференциальное сечение такого рассеяния будет равно

$$\Sigma_n(E', \vec{\Omega}' \rightarrow E, \vec{\Omega} | \vec{r}) = \frac{2 \times \Sigma_n(\vec{r}, E')}{4\pi} \delta(E - 0.511). \quad (10.7)$$

В данной формуле учтено, что образуется два аннигиляционных фотона, которые имеют энергию строго 0.511 МэВ и вылетают изотропно. В числителе стоит полное сечение образования электрон-позитронных пар $\Sigma_n(\vec{r}, E')$. Следовательно, для гамма-излучения дифференциальное сечение рассеяния может включать три слагаемых. Для нейтронов (в неделящихся средах) оно будет состоять из двух компонентов – упругого и неупругого рассеяний.

Таким образом, дифференциальное сечение рассеяния на атоме i -го элемента в общем случае есть сумма по нескольким (M) типам рассеяния:

$$\Sigma_{si}(E', \vec{\Omega}' \rightarrow E, \vec{\Omega} | \vec{r}) = \sum_{j=1}^M \Sigma_{sij}(E', \vec{\Omega}' \rightarrow E, \vec{\Omega} | \vec{r}),$$

так что $\Sigma_{sij}(E', \vec{\Omega}' \rightarrow E, \vec{\Omega} | \vec{r})$ есть дифференциальное сечение рассеяния j -го типа на атоме i -го элемента. Для каждого типа рассеяния существует полное сечение рассеяния $\Sigma_{sij}(\vec{r}, E')$, которое есть просто интеграл от дифференциального по всем конечным состояниям.

Обсудим технологию розыгрыша функции $g_{i\xi}(E', \vec{\Omega}' \rightarrow E, \vec{\Omega} | \vec{r})$. С учетом наличия нескольких типов рассеяния преобразуем задающее ее выражение (10.4)

$$g_i(E', \vec{\Omega}' \rightarrow E, \vec{\Omega} | \vec{r}) = \sum_{j=1}^M \frac{\Sigma_{sij}(E', \vec{\Omega}' \rightarrow E, \vec{\Omega} | \vec{r})}{\Sigma_{sij}(\vec{r}, E')} \times \frac{\Sigma_{sij}(\vec{r}, E')}{\Sigma_i(\vec{r}, E')}. \quad (10.8)$$

Поскольку функция имеет явный вид суммы нескольких слагаемых, приведем и ее к виду, удобному для использования метода суперпозиции. Первый множитель под знаком суммирования есть нормированная на единицу плотность вероятности:

$$\tilde{g}_{ij}(E', \vec{\Omega}' \rightarrow E, \vec{\Omega} | \vec{r}) = \frac{\Sigma_{sij}(E', \vec{\Omega}' \rightarrow E, \vec{\Omega} | \vec{r})}{\Sigma_{sij}(\vec{r}, E')}. \quad (10.9)$$

Второй множитель – это неотрицательный коэффициент разложения

$$\tilde{K}_{ij} = \frac{\Sigma_{sij}(\vec{r}, E')}{\Sigma_i(\vec{r}, E')}.$$

Действуя по общей схеме метода суперпозиции, необходимо сначала выбрать случайный j_{ξ} , т.е. номер типа рассеяния, по следующему правилу:

$$j_{\xi} : \sum_{k=1}^{j_{\xi}-1} \frac{\Sigma_{sik}(\vec{r}, E')}{\Sigma_i(\vec{r}, E')} < \xi_2 \leq \sum_{k=1}^{j_{\xi}} \frac{\Sigma_{sik}(\vec{r}, E')}{\Sigma_i(\vec{r}, E')}. \quad (10.10)$$

Однако, в отличие от выбора номера элемента по правилу (10.6), здесь будут возникать ситуации, когда ни для одного из $j \in \{1, \dots, M\}$ двойное неравенство (10.10) не будет удовлетворяться. Причина в том, что коэффициенты \tilde{K}_{ij} не нормированы:

$$\sum_{j=1}^M \tilde{K}_{ij} < 1.$$

Для нормирования в сумме не хватает члена, связанного с поглощением частиц:

$$\tilde{K}_{ai} = \frac{\Sigma_{ai}(\vec{r}, E')}{\Sigma_i(\vec{r}, E')}.$$

Следовательно, если выпадает такое ξ , что неравенство (10.10) не может быть удовлетворено ни при одном типе *рассеяния*, это означает, что произошло *поглощение* частицы, и ее история должна быть прекращена. Вероятность таких событий будет равна \tilde{K}_{ai} .

§10.2. Розыгрыш комптоновского рассеяния

Комптоновское рассеяние гамма-излучения представляет собой процесс, при котором каждый электрон считается свободным и выступает как независимый рассеиватель. Дифференциальное сечение такого рассеяния $\sigma_{KN}(\vec{\Omega}, E \rightarrow \vec{\Omega}', E')$ может быть записано двояко:

$$\frac{d^2\sigma}{dE'd\Omega'} = \frac{r_0^2}{2} \left(\frac{E'}{E} \right)^2 \left(\frac{E'}{E} + \frac{E}{E'} - \sin^2 \theta_s \right) \times \delta \left(E' - \frac{E}{1 + E(1 - \vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega})/c} \right)$$

(10.11)

или

$$\frac{d^2\sigma}{dE'd\Omega'} = \frac{r_0^2}{2} \frac{\varepsilon}{E^2} \left(\frac{E'}{E} + \frac{E}{E'} - 1 + \left(1 - \frac{\varepsilon}{E'} + \frac{\varepsilon}{E} \right)^2 \right) \times \delta \left(\bar{\Omega}\bar{\Omega}' - 1 + \frac{\varepsilon}{E'} - \frac{\varepsilon}{E} \right). \quad (10.12)$$

В формулах (10.11) и (10.12) θ_s обозначает угол рассеяния между векторами $\bar{\Omega}$ и $\bar{\Omega}'$, а ε – энергетический эквивалент массы покоя электрона (0.511 МэВ). Сечение рассеяния в них – дважды дифференциальное: по энергии и направлению вылета фотона.

Для перехода к дифференциальному только по энергии сечению рассеяния проинтегрируем формулу (10.12) по всем направлениям $\bar{\Omega}'$:

$$\frac{d\sigma}{dE'} = \pi r_0^2 \frac{\varepsilon}{E^2} \left(\frac{E'}{E} + \frac{E}{E'} - 1 + \left(1 - \frac{\varepsilon}{E'} + \frac{\varepsilon}{E} \right)^2 \right). \quad (10.13)$$

Введем следующие обозначения:

$$X = \frac{E}{E'}; \quad \alpha = \frac{E}{\varepsilon}; \quad \beta = 1 + 2\alpha; \quad \gamma = 1 - \frac{1}{\beta^2}.$$

Для розыгрыша энергии E' достаточно, очевидно, разыграть относительное изменение энергии X , которое лежит в пределах от 1 до β .

10.2.1. Метод Коблингера

Л. Коблингер (Koblinger) [31], переходя в формуле (10.13) к производной по X , получил следующее выражение:

$$\frac{d\sigma}{dX} = \frac{\pi r_0^2}{\alpha} \left(K_1 + K_2 \frac{1}{X} + K_3 \frac{1}{X^2} + K_4 \frac{1}{X^3} \right), \quad (10.14)$$

где

$$K_1 = \frac{1}{\alpha^2}; \quad K_2 = 1 - \frac{2(1+\alpha)}{\alpha^2}; \quad K_3 = \frac{1+2\alpha}{\alpha^2}; \quad K_4 = 1.$$

Для розыгрыша случайного значения X из формулы (10.14) воспользуемся методом суперпозиции. Формула (10.14) представляет собой сумму 4-х функций, которые, будучи отнормированы, выглядят так:

$$g_1(X) = \frac{1}{2\alpha}; g_2(X) = \frac{1}{\ln \beta} \cdot \frac{1}{X}; g_3(X) = \frac{\beta}{2\alpha} \cdot \frac{1}{X^2}; g_4(X) = \frac{2}{\gamma} \cdot \frac{1}{X^3}.$$

Вводя общий нормировочный коэффициент N , преобразуем с помощью указанных функций формулу (10.14) в плотность вероятности для случайной величины X :

$$p(X) = \frac{1}{N} (\tilde{C}_1 \cdot g_1(X) + \tilde{C}_2 \cdot g_2(X) + \tilde{C}_3 \cdot g_3(X) + \tilde{C}_4 \cdot g_4(X)). \quad (10.15)$$

При этом явный вид коэффициентов при функциях таков:

$$\tilde{C}_1 = \frac{2}{\alpha}; \quad \tilde{C}_2 = \left(1 - \frac{1 + \beta}{\alpha^2}\right) \ln \beta; \quad \tilde{C}_3 = \frac{2}{\alpha}; \quad \tilde{C}_4 = \frac{\gamma}{2}.$$

Для того чтобы плотность вероятности (10.15) была нормирована, необходимо обеспечить равенство единице суммы всех коэффициентов перед функциями. Это означает, что общий нормировочный коэффициент равен

$$N = \sum_i \tilde{C}_i.$$

Общий алгоритм метода Коблингера приведен на рис. 10.1. Он обладает высокой эффективностью, однако может быть применен только для энергий $E > (1 + \sqrt{3})\varepsilon \approx 1.396$ МэВ, при которых коэффициент \tilde{C}_2 становится положительным.

10.2.2. Метод Кана

Метод Кана (Kahn) [28] свободен от этого недостатка и может быть использован при любых энергиях. Данный метод также оперирует дифференциальным сечением по энергии (10.13) и относительным изменением энергии X . Однако формулу для дифференциального по X сечения использует в другом виде:

$$\frac{d\sigma}{dX} = \frac{\pi r_0^2}{\alpha X^2} \left(\frac{1}{X} + X - 1 + \left(1 - \frac{X}{\alpha} + \frac{1}{\alpha}\right)^2 \right), \quad (10.16)$$

или переходя к плотности вероятности с общим нормировочным коэффициентом N , получаем:

$$p(X) = \frac{1}{N} \left(\frac{1}{X} - \frac{1}{X^2} \right) + \frac{1}{NX^2} \left(\frac{1}{X} + \left(1 - \frac{X}{\alpha} + \frac{1}{\alpha} \right)^2 \right). \quad (10.17)$$

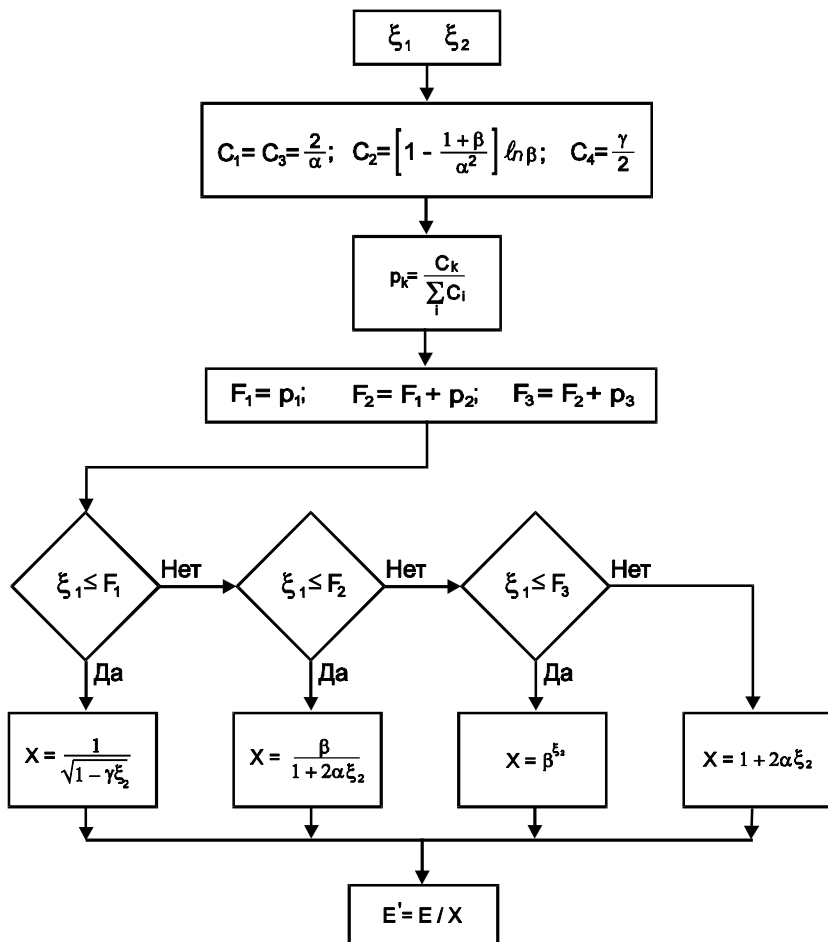


Рис.10.1. Блок-схема алгоритма Коблингера

Путем несложных преобразований сумма функций в формуле (10.17) приводится к виду, удобному для метода суперпозиции:

$$p(X) = C_1 h_1(X) g_1(X) + C_2 h_2(X) g_2(X), \quad (10.18)$$

где

$$C_1 = \frac{1+2\alpha}{9+2\alpha}; \quad h_1(X) = 4\left(\frac{1}{X} - \frac{1}{X^2}\right); \quad g_1(X) = \frac{1}{2\alpha};$$

$$C_2 = \frac{8}{9+2\alpha}; \quad h_2(X) = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{X} + \left(1 - \frac{X}{\alpha} + \frac{1}{\alpha}\right)^2\right); \quad g_2(X) = \frac{1+2\alpha}{2\alpha} \cdot \frac{1}{X^2}.$$

(10.19)

Таким образом, сначала с помощью коэффициентов C_1 и C_2 выбираем номер функции (метод суперпозиции), а затем выбранная функция разыгрывается методом исключения. Выборка самого случайного X_ξ осуществляется по моделирующим функциям $g_1(X)$ или $g_2(X)$, а проверка X_ξ – с помощью исключающих функций $h_1(X)$ или $h_2(X)$. Нетрудно убедиться, что подобранные Каном исключающие функции на отрезке $(1, 1+2\alpha)$ не превосходят единицы. В целом алгоритм Кана приведен на Рис. 10.2.

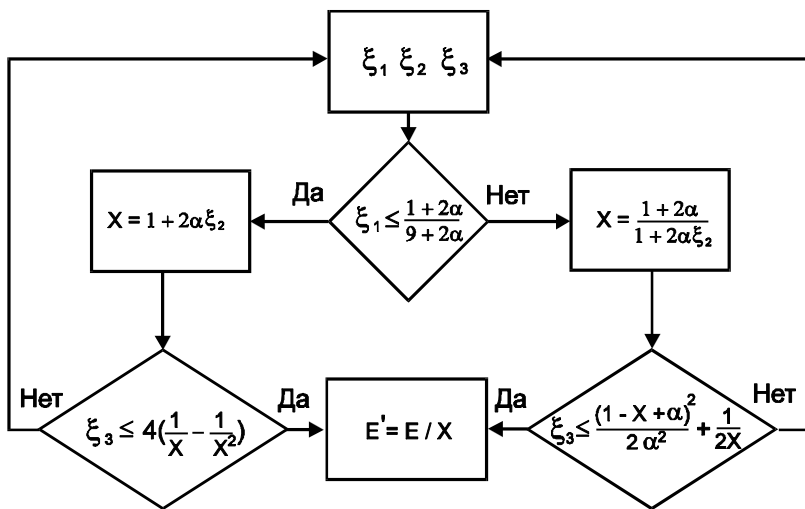


Рис.10.2. Блок-схема алгоритма Кана

Отметим, что алгоритм Кана, реализуя метод исключения, имеет уменьшающуюся с ростом энергии эффективность. Так, при $E= 1.5$ МэВ на выборку новой энергии тратится в среднем 1.5 попытки, а при $E= 10$ МэВ – около 3.

В связи с этим рекомендуется на энергиях $E < 1.4$ МэВ использовать метод Кана, а выше этого значения – метод Коблингера.

10.2.3. Метод Карлсона

Метод Карлсона (Carlson) [26] является наиболее простым среди существующих. Он основан на приближении реальной плотности вероятности вида (10.17) более простой зависимостью, допускающей прямой розыгрыш методом обратной функции. Конечная формула для розыгрыша новой энергии:

$$E' = \frac{E}{1 + S\xi + (2\alpha - S)\xi^3}, \quad (10.20)$$

где

$$S = \frac{E}{1 + 0.5625\alpha}.$$

Метод наиболее точен в области $0,5 < E < 2$ МэВ. При энергиях выше 4ϵ необходимо использовать дополнительное слагаемое

$$E' = \frac{E}{1 + S\xi + (2\alpha - S)\xi^3} + \frac{1}{2}(\alpha - 4)\xi^2(1 - \xi)^2, \quad (10.20')$$

которое позволяет пользоваться формулой примерно до 5 МэВ с удовлетворительной точностью. В области низких энергий $E < 0,5$ МэВ также следует применять уточняющую поправку:

$$E' = \frac{E}{1 + S\xi + (2\alpha - S)\xi^3} - \frac{A\alpha^2}{1 + 2\alpha} \left(\frac{B}{C + \alpha} - 1 \right) \xi^2 (1 - \xi) \quad (10.20'')$$

с коэффициентами $A = 0.592$, $B = 2.578$, $C = 0,425$.

Таким образом, новая энергия E' получена. В силу жесткой связи между изменением энергии и углом рассеяния косинус этого угла определяется однозначно

$$\mu = 1 - \frac{\epsilon}{E'} + \frac{\epsilon}{E}. \quad (10.21)$$

Азимутальный угол ψ (рис.10.3) распределен равномерно от 0 до 2π , если только при рассеянии не учитываются

поляризационные эффекты (обычно они малы). Случайное значение угла ψ может быть получено одним из методов, описанных в §8.2. Впрочем, сам угол нам не нужен. В приведенной ниже матрице (10.22) пересчета новых и старых компонент вектора $\vec{\Omega}$ используются только его тригонометрические функции, поэтому целесообразно использовать метод Неймана (8.8).

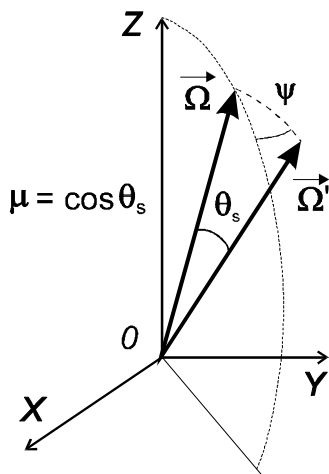


Рис. 10.3 Схема обозначения углов рассеяния между направлениями $\vec{\Omega}$ (до рассеяния) и $\vec{\Omega}'$ (после рассеяния)

$$\Omega'_x = \frac{\sqrt{1-\mu^2}}{\sqrt{1-\Omega_z^2}} \times [\Omega_x \Omega_z \cos \psi - \Omega_y \sin \psi] + \Omega_x \mu$$

$$\Omega'_y = \frac{\sqrt{1-\mu^2}}{\sqrt{1-\Omega_z^2}} \times [\Omega_y \Omega_z \cos \psi + \Omega_x \sin \psi] + \Omega_y \mu \quad (10.22)$$

$$\Omega'_z = -\sqrt{1-\mu^2} \sqrt{1-\Omega_z^2} \cos \psi + \Omega_z \mu.$$

Нетрудно убедиться, что преобразование (10.22) не изменяет длины вектора $\vec{\Omega}'$.

§10.3. Розыгрыш некогерентного рассеяния на связанных электронах

Комптоновским является рассеяние фотона на свободном электроне. В том же случае, когда энергия налетающего гамма-кванта сравнима с энергией связи электрона в атоме, электрон свободным считать нельзя, и его связь необходимо учитывать.

При рассеянии фотона на угол θ_s объекту, на котором происходило рассеяние, будет передан импульс

$$q = \frac{2E}{c} \sin \frac{\theta_s}{2}, \quad (10.23)$$

максимально возможное значение которого (при $\theta_s = \pi$) есть

$$q_m = \frac{2E}{c}. \quad (10.24)$$

Этот импульс будет передан одному из атомарных электронов, если сообщаемая при этом электрону энергия достаточна для ионизации или возбуждения атома. Изменение энергии фотона после рассеяния следует из закона сохранения импульса и энергии:

$$E' = \frac{E}{1 + E(1 - \bar{\Omega}'\bar{\Omega})/\varepsilon}.$$

Таким образом, объектами рассеяния выступают отдельные электроны, которые рассеивают падающую на них электромагнитную волну некогерентно. Дифференциальное микроскопическое сечение некогерентного рассеяния, рассчитанное на один атом, записывается следующим образом:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \sigma_{\text{нкз}}}{dE' d\Omega'} &= Z r_0^2 \left(\frac{E'}{E} \right)^2 \left(\frac{E'}{E} + \frac{E}{E'} - \sin^2 \theta_s \right) \times \\ &\times \delta \left(E' - \frac{E}{1 + E(1 - \bar{\Omega}'\bar{\Omega})/\varepsilon} \right) \times S(q, Z). \end{aligned} \quad (10.25)$$

Его отличает от сечения комптоновского рассеяния (сравните с формулой (10.11), где оно приведено в расчете на один электрон) наличие функции некогерентного рассеяния $S(q, Z)$, зависящей от переданного импульса и атомного номера. На рис.10.4 она приведена как функция относительного переданного импульса $\tilde{q} = q/q_m$, который изменяется от 0 до 1. По существу,

S -функция показывает вероятность того, что при данном переданном импульсе рассеяние будет носить некогерентный характер.

Розыгрыш некогерентного рассеяния на связанных электронах может быть выполнен по одной из схем розыгрыша комптоновского рассеяния (см. §10.2), а учет функции некогерентного рассеяния реализован методом исключения.

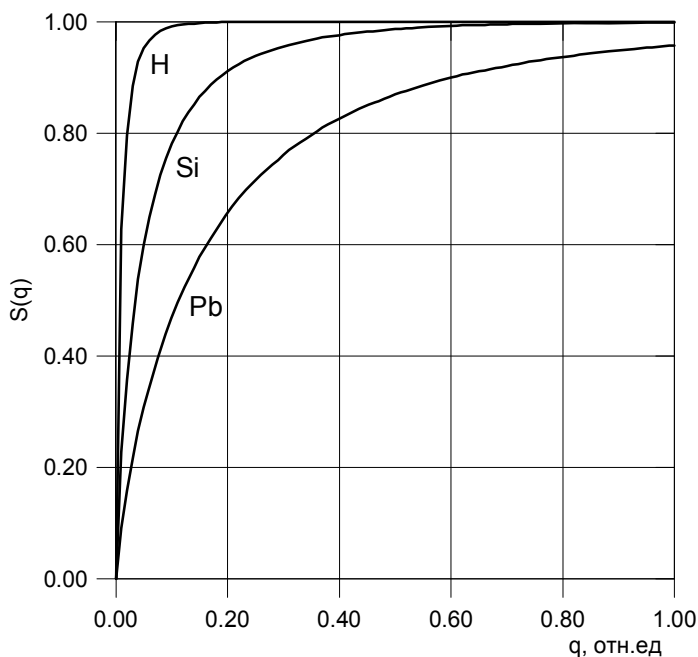


Рис.10.4. Зависимость S -функции от переданного импульса

Легко видеть, что для больших энергий розыгрыш некогерентного рассеяния будет совпадать с розыгрышем комптоновского рассеяния на свободном электроном.

§10.4. Розыгрыш когерентного рассеяния на связанных электронах

Если передаваемый при рассеянии импульс не сообщает атомарному электрону достаточной для ионизации энергии, импульс будет принят атомом в целом. Кинетическая энергия,

которую унесет атом, в силу большой массы ядра, оказывается незначительной по сравнению с энергией фотона. Объектом рассеяния, таким образом, выступает весь атом, электроны которого рассеивают падающую электромагнитную волну когерентно. Энергию фотонов при когерентном рассеянии можно считать неизменной, а дифференциальное атомарное сечение такого рассеяния записывается в виде:

$$\frac{d^2\sigma_{\kappa^2}}{dE'd\Omega'} = \frac{r_0^2}{2} (1 + \cos^2 \theta_s) \cdot \delta(E' - E) \cdot F^2(q, Z). \quad (10.26)$$

Сечение когерентного рассеяния включает атомный форм-фактор $F(q, Z)$, который имеет смысл отношения амплитуды электромагнитной волны, рассеянной атомом, к амплитуде волны, рассеянной отдельным электроном. При нулевом переданном импульсе это отношение в точности равно числу электронов в атоме: $F(0, Z) = Z$. Атомный форм-фактор для разных веществ как функция относительного переданного импульса приведен на рис.10.5.

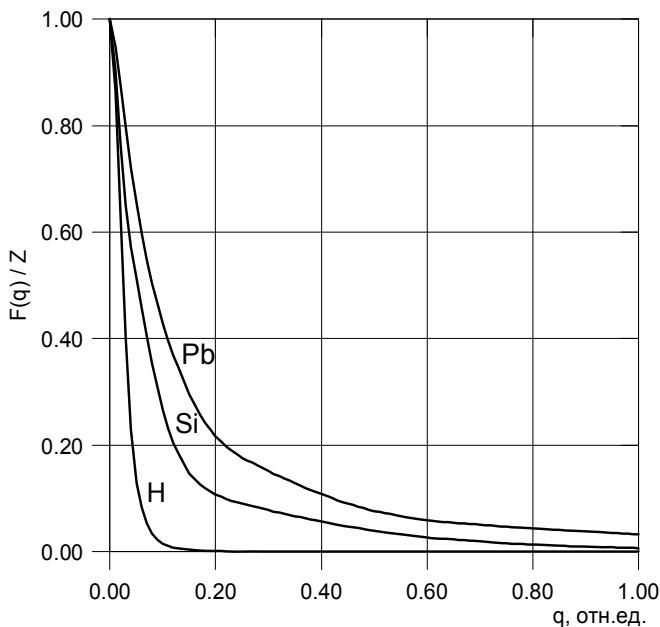


Рис.10.5. Атомный форм-фактор как функция переданного импульса

Поскольку энергия фотона не меняется, для моделирования когерентного рассеяния достаточно разыграть угол рассеяния θ_s или $\mu = \cos\theta_s$, так как азимутальный угол ψ распределен равномерно от 0 до 2π . Дифференциальное угловое сечение когерентного рассеяния (на атом) выглядит так:

$$\frac{d\sigma_{\kappa z}}{d\Omega'} = \frac{r_0^2}{2} (1 + \mu^2) \cdot F^2(q, Z).$$

С помощью формулы (10.23) перейдем к новым переменным $\tilde{q} = q/q_m$:

$$\frac{d^2\sigma_{\kappa z}}{d\tilde{q} d\psi} = \frac{r_0^2}{2} 8\tilde{q} (1 - 2\tilde{q}^2 + 2\tilde{q}^4) \cdot F^2(\tilde{q}, Z). \quad (10.27)$$

Для розыгрыша случайного значения переданного импульса \tilde{q}_ξ достаточно заранее получить функции распределения вида:

$$\Phi(x) = \frac{1}{N_\Phi} \int_0^x t(1 - 2t^2 + 2t^4) \cdot F^2(t q_m, Z) dt, \quad (10.28)$$

где нормировка обеспечивается константой

$$N_\Phi = \int_0^1 t(1 - 2t^2 + 2t^4) \cdot F^2(t q_m, Z) dt.$$

На рис.10.6 в качестве примера приведены функции распределения для розыгрыша переданного импульса при когерентном рассеянии на водороде, кремнии и свинце.

Значение случайного импульса находится методом обратной функции:

$$\tilde{q}_\xi = \Phi^{-1}(\xi).$$

Розыгрыш равномерно распределенного азимутального угла ψ описан в §8.2.

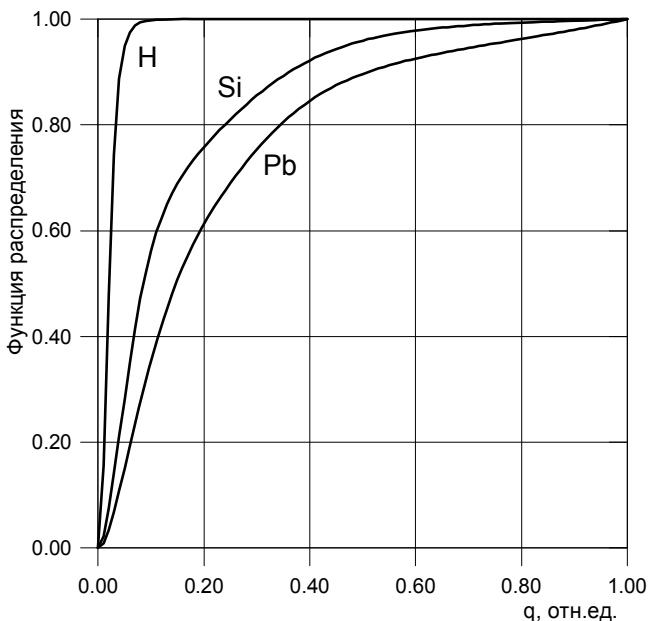


Рис.10.6. Функция распределения для розыгрыша переданного импульса при когерентном рассеянии

§10.5. Множественность частиц при рассеянии

Множественностью будем называть явление, при котором суммарное количество вторичных частиц, покидающих рассеяние, превосходит единицу. Напомним, что рассеянием мы считаем любое столкновение, в результате которого первичная частица не поглощается. В общем случае при рассеянии может образовываться более одной вторичной частицы того же сорта, что и первичная. Например, при делении тяжелых ядер под действием нейтронов, число вторичных нейтронов, в зависимости от ядра, варьирует от 2,4 до 2,9. Для фотонов ранее была приведена формула (10.7), которая позволяет интерпретировать образование электрон-позитронных пар и последующее аннигиляционное излучение как единый процесс рассеяния. При этом на один первичный испытывающий такое взаимодействие фотон образуются два вторичных.

С учетом возможной множественности m приведенную ранее формулу (2.5) для связи полного и интегрального сечения рассеяния следует уточнить:

$$m = \frac{\int_0^{\infty} \int_{4\pi} \sigma_s(E, \vec{\Omega} \rightarrow E', \vec{\Omega}') dE' d\Omega'}{\sigma_s(E)}. \quad (10.29)$$

В знаменателе формулы (10.23) стоит полное сечение данного физического процесса, относящегося к рассеянию.

Определенную таким образом множественность частиц при конкретном виде рассеяния не следует путать с введенной в главе 4 нормой ядра столкновений ν . Последнее обозначало среднее число частиц, покидающих столкновение. Результатом столкновения в общем случае могут быть несколько процессов рассеяния (каждый со своей множественностью) или поглощение, у которого $m = 0$.

Одним из возможных методов учета множественности при моделировании истории частицы методом Монте-Карло является следующий.

Для каждой из m вторичных частиц разыгрываются фазовые состояния после столкновения. Фазовые состояния $m - 1$ частиц запоминаются в специальном *банке частиц*, организуемом в виде стека или очереди. История одной из рассеянных частиц продолжается после столкновения по обычному алгоритму вплоть до обрыва. После гибели частицы алгоритм не сразу переходит к выборке новой частицы из источника, но сначала обращается в банк частиц, и если он не пуст, извлекает одну из имеющихся там частиц. История извлеченной частицы прослеживается, начиная с ее фазовых координат $(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$, записанных в банке, и кончая гибелью. Алгоритм не переходит к выбору частицы из источника, пока не опустошен весь банк.

Для расчета выборочной дисперсии (6.21) необходимо подсчитывать независимые вклады, создаваемые за одну историю. При учете множественности все ветви, начинающиеся из банка частиц, необходимо относить к одной истории, поскольку их нельзя считать независимыми.

Контрольные вопросы

- ❑ Каковы основные этапы розыгрыша ядра столкновений?
- ❑ Напишите формулу для выбора типа атома при столкновении.
- ❑ Напишите формулу для розыгрыша типа взаимодействия.
- ❑ При каком условии можно считать, что частица испытала поглощение?
- ❑ Какие методы розыгрыша комптоновского рассеяния вы знаете?
- ❑ Как смоделировать множественность частиц при рассеянии?

Глава 11. Оценка функционалов

*Он чудно вылитым узором
Ей что-то чудное гласит...*

А.С. Пушкин

В главе 7 были сформулированы основные процедуры, сопровождающие моделирование истории частицы или, в терминах интеграла (7.1), моделирование фазовых состояний, соответствующих плотности входящих столкновений. В согласии с общей схемой решения уравнения переноса методом Монте-Карло необходимо в этих фазовых состояниях вычислять величину $P^*(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$, математическое ожидание которой и будет равняться искомому функционалу. Величина, вычисляемая в ходе моделирования случайного блуждания частицы для подсчета соответствующего выборочного среднего, называется в методе Монте-Карло *оценкой*. Для расчета одного и того же функционала может быть использовано несколько различных оценок.

§11.1 Основные оценки в методе Монте-Карло

Ниже будут рассмотрены наиболее часто используемые оценки на примере расчета средней плотности потока в объеме детектора V :

$$\bar{\varphi} = \frac{1}{V} \int_V \int_0^\infty \int_{4\pi} \varphi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) d\vec{r} dE d\Omega. \quad (11.1)$$

Данное выражение для средней плотности потока может быть приведено к точному виду интеграла (7.1), если ввести индикаторную функцию

$$\Delta(\vec{r}) = \begin{cases} 1, & \vec{r} \in V \\ 0, & \vec{r} \notin V \end{cases}. \quad (11.2)$$

Она позволяет провести интегрирование по всему пространству переменной \vec{r} , а не только по объему детектора. С функцией детектора в виде

$$P^*(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \frac{\Delta(\vec{r})}{V \Sigma(\vec{r}, E)} \quad (11.3)$$

интеграл для средней плотности потока будет выглядеть в точности, как общий интеграл (7.1).

11.1.1. Оценка по столкновениям

Вычисляется при каждом входящем столкновении на основе формулы (11.3):

$$\varepsilon_{CO} = \frac{1}{V} \sum_{k=1}^l \frac{\Delta(\vec{r}_k)}{\Sigma(\vec{r}_k, E_k)}. \quad (11.4)$$

Суммирование ведется по всем столкновениям истории частицы вплоть до последнего (летального) l . При программировании роль индикаторной функции $\Delta(\vec{r})$ выполняет оператор «if».

11.1.2. Оценка по поглощениям

Строится на основе следующего выражения:

$$\dot{J} = \langle \varphi, P \rangle = \langle \varphi \cdot \Sigma_a, P / \Sigma_a \rangle = \langle \psi_a, P / \Sigma_a \rangle. \quad (11.5)$$

В нем присутствует новая функция – *плотность поглощений*

$$\psi_a(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \varphi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \cdot \Sigma_a(\vec{r}, E),$$

равная произведению дифференциальной плотности потока частиц и сечения поглощения. Эта плотность показывает количество поглощений, которые происходят в единицу времени в единице объема вокруг точки \vec{r} , для частиц, имеющих энергии внутри единичного интервала вокруг значения E и двигающихся в единице телесного угла вокруг направления $\vec{\Omega}$.

Состояние частицы, соответствующее плотности поглощений, возникает в тот момент, когда в процессе розыгрыша ядра столкновений (см. §10.1) выпадает поглощение частицы. За всю историю это происходит лишь однажды, поэтому в выражении для оценки присутствует только одно слагаемое:

$$\varepsilon_{AB} = \frac{1}{V} \frac{\Delta(\vec{r}_l)}{\Sigma_a(\vec{r}_l, E_l)}. \quad (11.6)$$

В последней формуле, так же как и ранее в формуле (11.4), индекс l соответствует последнему столкновению. Но в отличие от оценки по столкновениям, здесь учитываются только те столкновения, которые закончились поглощением частицы.

11.1.3. Оценка по пробегам

Для конструирования этой оценки нам понадобится доказать следующую лемму «Средняя плотность потока частиц по объему детектора численно равна общей длине треков частиц, принадлежащих единице объема детектора, создаваемых в единицу времени».

Рассмотрим среднее количество столкновений в секунду, происходящих в детекторе объема V , считая, что детектор однороден. Оно, очевидно, равно средней плотности столкновений, умноженной на объем детектора:

$$\dot{N}_V(E, \vec{\Omega}) = \bar{\psi}_V(E, \vec{\Omega}) \cdot V.$$

В свою очередь, средняя плотность столкновений есть:

$$\bar{\psi}_V(E, \vec{\Omega}) = \frac{1}{V} \int_V \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) d\vec{r} = \frac{1}{V} \int_V \varphi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \cdot \Sigma(E) d\vec{r}.$$

Поскольку все вещество в объеме детектора V однородно, сечение не зависит от точки \vec{r} .

С другой стороны, среднее количество столкновений, в силу физического смысла макроскопического сечения, есть произведение полного сечения взаимодействия на суммарную длину траекторий (треков) частиц, образующихся в данном объеме в единицу времени:

$$\dot{N}_V(E, \vec{\Omega}) = \Sigma(E) \cdot \sum_{k=1}^l \dot{L}_k(E, \vec{\Omega}).$$

Приравнявая выражения для \dot{N}_V , получим искомую формулу:

$$\bar{\varphi}_V(E, \vec{\Omega}) = \frac{1}{V} \int_V \varphi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) d\vec{r} = \frac{1}{V} \sum_{k=1}^l \dot{L}_k(E, \vec{\Omega}). \quad (11.7)$$

В формуле (11.7) отрезки $\dot{L}_k(E, \vec{\Omega})$ представляют собой отнесенные к единице времени участки траектории между $k-1$ и k -м столкновениями частиц, которые имеют энергии в единичном интервале вокруг E и движутся в единичном телесном угле вокруг направления $\vec{\Omega}$, принадлежащие объему детектора. Таким образом, среднюю интегральную плотность потока частиц можно записать в виде

$$\bar{\varphi}_V = \int_{4\pi 0}^{\infty} \bar{\varphi}_V(E, \vec{\Omega}) dE d\Omega = \frac{1}{V} \int_{4\pi 0}^{\infty} \sum_{k=1}^l \dot{L}_k(E, \vec{\Omega}) dE d\Omega = \frac{1}{V} \sum_{k=1}^l \dot{L}_k. \quad (11.8)$$

В формуле (11.8) отрезки \dot{L}_k суть участки траекторий частиц с любыми энергиями и направлениями движения, образуемые внутри объема детектора в единицу времени (рис. 11.1).

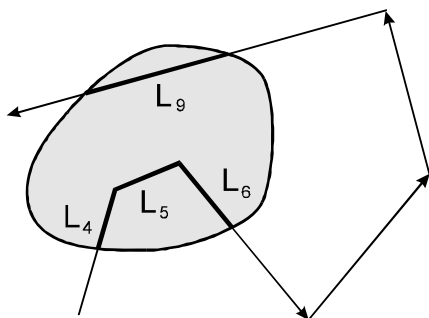


Рис. 11.1. К построению оценки по пробегам

Формулы (11.7) и (11.8) представляют собой математическую запись доказываемой леммы. Данная лемма в виде формулы (11.8) и будет служить основой для построения оценки по пробегам:

$$\varepsilon_{PL} = \frac{1}{V} \sum_{k=1}^l L_k. \quad (11.9)$$

Для оценки значок дифференцирования по времени убран, поскольку суммарная длина пробегов оценивается для единичной мощности источника, т.е. она уже приведена к вылету из источника одной частицы *в секунду*.

§11.2. Локальные оценки

Оценки по столкновениям (11.4), поглощениям (11.6) и пробегам (11.9) относятся к *нелокальным*, поскольку служат нахождению функционала (например, плотности потока частиц), усредненного по 3-мерной пространственной переменной, т.е. по некоторому объему. Если требуется сократить размерность такого усреднения или вовсе от него отказаться, необходимо использовать оценки, называемые *локальными*. В качестве таковых приведем *оценку по пересечениям* и *локальную оценку потока*, а также обсудим возможности построения других подобных оценок.

11.2.1. Оценка по пересечениям

Служит для вычисления функционала, усредненного по двухмерной пространственной переменной. Рассмотрим вычисление плотности потока, усредненной по поверхности детектора S . Соответствующую оценку построим на базе оценки по пробегам, приняв в качестве детектора слой малой толщины δ на поверхности S (рис.11.2).

$$\tilde{\varepsilon}_{PL} = \frac{1}{V} \sum_{k=1}^l L_k = \frac{\delta}{V} \sum_{k=1}^l \frac{\Delta_k}{|\vec{\Omega}_k \cdot \vec{n}_k|}.$$

Индикаторная функция Δ_k в данном выражении равна 1, если k -й пробег частицы пересек площадку S , и 0, если нет. Учитывая, что объем детектора фактически равен $V = S \cdot \delta$, получим оценку по пересечениям в виде:

$$\varepsilon_{CR} = \frac{1}{S} \sum_{k=1}^l \frac{\Delta_k}{|\vec{\Omega}_k \cdot \vec{n}_k|}. \quad (11.10)$$

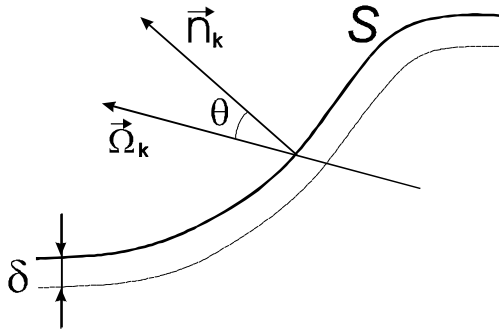


Рис.11.2. К построению оценки по пересечениям

Обратим внимание, что полученная оценка ε_{CR} неограничена, поскольку в знаменателе стоит косинус угла пересечения поверхности $\mu = |\vec{\Omega}_k \cdot \vec{n}_k|$, и этот косинус может быть сколь угодно мал. Это, впрочем, не является препятствием для использования самой оценки: ее математическое ожидание конечно. Действительно, обозначим как $p(\mu)$ плотность вероятности

получить в результате моделирования траектории частицы ее пресечение с поверхностью при заданной величине μ . Для математического ожидания оценки будет справедливо:

$$M\varepsilon_{CR} \sim \int_{4\pi} \frac{1}{|\mu|} p(\mu) d\Omega \sim \int_{-1}^1 \frac{1}{|\mu|} p(\mu) d\mu .$$

Полагая, что вероятность пересечения площади S пропорциональна ее проекции на направление движения частицы, будем считать, что $p(\mu) \sim \mu$. Это позволяет сделать окончательный вывод о конечности математического ожидания:

$$M\varepsilon_{CR} \sim \int_{-1}^1 \frac{1}{|\mu|} \mu d\mu = \int_{-1}^1 \frac{d\mu}{\text{sign}(\mu)} < \infty .$$

К сожалению, статистические свойства полученной оценки плохие: она обладает дисперсией, имеющей логарифмическую расходимость вблизи $\mu = 0$:

$$D\varepsilon_{CR} \sim \int_{-1}^1 \frac{1}{\mu^2} \mu d\mu = \int_{-1}^1 \frac{d\mu}{\mu} .$$

Отсутствие конечной дисперсии не позволяет использовать механизм оценки погрешности на основе центральной предельной теоремы (6.19). Кроме того, выборочное среднее при увеличении числа испытаний N сходится к математическому ожиданию медленнее, чем $N^{-1/2}$.

11.2.2. Локальная оценка потока

Несмотря на название, она может быть использована для расчета не только собственно плотности потока, но также и других величин: мощности дозы, интенсивности и т.п. Эта оценка предназначена для вычисления функционалов поля в точке – без усреднения по объему детектора. Детектор, таким образом, считается точечным, и например, для расчета интегральной плотности потока частиц функция детектора $P(\vec{r}, E, \bar{\Omega}) = \delta(\vec{r} - \vec{r}_d)$.

Совершенно ясно: вероятность того, что при моделировании фазовых состояний случайное столкновение произойдет именно в точке \vec{r}_d , равна 0. Это означает, что для построения оценки нельзя непосредственно использовать формулу (7.1).

Воспользуемся преобразованиями, сделанными при рассмотрении разложения функционалов в ряд Неймана (см. §5.5). Наряду с обычной формулой (5.3) для функционала $J_P = \langle P^*, \psi \rangle$ было найдено его разложение (5.33) на сумму n компонентов и остаток. Если в этом разложении принять $n = 1$, получим

$$J_P = \langle \chi_1^*, Q \rangle + \langle \psi_1^*, \psi \rangle = J_{\text{нерас}} + J_{\text{рас}}. \quad (11.11)$$

При этом первое слагаемое равно вкладу нерассеянного излучения, а второе – рассеянного. Для того, чтобы получить в явном виде $J_{\text{нерас}}$, воспользуемся соотношениями между компонентами разложения ценности столкновений (5.26):

$$\begin{aligned} J_{\text{нерас}} &= \langle \chi_1^*, Q \rangle = \int_0^\infty \int_0^\infty \int_{4\pi} \chi_1^*(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) Q(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) d\vec{r} dE d\Omega = \\ &= \int_0^\infty \int_0^\infty \int_{4\pi} \int_{4\pi} T(\vec{r} \rightarrow \vec{r}' | E, \vec{\Omega}) P^*(\vec{r}', E, \vec{\Omega}) Q(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) d\vec{r}' d\vec{r} dE d\Omega. \end{aligned}$$

Подставляя в полученное выражение явный вид для транспортного ядра, функции детектора, и выполняя простое интегрирование по переменным \vec{r}' и $\vec{\Omega}$, получим

$$J_{\text{нерас}} = \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{\Sigma(\vec{r}_d, E)}{|\vec{r}_d - \vec{r}|^2} \cdot e^{-\tau(\vec{r} \rightarrow \vec{r}_d, E)} Q(\vec{r}, E, \frac{\vec{r}_d - \vec{r}}{|\vec{r}_d - \vec{r}|}) d\vec{r} dE. \quad (11.12)$$

Таким образом, расчет вклада нерассеянного излучения не представляет собой никаких сложностей. Это просто интеграл от функции источника и транспортного ядра. В выражении (11.12) не учтен внешний поток, падающий на систему через границу. Если он присутствует, должен быть дописан аналогичный член в виде интеграла по поверхности границы и по энергиям.

Построение локальной оценки потока нацелено, в первую очередь, на вычисление вклада рассеянного излучения:

$$J_{\text{рас}} = \langle \psi_1^*, \psi \rangle = \int_0^\infty \int_0^\infty \int_{4\pi} \psi_1^*(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) d\vec{r} dE d\Omega.$$

Подставив компонент ценности столкновений ψ_1^* из уравнений (5.25) – (5.27), получим:

$$\dot{J}_{\text{рас}} = \int_{\infty}^{\infty} \int_{0}^{4\pi} \int_{\infty}^{\infty} \int_{0}^{4\pi} C(E, \vec{\Omega} \rightarrow E', \vec{\Omega}' | \vec{r}) T(\vec{r} \rightarrow \vec{r}' | E, \vec{\Omega}) P^*(\vec{r}', E', \vec{\Omega}') \times \\ \times \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) d\vec{r}' dE' d\Omega' d\vec{r} dE d\Omega.$$

С учетом конкретной (сингулярной) функции детектора $P^*(\vec{r}', E', \vec{\Omega}') = \delta(\vec{r}' - \vec{r}_d) / \Sigma(\vec{r}', E)$ и дельта-функции, содержащейся в транспортном ядре, данный интеграл упрощается:

$$\dot{J}_{\text{рас}} = \int_{\infty}^{\infty} \int_{0}^{4\pi} \int_{0}^{\infty} C(E, \vec{\Omega} \rightarrow E', \frac{\vec{r}_d - \vec{r}}{|\vec{r}_d - \vec{r}|} | \vec{r}) \frac{e^{-\tau(\vec{r} \rightarrow \vec{r}_d, E')}}{|\vec{r}_d - \vec{r}|^2} \times \\ \times \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) dE' d\vec{r} dE d\Omega. \quad (11.13)$$

Для многих видов столкновения между энергией после рассеяния и изменением направления движения частицы существует жесткая связь. Это позволяет провести аналитическое интегрирование и по E' .

Запишем явный вид выражения (11.13) в случае комптоновского рассеяния, дифференциальное макроскопическое сечение которого есть (см. формулу (10.11)):

$$\Sigma_{KN}(E, \vec{\Omega} \rightarrow E', \vec{\Omega}' | \vec{r}) = \Sigma_{KN}(\vec{\Omega} \rightarrow \vec{\Omega}' | \vec{r}, E) \times \delta(E' - E_s). \quad (11.14)$$

Для компактности обозначим косинус угла рассеяния $\mu_s = \vec{\Omega}' \vec{\Omega}$, а энергию, выраженную в относительных единицах, $\alpha = E / \varepsilon$. Тогда угловую часть дифференциального сечения можно записать в виде

$$\Sigma_{KN}(\vec{\Omega} \rightarrow \vec{\Omega}' | \vec{r}, E_s) = n_e(\vec{r}) \frac{r_0^2}{2} \left(\frac{1}{1 + \alpha(1 - \mu_s)} \right)^2 \times \\ \times \left(\frac{1}{1 + \alpha(1 - \mu_s)} + 1 + \alpha(1 - \mu_s) - (1 - \mu_s)^2 \right),$$

а энергию после рассеяния

$$E_s = \frac{E}{1 + \alpha(1 - \mu_s)}.$$

При этом, как и ранее, ε обозначает энергетический эквивалент массы покоя электрона (0.511 МэВ), r_0 – классический радиус электрона (2.82×10^{-13} см), а $n_e(\vec{r})$ – концентрацию электронов в точке \vec{r} . Поскольку в формуле для

дифференциального сечения (11.14) присутствует дельта-функция, интеграл (11.13) по E' легко вычисляется:

$$J_{\text{рас}} = \int_0^\infty \int_{4\pi} \int_{\Sigma_{KN}} (\vec{\Omega} \rightarrow \frac{\vec{r}_d - \vec{r}}{|\vec{r}_d - \vec{r}|} | \vec{r}, E) \frac{e^{-\tau(\vec{r} \rightarrow \vec{r}_d, E_s)}}{\Sigma(\vec{r}, E) |\vec{r}_d - \vec{r}|^2} \times \\ \times \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) d\vec{r} dE d\Omega \quad (11.15)$$

Обратим внимание, что полученная формула по виду полностью соответствует интегралу (7.1). Под знаком интеграла присутствует плотность входящих столкновений $\psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$, а все остальное является оценкой, которую надо вычислять после получения точки очередного столкновения:

$$g_R(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, \vec{r}_d) = \Sigma_{KN}(\vec{\Omega} \rightarrow \frac{\vec{r}_d - \vec{r}}{|\vec{r}_d - \vec{r}|} | \vec{r}, E) \frac{e^{-\tau(\vec{r} \rightarrow \vec{r}_d, E_s)}}{\Sigma(\vec{r}, E) |\vec{r}_d - \vec{r}|^2}. \quad (11.16)$$

Локальная оценка потока (в англоязычной литературе принят термин *flux-at-a-point*) для вычисления интегральной плотности потока частиц в точке \vec{r}_d , создаваемая за всю историю частицы, представляет собой сумму по всем столкновениям

$$\varepsilon_R = \sum_{k=1}^l g_R(\vec{r}_k, E_k, \vec{\Omega}_k, \vec{r}_d). \quad (11.17)$$

Отметим, что за возможность вычислять характеристики поля без какого-либо пространственного усреднения приходится платить ухудшением статистических свойств полученной оценки. В самом деле, присутствие в знаменателе формулы (11.16) квадрата расстояния от точки столкновения до точки детектирования в случае нахождения детектора в среде переноса излучения делает оценку неограниченной.

Этот факт, как и в случае оценки по пересечениям (11.10), сам по себе не мешает ее использованию, поскольку математическое ожидание величины оценки конечно. В последнем можно убедиться путем следующих рассуждений. Обозначим через $p(\vec{r})$ плотность вероятности в результате моделирования столкновений получить случайную точку \vec{r} . Положим, что эта функция не имеет в окрестности точки детектора \vec{r}_d каких-то

особенностей. Тогда конечность математического ожидания локальной оценки будет определяться интегралом вида

$$M\varepsilon_R \sim \int_V \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}_d|^2} p(\vec{r}) d\vec{r},$$

взятого по малому объему V вокруг детектора. Этот объем, без ущерба для общности, можно считать сферой малого радиуса δ с центром в точке \vec{r}_d . Заменяя под знаком интеграла функцию $p(\vec{r})$ ее значением в центре сферы и переходя к сферическим координатам, сразу получим ограниченность математического ожидания:

$$M\varepsilon_R \sim p(\vec{r}_d) \int_0^\delta \frac{4\pi}{\rho^2} \rho^2 d\rho < \infty.$$

К сожалению, подобный интеграл для дисперсии локальной оценки расходится

$$D\varepsilon_R \sim p(\vec{r}_d) \int_0^\delta \frac{4\pi}{\rho^4} \rho^2 d\rho \sim p(\vec{r}_d) \int_0^\delta \frac{4\pi}{\rho^2} d\rho.$$

При этом в 0 он обладает гиперболической (первой степени) расходимостью, что, несомненно, хуже, чем логарифмическая расходимость оценки по пересечениям.

11.2.3. Другие локальные оценки

Громоздкий вид локальной оценки (11.16) возник в результате того, что рассматриваемая функция детектора содержала сингулярность – пространственную дельта-функцию, поскольку детектор предполагался точечным. В результате, вместо того, чтобы строить оценку на основе выражения $\dot{J} = \langle \psi, P^* \rangle$, пришлось применить разложение (5.33) и при $n = 1$ вычислять компонент рассеянного излучения в виде $\dot{J}_{\text{рас}} = \langle \psi_1^*, \psi \rangle$. Входящий в него компонент ценности столкновений ψ_1^* никаких сингулярностей не содержит.

Теперь представим себе детектор, который является не только точечным, но и избирательным по энергии:

$P(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \delta(\vec{r} - \vec{r}_d) \cdot \delta(E - E_d)$. Оценку для него можно также построить с помощью разложения (5.33), но составляющую рассеянного излучения придется считать на основе плотности выходящих столкновений

$$j_{\text{рас}} = \langle \chi_2^*, \chi \rangle. \quad (11.18)$$

В данной формуле присутствует второй компонент ценности выходящих столкновений, который представляет собой следующий интеграл

$$\begin{aligned} \chi_2^*(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = & \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} \int_{4\pi} T(\vec{r} \rightarrow \vec{r}' | E, \vec{\Omega}) C(E, \vec{\Omega} \rightarrow E', \vec{\Omega}' | \vec{r}') \times \\ & \times T(\vec{r}' \rightarrow \vec{r}'' | E', \vec{\Omega}') P^*(\vec{r}'', E', \vec{\Omega}') d\vec{r}' dE' d\Omega' d\vec{r}'' . \end{aligned}$$

С учетом конкретного вида функции детектора, а также используя δ -функции, входящие в транспортные ядра, этот 9-мерный интеграл приводится к одномерному интегралу вдоль луча $\vec{\Omega}$:

$$\chi_2^*(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \int_0^{\infty} \frac{\exp(-\tau_0(R, E) - \tau_1(R, E_d)) \Sigma_s(E, \vec{\Omega} \rightarrow E_d, \vec{\omega}_R | \vec{r} + R\vec{\Omega}) dR}{|\vec{r} + R\vec{\Omega} - \vec{r}_d|^2} \quad (11.19)$$

В последней формуле введено обозначение для оптических расстояний

$$\tau_0(R, E) = \tau(\vec{r} \rightarrow \vec{r} + R\vec{\Omega}, E); \quad \tau_1(R, E_d) = \tau(\vec{r} + R\vec{\Omega} \rightarrow \vec{r}_d, E_d),$$

а также для единичного вектора направления:

$$\vec{\omega}_R = (\vec{r}_d - \vec{r} - R\vec{\Omega}) / |\vec{r}_d - \vec{r} - R\vec{\Omega}| \quad (\text{рис.11.3}).$$

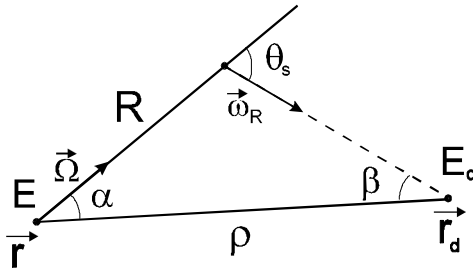


Рис.11.3. К построению двойной локальной оценки.

На основе интеграла (11.19) получим окончательное выражение для двойной локальной оценки (по пространству и энергии), которое вычисляется каждый раз, когда фазовое состояние частицы соответствует плотности выходящих столкновений, т.е. сразу после розыгрыша новой энергии и направления движения. При этом учтем жесткую связь между углом рассеяния θ_s и изменением энергии, позволяющую вовсе избавиться от интеграла по лучу:

$$g_{RE}(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, \vec{r}_d, E_d) = \frac{\Sigma_s(E \rightarrow E_d | \vec{r} + R\vec{\Omega})}{2\pi \rho \sin \alpha \sin \theta_s} \times \exp(-\tau_0(R, E) - \tau_1(R, E_d)) \quad (11.20)$$

Входящий в данную формулу угол θ_s вычисляется из условия, что такое рассеяние переводит энергию E в E_d . Может оказаться, что при конкретных параметрах $\vec{r}, E, \vec{\Omega}, \vec{r}_d, E_d$ такой угол отсутствует, тогда и оценку в этой точке не подсчитывают. С учетом сказанного, окончательное выражение для двойной локальной оценки как сумма при разных столкновениях есть

$$\varepsilon_{RE} = \sum_{k=1}^l g_{RE}(\vec{r}_k, E_k, \vec{\Omega}_k, \vec{r}_d, E_d) \quad (11.21)$$

Дисперсия оценки (11.21) логарифмически расходится по «прицельному параметру» $\rho \sin \alpha$, с которым частица пролетает мимо точечного детектора.

Действуя аналогично, т.е. используя выражения $J_{\text{рас}} = \langle \chi_n^*, \chi \rangle$ или $J_{\text{рас}} = \langle \psi_n^*, \psi \rangle$ нужной (минимальной) степени n , можно построить оценки и для других типов локальных детекторов. Например, для точечного моноэнергетического мононаправленного детектора. Мы не будем этого делать, поскольку выражение оценки получается громоздким и практического значения не имеет. В главе 13 будет показано, что в подобных случаях более удобным может оказаться моделирование сопряженного уравнения переноса.

В заключение приведем на рис.11.4 общую алгоритмическую схему моделирования фазовых состояний с указанием точек вычисления всех полученных оценок.

Оценки по столкновениям ε_{CO} и пересечениям ε_{CR} , а также локальная оценка ε_R вычисляются после розыгрыша транспортного ядра, как только установлена очередная точка столкновения. Оценка по пробегам ε_{PL} также вычисляется после T -ядра, но может существовать и при вылете частицы за границы системы, т.е. когда фактически точки столкновения нет.

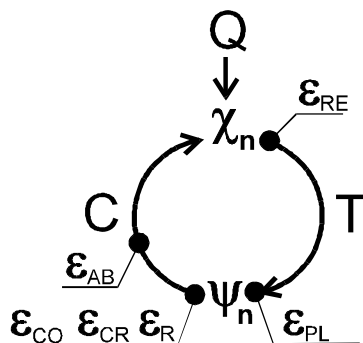


Рис.11.4. Схема алгоритмических точек вычисления различных оценок

Оценка по поглощениям ε_{AB} , как уже упоминалось выше, определяется в процессе розыгрыша C -ядра, если при этом столкновение заканчивается поглощением частицы.

Двойная локальная оценка ε_{RE} должна быть рассчитана перед розыгрышем транспортного ядра. При этом для частиц, только что рожденных в источнике, она даст вклад однократно рассеянного излучения, а в остальных случаях – компонент многократного рассеяния.

Контрольные вопросы

- Перечислите основные оценки метода Монте-Карло.
- Назовите локальные оценки метода Монте-Карло.
- Напишите вид оценки по столкновениям для расчета средней плотности столкновений в объеме детектора.
- Назовите достоинства и недостатки локальных оценок.
- Каковы статистические свойства локальной оценки потока?
- На основе формулы (11.13) напишите локальную оценку

потока для столкновения, заканчивающегося образованием электрон-позитронной пары. При этом рассматривайте последующий вылет аннигиляционного излучения как процесс рассеяния первичного фотона (формула (10.7)).

- Какие оценки вычисляются многократно в течение истории? Какие однократно?

Глава 12. Методы уменьшения дисперсии

Меж ними все рождало споры

И к размышлению влекло...

А.С. Пушкин

§12.1. Неаналоговое моделирование

При рассмотрении в §6.9 вычисления методом Монте-Карло определенных интегралов

$$J = \int_a^b f(x) \cdot p(x) dx,$$

подчеркивалось, что такое представление подынтегрального выражения в виде произведения плотности вероятности $p(x)$ и оценки $f(x)$ не является единственным. Всегда можно перейти к моделированию точек x по другой плотности вероятности $\tilde{p}(x)$, добавив при этом под интеграл дополнительный множитель, равный отношению старой и новой функций:

$$J = \int_a^b f(x) \tilde{p}(x) \cdot \frac{p(x)}{\tilde{p}(x)} dx$$

При моделировании фазовых состояний частиц в качестве плотности вероятности мы использовали отнормированную должным образом реальную функцию источника (глава 8), или имеющее ясный физический смысл транспортное ядро (глава 9), или же ядро столкновений, в точности отражающее физический процесс столкновения частицы с атомом, ядром или электроном (глава 10). Таким образом, на всех трех этапах плотность вероятности выбираемой фазовой точки соответствовала рассматриваемому физическому процессу. Такое моделирование обычно называют *аналоговым*.

В отличие от него, идея *неаналогового* моделирования предполагает замену реальной (аналоговой) плотности вероятности $p(x)$ на некоторую смещенную плотность $\tilde{p}(x)$, выбранную из математических соображений (уменьшение дисперсии результата, сокращение времени расчета и т.п.). При этом вводится понятие *статистического веса* частицы, который

после каждой выборки нового фазового состояния по смещенной плотности изменяется на величину

$$w = \frac{p(\bar{x})}{\tilde{p}(\bar{x})}.$$

После n столкновений итоговый вес частицы будет определяться произведением весов, набранных в результате всех произошедших смещенных розыгрышей:

$$W_n = \prod_{i=0}^n w_i.$$

Индекс $i = 0$ присвоен весу, приобретенному в результате смещения функции источника.

Для того, чтобы смоделировать фазовые точки, соответствующие плотности n -х входящих столкновений, следует использовать связь между компонентами неймановского разложения

$$\psi_n(\bar{x}) = \int K(\bar{x}' \rightarrow \bar{x}) \cdot \psi_{n-1}(\bar{x}') d\bar{x}', \quad (12.1)$$

которая получена на основе уравнения (5.20). Последовательно применяя ее $n-1$ раз, будем иметь:

$$\begin{aligned} \psi_n(\bar{x}) = & \int K(\bar{x}' \rightarrow \bar{x}) \int K(\bar{x}'' \rightarrow \bar{x}') \int \dots \int K(\bar{x}^{(n-1)} \rightarrow \bar{x}^{(n-2)}) \times \\ & \times \int Q(\bar{x}^{(n)}) T(\bar{x}^{(n)} \rightarrow \bar{x}^{(n-1)}) d\bar{x}' d\bar{x}'' \dots d\bar{x}^{(n-1)}. \end{aligned} \quad (12.2)$$

На последнем шаге плотность первых входящих столкновений расписана (см. формулу (5.21)) через функцию источника и транспортное ядро с использованием их обобщенной записи в фазовых координатах.

Неаналоговое моделирование предполагает следующие смещения.

- Для розыгрыша фазовой точки $\bar{x}^{(n)}$ рождения частицы вместо истинной функции источника $Q(\bar{x}^{(n)})$ используются замена $\tilde{Q}(\bar{x}^{(n)})$ и компенсирующий такое смещение статистический вес

$$w_0 = \frac{Q(\bar{x}^{(n)})}{\tilde{Q}(\bar{x}^{(n)})}.$$

- Для получения точки $\bar{x}^{(n-1)}$ первого столкновения истинное транспортное ядро $T(\bar{x}^{(n)} \rightarrow \bar{x}^{(n-1)})$ заменяется смещенным $\tilde{T}(\bar{x}^{(n)} \rightarrow \bar{x}^{(n-1)})$ и вводится компенсация статистическим весом

$$w_1 = \frac{T(\bar{x}^{(n)} \rightarrow \bar{x}^{(n-1)})}{\tilde{T}(\bar{x}^{(n)} \rightarrow \bar{x}^{(n-1)})}.$$

- Для каждого последующего шага получения точки $\bar{x}^{(n-i)}$ i -го столкновения вместо аналогового кинетического ядра $K(\bar{x}^{(n-i+1)} \rightarrow \bar{x}^{(n-i)})$ используется смещенное $\tilde{K}(\bar{x}^{(n-i+1)} \rightarrow \bar{x}^{(n-i)})$ с добавлением статистического веса

$$w_i = \frac{K(\bar{x}^{(n-i+1)} \rightarrow \bar{x}^{(n-i)})}{\tilde{K}(\bar{x}^{(n-i+1)} \rightarrow \bar{x}^{(n-i)})}.$$

Таким образом, к моменту вычисления оценки частица имеет вес, не равный единице. Модифицированные с учетом неаналогового моделирования оценки по столкновениям, пробегам, пересечениям, а также локальная оценка будут иметь вид:

$$\varepsilon = \sum_{k=1}^l \varepsilon_k \prod_{i=0}^k w_i. \quad (12.3)$$

В данной формуле ε_k обозначает конкретное выражение, вычисляемое при каждом столкновении. Оно зависит от вида оценки и искомого функционала (см. 11.1.1, 11.1.3, 11.2.1, 11.2.2). Буквой l , как и ранее, обозначено последнее столкновение частицы перед обрывом ее истории. Для оценки по поглощениям суммирование отсутствует:

$$\varepsilon = \varepsilon_l \prod_{i=0}^l w_i. \quad (12.4)$$

При выборе смещенных ядер или функций плотности вероятности

$$Q(\bar{x}) \rightarrow \tilde{Q}(\bar{x}); T(\bar{x}' \rightarrow \bar{x}) \rightarrow \tilde{T}(\bar{x}' \rightarrow \bar{x}); K(\bar{x}' \rightarrow \bar{x}) \rightarrow \tilde{K}(\bar{x}' \rightarrow \bar{x})$$

для розыгрыша фазовой точки \bar{x} необходимо учитывать следующие ограничения. Смещенные ядра и функции плотности вероятности могут обращаться в 0 только в двух случаях:

- в этой точке соответствующая аналоговая функция (или ядро) равна 0;

- в данной точке равна 0 ценность (входящего/выходящего столкновения) частицы.

Пренебрежение этим правилом приведет к неизбежному искажению результата, а также появлению бесконечного веса.

Общей целью смещения плотности вероятности является увеличение количества столкновений («обогащение статистики») в ценных для конечного результата состояниях. Как правило, это столкновения вблизи детектора или же в тех зонах, влияние на показания детектора которых есть предмет решения задачи. Введение статистического веса гарантирует неизменность общего математического ожидания от возросшего числа столкновений, поскольку каждый создаваемый вклад зачитывается с меньшим весом. Если смещение подобрано разумно, т.е. в детектор заносятся вклады примерно с одинаковыми весами, общая дисперсия результата уменьшится за счет большей выборки, по которой происходит усреднение вклада.

Рассмотрим несколько практически используемых смещений при моделировании истории частицы.

12.1.1. Статистический вес по выживанию

Вводится при смещении ядра столкновения:

$$\tilde{C}(E', \vec{\Omega}' \rightarrow E, \vec{\Omega} | \vec{r}) = \frac{\Sigma_s(E', \vec{\Omega}' \rightarrow E, \vec{\Omega} | \vec{r})}{\Sigma_s(\vec{r}, E')}. \quad (12.5)$$

В отличие от аналогового ядра (10.1), в знаменателе смещенного стоит не полное сечение *взаимодействия*, а интегральное сечение *рассеяния*. Это означает, что частица при столкновении не поглощается, а только рассеивается. Разумеется, данный прием не может быть использован вместе с оценкой по поглощениям. Компенсирующий вес, равный отношению истинного и смещенного ядер, есть просто вероятность частицы выжить после столкновения:

$$w = \frac{C(E', \vec{\Omega}' \rightarrow E, \vec{\Omega} | \vec{r})}{\tilde{C}(E', \vec{\Omega}' \rightarrow E, \vec{\Omega} | \vec{r})} = \frac{\Sigma_s(\vec{r}, E')}{\Sigma(\vec{r}, E')}.$$

Введение такого смещения увеличивает затраты процессорного времени на расчет одной истории и может быть оправданным только, если необходимо обеспечить высокую точность расчета компонента излучения с высокой кратностью рассеянного.

12.1.2. Статистический вес по вылету

Данный вес также используется в случае, когда необходимо обеспечить хорошую статистику в отношении расчета компонента многократно рассеянного излучения. Он предусматривает смещение плотности вероятности длины свободного пробега с целью предотвращения вылета частицы за границу среды. Рассмотрим это на примере однородной среды, в которой соответствующая плотность имеет вид

$$p(x) = \Sigma \exp(-\Sigma x).$$

Пусть x_T есть расстояние от точки вылета частицы из очередного столкновения до границы среды с вакуумом или абсолютно черным телом. Введем смещенную плотность вероятности, нормированную на интервале от 0 до x_T :

$$\tilde{p}(x) = \frac{\Sigma \exp(-\Sigma x)}{1 - \exp(-\Sigma x_T)}.$$

В силу такой нормировки все частицы будут взаимодействовать до пересечения границы среды. Компенсирующий вес при этом будет равен вероятности того, что при аналоговом моделировании частица не вылетит из среды:

$$w = p(x)/\tilde{p}(x) = 1 - \exp(-\Sigma x_T).$$

Данный вес всегда меньше единицы.

12.1.3. Статистический вес по рождению

Представим себе изотропный источник, находящийся вблизи границы среды с вакуумом (рис.12.1). Интуитивно ясно, что частицы, вылетающие в сторону границы с вакуумом, имеют малую вероятность попасть в детектор, и поэтому для рассмотрения малоинтересны. Частицы же, имеющие малые углы вылета θ по отношению к направлению на детектор, должны быть обеспечены большой статистикой.

Для обеспечения преимущественного вылета частиц из источника в сторону детектора истинную (изотропную) плотность вероятности направления вылета целесообразно заменить на смещенную

$$\tilde{p}(\vec{\Omega}) = \frac{1 + a \cdot \cos \theta}{4\pi}. \quad (12.6)$$

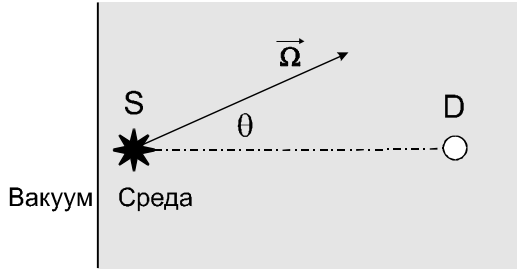


Рис.12.1. К смещению плотности вероятности вылета частиц из источника

Конкретный вид смещенной плотности может, разумеется, быть и другим. Для данной функции регулятором степени смещения является положительный параметр $a < 1$. При $a = 0$ имеем несмещенную плотность. Связанный со смещением статистический вес по рождению будет равен:

$$w = \frac{p(\vec{\Omega})}{\tilde{p}(\vec{\Omega})} = \frac{1}{1 + a \cdot \cos \theta}.$$

При параметр $a = 1$ вес становится неограниченно большим.

12.1.4. Смещение индикатрисы рассеяния

Данный вид неаналогового розыгрыша преследует ту же идею, что и искажение моделируемого углового распределения источника: увеличение количества тех частиц, которые летят в сторону детектора. В качестве смещенной индикатрисы может быть использована функция вида (12.6). При этом θ – угол между вектором скорости частицы после столкновения и направлением на детектор. Компенсирующий статистический вес включает угловую часть дифференциального сечения рассеяния $\Sigma_s(E, \mu_s, \psi | \vec{r})$ и интегральное сечение рассеяния $\Sigma_s(\vec{r}, E)$:

$$w = \frac{\Sigma_s(E, \mu_s, \psi | \vec{r}) \cdot 4\pi}{\Sigma_s(\vec{r}, E) \cdot (1 + a \cdot \cos \theta)}$$

где E – энергия до столкновения, μ_s – косинус угла рассеяния, a – азимутальный угол.

12.1.5. Экспоненциальное преобразование

Экспоненциальное преобразование представляет собой смещение транспортного ядра, предназначенное для решения задачи *глубокого проникания*. Последняя относится к большим (20...40 и более длин свободного пробега, д.с.п.) расстояниям между источником и детектором. Совершенно ясно, что обычное аналоговое моделирование не может решить такую задачу. Вероятность частице преодолеть без взаимодействия расстояние в 20 д.с.п. имеет порядок 10^{-9} . Следовательно, количество историй, смоделированных аналоговым методом, которое бы обеспечило мало-мальски приличную статистику столкновений вблизи детектора, даже для плоской задачи должно, как минимум, иметь порядок 10^{10} - 10^{11} . Трудоемкость такого расчета для современных компьютеров составляет не менее $10^3 \dots 10^4$ часов.

Идея экспоненциального преобразования заключается в смещении сечения взаимодействия (а вместе с ним и транспортного ядра) в зависимости от ориентации вектора скорости частицы по отношению к направлению на детектор (см. рис.12.2):

$$\tilde{\Sigma} = \Sigma - b \cdot \mu . \quad (12.7)$$

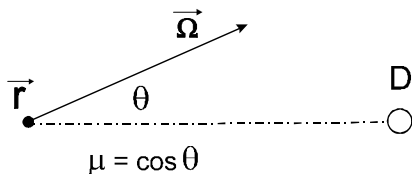


Рис.12.2. К экспоненциальному преобразованию

Положительный параметр b управляет степенью смещения. Его величина ограничена сверху минимальным значением сечения для данной энергии – так, чтобы при любых μ обеспечить положительность действующего смещенного сечения. Как видно из формулы (12.7), для частиц, летящих в сторону детектора, среда

становится оптически более разряженной, обеспечивая большие длины пробега. Напротив, при отрицательных μ среда оказывается оптически плотнее, чем на самом деле, давая возможность частице испытать взаимодействие на малых расстояниях и, возможно, повернуть в сторону детектора.

Выражение для статистического веса частицы с пробегом x приведем для однородной среды:

$$w = \frac{p(x)}{\tilde{p}(x)} = \frac{\Sigma \exp(-\Sigma x)}{\tilde{\Sigma} \exp(-\tilde{\Sigma} x)} = \frac{\Sigma \exp(-b\mu x)}{\Sigma - b\mu}.$$

Как видно из последней формулы, абсолютная величина веса может варьировать в широких пределах. Действительно, с одной стороны, знаменатель может быть весьма мал, если параметр b близок к величине сечения Σ . С другой стороны, в аргументе экспоненты стоит большая (по модулю) величина, если подбором b обеспечены большие пробеги x . Большой динамический диапазон весов, возникающий в одном методе, нежелателен, поскольку дает большую дисперсию конечного результата. В силу этого, к выбору управляющего параметра b надо относиться очень тщательно. Существует несколько подходов, оптимизирующих его выбор. Упомянем лишь один, называемый МД-методом. Он выбирает b каждый раз при очередном столкновении заново в зависимости от взаимного расположения точки столкновения и детектора, а также направления и энергии, с которыми частица вылетает из столкновения. Выбираемый параметр должен обеспечить минимум дисперсии вкладов в детектор от всех возможных столкновений, лежащих на направлении вылета частицы.

§12.2. Моделирование по ценности

Как видно из предыдущего параграфа, статистические веса – богатый и мощный инструмент для смещения моделируемых распределений. Однако выбор смещенной функции до сих пор основывался на интуитивном желании обогатить статистику частиц в интересных, близких к детектору областях за счет остальных. Задача настоящего параграфа – сформулировать подход к выбору оптимальной смещенной функции, дающей минимальное значение дисперсии конечного результата.

Подобная задача рассматривалась в §6.9 для вычисления методом Монте-Карло определенного интеграла. Там же был найден метод выборки по важности, позволяющий в идеале получить нулевую дисперсию. Идея метода заключалась в том, чтобы выбирать случайные точки из области интегрирования тем чаще, чем больший вклад они вносят в общую величину интеграла, т.е. чем важнее они для результата в целом.

Теперь, имея разработанный аппарат сопряженных функций и, в частности, функции ценности частиц, можно реализовать тот же самый подход к моделированию историй частиц, выбирая фазовые точки на каждом этапе алгоритма пропорционально их ценности по отношению к искомому функционалу:

$$J = \langle P^*, \psi \rangle. \quad (12.8)$$

Разлагая плотность входящих столкновений в ряд Неймана и используя для его компонентов представление (12.2), получим следующий аналог формулы (12.8):

$$J = \int \sum_{n=1}^{\infty} P^*(\bar{x}) \int K(\bar{x}' \rightarrow \bar{x}) \int K(\bar{x}'' \rightarrow \bar{x}') \int \dots \int K(\bar{x}^{(n-1)} \rightarrow \bar{x}^{(n-2)}) \times \\ \times \int \psi_1(\bar{x}^{(n-1)}) d\bar{x}' d\bar{x}'' \dots d\bar{x}^{(n-1)} d\bar{x}. \quad (12.9)$$

Разрабатываемый подход моделирования по ценности будет продемонстрирован на примере оценки по поглощениям. Эта оценка вычисляется только однажды за историю частицы, поэтому для нее будет отсутствовать суммирование. Технология данной оценки такова: при каждом входящем столкновении, задаваясь некоторой вероятностью гибели $g(\bar{x})$ в данной фазовой точке, разыгрываем исход столкновения. Если частица поглощается, вычисляем оценку и прекращаем данную историю. Обычно (аналоговое моделирование) в качестве вероятности поглощения берут

$$g(\bar{r}, E) = \Sigma_a(\bar{r}, E) / \Sigma(\bar{r}, E). \quad (12.10)$$

Запишем выражение для функционала (12.9) в виде оценки по поглощениям:

$$\dot{J} = \int P^*(\bar{x}) \frac{g(\bar{x})}{g(\bar{x})} \int K(\bar{x}' \rightarrow \bar{x}) \int \dots \int K(\bar{x}^{(n-1)} \rightarrow \bar{x}^{(n-2)}) \times \quad (12.11)$$

$$\times \int \psi_1(\bar{x}^{(n-1)}) d\bar{x}' d\bar{x}'' \dots d\bar{x}^{(n-1)} d\bar{x}.$$

В числитель и знаменатель добавлена моделируемая вероятность поглощения $g(\bar{x})$. Напомним, что в данном интеграле точка $\bar{x}^{(n-1)}$ соответствует первому столкновению, $\bar{x}^{(n-2)}$ – второму, ..., \bar{x}' – $(n-1)$ -му, а \bar{x} – n -му, последнему, в котором частица поглотилась.

Реализация моделирования по ценности интеграла (12.11) заключается в следующем.

▪ На шаге моделирования фазовых точек, соответствующих плотности первых входящих столкновений, вместо аналоговой функции $\psi_1(\bar{x}^{(n-1)})$ будем использовать смещенную, выбирая точки тем чаще, чем больше их ценность:

$$\tilde{\psi}_1(\bar{x}^{(n-1)}) = \frac{\psi_1(\bar{x}^{(n-1)})\psi^*(\bar{x}^{(n-1)})}{\int \psi_1(\bar{y})\psi^*(\bar{y})d\bar{y}}. \quad (12.12)$$

Интеграл в знаменателе (12.12) обеспечивает нормировку смещенной плотности вероятности. Компенсирующий вес равен отношению истинной и смещенной функций:

$$w_1 = \frac{\psi_1(\bar{x}^{(n-1)})}{\tilde{\psi}_1(\bar{x}^{(n-1)})} = \frac{\int \psi_1(\bar{y})\psi^*(\bar{y})d\bar{y}}{\psi^*(\bar{x}^{(n-1)})}. \quad (12.13)$$

▪ На каждом последующем шаге моделирования точки i -го столкновения вместо аналогового ядра $K(\bar{x}^{(n-i+1)} \rightarrow \bar{x}^{(n-i)})$ будем использовать смещенное:

$$\tilde{K}(\bar{x}^{(n-i+1)} \rightarrow \bar{x}^{(n-i)}) = \frac{K(\bar{x}^{(n-i+1)} \rightarrow \bar{x}^{(n-i)})\psi^*(\bar{x}^{(n-i)})}{\psi^*(\bar{x}^{(n-i+1)})}, \quad (12.14)$$

в числитель которого по-прежнему добавлена ценность конечного состояния, а в знаменателе стоит ценность начального. Заметим, что смещенное кинетическое ядро имеет нормировку меньше 1, поскольку из уравнения (5.22) следует, что:

$$\psi^*(\bar{x}) = P^*(\bar{x}) + \int K(\bar{x} \rightarrow \bar{x}')\psi^*(\bar{x}')d\bar{x}'.$$

Оно в этом смысле ничем не хуже аналогового кинетического ядра, норма которого тоже меньше 1, хотя бы уже потому, что существует поглощение. Статистические вес, который компенсирует внесенное смещение ядра имеет вид:

$$w_i = \frac{K(\bar{x}^{(n-i+1)} \rightarrow \bar{x}^{(n-i)})}{\tilde{K}(\bar{x}^{(n-i+1)} \rightarrow \bar{x}^{(n-i)})} = \frac{\psi^*(\bar{x}^{(n-i+1)})}{\psi^*(\bar{x}^{(n-i)})}. \quad (12.15)$$

▪ Последний этап связан с розыгрышем поглощения частицы. Вместо аналоговой функции вида (12.10) будем моделировать специальную плотность

$$g(\bar{x}) = \frac{P^*(\bar{x})}{\psi^*(\bar{x})}. \quad (12.16)$$

Последняя преследует ту же идею ценностного подхода: будем обрывать историю тем чаще, чем больше ожидаемый в данной фазовой точке непосредственный вклад в детектор (функция P^* стоит в числителе). В то же время, чем меньше непосредственный вклад в данной точке по сравнению со всем потенциальным вкладом в детектор, который отражает стоящая в знаменателе ценность, тем реже в этой точке должно происходить поглощение.

Таким образом, оценка на основе выражения (12.11), вычисляемая при поглощении частицы, будет с учетом накопленного статистического веса выглядеть как

$$\begin{aligned} \varepsilon_{AB} = \frac{P^*(\bar{x})}{g(\bar{x})} \prod_{i=1}^n w_i = \psi^*(\bar{x}) \frac{\psi^*(\bar{x}')}{\psi^*(\bar{x})} \cdot \frac{\psi^*(\bar{x}'')}{\psi^*(\bar{x}')} \cdot \dots \cdot \frac{\psi^*(\bar{x}^{(n-i+1)})}{\psi^*(\bar{x}^{(n-i)})} \cdot \dots \times \\ \times \frac{\psi^*(\bar{x}^{(n-1)})}{\psi^*(\bar{x}^{(n-2)})} \cdot \frac{\int \psi_1(\bar{y}) \psi^*(\bar{y}) d\bar{y}}{\psi^*(\bar{x}^{(n-1)})}. \end{aligned}$$

Нетрудно видеть, что после сокращения окончательный вид оценки станет много проще:

$$\varepsilon_{AB} = \int \psi_1(\bar{y}) \psi^*(\bar{y}) d\bar{y}. \quad (12.17)$$

Обратим внимание, что оценка (12.17) не зависит от конкретной фазовой точки \bar{x} , в которой произошло поглощение. Это означает, что во всех точках оценка будет одной и той же, т.е. она обладает нулевой дисперсией! Абсолютное значение оценки можно установить, расписав плотность первых столкновений через

функцию источника и транспортное ядро с помощью уравнений (4.26) и (4.27)

$$\varepsilon_{AB} = \iint T(\bar{x} \rightarrow \bar{y}) Q(\bar{x}) \psi^*(\bar{y}) d\bar{x} d\bar{y}$$

и заметив, что свертка транспортного ядра с ценностью входящих столкновений дает ценность выходящих (см. формулу (5.19)), получить окончательно:

$$\varepsilon_{AB} = \int Q(\bar{x}) \chi^*(\bar{x}) d\bar{x} = J. \quad (12.18)$$

Таким образом, получена несмещенная оценка искомого функционала с нулевой дисперсией. К сожалению, реализовать данный подход мешает одно обстоятельство: нужно априори знать функцию ценности во всем пространстве. Если бы она, однако, каким-то образом стала известной, искомым функционал мог бы быть вычислен непосредственно из выражения (12.8).

Впрочем, так же как и в случае с вычислением обычного интеграла с помощью выборки по важности, полученный результат интересен не только теоретически. На практике его используют, предварительно выполняя приблизительный расчет функции ценности для упрощенной задачи. Ориентируясь на эту грубую оценку функции ценности, проводят основной расчет поставленной задачи с помощью моделирования по ценности. Разумеется, нулевая дисперсия при этом не достигается, но выигрыш в эффективности расчета может быть очень значителен.

§12.3. Расщепление и русская рулетка

Метод *расщепления*, так же как и неаналоговое моделирование, нацелен на увеличение статистики в тех фазовых областях, которые представляют интерес с точки зрения решения конкретной задачи.

Частица, влетающая в такую интересную область, расщепляется на пучок из n идентичных по фазовому состоянию частиц. При этом вес каждой дочерней частицы устанавливается в n меньшим веса материнской частицы (рис.12.3). Так что суммарный вес пучка образованных частиц сохраняется. В дальнейшем история каждой частицы продолжается независимо.

Метод *русской рулетки* предназначен для экономии процессорного времени за счет сокращения статистики частиц в неинтересных областях, вклад из которых в детектор незначителен. Судьба частицы, попавшей в такую область, определяется случайно (розыгрышем): с вероятностью p она выживает, а с вероятностью $1-p$ – погибает. Вес выжившей частицы увеличивается в $1/p$ раз, так что математическое ожидание веса «выживания» оказывается равным весу первоначальной частицы (рис.12.4).

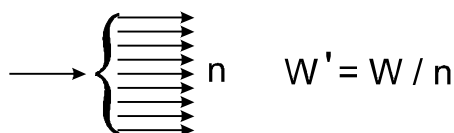


Рис.12.3. Схема расщепления

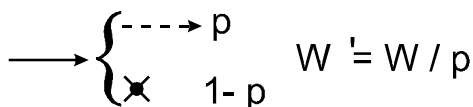


Рис.12.4. Схема русской рулетки

При выборе параметров расщепления n и выживания при рулетке p лучше опираться на ценностный подход. Пусть частица переходит из фазовой точки \bar{x}' в точку \bar{x} . В параграфе §12.2 установлено, что идеальному ценностному моделированию соответствует замена истинного ядра на смещенное, в которое входит отношение ценностей в конечной и начальной точках (см. формулу (12.14)):

$$\lambda = \psi^*(\bar{x}) / \psi^*(\bar{x}'). \quad (12.19)$$

Выше уже обсуждались проблемы, связанные с недостатком знаний о функции ценности. Будем, однако, предполагать, что она известна хотя бы приближенно.

Тогда, если $\lambda < 1$, должна происходить рулетка, поскольку ценность частицы при переходе уменьшилась, и параметр рулетки $p = \lambda$. Если же ценность возросла, т.е. $\lambda > 1$, то частица подвергается расщеплению, причем с вероятностью 1 запускается $n = [\lambda]$ частиц и дополнительно, с вероятностью $\lambda - [\lambda]$, – еще одна частица. Квадратные скобки обозначают целую часть числа.

При рассмотрении неаналогового моделирования отмечалось, что в ряде случаев (как, например, при экспоненциальном преобразовании) может иметь место широкий диапазон вариации весов частиц, что негативно сказывается на дисперсии конечного результата. Рулетка и расщепление предоставляют механизм удержания весов частиц в пределах заданного весового окна. Ширина весового окна задается значениями максимального W_{\max} и минимального W_{\min} допустимого веса (рис.12.5), причем обычно $W_{\max} \approx 10W_{\min}$.

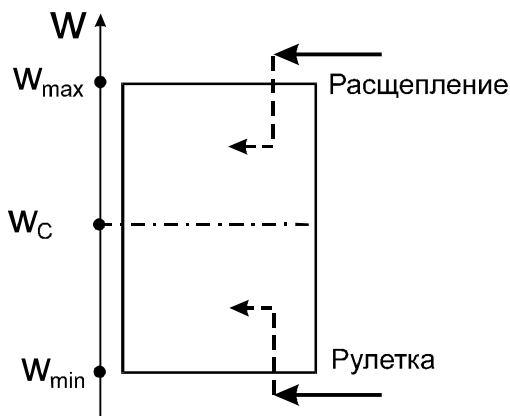


Рис.12.5. Метод весового окна

Для частиц, которые имеют вес, больший чем W_{\max} , применяется расщепление, в результате которого вес уменьшается. Параметр расщепления n подбирается так, чтобы новый вес $W' = W/n$ оказался как можно ближе к «центру окна»

$$W_C = \sqrt{W_{\max} W_{\min}} .$$

Частицы с весом, меньшим чем W_{\min} , подвергаются действию рулетки, в результате которой они либо погибают, либо увеличивают свой вес. Вероятность выживания p выбирается из аналогичных соображений: $p = W/W_C$.

Контрольные вопросы

- ❑ Что такое статистический вес?
- ❑ Приведите примеры использования статистического веса.
- ❑ Каковы ограничения на введение смещенной плотности вероятности?

- ❑ Какова основная идея метода экспоненциального преобразования?
- ❑ Как выглядит смещенное ядро переноса при моделировании по ценности?
- ❑ Что дает идеальная реализация моделирования по ценности?
- ❑ Как на практике может быть использовано моделирование по ценности?

Глава 13. Моделирование сопряженного уравнения переноса методом Монте-Карло

*Там скука, там обман иль бред;
В том совести, в том смысла нет*
А.С. Пушкин

§13.1. Выбор стратегии

Прежде чем начать рассмотрение технологии моделирования сопряженного уравнения переноса методом Монте-Карло, следует сначала правильно определить стратегию этого моделирования. Стратегия – это те функции, которые лежат в основе плотности моделируемых фазовых состояний.

Вспомним, как это делалось для прямого уравнения. Несмотря на то, что было получено сначала интегродифференциальное (3.9), а затем и интегральное (4.12) уравнение переноса для плотности потока частиц $\varphi(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$, мы ввели дополнительные прямые функции – плотность входящих $\psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$ и выходящих $\chi(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$ столкновений. Именно для них была записана система интегральных уравнений (4.20) и (4.21), неймановское разложение которых (4.26) – (4.28) и послужило основой для построения прямого алгоритма Монте-Карло: моделировались фазовые состояния, соответствующие плотности входящих столкновений. Расчет искомого функционала строился как вычисление обычного, хотя и 6-мерного, интеграла:

$$\dot{J}_P = \langle P^*, \psi \rangle = \langle P, \varphi \rangle. \quad (13.1)$$

При этом, однако, существовала альтернатива. Действительно, судя по эквивалентности записи (13.1), вполне можно было моделировать фазовые состояния, соответствующие плотности потока частиц, и на них вычислять как оценку функцию детектора $P(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$.

Давайте посмотрим, какие «технологические» уравнения для такого прямого *потокоподобного* моделирования можно получить из системы (4.26) – (4.28). Сначала вспомним связь между компонентами неймановского разложения плотности потока и плотности входящих столкновений:

$$\varphi_{n-1}(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \psi_n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) / \Sigma(\vec{r}, E)$$

и для симметрии аналогичным образом введем еще одну потоковую функцию:

$$\phi_n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \chi_{n-1}(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) / \Sigma(\vec{r}, E).$$

Теперь, разделив уравнения (4.26) – (4.28) на сечение взаимодействия, получим искомую потокоподобную систему интегральных уравнений:

$$\phi_0(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \equiv Q(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) / \Sigma(\vec{r}, E) \quad (13.2)$$

$$\phi_n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \int_{\infty} T(\vec{r}' \rightarrow \vec{r} | E, \vec{\Omega}) \cdot \frac{\Sigma(\vec{r}', E)}{\Sigma(\vec{r}, E)} \phi_n(\vec{r}', E, \vec{\Omega}) d\vec{r}' \quad (13.3)$$

$$\phi_n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \int_{0}^{\infty} \int_{4\pi} C(E', \vec{\Omega}' \rightarrow E, \vec{\Omega} | \vec{r}) \frac{\Sigma(\vec{r}, E')}{\Sigma(\vec{r}, E)} \phi_{n-1}(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') dE' d\vec{\Omega}'. \quad (13.4)$$

После розыгрыша точки, распределенной по ϕ_0 , из уравнения (13.2) следует разыграть новую фазовую точку, соответствующую плотности потока частиц, исходя из транспортного ядра вместе с дополнительным множителем, которые стоят под интегралом (13.3). Распишем его явно:

$$\begin{aligned} T_{\phi}(\vec{r}' \rightarrow \vec{r} | E, \vec{\Omega}) &= T(\vec{r}' \rightarrow \vec{r} | E, \vec{\Omega}) \frac{\Sigma(\vec{r}', E)}{\Sigma(\vec{r}, E)} = \\ &= \frac{\Sigma(\vec{r}', E)}{|\vec{r} - \vec{r}'|^2} \cdot e^{-\tau(\vec{r}' \rightarrow \vec{r}, E)} \cdot \delta(\vec{\Omega} - \frac{\vec{r} - \vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|}). \end{aligned} \quad (13.5)$$

К сожалению, полученное транспортное ядро для плотности потока является ненормированным, поскольку, в отличие от обычного Т-ядра (4.16), в числителе стоит сечение не от конечной \vec{r} , а от начальной точки \vec{r}' . Этой трудности можно, казалось бы, избежать, используя для розыгрыша новой точки обычное нормированное ядро (4.16), а множитель $\Sigma(\vec{r}', E) / \Sigma(\vec{r}, E)$ учесть как статистический вес частицы. Однако при этом величина статвеса будет варьировать практически неограниченно: сечения в разных точках многокомпонентной среды могут отличаться на несколько порядков.

Следующий шаг алгоритма – это розыгрыш новой энергии и направления движения, следуя подынтегральному ядру в уравнении (13.4). Как видим, новое ядро столкновений для

плотности потока частиц также отличается от обычного С-ядра (4.17):

$$C_\varphi(E', \bar{\Omega}' \rightarrow E, \bar{\Omega} | \bar{r}) = \frac{\Sigma_s(E', \bar{\Omega}' \rightarrow E, \bar{\Omega} | \bar{r})}{\Sigma(\bar{r}, E)}. \quad (13.6)$$

Главное отличие заключается в том, что в знаменателе стоит, в отличие от прежнего ядра, сечение взаимодействия не от начальной энергии, а от конечной, которую только предстоит разыграть. Прежнее С-ядро для плотности столкновений (4.17) можно было представить в виде произведения двух физически очевидных сомножителей:

$$\begin{aligned} C(E', \bar{\Omega}' \rightarrow E, \bar{\Omega} | \bar{r}) &= \frac{\Sigma_s(E', \bar{\Omega}' \rightarrow E, \bar{\Omega} | \bar{r})}{\Sigma(\bar{r}, E')} = \\ &= \frac{\Sigma_s(\bar{r}, E')}{\Sigma(\bar{r}, E')} \times \frac{\Sigma_s(E', \bar{\Omega}' \rightarrow E, \bar{\Omega} | \bar{r})}{\Sigma_s(\bar{r}, E')}. \end{aligned} \quad (13.7)$$

Первый сомножитель это вероятность выжить в результате столкновения. Второй – нормированная плотность вероятности энергии и направления движения после рассеяния. Алгоритм розыгрыша естественно распадается на два шага: сначала выясняется, поглощается частица или рассеивается, а затем разыгрываются новые энергия и направление вектора скорости.

Ядро столкновений вида (13.6) такой возможности не предоставляет. Если хотим сохранить привычный порядок моделирования, придется замещать ядро C_φ прежним С-ядром, а множитель $\Sigma(\bar{r}, E')/\Sigma(\bar{r}, E)$ вводить в статвес.

Приведенные примеры наглядно демонстрируют, к каким серьезным проблемам могут привести ошибки в выборе стратегии моделирования. Мы их избежали только потому, что с самого начала при моделировании прямого уравнения переноса взяли за основу не плотность потока частиц, а плотность их столкновений.

Перейдем к выбору базисных функций для моделирования сопряженного уравнения. Уже известная функция ценности $\varphi^+(\bar{r}, E, \bar{\Omega})$ есть решение интегродифференциального уравнения (5.11), которое является сопряженным по отношению к прямому уравнению переноса для плотности потока частиц (3.9). Она представляет собой плотность потока вообразаемых

псевдочастиц, свойства которых обсуждали в §5.4. В силу этого она для моделирования не пригодна. Функции ценности входящих и выходящих столкновений, несмотря на свое название, также не годятся, поскольку являются потокоподобными. Действительно, в том же §5.4 указывалось на тождественность функции $\chi^*(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$ и плотности потока псевдочастиц $\varphi^+(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$. Кроме того уравнение (5.19), связывающее функции χ^* и ψ^* , содержит транспортное ядро, транспонированное по отношению к начальной и конечной точке:

$$\chi^*(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \int_{\infty} T(\vec{r} \rightarrow \vec{r}' | E, \vec{\Omega}) \cdot \psi^*(\vec{r}', E, \vec{\Omega}) d\vec{r}'. \quad (13.8)$$

Это ядро с точностью до знака перед вектором $\vec{\Omega}$ совпадает с $T_{\varphi}(\vec{r}' \rightarrow \vec{r} | E, \vec{\Omega})$ -ядром, входящим в потокоподобную систему уравнений (13.4) – (13.6). Как следствие, транспортное ядро уравнения (13.8) разделяет самый крупный недостаток T_{φ} -ядра – ненормированность. Все это указывает на потокоподобность функций χ^* и ψ^* .

Для моделирования сопряженного уравнения переноса нам понадобятся функции, которые представляют собой *плотность столкновений псевдочастиц (сопряженных частиц)*.

Введем их по аналогии с введением в §4.3 плотности столкновений обычных частиц. Будем называть *плотностью входящих столкновений псевдочастиц* функцию

$$\chi^+(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \chi^*(\vec{r}, E, -\vec{\Omega}) \cdot \Sigma(\vec{r}, E), \quad (13.9)$$

а *плотностью выходящих столкновений псевдочастиц* функцию

$$\psi^+(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \psi^*(\vec{r}, E, -\vec{\Omega}) \cdot \Sigma(\vec{r}, E). \quad (13.10)$$

Обратим внимание, что плотность *выходящих* столкновений псевдочастиц образуется из ценности *входящих* столкновений и наоборот. Ценность относится к обычным частицам, а плотность столкновений в данном случае – к псевдочастицам, которые движутся в противоположном, по отношению к обычным частицам, направлении (смена знака у вектора $\vec{\Omega}$ как раз отражает этот факт). Поэтому фазовое состояние, которое для обычных частиц является конечным, т.е. «после столкновения», для

сопряженных выглядит начальным, т.е. «до столкновения», и наоборот.

§13.2. Базовые уравнения для сопряженного моделирования

При моделировании прямого уравнения переноса в качестве базовых технологических уравнений была использована система уравнений (4.26) – (4.28) для неймановских компонентов плотности входящих и выходящих столкновений.

Получим подобную систему для сопряженного моделирования, используя имеющиеся уравнения для ценности столкновений (5.16), (5.17), а также связь ценности обычных столкновений с плотностью столкновений псевдочастиц (13.9), (13.10). Для этого обе части уравнений (5.16), (5.17) надо умножить на сечение $\Sigma(\vec{r}, E)$ и произвести замены в соответствии с формулами (13.9), (13.10):

$$\psi^+(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = P^*(\vec{r}, E, -\vec{\Omega}) \cdot \Sigma(\vec{r}, E) + \int_0^\infty \int_{4\pi} \frac{\Sigma_S(E, -\vec{\Omega} \rightarrow E', -\vec{\Omega}' | \vec{r})}{\Sigma(\vec{r}, E')} \cdot \chi^+(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') dE' d\vec{\Omega}'$$

$$\chi^+(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \int_\infty^\infty \frac{\Sigma(\vec{r}, E)}{|\vec{r} - \vec{r}'|^2} \cdot e^{-\tau(\vec{r} \rightarrow \vec{r}', E)} \cdot \delta(-\vec{\Omega} - \frac{\vec{r}' - \vec{r}}{|\vec{r}' - \vec{r}|}) \cdot \psi^+(\vec{r}', E, \vec{\Omega}) d\vec{r}'$$

Примем во внимание связь (5.4) между двумя функциями детектора: $P(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = P^*(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \cdot \Sigma(\vec{r}, E)$. Учтем, что $\Sigma_S(E, \vec{\Omega} \rightarrow E', \vec{\Omega}' | \vec{r}) = \Sigma_S(E, -\vec{\Omega} \rightarrow E', -\vec{\Omega}' | \vec{r})$. Признаем, что оптическое расстояние инвариантно к взаимной замене начальной и конечной точек $\tau(\vec{r} \rightarrow \vec{r}', E) = \tau(\vec{r}' \rightarrow \vec{r}, E)$. В результате получим:

$$\psi^+(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = P(\vec{r}, E, -\vec{\Omega}) + \int_0^\infty \int_{4\pi} C^+(E', \vec{\Omega}' \rightarrow E, \vec{\Omega} | \vec{r}) \chi^+(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') dE' d\vec{\Omega}' \quad (13.11)$$

$$\chi^+(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \int_{\infty} T(\vec{r}' \rightarrow \vec{r} | E, \vec{\Omega}) \cdot \psi^+(\vec{r}', E, \vec{\Omega}) d\vec{r}' . \quad (13.12)$$

В уравнении (13.11) сопряженное ядро столкновения C^+ обозначает

$$C^+(E', \vec{\Omega}' \rightarrow E, \vec{\Omega} | \vec{r}) = \frac{\Sigma_s(E, \vec{\Omega} \rightarrow E', \vec{\Omega}' | \vec{r})}{\Sigma(\vec{r}, E')} . \quad (13.13)$$

Оно по форме вполне соответствует прямому ядру столкновений, только конечная энергия E у него больше начальной E' .

Напишем уравнения для компонентов разложения плотностей столкновения псевдочастиц в ряд Неймана:

$$\psi_0^+(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = P(\vec{r}, E, -\vec{\Omega}), \quad (13.14)$$

$$\chi_n^+(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \int_{\infty} T(\vec{r}' \rightarrow \vec{r} | E, \vec{\Omega}) \cdot \psi_{n-1}^+(\vec{r}', E, \vec{\Omega}) d\vec{r}' , \quad (13.15)$$

$$\psi_n^+(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \int_0^{\infty} \int_{4\pi} C^+(E', \vec{\Omega}' \rightarrow E, \vec{\Omega} | \vec{r}) \chi_n^+(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') dE' d\vec{\Omega}' . \quad (13.16)$$

Полученный набор уравнений (13.14) – (13.16) является базовой технологической системой для конструирования алгоритма моделирования сопряженного уравнения переноса излучения.

§13.3. Общий алгоритм сопряженного моделирования

Не будем забывать, что конечной целью моделирования здесь является вычисление некоторого функционала, который может быть записан двояко (см. формулу (5.8)): либо как интеграл от решения прямого уравнения переноса излучения для плотности потока частиц, либо как интеграл от решения сопряженного для ценности.

При решении данной задачи моделированием прямого уравнения была использована модификация этого интеграла в виде (7.1), в которую явно входила моделируемая плотность столкновений частиц ψ :

$$J = \langle \psi, P / \Sigma \rangle .$$

Для построения решения на основе сопряженного уравнения следует опираться на соответствующую модификацию с моделируемой функцией χ^+ :

$$J = \langle \chi^+, Q/\Sigma \rangle. \quad (13.17)$$

Следовательно, общая схема вычисления функционала J будет такой:

- с помощью базовых уравнений (13.14) – (13.16) необходимо получить набор случайных фазовых точек $(\vec{r}_\xi, E_\xi, \vec{\Omega}_\xi)$ в пространстве координат, энергий и направлений, плотность которых отвечала бы плотности столкновений псевдочастиц, а именно – функции $\chi^+(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$;
- в каждой такой точке вычислить значение оценки $Q(\vec{r}_\xi, E_\xi, \vec{\Omega}_\xi) / \Sigma(\vec{r}_\xi, E_\xi)$;
- определить для числа испытаний N выборочное среднее

$$j_N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (Q/\Sigma)_i,$$

которое, как известно, при достаточно большом N сходится к истинному значению J .

Подобно тому, как это было сделано в §7.2, моделирование фазовых состояний разобьем на три основных шага, схема которых показана на рис.13.1.

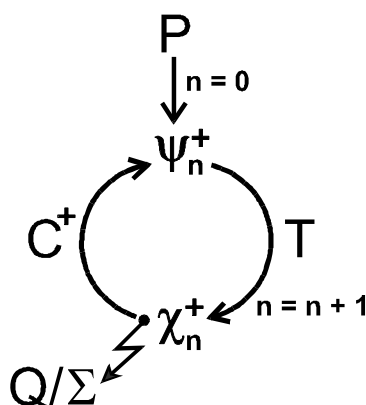


Рис.13.1. Схема моделирования сопряженного уравнения переноса

На **шаге 1** выбираем фазовую точку рождения псевдочастицы в псевдоисточнике, роль которого, как следует из уравнения (13.14), играет функция детектора. Случайная точка рождения разыгрывается из нормированной плотности:

$$p(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \frac{P(\vec{r}, E, -\vec{\Omega})}{P_0}. \quad (13.18)$$

Нормировочная константа

$$P_0 = \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^4 \int_{4\pi} P(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) d\vec{r} dE d\vec{\Omega} \neq 1$$

должна быть учтена при окончательном вычислении результата. Ее можно интерпретировать как стартовый статистический вес частицы. Действительно, формально она есть отношение аналоговой функции $P(\vec{r}, E, -\vec{\Omega})$, из которой следовало бы разыгрывать рождение псевдочастицы, к смещенной (нормированной). При этом следует помнить, что этот статвес несет размерность, зависящую от размерности искомого функционала: $[J] \cdot [\text{Мэв} \cdot \text{ср} \cdot \text{см}^2]$. По окончании первого шага фазовое состояние соответствует плотности нулевых выходящих столкновений псевдочастиц $\psi_0^+(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$.

Шаг 2 выполняем точно так же, как и для прямого уравнения. Он заключается в розыгрыше транспортного ядра, которое в уравнении (13.15), благодаря правильному выбору базисных функций, идентично прямому ядру в формуле (4.27). Все технологические детали нахождения точки очередного столкновения были изложены в главе 9. После этого шага фазовое состояние соответствует плотности первых входящих столкновений псевдочастиц $\chi_1^+(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$.

Содержание **шага 3** составляет розыгрыш сопряженного ядра столкновений. Он существенно отличается от своего прямого аналога.

Сопряженное ядро не может быть столь естественно, как прямое (13.7), разложено на вероятность выживания при столкновении и нормированную плотность вероятности конечных состояний псевдочастицы. Нормированная плотность вероятности для энергии и направления движения после сопряженного рассеяния, очевидно, есть:

$$p^+(E, \vec{\Omega}) = \frac{\Sigma_s(E, \vec{\Omega} \rightarrow E', \vec{\Omega}' | \vec{r})}{\Sigma_s^+(\vec{r}, E')}, \quad (13.19)$$

где «интегральное сечение сопряженного рассеяния» формально определяется как:

$$\Sigma_s^+(\vec{r}, E') = \int_{E'}^{E_{\max}} \int_{4\pi} \Sigma_s(E, \vec{\Omega} \rightarrow E', \vec{\Omega}' | \vec{r}) dE d\Omega. \quad (13.20)$$

Обратим внимание, что интегрирование ведется по всем начальным состояниям рассеяния обычной частицы, которые являются конечными для псевдочастиц. Как уже отмечалось, при сопряженном рассеянии энергия возрастает, поэтому пределы интегрирования – от E' до максимально возможной энергии E_{\max} . Кавычки в названии величины $\Sigma_s^+(\vec{r}, E')$ подчеркивают ее абстрактность, не поддержанную конкретным физическим смыслом. Все эти особенности сопряженного ядра столкновений делают его моделирование одним из самых сложных моментов реализации метода Монте-Карло для сопряженного уравнения. Более подробно они будут рассмотрены в специальных параграфах §§13.4, 13.5.

Итогом шага 3 является фазовое состояние, соответствующее плотности выходящих столкновений псевдочастицы (рис.13.1). Проделав шаги 2 и 3 один раз, мы смоделировали плотность первых входящих и выходящих столкновений. Последовательно повторяя эти шаги в согласии с уравнениями (13.15), (13.16), можно смоделировать столкновения любой кратности.

§13.4. Сопряженное ядро столкновений при комптоновском рассеянии

Рассмотрим более внимательно верхний предел по энергиям в случае комптоновского рассеяния фотонов. Согласно известной связи между энергиями E до и E' после рассеяния находим:

$$E = \frac{E'}{1 - E'(1 - \cos \theta_s) / \varepsilon}, \quad (13.21)$$

где, как и раньше, θ_s обозначает угол рассеяния, а $\varepsilon = 0,511$ МэВ. При единичном акте комптоновского сопряженного рассеяния

максимальная энергия псевдофотона достигается, если угол рассеяния равен π .

$$E_{\pi} = \frac{E'}{1 - 2E'/\varepsilon}. \quad (13.22)$$

Нетрудно видеть, что при начальной энергии псевдофотона

$$E' \geq \varepsilon/2 = 0,255 \text{ МэВ}$$

максимальная энергия не ограничена: $E_{\pi} = \infty$. Это отражает следующий факт при комптоновском рассеянии обычного фотона. Сколь велика ни была бы его начальная энергия, после рассеяния на угол π она станет близка к 0,255 МэВ. Следовательно, для верхнего предела в интеграле (13.20) справедливо:

$$E_{\max} = \begin{cases} E_{\pi}, & \text{если } E' < \varepsilon/2 \\ \infty, & \text{если } E' \geq \varepsilon/2 \end{cases}. \quad (13.23)$$

Выписав явно формулу Клейна-Нишины-Тамма для дифференциального сечения (см. формулы (10.11) и (10.12)), легко убедиться, что «интегральное сечение сопряженного рассеяния» $\Sigma_s^+(\vec{r}, E')$ при бесконечном верхнем пределе по энергиям в формуле (13.20) логарифмически расходится. В этом, впрочем, нет ничего удивительного, поскольку это «сечение» не имеет никакого физического смысла. Оно есть просто формальный интеграл. Однако для того, чтобы $\Sigma_s^+(\vec{r}, E')$ могло обеспечить нормировку плотности (13.19), оно, разумеется, должно быть конечным.

В качестве решения данной проблемы может быть использован следующий очевидный подход: верхнее значение энергии, достигаемой после сопряженного рассеяния, естественно ограничить максимальной энергией действующего источника E_{\max}^Q . Действительно, как следует из формулы (13.17), вклад в функционал дадут только те псевдочастицы, энергия которых лежит в пределах функции источника. Псевдочастица, набравшая большую энергию, обладает в этом смысле нулевой «сопряженной ценностью», поскольку при дальнейших рассеяниях энергия такой частицы только возрастет. Следовательно, ее история, как бесполезная, может быть оборвана.

Второй метод розыгрыша сопряженного комптоновского рассеяния разработал Л. Коблингер [32]. Метод предполагает сначала розыгрыш энергии, а затем — направления движения.

Следуя ядру столкновений (13.13), энергию E после сопряженного рассеяния надо выбирать из дифференциального только по энергиям сечения комптоновского рассеяния:

$$\Sigma_S(E \rightarrow E' | \vec{r}) = n_e(\vec{r}) \cdot \pi r_0^2 \frac{\varepsilon}{E^2} \left(\frac{E'}{E} + \frac{E}{E'} - 1 + \left(1 - \frac{\varepsilon}{E'} + \frac{\varepsilon}{E} \right)^2 \right). \quad (13.24)$$

Для обеспечения конечной нормировки Л. Коблингер предложил вместо аналоговой функции (13.24) использовать смещенную плотность вероятности:

$$\tilde{p}(E) = \frac{E'}{E} \times \frac{1}{E^2} \left(\frac{E'}{E} + \frac{E}{E'} - 1 + \left(1 - \frac{\varepsilon}{E'} + \frac{\varepsilon}{E} \right)^2 \right) \times \frac{1}{A_N}, \quad (13.25)$$

которая получена из сечения (13.24) добавлением множителя E'/E , отбрасыванием постоянных множителей и введением константы нормировки A_N . Дополнительный множитель решает проблему расходимости: конечная нормировка смещенной функции даже при бесконечном верхнем пределе обеспечена.

Технология розыгрыша полученной функции по Коблингеру предполагает следующие обозначения

$$X = \frac{E'}{E}; \quad \alpha' = \frac{E'}{\varepsilon}$$

и переход от плотности $\tilde{p}(E)$ к функции для X

$$\tilde{f}(X) = X \left[\frac{1}{X} + X + \left(1 + \frac{X}{\alpha'} - \frac{1}{\alpha'} \right)^2 - 1 \right]; \quad X_0 \leq X \leq 1, \quad (13.26)$$

где левая граница диапазона изменения переменной X :

$$X_0 = \begin{cases} 1 - 2\alpha', & \text{если } \alpha' < 1/2 \\ 0, & \text{если } \alpha' \geq 1/2 \end{cases}$$

Функцию (13.26) удобно представить как сумму трех функций:

$$\tilde{f}(X) = \tilde{f}_1(X) + \tilde{f}_2(X) + \tilde{f}_3(X),$$

$$\tilde{f}_1(X) = X^2, \quad \tilde{f}_2(X) = 1 - X, \quad \tilde{f}_3(X) = X \cdot (X - 1 + \alpha')^2 / \alpha'^2.$$

Интегрируя каждую из них в пределах от X_0 до 1, получим соответствующие значения интегралов:

$$I_1 = \frac{(1 - X_0^3)}{3}; \quad I_2 = \frac{(1 - X_0)^2}{2};$$

$$I_3 = \frac{1}{\alpha'^2} \left[(\alpha' - 1)^2 \frac{1 - X_0^2}{2} + 2(\alpha' - 1) \frac{1 - X_0^3}{3} + \frac{1 - X_0^4}{4} \right].$$

Обратим внимание, что все интегралы конечны, а значит, и с общей нормировкой все в порядке. Обозначим ее

$$I^+ = I_1 + I_2 + I_3.$$

Тогда нормированная функция плотности вероятности, сконструированная на основе $\tilde{f}(X)$, будет выглядеть следующим образом:

$$f(X) = C_1 \cdot g_1(X) + C_2 \cdot g_2(X) + C_3 \cdot g_3(X),$$

где

$$C_i = I_i / I^+; \quad g_i(X) = \tilde{f}_i(X) / I_i.$$

Определение случайного значения X_ξ проводится методом суперпозиции (см. §6.7). Сначала по коэффициентам C_i выбирается одна из трех функций $g_i(X)$, а затем разыгрывается X_ξ для конкретной функции:

1) функция $g_1(X) = X^2 / I_1$:

$$\text{при } X_0 \neq 0: \quad X_\xi = \left[\xi (1 - X_0^3) + X_0^3 \right]^{1/3},$$

$$\text{при } X_0 = 0: \quad X_\xi = \max\{\xi_1, \xi_2, \xi_3\}^1$$

2) функция $g_2(X) = (1 - X) / I_2$:

$$\text{при } X_0 \neq 0: \quad X_\xi = 1 - (1 - X_0) \max\{\xi_1, \xi_2\},$$

$$\text{при } X_0 = 0: \quad X_\xi = \min\{\xi_1, \xi_2\}^2$$

3) функция $g_3(X) = X \cdot (X - 1 + \alpha')^2 / \alpha'^2 I_3$ разыгрывается методом исключения (§6.6). Если $X_0 = 0$, то быстрее выбирать X_ξ

¹ Корень $\sqrt[n]{\xi}$ распределен так же, как и максимум из n независимых случайных чисел.

² Выражение $1 - \sqrt[n]{\xi}$ распределено так же, как и минимум из n независимых случайных чисел.

из моделирующей функции $f(X) = 2X / (1 - X_0)^2$, а в качестве исключаяющей использовать остальные сомножители функции $g_3(X)$. Если же $X_0 \neq 0$, то экономнее, напротив, выбирать X_ξ из моделирующей функции $f(X) = 3(X - 1 + \alpha')^2 / (\alpha'^3 - (X_0 - 1 + \alpha')^3)$, оставив все остальное для исключения. Таким образом:

при $X_0 = 0$ выбираем $X_\xi = \max\{\xi_1, \xi_2\}$ и если $\xi_3 \leq (X_\xi - 1 + \alpha')^2 / \alpha'^2$, принимаем его как результат, иначе повторяем выбор;

при $X_0 \neq 0$ выбираем $X_\xi = s_\xi \alpha' \cdot \max\{\xi_1, \xi_2, \xi_3\} + 1 - \alpha'$ и если $X_\xi \leq \xi_4$, принимаем его как результат, иначе повторяем выбор; s_ξ – случайный знак, равновероятно принимающий значение ± 1 .

Новая энергия после сопряженного рассеяния выбрана. Угол рассеяния между векторами $\vec{\Omega}$ и $\vec{\Omega}'$ после этого определяется однозначно. Азимутальный угол положения плоскости, в которой лежит вектор $\vec{\Omega}'$, разыгрывается равномерно в интервале от 0 до 2π .

Однако при розыгрыше энергии имело место смещение плотности распределения. Вместо плотности переходов между состояниями (псевдочастицы), рекомендованной уравнением в виде сопряженного ядра столкновений (13.13) получили энергию из функции (13.25). Компенсирующий статистический вес есть их отношение:

$$W_C^+ = \frac{n_e(\vec{r}) \cdot \pi r_0^2 \varepsilon I^+}{\Sigma(\vec{r}, E') E'} \cdot \frac{E}{E'}. \quad (13.27)$$

После получения новой энергии, как и при прямом комптоновском рассеянии, вычисляется угол рассеяния по формуле (10.21). Азимутальный угол поворота разыгрывается равномерно. Новый вектор направления движения находится с помощью преобразования (10.22).

§13.5. Сингулярные сопряженные ядра столкновений

Сингулярными ядрами столкновений будем называть такие, которые в качестве выходных состояний имеют дискретный

спектр по энергии.

Для примера приведем уже встречавшееся ранее (10.7) дифференциальное сечение рассеяния, которое на самом деле представляет собой процесс образования электрон-позитронной пары и последующую генерацию аннигиляционного излучения

$$\Sigma_n(E', \vec{\Omega}' \rightarrow E, \vec{\Omega} | \vec{r}) = \frac{2 \times \Sigma_n(\vec{r}, E')}{4\pi} \delta(E - \varepsilon).$$

Стоящая в правой части δ -функция отражает дискретность конечных энергетических состояний такого «рассеяния». Аналогичная ситуация возникает при учете фотонов характеристического излучения атома, сопровождающего фотоэлектрическое поглощение: вылетающие фотоны имеют дискретный спектр, однозначно заданный энергетическими уровнями данного атома.

Наличие δ -функции по энергии в дифференциальном сечении рассеяния – необходимый, но недостаточный признак сингулярности ядра. К примеру, когерентное рассеяние фотонов имеет дифференциальное сечение вида

$$\Sigma_{KT}(E', \vec{\Omega}' \rightarrow E, \vec{\Omega} | \vec{r}) = n_a(\vec{r}) \frac{r_0^2}{2} (1 + \cos^2 \theta_s) F^2(E', \theta_s) \delta(E - E'),$$

где $F(E', \theta_s)$ – атомный форм-фактор. Однако когерентно рассеянные частицы могут иметь любую энергию (равную начальной) и поэтому дискретного спектра не образуют.

В общем случае дифференциальное сечение рассеяния представимо как сумма двух компонентов: регулярного и сингулярного рассеяния

$$\Sigma_s(E', \vec{\Omega}' \rightarrow E, \vec{\Omega} | \vec{r}) = \Sigma_{RG}(E', \vec{\Omega}' \rightarrow E, \vec{\Omega} | \vec{r}) + \Sigma_{SG}(E', \vec{\Omega}' \rightarrow E, \vec{\Omega} | \vec{r}), \quad (13.28)$$

где сингулярный компонент

$$\Sigma_{SG}(E', \vec{\Omega}' \rightarrow E, \vec{\Omega} | \vec{r}) = m \cdot \Sigma_X(\vec{r}, E') \delta(E - E_X) f_X(\vec{\Omega}' \vec{\Omega}) \quad (13.29)$$

содержит полное сечение данного сингулярного X -процесса $\Sigma_X(\vec{r}, E')$, множественность вторичных частиц m и плотность вероятности вылета вторичных частиц $f_X(\vec{\Omega}' \vec{\Omega})$. Для простоты будем считать, что дискретный спектр представлен только монолинией E_X . Обобщение на случай нескольких сингулярных

процессов, каждый из которых обладает несколькими линиями, не представляет труда, но сделает выкладки громоздкими.

С учетом двух слагаемых сечения рассеяния перепишем базовое уравнение (13.16):

$$\begin{aligned} \psi_n^+(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = & \int_0^\infty \int_{4\pi} \frac{\Sigma_{RG}(E, \vec{\Omega} \rightarrow E', \vec{\Omega}' | \vec{r})}{\Sigma(\vec{r}, E')} \chi_n^+(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') dE' d\Omega' + \\ & + m \Sigma_X(\vec{r}, E) \int_{4\pi} \frac{f_X(\vec{\Omega}' \vec{\Omega})}{\Sigma(\vec{r}, E_X)} \chi_n^+(\vec{r}, E_X, \vec{\Omega}') d\Omega'. \end{aligned} \quad (13.30)$$

Как видно, промоделировать второе слагаемое обычным образом невозможно, поскольку для этого надо получить случайные фазовые состояния, лежащие в гиперплоскости $E' = E_X$. Воспользуемся связью между компонентами разложения сопряженной плотности столкновений и для $n > 1$ приведем уравнение (13.30) к виду:

$$\begin{aligned} \psi_n^+(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = & \int_0^\infty \int_{4\pi} \frac{\Sigma_{RG}(E, \vec{\Omega} \rightarrow E', \vec{\Omega}' | \vec{r})}{\Sigma(\vec{r}, E')} \chi_n^+(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') dE' d\Omega' + \\ & + m \frac{\Sigma_X(\vec{r}, E)}{\Sigma(\vec{r}, E_X)} \int_{4\pi} f_X(\vec{\Omega}'' \vec{\Omega}) \int_{-\infty}^\infty T(\vec{r}' \rightarrow \vec{r} | E_X, \vec{\Omega}'') \times \\ & \times \int_0^\infty \int_{4\pi} \frac{\Sigma_{RG}(E_X, \vec{\Omega}'' \rightarrow E', \vec{\Omega}' | \vec{r}')}{\Sigma(\vec{r}', E')} \chi_{n-1}^+(\vec{r}', E', \vec{\Omega}') dE' d\Omega' d\vec{r}' d\Omega''. \end{aligned} \quad (13.31)$$

Получили форму уравнения, которую можно моделировать: второй компонент суммы теперь содержит интегралы по всевозможным энергиям и направлениям.

Наличие справа двух слагаемых, каждое из которых содержит интеграл по плотности входящих сопряженных столкновений, указывает на то, что в фазовой точке $(\vec{r}, E', \vec{\Omega}')$ придется расщепить историю сопряженной частицы на две ветки. Технология моделирования расщепления частиц описана ранее в §10.3.

Первая ветка означает, что частица при столкновении испытывает сопряженное регулярное рассеяние, попадает в непрерывную энергетическую область, и дальнейшая ее судьба обычна.

Вторая ветка предполагает, что частица после сопряженного регулярного рассеяния оказывается в дискретной части спектра, т.е. имеет фиксированную энергию E_X . Ветка может реализоваться, только если в результате однократного сопряженного рассеяния (например, комптоновского) вообще возможен переход $E' \rightarrow E_X$. Для комптоновского рассеяния эта возможность определяется формулой (13.21).

Итак, вторая ветка, соответствующая второму слагаемому в формуле (13.31), состоит из следующих шагов, которые начинаются в фазовой точке $(\vec{r}', E', \vec{\Omega}')$:

Шаг 1. Разыгрывается новое направление $\vec{\Omega}''$ движения псевдочастицы после сопряженного столкновения. Искомый вектор определяется углом сопряженного рассеяния, который однозначно задается переходом $E' \rightarrow E_X$, а также азимутальным углом φ , который распределен равномерно. Таким образом, для розыгрыша $\vec{\Omega}''$ достаточно розыгрыша угла φ – с помощью метода обратных функций (8.7) или метода Неймана, который дает сразу тригонометрические функции этого угла (8.8). Вес псевдочастицы умножается на фактор

$$\frac{\Sigma_{RG}(E_X \rightarrow E' | \vec{r}')}{\Sigma(\vec{r}', E')} . \quad (13.32)$$

Данный шаг отражает переход сопряженной частицы из состояния с непрерывным спектром в дискретное энергетическое состояние. Отметим, что это состояние нельзя отнести к обычному. Добавленный весовой фактор (13.32) имеет размерность $[1/E]$, а частицу с размерным весом следует считать виртуальной. После окончания шага псевдочастица переходит в фазовую точку $(\vec{r}', E_X, \vec{\Omega}'')$.

Шаг 2. Обычным образом разыгрывается транспортное ядро $T(\vec{r}' \rightarrow \vec{r} | E_X, \vec{\Omega}'')$, т.е. пробег псевдочастицы, заканчивающийся в фазовой точке $(\vec{r}, E_X, \vec{\Omega}'')$.

Шаг 3. С помощью плотности вероятности $f_X(\vec{\Omega}'' | \vec{\Omega})$ производится розыгрыш нового направления движения псевдочастицы. Фазовое состояние становится $(\vec{r}, E_X, \vec{\Omega})$.

Шаг 4. Переводит частицу в состояние с непрерывным спектром. Он включает розыгрыш новой энергии E . Формула (13.31) содержит функцию $\Sigma_X(\vec{r}, E)$, которую, чтобы использовать в качестве плотности вероятности, остается только отнормировать:

$$\frac{\Sigma_X(\vec{r}, E)}{\int_0^{\infty} \Sigma_X(\vec{r}, E) dE} \quad (13.33)$$

Реально нижний предел нормировочного интеграла в знаменателе (13.33) должен соответствовать пороговому значению энергии, при котором сингулярный X -процесс становится возможным, т.е. сечение $\Sigma_X(\vec{r}, E)$ становится положительным. Новая энергия разыгрывается из плотности (13.33), а в статистический вес псевдочастицы добавляется множитель

$$m^0 \frac{\int_0^{\infty} \Sigma_X(\vec{r}, E) dE}{\Sigma(\vec{r}, E_X)}, \quad (13.34)$$

сконструированный на основе формулы (13.31) с учетом введенной нормировки.

Как видим, новый множитель имеет размерность $[E]$, и таким образом выводит псевдочастицу из виртуального состояния. Действительно, произведение весов (13.32) и (13.34) безразмерно.

Итогом шага 4 является псевдочастица в фазовой точке $(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$, соответствующей плотности выходящих сопряженных столкновений $\psi_n^+(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$, имеющая реальное (не виртуальное) состояние.

Далее вторая ветка моделируется обычным для сопряженной частицы образом.

При $n = 1$ уравнение (13.30) неверно, поскольку компонент χ_0^+ не существует. Вместо этого случая следует использовать следующее уравнение:

$$\begin{aligned} \psi_1^+(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = & \int_0^\infty \int_{4\pi} \frac{\Sigma_{RG}(E, \vec{\Omega} \rightarrow E', \vec{\Omega}' | \vec{r})}{\Sigma(\vec{r}, E')} \chi_1^+(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') dE' d\Omega' + \\ & + m \frac{\Sigma_X(\vec{r}, E)}{\Sigma(\vec{r}, E_X)} \int_{4\pi} f_X(\vec{\Omega}'' \vec{\Omega}) \int_\infty T(\vec{r}' \rightarrow \vec{r} | E_X, \vec{\Omega}'') P(\vec{r}', E_X, -\vec{\Omega}'') d\vec{r}' d\Omega''. \end{aligned} \quad (13.35)$$

Оно означает, что для моделирования второй ветки при $n = 1$ необходимо реализовать некоторый набор историй, начинающихся с розыгрыша функции детектора.

Шаг 1. Выбор начального фазового состояния частицы из функции детектора $P(\vec{r}', E', -\vec{\Omega}'')$, но не во всем фазовом пространстве, а только на гиперплоскости $E' = E_X$. В отличие от стандартной технологии, изложенной в §13.3, энергия псевдочастицы сразу принимается равной E_X . При этом стартовый вес будет определяться нормировкой

$$P'_0 = \int_\infty \int_0^\infty \int_{4\pi} P(\vec{r}, \vec{\Omega}) d\vec{r} d\vec{\Omega},$$

а его размерность равна $[P'_0 / E]$, т.е. не совпадает с размерностью обычно выбираемой псевдочастицы. Таким образом, частица, запущенная по данной ветке, оказывается виртуальной и находится в дискретном энергетическом состоянии.

Шаги 2 – 4 выполняются точно так же, как описано выше. Причем шаг 4, как и раньше, вводит дополнительный вес с размерностью $[E]$, который переводит псевдочастицу из виртуального дискретного энергетического состояния в обычное с непрерывным энергетическим спектром.

Дополнительные ветки, запущенные из детектора с дискретным спектром, являются самостоятельными, независимыми от остальных историями. Вклад в функционал, созданный на них, необходимо сложить с функционалом, полученным на остальных историях, а общая погрешность будет складываться из погрешностей двух статистически независимых результатов:

$$J = J_1 + J_2; \quad \delta J = \sqrt{\delta J_1^2 + \delta J_2^2}.$$

§13.6. Сопряженные оценки

Как уже обсуждалось в §13.3, основой для расчета функционала поля излучения при моделировании сопряженного уравнения переноса является следующее выражение:

$$\dot{J} = \langle \chi^+, Q / \Sigma \rangle. \quad (13.36)$$

В отличие от прямых оценок, конкретный вид которых определялся вычисляемым функционалом, сопряженные оценки полностью зависят от функции источника.

13.6.1. Распределенный источник

Так будем называть источник, функция которого регулярна по всем своим переменным, т.е. не содержит δ -функции ни по одной из них. Для него формула (13.36) позволяет непосредственно построить основную сопряженную оценку по входящим столкновениям:

$$\varepsilon_{CO}^+ = \sum_{k=1}^l \frac{Q(\vec{r}_k, E_k, -\vec{\Omega}_k)}{\Sigma(\vec{r}_k, E_k)} W_k, \quad (13.37)$$

где W_k – статистический вес, накопленный сопряженной частицей к моменту k -го столкновения. Как видим, оценка по столкновениям весьма проста, ограничена и обладает конечной дисперсией независимо от свойств детектора. Однако, если фазовый объем, занимаемый источником, невелик, добиться хорошей статистики для результата будет непросто.

13.6.2. Распределенный источник с дискретным спектром излучения

Примером такого источника являются любые объемные источники, образованные радиоактивными веществами. Этот класс источников часто встречается на практике: резервуары с радиоактивными отходами, атмосферные выбросы радиоактивных веществ и т.п. Несмотря на возможную значительность физических размеров этих источников (атмосферные выбросы!), их фазовый объем равен 0, и простая оценка (13.37) для них бесполезна. В силу фазовой локализации на энергетической переменной придется построить для таких источников соответствующую локальную оценку.

В конце §5.5 была получена формула (5.30), которая в данном случае окажется полезной при $n = 1$:

$$j = \langle \psi_1, P^* \rangle + \langle \chi_1, \chi^* \rangle. \quad (13.38)$$

Нетрудно видеть, что первый член суммы представляет собой вклад нерассеянного излучения, расчет которого обычно не представляет каких-то трудностей. Оценку будем строить для второго компонента, равного вкладу рассеянного излучения. Для плотности первых выходящих столкновений из уравнений (4.26) – (4.28) получим:

$$\begin{aligned} \chi_1(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = & \int_0^\infty \int_{4\pi} C(E', \vec{\Omega}' \rightarrow E, \vec{\Omega} | \vec{r}) \int_\infty^\infty T(\vec{r}' \rightarrow \vec{r} | E', \vec{\Omega}') \times \\ & \times \frac{Q(\vec{r}') \delta(E' - E_0)}{4\pi} d\vec{r}' dE' d\Omega'. \end{aligned} \quad (13.39)$$

Здесь ограничились случаем, когда радионуклид излучает частицы только одной энергии E_0 . Функция $Q(\vec{r})$ здесь имеет смысл полной мощности источника в единице объема вокруг точки \vec{r} .

Выразим точку источника \vec{r}' через точку \vec{r} , в которой фиксируем столкновение: $\vec{r}' = \vec{r} + R\vec{\omega}$. Сделаем соответствующую замену переменных в дифференциале объема: $d\vec{r}' = R^2 dR d\omega$. Подставим явный вид T - и C -ядер, обозначая оптическое расстояние: $\tau(R) = \tau(\vec{r} - R\vec{\Omega}' \rightarrow \vec{r} | E_0)$. Выполним очевидное интегрирование по энергии dE' и по телесному углу $d\omega$. В результате получим:

$$\chi_1(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \int_{4\pi} \Sigma_s(E_0, \vec{\Omega}' \rightarrow E, \vec{\Omega} | \vec{r}) \int_0^\infty \frac{e^{-\tau(R)} Q(\vec{r} - R\vec{\Omega}')}{4\pi} dR d\Omega'.$$

Запишем дифференциальное сечение комптоновского рассеяния как

$$\Sigma_s(E_0, \vec{\Omega}' \rightarrow E, \vec{\Omega} | \vec{r}) = \Sigma_s(E_0 \rightarrow E | \vec{r}) \frac{1}{2\pi} \delta\left(\vec{\Omega}'\vec{\Omega} - 1 + \frac{\varepsilon}{E} - \frac{\varepsilon}{E_0}\right),$$

что позволит, обозначая $\mu = \vec{\Omega}'\vec{\Omega}$ и представляя $d\vec{\Omega}' = d\mu d\phi$, выполнить интегрирование по $d\mu$. В результате для плотности первых выходящих столкновений имеем

$$\chi_1(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \int_0^{2\pi} \frac{\Sigma_s(E_0 \rightarrow E | \vec{r})}{2\pi} \int_0^\infty \frac{e^{-\tau(R)} Q(\vec{r} - R\vec{\Omega}')}{4\pi} dR d\phi. \quad (13.40)$$

На основе полученного выражения сконструируем оценку, которая, как показывает формула (13.38), должна вычисляться в тот момент, когда фазовое состояние соответствует ценности выходящих столкновений χ^* (или плотности входящих столкновений сопряженных частиц χ^+). Это означает, что каждый раз после розыгрыша свободного пробега псевдочастицы, т.е. когда установлена точка ее очередного столкновения \vec{r} , энергия E и направление движения (на рис.13.1 оно соответствует вектору $-\vec{\Omega}$) при входе в сопряженное столкновение, необходимо:

- проверить, возможно ли сопряженное рассеяние из текущей энергии E в энергию источника E_0 , и вычислить необходимый для этого угол рассеяния θ_s ;
- равномерно разыграть азимутальный угол ϕ для вычисления соответствующего интеграла в выражении (13.39) и таким образом установить направление $\vec{\Omega}'$;
- вдоль данного направления определить точки пересечения с границами области источника $R_1(\vec{\Omega}')$ и $R_2(\vec{\Omega}')$;
- вычислить (методом Монте-Карло, численно или, если возможно, аналитически) следующий интеграл:

$$I(\vec{r}, E_0, \vec{\Omega}') = \int_{R_1}^{R_2} \exp\left(-\int_0^R \Sigma(\vec{r} - R'\vec{\Omega}', E_0) dR'\right) Q(\vec{r} - R\vec{\Omega}') dR; \quad (13.41)$$

- найти значение выражения для локальной по энергии сопряженной оценки

$$g_E^+(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, E_0) = \frac{\Sigma_s(E_0 \rightarrow E | \vec{r}) \cdot I(\vec{r}, E_0, \vec{\Omega}')}{4\pi \Sigma(\vec{r}, E)}. \quad (13.42)$$

С помощью величины 2π в знаменателе формулы (13.40), была образована плотность вероятности для оценки интеграла по $d\phi$ методом Монте-Карло по одному случайному узлу. В общем случае можно взять n узлов интегрирования, т.е. n раз разыграть случайный угол ϕ , вычислить интеграл I , а выражение для $g_E^+(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$ усреднить по n получившимся результатам. Явный вид дифференциального по энергии сечения рассеяния приведен в

формуле (13.24). Полное сечение взаимодействия в знаменателе есть следствие того, что моделирование фазовых состояний реализовано по плотности входящих столкновений сопряженных частиц χ^+ , а не по функции ценности χ^* (см. §13.2 и §13.3).

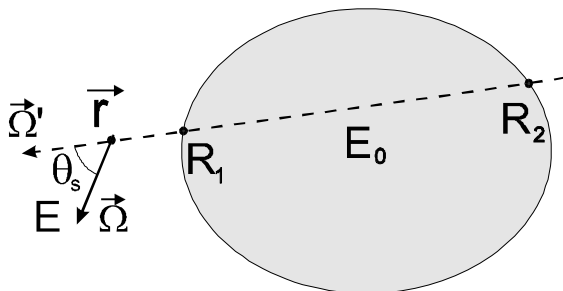


Рис.13.1. К вычислению сопряженной оценки для распределенного моноэнергетического источника

Таким образом, сама локальная по энергии сопряженная оценка представляет собой

$$\mathcal{E}_E^+ = \sum_{k=1}^l g_E^+(\vec{r}_k, E_k, \vec{\Omega}_k, E_0) \cdot W_k. \quad (13.43)$$

Вычисление полученной оценки (13.43) с учетом выражений (13.41), (13.42) довольно трудоемко. Несмотря на громоздкость, локальная по энергии сопряженная оценка (13.43) является ограниченной и обладает конечной дисперсией.

Впрочем, для часто встречающегося случая равномерного источника и однородной среды внутри источника (резервуар с радиоактивной жидкостью и т.п.) интеграл (13.41) вычисляется аналитически. Если же перенос происходит в бесконечной однородной среде, полностью и равномерно заполненной моноэнергетическим изотропным источником, выражение (13.42) для оценки становится предельно простым:

$$g_E^+(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, E_0) = \frac{\Sigma_s(E_0 \rightarrow E)}{2\Sigma(E)\Sigma(E_0)}. \quad (13.44)$$

В силу пространственной симметрии характеристики поля во всех точках одинаковы, а само поле изотропно. Если при этом регистрируется интегральная характеристика поля, без

зависимости от направления, то для плотностей входящих и выходящих столкновений прямых и сопряженных частиц справедливо

$$\begin{aligned}\chi_n^+(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) &\equiv \psi_{n-1}^+(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \\ \psi_n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) &\equiv \chi_{n-1}(\vec{r}, E, \vec{\Omega}).\end{aligned}$$

В таком случае необходимость в розыгрыше транспортного ядра отпадает, и моделирование траектории частицы ведется только по энергетической оси.

13.6.3. Точечный источник с дискретным спектром излучения

Компактный (точечный) радиоактивный источник излучения часто встречается на практике. Его функция описывается выражением

$$Q(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \frac{Q_0}{4\pi} \delta(E - E_0) \delta(\vec{r} - \vec{r}_0) \quad (13.45)$$

и содержит две δ -функции, исключающие возможность построения для него обычной сопряженной оценки.

Действуя так же, как и в предыдущем п.13.6.2, воспользуемся выражением (5.30) при $n = 1$, однако теперь для плотности и ценности входящих столкновений обычных частиц:

$$J_P = \langle \psi_1, P^* \rangle + \langle \psi_2, \psi^* \rangle. \quad (13.46)$$

По-прежнему, будем строить оценку только для вычисления вклада рассеянного излучения, т.е. второго слагаемого в сумме (13.46).

Благодаря δ -функциям интегралы по пространству и по энергии в выражении (13.39) для плотности первых выходящих столкновений легко берутся. После интегрирования получим:

$$\chi_1(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \int_{4\pi} C(E_0, \vec{\Omega}' \rightarrow E, \vec{\Omega} | \vec{r}) T(\vec{r}_0 \rightarrow \vec{r} | E_0, \vec{\Omega}') \cdot \frac{Q_0}{4\pi} d\Omega'.$$

Для плотности вторых входящих столкновений с помощью уравнения (4.27) можно получить:

$$\begin{aligned}\psi_2(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) &= \int_{\infty} T(\vec{r}' \rightarrow \vec{r} | E, \vec{\Omega}) \cdot \int_{4\pi} C(E_0, \vec{\Omega}' \rightarrow E, \vec{\Omega} | \vec{r}') \times \\ &\times T(\vec{r}_0 \rightarrow \vec{r}' | E_0, \vec{\Omega}') \cdot \frac{Q_0}{4\pi} d\Omega' d\vec{r}'.\end{aligned} \quad (13.47)$$

Подставим явный вид T - и C -ядер и после преобразований получим:

$$\begin{aligned} \psi_2(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \frac{Q_0}{4\pi} \Sigma(\vec{r}, E) \int_0^\infty \exp(-\tau_0(R) - \tau_1(R)) \times \\ \times \frac{\Sigma_s(E_0, \vec{\omega}_R \rightarrow E, \vec{\Omega} | \vec{r} - R\vec{\Omega} - \vec{r}_0)}{|\vec{r} - R\vec{\Omega} - \vec{r}_0|^2} dR. \end{aligned} \quad (13.48)$$

При этом использованы обозначения для оптических расстояний: $\tau_0(R) = \tau(\vec{r}_0 \rightarrow \vec{r} - R\vec{\Omega} | E_0)$ и $\tau_1(R) = \tau(\vec{r} - R\vec{\Omega} \rightarrow \vec{r} | E)$, а также для единичного вектора направления: $\vec{\omega}_R = (\vec{r} - R\vec{\Omega} - \vec{r}_0) / |\vec{r} - R\vec{\Omega} - \vec{r}_0|$ (см. рис.13.2).

В формуле (13.48) жесткая связь между углом рассеяния θ_s и изменением энергии присутствует в виде δ -функции в дифференциальном сечении рассеяния. Если за одно рассеяние возможен переход из энергии источника E_0 в заданную энергию E , то угол рассеяния θ_s определяется однозначно. Он, в свою очередь, однозначно определяет удаление R , т.е. единственную точку на луче $-\vec{\Omega}$, где такое рассеяние возможно. Выполнив, благодаря δ -функции, интегрирование аналитически, сформулируем следующий алгоритм расчета сопряженной локальной оценки для точечного источника.

Как показывает формула (13.46), оценка должна вычисляться в тот момент, когда фазовое состояние соответствует ценности входящих столкновений ψ^* (или плотности выходящих столкновений сопряженных частиц ψ^\dagger). Он наступает сразу после розыгрыша рассеяния псевдочастицы в точке \vec{r} ее очередного столкновения, когда установлены новые энергия E и направление движения (на рис.13.2 оно соответствует вектору $-\vec{\Omega}$). Всякий раз при выходе из сопряженного столкновения, следует:

- проверить, возможно ли сопряженное рассеяние из текущей энергии E в энергию источника E_0 , и вычислить необходимый для этого угол рассеяния θ_s ;
- по углу рассеяния θ_s рассчитать удаление R , т.е. задать единственную точку, где рассеяние на данный угол приведет к попаданию в точку источника;
- вычислить следующее выражение для локальной сопряженной оценки (использованы обозначения рис.13.2):

$$g_{RE}^+(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, \vec{r}_0, E_0) = \frac{Q_0}{4\pi} \frac{\Sigma_s(E_0 \rightarrow E | \vec{r} - R\vec{\Omega})}{2\pi \rho \sin \alpha \sin \theta_s} \times \exp(-\tau_0(R) - \tau_1(R)). \quad (13.49)$$

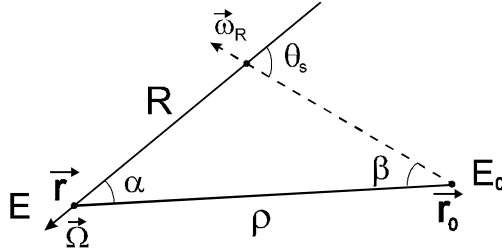


Рис.13.2. К вычислению сопряженной локальной оценки для моноэнергетического источника

Сама локальная по пространству и энергии сопряженная оценка представляет собой сумму:

$$\varepsilon_{RE}^+ = \sum_{k=1}^l g_{RE}^+(\vec{r}_k, E_k, \vec{\Omega}_k, \vec{r}_0, E_0) \cdot W_k. \quad (13.50)$$

Вычисление локальной оценки (13.50) не столь трудоемко, как оценки (13.43). Однако по статистическим свойствам она проигрывает последней, поскольку является неограниченной. Дисперсия оценки (13.50) логарифмически расходится по «прицельному параметру» $\rho \sin \alpha$, с которым псевдочастица пролетает мимо точечного источника.

Контрольные вопросы

- Каковы основные недостатки при использовании ценности столкновений в качестве базовых функций моделирования сопряженного уравнения?
- Какие сопряженные функции являются базовыми для моделирования сопряженного уравнения?
- Как связаны между собой плотность столкновения псевдочастиц и ценность столкновений?
- Чем отличаются розыгрыши свободного пробега псевдочастиц и обычных частиц?
- В чем особенности розыгрыша столкновения сопряженных частиц?

- Перечислите методы преодоления формальной неограниченности полного сечения рассеяния для псевдочастиц.
- В чем особенность моделирования сингулярных ядер столкновения при сопряженном моделировании?
- В чем преимущества моделирования сопряженного уравнения перед моделированием прямого?
- Для каких задач сопряженные оценки имеют наиболее простой вид?
- Каковы статистические свойства сопряженных оценок для распределенного источника с дискретным спектром?

Глава 14. Аппарат сопряженных функций в задачах радиационной физики

*Всего, что знал еще Евгений,
Пересказать мне недосуг...
А.С. Пушкин*

§14.1. Вычисление линейных функционалов

Как уже было установлено (см. §5.2), любой функционал может быть рассчитан двояко:

- на основе решения прямого уравнения для плотности потока (или плотности столкновений), которое затем сворачивается с функцией детектора

$$J = \langle \varphi, P \rangle = \langle \psi, P^* \rangle \quad (14.1)$$

или

- на основе решения сопряженного уравнения для ценности частиц, которое сворачивается с функцией источника

$$J = \langle \varphi^+, Q \rangle = \langle \chi^+, Q / \Sigma \rangle. \quad (14.2)$$

Ранее было показано, что оба подхода могут быть реализованы методом Монте-Карло. С точки зрения вычислительных затрат они, однако, отнюдь не эквивалентны. В зависимости от свойств конкретных функций детектора и источника предпочтительным может оказаться как прямой, так и сопряженный подход.

Для задач с локальным источником и протяженным в фазовом пространстве детектором выгоднее использовать обычный (прямой) метод. Локальные источники просто и эффективно разыгрываются, а протяженные детекторы дают возможность применять простые ограниченные оценки (по столкновениям, пробегам и т.п.), которые обладают хорошими статистическими свойствами.

Задачи с локализованным детектором и протяженным источником предпочтительнее решать сопряженным моделированием. В этом случае оценки получаются проще, а розыгрыш псевдоисточника, построенного на основе локализованной функции детектора, – эффективным.

Задачи с точечным детектором тоже могут решаться прямым, а задачи с точечным источником – сопряженным моделированием. Однако такое использование метода Монте-Карло требует применения локальных оценок, имеющих, как было показано, расходящуюся дисперсию.

Таким образом, выбор подхода остается за математиком, решающим конкретную задачу переноса излучения. Если степень локальности функций источника и детектора примерно одинакова, то и для прямого, и для сопряженного моделирования потребуются примерно одинаковые по сложности оценки. Для таких задач следует предпочесть прямой метод моделирования, как более разработанный в реализации.

§14.2. Вычисление билинейных функционалов

Функционалы вида (14.1) или (14.2) являются линейными по отношению к характеристикам поля (плотности потока, плотности столкновений, ценности частиц) V отличие от них, билинейными называют функционалы, зависящие от произведения плотности потока и ценности частиц:

$$\dot{B} = \langle \varphi \varphi^+, G \rangle. \quad (14.3)$$

При рассмотрении в §5.3 вывода сопряженного интегродифференциального уравнения был получен пример такого билинейного функционала в виде формулы (5.15). Она была выведена для области переноса со свободными граничными условиями как для плотности потока частиц, так и для их ценности.

Представим себе, что в такой области пространственно разделены функция источника и функция детектора. Тогда между ними можно провести внутреннюю границу Γ , которая разделит всю область на две подобласти: источника V_Q и детектора V_P . Условимся считать положительной такую нормаль к этой границе, которая в каждой ее точке направлена от V_Q к V_P (рис.14.1).

Если применить такое же рассмотрение отдельно к каждой из подобластей V_Q и V_P , то легко получить следующее уравнение, аналогичное (5.15):

$$J = \int \int_{\Gamma} \int_0^{\infty} \int_{4\pi} \bar{\Omega} \cdot \bar{n}(\bar{r}_S) \cdot \varphi^+(\bar{r}_S, E, \bar{\Omega}) \varphi(\bar{r}_S, E, \bar{\Omega}) dE d\Omega d\bar{r}_S. \quad (14.4)$$

В нем интеграл по пространственной переменной \bar{r}_S является поверхностным (это специально подчеркнуто индексом S) и берется только по внутренней границе (по остальным он равен 0 в силу граничных условий).

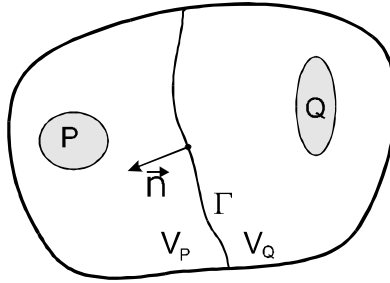


Рис.14.1. Плотность потока и ценность на внутренней границе

Таким образом обнаруживаем еще один способ расчета искомого функционала поля излучения J : с помощью билинейной «перевязки» плотности потока и ценности на внутренней границе, разделяющей источник и детектор. Поверхность Γ может быть проведена произвольно. Она может, например, окружать источник или детектор.

Рассмотрим технологию реализации этого расчета методом Монте-Карло. Для этого выделим в подынтегральном выражении интеграла (14.4) плотности распределения случайной точки \bar{r}_ξ , случайного направления $\bar{\Omega}_\xi$ и случайной энергии E_ξ :

$$j = \int \int_{\Gamma} \int_0^{\infty} \int_{4\pi} \frac{\bar{\Omega} \bar{n}(\bar{r}_S) \varphi^+(\bar{r}_S, E, \bar{\Omega}) \varphi(\bar{r}_S, E, \bar{\Omega})}{S_\Gamma 4\pi (E_{\max} - E_{\min})} \times \\ \times S_\Gamma 4\pi (E_{\max} - E_{\min}) dE d\Omega d\bar{r}_S. \quad (14.5)$$

Эти плотности выбраны равномерными, т.е.

- $p_r(\bar{r}) = 1/S_\Gamma$, где S_Γ – площадь поверхности границы Γ ;
- $p_\Omega(\bar{\Omega}) = 1/4\pi$;

- $p_E(E) = 1/(E_{\max} - E_{\min})$, где E_{\max} и E_{\min} – соответственно максимальная и минимальная энергии рассматриваемого диапазона.

Разумеется, вместо равномерной плотности можно взять и какую-то другую, если к тому имеются определенные причины.

Выполним следующие алгоритмические шаги расчета интеграла (14.5).

Шаг 1. На границе Γ разыграем случайную фазовую точку $\vec{r}_\xi, \vec{\Omega}_\xi, E_\xi$.

В этой точке предстоит определить ценность $\varphi^+(\vec{r}_\xi, E_\xi, \vec{\Omega}_\xi)$ и плотность потока $\varphi(\vec{r}_\xi, E_\xi, \vec{\Omega}_\xi)$. Первая из этих величин по своему физического смыслу представляет собой показания некоторого детектора в поле точечного мононаправленного моноэнергетического источника. Задачу с таким δ -источником следует решать прямым методом Монте-Карло. Поэтому выполняем следующий шаг.

Шаг 2. Моделируем из точки $(\vec{r}_\xi, E_\xi, \vec{\Omega}_\xi)$ обычную траекторию истории частицы и собираем весь образованный ею вклад, который обозначим $\varepsilon^+(\vec{r}_\xi, E_\xi, \vec{\Omega}_\xi)$.

Плотность потока $\varphi(\vec{r}_\xi, E_\xi, \vec{\Omega}_\xi)$, напротив, есть показания δ -детектора (по пространству, углу и энергии) в поле источника Q . Ее будем считать сопряженным моделированием. Для этого переходим на шаг 3.

Шаг 3. Моделируем из точки \vec{r}_ξ в направлении $-\vec{\Omega}_\xi$ с энергией E_ξ сопряженную траекторию истории псевдочастицы и собираем весь образованный ею вклад в функцию источника, который обозначим как $\varepsilon(\vec{r}_\xi, E_\xi, \vec{\Omega}_\xi)$.

Заключительный **Шаг 4** рассчитывает полную билинейную оценку для одной случайной выбранной фазовой точки $\varepsilon^B(\vec{r}_\xi, E_\xi, \vec{\Omega}_\xi) = \vec{\Omega}_\xi n(\vec{r}_\xi) \varepsilon^+(\vec{r}_\xi, E_\xi, \vec{\Omega}_\xi) \varepsilon(\vec{r}_\xi, E_\xi, \vec{\Omega}_\xi) \times$
 $\times S_\Gamma 4\pi (E_{\max} - E_{\min}).$ (14.6)

Шаги 1–4 повторяются необходимое число раз для достижения требуемой точности. Результат, как всегда, оценивается по

выборочному среднему. Следует обратить внимание, что оценка (14.6) может быть и отрицательной, поскольку содержит проекцию вектора движения на положительную нормаль.

Представленный алгоритм есть, конечно, только схема. Он может быть модифицирован, например, путем введения расщепления прямой или сопряженной траектории.

Произведение дифференциальной плотности потока частиц и ценности, стоящее под интегралом (14.4), можно интерпретировать как дифференциальную плотность потока некоторых гипотетических частиц – *контрибутонов*. Если плотность потока обычных частиц зависит от источника, а плотность потока сопряженных псевдочастиц – от детектора, то плотность потока контрибутонов несет информацию одновременно и об источнике, и о детекторе. Контрибутоны рождаются в источнике, а поглощаются только в детекторе.

Полная интегральная плотность потока контрибутонов есть

$$\Phi(\vec{r}) = \int_0^{\infty} \int_{4\pi} \varphi^+(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \varphi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) dE d\Omega, \quad (14.7)$$

а вектор интегральной плотности тока контрибутонов

$$\vec{D}(\vec{r}) = \int_0^{\infty} \int_{4\pi} \vec{\Omega} \varphi^+(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \varphi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) dE d\Omega. \quad (14.8)$$

Интеграл (14.4), а значит, и искомый функционал, равен полному току контрибутонов через любую поверхность Γ , разделяющую источник и детектор. Распределение скалярного тока (проекции вектора тока на нормаль) по поверхности показывает «каналы», по которым «вклад натекает» из источника в детектор. Оно демонстрирует, насколько важными являются те или иные участки границы с точки зрения формирования функционала в детекторе. Рис.14.2 иллюстрирует примерные каналы распространения контрибутонов от источника к детектору в условиях лабиринтной защиты, исключающей прямой «прострел» излучения. Информация о конфигурации таких каналов может быть полезна для конструирования оптимальной защиты при ограничениях на ее массу.

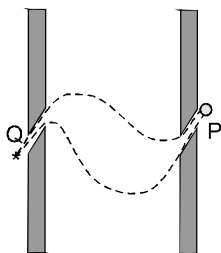


Рис.14.2. Каналы распространения контрибутонов в лабиринте

§14.3. Расчет возмущений функционалов

Возмущением будем называть изменение свойств среды (самого вещества или только плотности), в которой происходит перенос излучения. Это выражается в изменении функций сечения взаимодействия излучения в локальной области V , что приводит к возмущению всей функции плотности потока частиц и ценности, т.е. в целом прямого и сопряженного операторов переноса.

Запишем прямое невозмущенное и сопряженное возмущенное уравнения переноса в операторной форме, отметив возмущенные величины штрихом:

$$\hat{L}\varphi(\vec{x}) = Q(\vec{x}) \quad (14.9)$$

$$\hat{L}'\varphi^+(\vec{x}) = P(\vec{x}). \quad (14.10)$$

Возмущение искомого функционала представляет собой разницу его возмущенного и исходного значений:

$$\delta J = J' - J = \langle Q, \varphi^+ \rangle - \langle P, \varphi \rangle. \quad (14.11)$$

Существует целый ряд практических задач, для которых представляет интерес расчет именно самого возмущения. Он дает ответ на вопрос, насколько чувствителен данный функционал к малым изменениям параметров среды. Например, важно понимать, как сильно влияют на результат погрешности задания сечений взаимодействия.

На первый взгляд, такую задачу можно решить, рассчитав сначала исходное значение функционала, затем получив в другом расчете (в возмущенной среде) возмущенное значение, и наконец, произведя вычитание первого из второго. При использовании метода Монте-Карло, надо иметь в виду, что если величина

возмущения сравнима с погрешностью каждого из независимых расчетов, то ошибка разницы будет неоправданно велика. Обычно статистическая погрешность расчетов методом Монте-Карло составляет не менее 1%. Следовательно, таким образом можно рассчитать возмущения, составляющие не менее 10% величины функционала.

Для уменьшения погрешности результата используют коррелированные вычисления исходной и возмущенной задачи: оба расчета выполняются на одном наборе траекторий. Практически это выглядит следующим образом: моделирование траекторий выполняется в невозмущенной среде, а там, где траектория пересекает область возмущения, вводится дополнительный статистический вес, обусловленный разницей плотностей распределения в исходной и возмущенной задачах. При этом, однако, информативными являются только те траектории, которые пересекают область возмущения. С уменьшением области возмущения снижается и эффективность подобного расчета.

На основе билинейных функционалов можно построить расчетную схему с высокой эффективностью независимо от размера области возмущения.

Представим возмущенный сопряженный оператор в виде:

$$\hat{L}^+ = \hat{L} + \delta\hat{L}^+. \quad (14.12)$$

Умножим левую и правую части уравнения (14.9) слева на возмущенную ценность частиц $\varphi^+(\bar{x})$. Умножим уравнение (14.10) слева на невозмущенную плотность потока $\varphi(\bar{x})$. Вычтем одно из другого и проинтегрируем результат вычитания по всему фазовому пространству. В правой части, в соответствии с уравнением (14.11), получим саму величину возмущения $\delta\dot{J}$, и новое уравнение будет иметь вид:

$$\delta\dot{J} = \langle \varphi^+ \hat{L} \varphi \rangle - \langle \varphi \hat{L}^+ \varphi^+ \rangle.$$

Используя разложение (14.12), а также свойство сопряженности операторов \hat{L} и \hat{L}^+ (см. §5.2), получим:

$$\delta\dot{J} = \langle \varphi^+ \hat{L} \varphi \rangle - \langle \varphi \hat{L}^+ \varphi^+ \rangle - \langle \varphi \delta\hat{L}^+ \varphi^+ \rangle = -\langle \varphi \delta\hat{L}^+ \varphi^+ \rangle. \quad (14.13)$$

Приведем развернутую запись полученного интеграла для возмущения:

$$\delta J = - \int_V \int_0^\infty \int_{4\pi} \varphi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \left[\delta \chi^+(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) - \delta \psi^+(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \right] d\vec{r} dE d\Omega, \quad (14.14)$$

где компоненты в квадратных скобках представляют собой возмущения плотности столкновений псевдочастиц:

$$\delta \chi^+(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \delta \Sigma(\vec{r}, E) \varphi^+(\vec{r}, E, \vec{\Omega}), \quad (14.15)$$

$$\delta \psi^+(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \int_0^\infty \int_{4\pi} \varphi^+(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') \delta \Sigma_s(E, \vec{\Omega} \rightarrow E', \vec{\Omega}' | \vec{r}) dE' d\Omega'. \quad (14.16)$$

Возмущения полного сечения $\delta \Sigma(\vec{r}, E)$ и дифференциального сечения рассеяния $\delta \Sigma_s(E, \vec{\Omega} \rightarrow E', \vec{\Omega}' | \vec{r})$ отличны от 0 только в области возмущения V . В силу этого интеграл по пространственной переменной (14.14) записан только по области возмущения.

Обсудим технологию вычисления полученного интеграла методом Монте-Карло. Подобно тому, как это делалось для интеграла (14.4), выделим в подынтегральном выражении функции плотности вероятности, которые будут использованы для розыгрыша случайных фазовых точек $(\vec{r}_\xi, \vec{\Omega}_\xi, E_\xi)$. Как и раньше, будем использовать равновероятный выбор, т.е.

- $p_r(\vec{r}) = 1/V$, где V – объем области возмущения;
- $p_\Omega(\vec{\Omega}) = 1/4\pi$;
- $p_E(E) = 1/(E_{\max} - E_{\min})$, где E_{\max} и E_{\min} – максимальная и минимальная энергии рассматриваемого диапазона.

В результате будем иметь выражение вида

$$\delta J = - \int_V \int_0^\infty \int_{4\pi} \frac{\varphi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \left[\delta \chi^+(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) - \delta \psi^+(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \right]}{V 4\pi (E_{\max} - E_{\min})} \times \quad (14.17)$$

$$\times V 4\pi (E_{\max} - E_{\min}) d\vec{r} dE d\Omega.$$

Алгоритм вычисления интеграла (14.17) сводится к следующему.

Шаг 1. В области возмущения V необходимо разыграть случайную фазовую точку $(\vec{r}_\xi, E_\xi, \vec{\Omega}_\xi)$ в соответствии с используемыми функциями $p_r(\vec{r})$, $p_\Omega(\vec{\Omega})$, $p_E(E)$.

В этой точке понадобится плотность потока частиц $\varphi(\vec{r}_\xi, E_\xi, \vec{\Omega}_\xi)$, а также два компонента плотности столкновений псевдочастиц: $\delta\chi^+(\vec{r}_\xi, E_\xi, \vec{\Omega}_\xi)$ и $\delta\psi^+(\vec{r}_\xi, E_\xi, \vec{\Omega}_\xi)$.

Плотность потока, как уже отмечалось выше, удобнее моделировать с помощью сопряженных траекторий. Для этого выполняем следующий шаг.

Шаг 2. Моделируем из точки \vec{r}_ξ в направлении $-\vec{\Omega}_\xi$ с энергией E_ξ сопряженную траекторию псевдочастицы и собираем весь образованный ею вклад в функцию источника, который обозначим как $\varepsilon(\vec{r}_\xi, E_\xi, \vec{\Omega}_\xi)$. Моделирование истории псевдочастицы должно вестись с невозмущенными сечениями взаимодействия.

Шаг 3 реализует оценивание $\delta\chi^+(\vec{r}_\xi, E_\xi, \vec{\Omega}_\xi)$ путем запуска из точки $(\vec{r}_\xi, E_\xi, \vec{\Omega}_\xi)$ прямой траектории частицы, поскольку плотность столкновений псевдочастиц, как сопряженную функцию, удобнее рассчитывать с помощью прямого моделирования. При этом происходит расчет возмущенной плотности столкновений, поэтому траектория должна строиться с учетом внесенных возмущений в сечения взаимодействия. Весь вклад, образованный траекторией в детекторе, обозначим как $\varepsilon_\chi^+(\vec{r}_\xi, E_\xi, \vec{\Omega}_\xi)$.

Шаг 4 обеспечивает оценивание компонента $\delta\psi^+(\vec{r}_\xi, E_\xi, \vec{\Omega}_\xi)$, представляющего собой интеграл (14.16). Его оценка будет сделана методом Монте-Карло с помощью преобразования

$$\delta\psi^+(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \int_0^\infty \int_{4\pi} \varphi^+(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') \delta\Sigma_s(\vec{r}, E) \frac{\delta\Sigma_s(E, \vec{\Omega} \rightarrow E', \vec{\Omega}' | \vec{r})}{\delta\Sigma_s(\vec{r}, E)} dE' d\Omega'.$$

Введенное в знаменатель возмущение интегрального сечения рассеяния $\delta\Sigma_s(\vec{r}, E)$, которое есть интеграл от возмущения

дифференциального сечения по всем конечным состояниям, призвано образовать под интегралом нормированную плотность вероятности. Таким образом, в фазовой точке $(\vec{r}_\xi, E_\xi, \vec{\Omega}_\xi)$, найденной на шаге 1, производим розыгрыш новой энергии E'_ξ и направления $\vec{\Omega}'_\xi$ с помощью плотности

$$\frac{\delta\Sigma_s(E_\xi, \vec{\Omega}_\xi \rightarrow E'_\xi, \vec{\Omega}'_\xi | \vec{r}_\xi)}{\delta\Sigma_s(\vec{r}_\xi, E_\xi)}.$$

Если речь идет о комптоновском рассеянии, то возмущение среды означает просто изменение плотности электронов, что никак не влияет на плотность вероятности конечных состояний. При комптоновском процессе может быть непосредственно применен один из методов, описанных в §10.2.

Из полученной точки $(\vec{r}_\xi, E'_\xi, \vec{\Omega}'_\xi)$ начинаем моделирование обычной траектории в возмущенной среде для оценки стоящей под интегралом величины $\varphi^+(\vec{r}, E', \vec{\Omega}')$. Весь собранный за этот счет вклад в детектор обозначим $\varepsilon_\psi^+(\vec{r}_\xi, E_\xi, \vec{\Omega}_\xi)$.

Шаг 5 подсчитывает полную билинейную оценку для искомого возмущения, вычисляемую в случайной фазовой точке, выбранной на шаге 1:

$$\begin{aligned} \varepsilon^B(\vec{r}_\xi, E_\xi, \vec{\Omega}_\xi) = & V 4\pi (E_{\max} - E_{\min}) \varepsilon(\vec{r}_\xi, E_\xi, \vec{\Omega}_\xi) \times \\ & \times \left[\delta\Sigma(\vec{r}_\xi, E_\xi) \varepsilon_\chi^+(\vec{r}_\xi, E_\xi, \vec{\Omega}_\xi) - \delta\Sigma_s(\vec{r}_\xi, E_\xi) \varepsilon_\psi^+(\vec{r}_\xi, E_\xi, \vec{\Omega}_\xi) \right] \end{aligned} \quad (14.18)$$

Величина возмущения функционала $\delta\hat{J}$ оценивается по выборочному среднему на необходимом ансамбле случайных точек $(\vec{r}_\xi, E_\xi, \vec{\Omega}_\xi)$, для каждой из которых выполняются все шаги 1-5. Билинейная оценка (14.18), как видно, является знакопеременной.

Сформулированный подход на основе моделирования билинейного функционала является выигрышным по сравнению с методом коррелированных вычислений, поскольку не моделирует неинформативных траекторий. Все траектории обязательно проходят через область возмущения, и чем локальнее эта область, тем меньше дисперсия результата.

Контрольные вопросы

- Назовите класс задач по вычислению линейных функционалов, где сопряженный метод Монте-Карло предпочтительней прямого.
- Назовите класс задач по вычислению линейных функционалов, где прямой метод Монте-Карло предпочтительней сопряженного.
- Перечислите классы задач радиационной физики, где встречаются билинейные функционалы.
- Каковы свойства контрибутонов?
- В чем преимущества расчета возмущений функционалов с помощью билинейных функционалов по сравнению с методом коррелированных вычислений?

Список литературы

1. Бекурц К., Виртц К. Нейтронная физика. М.: Атомиздат, 1968.
2. Беспалов В.И. Взаимодействие ионизирующих излучений с веществом: Учебное пособие. 2-е изд., перераб. и доп. – Томск: Дельтаплан, 2006.
3. Власов Н.А. Нейтроны. Изд. 2-е. М.: Наука, 1971.
4. Борисов Н.М.: Панин М.П. Моделирование сопряженных ядер столкновения при сопряженном блуждании // Атомная энергия. 1999. Т.86. С.178 – 183.
5. Вентцель Е.С. Теория вероятностей: М.: Наука (Главная редакция физико-математической литературы). 1969.
6. Дейвиссон Ш. Взаимодействие γ -излучения с веществом //Альфа-, бета- и гамма-спектроскопия/ Пер. с англ; Под ред. К.Зигбана. Вып.1. М. Атомиздат, 1969. С.58-97.
7. Ермаков С.М. Метод Монте-Карло и смежные вопросы. Изд. 2-е, доп.. М.: Наука, 1975.
8. Ермаков С.М.: Михайлов Г.А. Статистическое моделирование. 2-е изд., доп. М.: Наука (Главная редакция физико-математической литературы). 1982.
9. Защита от ионизирующих излучений: В 2-х т. Т.1. Физические основы защиты от излучений: Учебник для вузов/ Н.Г. Гусев и др., Под ред. Н.Г. Гусева. 3-е изд. М.: Энергоатомиздат, 1989.
10. Климов А.Н. Ядерная физика и ядерные реакторы: Учебное пособие для вузов. 3-е изд., перераб. и доп. М.: Энергоатомиздат, 2002.
11. Кольчужкин А.М.: Учайкин В.В., Введение в теорию прохождения частиц через вещество. М.: Атомиздат, 1978.
12. Льюинс Дж. Ценность. Сопряженная функция/ Пер. с англ. М.: Атомиздат, 1972.
13. Марчук Г.И., Орлов В.В. К теории сопряженных функций// Нейтронная физика: Сб. статей/Под ред. П.А.Крупчицкого. М.: Атомиздат, 1961.
14. Метод Монте-Карло в атмосферной оптике/ Под. ред. Г.И.Марчука. Новосибирск: Наука, 1976.
15. Метод Монте-Карло в проблеме переноса излучений/ Под. ред. Г.И.Марчука. М.: Атомиздат, 1967.
16. Михайлов Г.А. Некоторые вопросы теории методов Монте-Карло. Новосибирск: Наука, 1974.

17. Михайлов Г.А. Оптимизация весовых методов Монте-Карло. М.: Наука (Главная редакция физико-математической литературы). 1987.
18. Мухин К.Н. Экспериментальная ядерная физика. В 2-х т., Т.1. Физика атомного ядра: Учебник для вузов. М.: Атомиздат, 1974.
19. Пшеничный Г.А., Взаимодействие излучений с веществом и моделирование задач ядерной геофизики. М.: Энергоатомиздат, 1982.
20. Соболев И.М. Численные методы Монте-Карло. М.: Наука, 1973.
21. Спанье Дж., Гелбард Э. Метод Монте-Карло и задачи переноса нейтронов/ Пер. с англ. М.: Атомиздат, 1972.
22. Стародубцев С.В., Романов А.М. Взаимодействие гамма-излучения с веществом. Ташкент, Наука, 1964.
23. Учайкин В.В., Лаппа А.В. Вероятностные задачи в теории переноса. Томск: Издательство Томского университета, 1978.
24. Фано У., Спенсер Л., Бергер М.: Перенос гамма-излучения/ Пер. с англ. Под ред. Г.И. Марчука. М.: Госатомиздат, 1963.
25. Франк-Каменецкий А.Д. Моделирование траекторий нейтронов при расчете реакторов методом Монте-Карло. М.: Атомиздат, 1978.
26. Carlson B. The Monte Carlo Method Applied to a Problem in Gamma-Ray Diffusion. USAEC Report AECU-2857, 1953.
27. GEANT-4 Physics Reference Manual (<http://geant4.web.cern.ch/geant4/UserDocumentation/UsersGuide/s/PhysicsReferenceManual/fo/PhysicsReferenceManual.pdf>), CERN, 2007.
28. Irving D.C. The Adjoint Boltzmann Equation and Its Simulation by Monte Carlo// Nucl. Eng. Des. 1971. V.15, P.273–292.
29. Kahn H. Application of Monte Carlo. USAEC Report AECU-3259. Rand Corporation, 1954.
30. Kalos M. H. and Whitlock P. A. Monte Carlo Methods. V. 1// J. Wiley & Sons, New York, 1986.
31. Kalos M. Monte Carlo Integration of the Adjoint Gamma Ray Transport Equation// Nucl. Sci. Eng. 1968. V.33, P.284–290.
32. Koblinger L. Direct Sampling from the Klein Nishina Distribution for Photon Energies above 1.4 MeV // Nucl. Sci. Eng. 1975. V.56, P.218-219.

33. Koblinger L. A new energy sampling method for Monte Carlo simulation of adjoint transport equation. KFKI-76-65, 1976.
34. National Nuclear Data Center, Brookhaven National Laboratory, (<http://www.nndc.bnl.gov>).
35. Storm E. and Israel H.I. Photon Cross Sections from 1 keV to 100 MeV for elements $Z=1$ to $Z=100$ // Nucl. Data Tables, A7, 1970. P. 565-681.
36. Williams M.L. Generalized contribution response theory// Nucl. Sci. Eng., 1991. V.108, P.355-382.
37. Wood J. Computational Methods in Reactor Shielding// Pergamon Press. Oxford/ New York/ Toronto/ Sydney/ Paris/ Frankfurt, 1982.