Министерство образования и науки Российской Федерации

Московский физико-технический институт
(государственный университет)

На правах рукописи
УДК 519.245

Цветков Егор Александрович

МЕТОДЫ РАСЧЕТА НЕАДДИТИВНЫХ ФУНКЦИОНАЛОВ В ПРИКЛАДНЫХ ЗАДАЧАХ РАДИАЦИОННОЙ ФИЗИКИ

05.13.18 — математическое моделирование, численные методы и комплексы программ

Диссертация на соискание ученой степени
кандидата физико–математических наук

Научный руководитель —
к.т.н. Шаховский Валентин Владимирович

Автор: _____

Москва – 2013

Оглавление

Список условных обозначений **7**

Введение **9**

1 Математические модели многодетекторных приборов **26**

1.1 Свойство аддитивности **26**

1.1.1 Аддитивность по столкновениям 26

1.1.2 Аддитивность по траекториям 27

1.1.3 Неаддитивные функционалы 28

1.1.4 Аддитивность по времени 31

1.1.4.1 Определение 31

1.1.4.2 Свойства 32

1.2 Требования к разрабатываемым математическим моделям **35**

1.3 Моделирование сцинтилляционного детектора **36**

1.3.1 Выбор модели сцинтилляционного детектора 36

1.3.2 Вычисление потерянной энергии 38

1.3.3 Входные и выходные данные моделей детектора 40

1.3.4 Формулировка используемого алгоритма 41

1.3.4.1 Выделение точек пересечения частицами границ детектора 41

1.3.4.2 Случай $Q = q(S)$ 43

1.3.4.3 Случай $Q = q(S_1, S_2, \ldots, S_k)$ 43

1.4 Моделирование спектрометра **45**

1.5 Моделирование электронной схемы совпадений **46**

1.6 Моделирование интроскопа, работающего по методу меченых нейтронов . . . 48
1.6.1 Метод меченых нейтронов . . . 48
1.6.2 Моделирование прибора . . . 49

1.7 Моделирование комптоновского гамма-спектрометра 50
1.7.1 Приложения и принцип работы комптоновских гамма-спектрометров . . . 50
1.7.2 Модель комптоновского гамма-спектрометра . . . 52
1.7.3 Определение типа совпадений . . . 54

1.8 Результаты . . . 56

2 Весовой алгоритм вычисления среднего неаддитивных функционалов . . . 57

2.1 Существующие способы вычисления среднего небольцмановских функционалов . . . 57

2.2 Концепция супертреков . . . 59

2.3 Формулировка предлагаемого алгоритма . . . 62

2.4 Фазовое пространсво . . . 63

2.5 Вероятностное пространство . . . 64
2.5.1 Способы описания ветвящихся траекторий . . . 64
2.5.2 Математическое описание супертреков . . . 65
2.5.2.1 Дерево супертрека . . . 65
2.5.2.2 Кодирование структуры супертреков . . . 66
2.5.2.3 Нумерация вершин супертреков . . . 67
2.5.2.4 Математическое описание супертреков . . . 68
2.5.3 Плотность вероятности . . . 68
2.5.3.1 Физические вероятности . . . 68
2.5.3.2 Плотность вероятности реализации супертрека . . . 69

2.5.4 Построение вероятностного пространства 73
2.5.4.1 Обзор литературы 73
2.5.4.2 Непосредственное построение вероятностного пространства 74
2.5.4.3 Вероятностное пространство $(\mathbb{S}^k, \mathcal{H}^k, P^k)$ 75
2.5.5 Усреднение по супертрекам 75

2.6 Аналоговое моделирование 77

2.7 Обоснование предлагаемого алгоритма 78
2.7.1 Схема доказательства 78
2.7.2 Разыгрывание со смещённой плотностью вероятности . . 79
2.7.2.1 Общий случай (метод существенной выборки) . . . 79
2.7.2.2 Концепция супертреков 80
2.7.3 Расщепление 82
2.7.3.1 Общий случай 82
2.7.3.2 Концепция супертреков 84
2.7.4 Русская рулетка 85
2.7.4.1 Общий случай 85
2.7.4.2 Концепция супертреков 87
2.7.5 DXTRAN 88
2.7.5.1 Суть метода DXTRAN 88
2.7.5.2 Обоснование несмещённости оценки Q^* при использовании метода DXTRAN в одной вершине 90
2.7.5.3 Обоснование несмещённости оценки Q^* при использовании метода DXTRAN в нескольких вершинах . 93
2.7.6 Доказательство основной теоремы 97

2.8 Случай функционала, не аддитивного по траекториям 99

2.9 Нестационарная схема 100

2.10 Способ вычисления весовой оценки для схемы совпадений 102

2.10.1 Представление отлика схемы совпадений в виде суммы . 102
2.10.2 Выбор индексов разбиения 103
2.10.3 Вычисление среднего значения методом Монте-Карло . . 104

2.11 Результаты 106

3 Реализация концепции восстановления супертреков 108

3.1 Транспортный код 108
3.1.1 Выбор транспортного кода 108
3.1.2 Подключение транспортного кода MCNP 110

3.2 Вычисление отклика детектора $q(S_1, S_2, \ldots, S_k)$ по данным транспортного кода MCNP 112
3.2.1 Условия, при которых возможно восстановление супертреков 112
3.2.2 Вычисление функционалов вида $q(S)$ 115
3.2.3 Вычисление функционалов вида $q(S_1, S_2, \ldots, S_k)$ в схемах совпадений 116
3.2.4 Восстановление необходимых для вычисления значения случайной величины данных о супертреке в случае неразмножающей среды вне детектора 116
3.2.5 Вспомогательные поверхности для сбора информации о супертреках с использованием расщепляющих методов . 119

3.3 Программная реализация 120
3.3.1 Структура комплекса программ 120
3.3.2 Организация вычислений 122

3.4 Результаты 123

4 Тестирование разработанного алгоритма 125

4.1 Система тестов 125

4.2 Бросание точек на единичный отрезок 127

4.2.1 Теоретическая оценка 127

4.2.2 Вычисление методом Монте-Карло 128

4.3 Простейшая модель двойных совпадений 130

4.4 Моделирование интроскопа, работающего по методу меченых нейтронов 132

4.4.1 Задача с преградой 132

4.4.2 Задача без преграды и сравнение с экспериментом 136

4.5 Комптоновский гамма-спектрометр 139

4.5.1 Конфигурация моделируемого прибора 139

4.5.2 Оптимизация геометрической конфигурации комптоновского гамма-спектрометра 141

4.6 Результаты 145

Заключение 146

Список литературы 148

Приложения 160

А Построение вероятностного пространства 160

А.1 Построение полукольца в $\mathbb{S}$ 160

А.2 Построение меры на полукольце 161

А.3 Продолжение меры на σ-алгебру 162

Б Свойства операции усреднения 163

Б.1 Существование 163

Б.2 Свойство линейности 164

Б.3 Перемена порядка интегрирования в повторном интеграле 165

В Исходный код функции TallyX 167

Г Обоснование метода Монте-Карло 170

Г.1 Вероятностное пространство и случайная величина . . . 170

Г.2 Классический метод Монте-Карло 171

Д Определение базовых амплитудно–временных спектров на основе расчётного моделирования 173

Список условных обозначений

- $\mathbf{x}$ – пространственные координаты, задающие положение частицы;
- $\mathbf{\Omega}$ – единичный вектор направления скорости;
- E – энергия частицы;
- t – момент времени;
- $x = (\mathbf{x}, \mathbf{\Omega}, E, t)$ – фазовые координаты частицы;
- N – количество статистических испытаний;
- M – максимально возможное количество частиц, получаемое в результате столкновения;
- k – количество аргументов у функционала $q(S_1, S_2, \ldots, S_k)$;
- m_i – количество взаимоисключающих реализаций супертрека S_i;
- $\mathbb{S}$ – множество всех супертреков;
- $\mathbb{S}_n$ – подмножество множества всех супертреков $\mathbb{S}$, в которое входят все супертреки с одинаковой структурой;
- S – супертрек, $S = \{t, n, x_0, x_1, \ldots, x_{k_n}\}$;
- k_n – количество вершин у супертреков из множества $\mathbb{S}_n$ без учёта точки рождения первичной частицы;
- τ_{int} – время, в течение которого интегрируется сигнал ФЭУ;
- τ_{dead} – мёртвое время сцинтилляционного детектора;
- τ_{per} – разрешающее время схемы совпадений;
- Q – аналоговая оценка среднего значения функционала;
- Q^* – весовая оценка среднего значения функционала;

- $q(x)$ – отклик детектора на соударение в точке x;
- $q(S)$ – отклик детектора на супертрек S;
- $g(x)$ – вероятность поглощения в точке x;
- $p(x \to x_1, x_2, \ldots, x_m)$ – плотность вероятности того, что после столкновения в точке x, из реакции выйдет m частиц, первая из которых испытает следующее столкновение в x_1, вторая – в x_2, …, m-ая – в x_m;
- $P_m(x)$ – вероятность того, что при столкновении в точке x из реакции выйдет m частиц;
- $p(S)$ – плотность вероятности реализации супертрека S;
- $p_n(x_i|x_0, x_1, \ldots, x_{i-1})$ – условная плотность вероятности того, что при разыгрывании i-ой вершины супертрека S из $\mathbb{S}_n$ она будет иметь координаты x_i, при условии, что все предыдущие вершины имели координаты x_0, x_1, …, x_{i-1};
- w – статистический вес;
- A_i^+ – события, соответствующие вхождению частиц в область детектора;
- A_{ij}^- – события, соответствующие выхождению частиц из области детектора;
- ε – энергия, оставленная в детекторе при единичном акте столкновения;
- $s(x \to y)$ – длина оптического пути от точки x до точки y;
- $\mathbb{I}(A)$ – индикатор события A.

Введение

Актуальность

В настоящее время интерес к разработке приборов, регистрирующих ядерное излучение, постоянно возрастает. Областями человеческой деятельности, в которых используются схемы совпадений, являются гамма-астрономия, обеспечение безопасности [21, 22, 42, 46] (досмотр грузов и контейнеров, экологическая безопасность), медицина [35, 44, 62, 70, 78] и некоторые другие. Успехи в области создания новых сцинтилляционных материалов позволяют улучшить такие характеристики приборов, работающих по схемам совпадений или антисовпадений, как отношение сигнал-шум и пространственное разрешение[43].

В сфере обеспечения безопасности важным направлением является разработка технических средств, позволяющих производить досмотр грузов, не вскрывая контейнеры. Наиболее перспективным в смысле высокой информативности и компактности является метод меченых нейтронов (ММН, в зарубежной терминологии – API, associated particle imaging). Эксперименты в лабораторных условиях показали возможность создания компактной системы измерения спектров гамма-излучения от неупругого взаимодействия нейтронов с высоким пространственным разрешением на базе портативных нейтронных (D, T) генераторов со встроенным многоэлементным детектором альфа-частиц. Важной отличительной чертой метода меченых нейтронов является возможность обнаружения взрывчатых веществ (ВВ) в герметичной, в том числе и металлической упаковке.

В настоящее время в ряде отечественных и зарубежных лабораторий разработаны или планируются к разработке макетные образцы систем обнаружения и идентификации ВВ. Так в Радиевом институте им. В.Г. Хлопина (г. С.-Петербург) по заказу дирекции программы НАТО «Наука для мира» для демонстрации возможностей метода меченых нейтронов

создана серия приборов-интроскопов под общим названием SENNA. Внешний вид приборов SENNA иллюстрирует рис. 1.

Рис. 1. Внешний вид приборов SENNA.

Вес прибора около 40 кг, однако все результаты по обнаружению получены с применением дополнительной коллимации детекторов железными конусами общим весом 10 кг. Для обнаружения ВВ весом около 400—500 грамм требуется время 5—10 минут, а весом 3 кг около минуты. Дальность управления 10—15 метров ограничена длиной сигнального кабеля; питание от сети 220 В. Сокращение предела обнаружения (вес ВВ) и времени обнаружения невозможно из-за перегрузки каналов оцифровки сигналов, хотя при замене нейтронного генератора можно было бы повысить мощность нейтронного потока и, соответственно, улучшить статистику отсчетов. Жёсткая компоновка общей конструкции, фиксирующая положение генератора, модуля гамма-детектора и защиты и ограничивает подход к обследуемому объекту. В НПЦ «Аспект» г. Дубна разработана возимая установка для досмотра автомобильной техники на основе метода меченых нейтронов. Вес установки (без автомобиля) 750 кг; порог обнаружения ВВ 10 кг за 10 минут. Внешний вид установки представлен на рис. 2.

Проект Евросоюза, названный EURITRACK, предназначается для обследования большегрузных контейнеров и находится в настоящее время в процессе проектирования. Предполагаемый объем – несколько кубометров. Внешний вид проектируемого терминального комплекса EURITRACK представлен на рис. 3.

Рис. 2. Схематичный вид прибора Aspect.

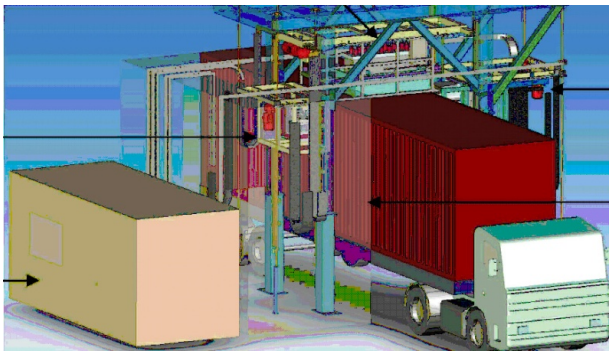

Рис. 3. Схематичный вид установки EURITRACK.

Комптоновский гамма-спектрометр позволяет определить направление прилёта гамма-квантов по измерениям потерянной ими энергии при последовательных рассеяниях. Ярким примером такого прибора является гамма-телескоп COMPTEL, работающий по схеме двойных рассеяний. Комптоновский гамма-спектрометр состоит из нескольких слоёв детекторов, параметры которых подбираются таким образом, чтобы во всех слоях кроме последнего гамма-кванты испытывали преимущественно одиночное комптоновское рассеяние, а в последнем – полное поглощение. Зная энергии, потерянные гамма-квантом в каждом слое и примерные координаты точек столкновения, можно определить конус возможных направлений прилёта гамма-кванта. Приборы на основе комптоновских гамма-спектрометров позволяют получить трёхмерную картину распределения источников гамма-излучения в некотором объёме, что делает

его применение интересным в медицинской томографии [74] и в сфере безопасности [65].

Разработка новых приборов, как правило, включает в себя этап расчётно-теоретического обоснования их параметров и характеристик. Для этого наиболее часто используется метод Монте-Карло, в котором проводится большое количество статистических испытаний для определения среднего значения некоторого функционала, заданного на множестве случайных траекторий.

Если при моделировании траекторий частиц используется физическая плотность вероятности, то такой метод Монте-Карло называется аналоговым. В некоторых случаях для достижения приемлемой статистической погрешности расчётов, проводимых аналоговыми методами Монте-Карло, требуется огромное количество испытаний. Например, для набора базовых спектров, позволяющих идентифицировать вещество при использовании ММН, в работе [33] потребовалось по $4,85 \cdot 10^{10}$ статистических испытаний для каждого вещества. Это послужило причиной разработки весовых методов Монте-Карло, в которых статистические испытания проводятся с использованием модельной вероятности, отличной от физической. Модельная вероятность выбирается так, чтобы увеличить количество попаданий частиц в область детекторов. Как при аналоговом, так и при весовом моделировании, зависимость относительной статистической погрешности δ от количества испытаний имеет вид

$$\delta \propto \frac{1}{\sqrt{N}}.$$

Для весовых методов коэффициент пропорциональности существенно меньше, чем для аналоговых. За счёт этого при использовании весовых методов требуемый уровень статистической погрешности достигается при меньшем количестве испытаний, чем при использовании аналоговых методов.

В настоящее время весовые методы хорошо проработаны для вычисления значения функционалов определённого класса, названных в работе [37] больцмановскими. Под больцмановским функционалом пони-

мается функционал, который может быть вычислен при известной одночастичной плотности распределения, являющейся решением уравнения Больцмана. Примером больцмановских функционалов являются среднее количество пересечений частицами некоторой поверхности или среднее количество столкновений внутри некоторого объёма. Если физическая величина зависит от совместного влияния нескольких частиц, то она не может быть представлена в виде больцмановского функционала[37]. Например, на отклик приборов, работающих по схемам совпадений, оказывают совместное влияние частицы, находящиеся в разных областях пространства. Функционал, описывающий отклик таких приборов, должен зависеть от совместной плотности распределения частиц. Большинство имитационных моделей приборов, регистрирующих ядерное излучение, не удаётся адекватно описать функционалом от плотности столкновений.

Современной тенденцией является построение сложных имитационных моделей приборов, учитывающих различные физические явления. Например, в работах [36, 43, 81, 85] используется модель сцинтилляционного детектора, имитирующая оптическое распространение фотонов внутри сцинтилляционного вещества. Испускание сцинтилляционных фотонов в точках столкновения гамма-квантов с элементами вещества ведётся по закону Пуассона с переменной интенсивностью [76, 86], что ещё больше усложняет модель. Для учёта более тонких явлений таких, как инертность ФЭУ, производится моделирование испускания электронов фотокатодом и прохождения их между электродами ФЭУ. В работе [75] приведена аналитическая модель, имитирующая поведение ФЭУ. Разработка универсальной программы, моделирующей движение сцинтилляционных фотонов, работу ФЭУ и учитывающей неидеальность электронной схемы, регистрирующей совпадения, проведена в [87].

В перечисленных работах модели детекторов не могут быть описаны больцмановскими функционалами, моделирование ведётся аналоговыми методами, а учёт различных физических явлений существенно снижает скорость расчётов. В программах MCNP-DSP [89] и MVP [69], предназначенных для решения широкого круга задач, и в программе KENO-

NR [49], в случаях, когда важно учитывать совместное распределение частиц, также используются аналоговые методы расчёта траекторий частиц.

Проблема ускорения расчётов, проводимых по методу Монте-Карло, стоит очень остро и во многих других работах.

Современное состояние проблемы

В литературе [3, 7, 11, 15, 16, 24, 25] весовые методы предлагаются для вычисления аддитивных по столкновениям функционалов, определённых на множестве реализаций случайного процесса переноса излучения. Значение такого функционала $q(S)$ равно сумме вкладов от отдельных столкновений, то есть

$$q(S) = \sum_{i=1}^{k} q(x_i),$$

где S — случайная траектория частицы, x_i — точки соударения частицы, движущейся по этой траектории, $i = 1, 2, \ldots k$. Примером такого функционала является количество столкновений в выделенном объёме. Очевидно, что аддитивные по столкновениям функционалы являются частным случаем больцмановских функционалов.

Ещё одним важным частным случаем больцмановских функционалов являются функционалы, представимые в виде

$$q(S) = \sum_{i=1}^{k-1} q(x_i \to x_{i+1}).$$

Примером такого функционала является количество пересечений частицами выбранной поверхности.

Наиболее известными весовыми методами, применяемыми при вычислении среднего значения аддитивных по столкновениям функционалов, являются разыгрывание со смещённой плотностью вероятности, расщепление, русская рулетка и DXTRAN. При разыгрывании со смещённой

плотностью вероятности искусственно повышается вероятность попадания частиц в область сосредоточения детекторов. При использовании метода расщепления частица расщепляется на несколько новых частиц, что даёт возможность точнее оценить вклад в показания детекторов исходной частицы. Метод русской рулетки позволяет прервать моделирование траектории частицы, если известно, что ожидаемый вклад частицы в показания детектора слишком мал. В методе DXTRAN при каждом столкновении частицы происходит оценка потока излучения внутрь выбранной сферы, окружающей область сосредоточения детекторов [28].

Если выполняется свойство аддитивности, то частицы вносят вклады независимо друг от друга (каждое слагаемое зависит от фазовых координат только одной частицы). В случае небольцмановского функционала $q(S)$ свойства аддитивности не выполняются.

В большей части литературы построение универсальных методов для вычисления небольцмановских функционалов ограничивается аналоговой схемой, а весовые методы строятся для различных частных случаев. В классических работах С. М. Ермакова и Л. Яноши рассмотрены весовые методы вычисления первых двух моментов от аддитивных по столкновениям функционалов (дисперсия аддитивного функционала вычисляется как среднее квадрата, то есть неаддитивного функционала). Также в работах С. М. Ермакова особое внимание уделяется случаю ветвящихся траекторий, так как он всегда представляет отдельную сложность при проведении доказательств несмещённости весовых оценок. В работах В. В. Учайкина и А. В. Лаппы рассмотрены функционалы «столкновительно-трекового» класса, обобщающего класс аддитивных по столкновениям функционалов. В работах А. В. Лаппы построены неимитационные методы, вычисляющие любой момент от аддитивного по траекториям функционала. В [1, 41] построение весового алгоритма вычисления небольцмановских функционалов ведётся на конкретном примере вычисления энергии, оставленной частицами в детекторе, а среда считается неразмножающей. В [25] рассмотрен способ вычисления произвольного функционала при помощи поливариантного разложения,

но на практике этот способ применим, когда все члены разложения, начиная с некоторого номера, близки к нулю. Также известны способы для вычисления любого момента аддитивного функционала [12, 13].

Основополагающими работами, предлагающими универсальный подход к вычислению небольцмановских функционалов весовыми методами, являются работы [37, 38]. В них предлагается приписывать статистический вес всей ветвящейся траектории целиком, а не каждой частице в отдельности, как это делается в схеме Неймана-Улама при вычислении среднего аддитивных по столкновениям функционалов. Ветвящаяся траектория в этих работах названа супертреком, так как она рассматривается как неделимая коллекция отдельных неветвящихся траекторий частиц. В перечисленных работах предлагаются два способа получения супертреков.

В первом способе, названном способом развёртывания (deconvolution approach), результатом моделирования истории одной первичной частицы является ветвящаяся траектория, содержащая вершины двух типов. В вершинах первого типа происходит разветвление траектории естесвенным образом, то есть в результате моделирования реакции, происходящей при столкновении частицы. В вершинах второго типа разветвление происходит в результате применения какого-либо весового метода. Достигнув такой вершины, частица пошла бы дальше только по одной из ветвей. Выбирая в каждой вершине второго типа по одной ветви, получаем ветвящуюся траекторию, состоящую только из вершин первого типа, что и должно быть для физически осуществимой траектории. Вес этой траектории равен произведению весовых множителей выбранных ветвей. В работах [37, 38] описанный подход применяется для вычисления потерянной в чувствительном объёме детектора энергии частиц. В работах [82, 83] описанный подход предложен для вычисления отклика приборов, работающих по схемам совпадений. Стоит отметить, что в работах [82, 83] рассматриваются только совпадения, вызванные частицами, принадлежащими одной и той же ветвящейся траектории. Совпадения, вызванные частицами из разных ветвящихся траекторий, не учитываются.

Во втором способе, названным способом разыгрывания супертреков (supertrack approach) результатом статистического испытания является вся ветвящаяся траектория целиком. Весовые методы применяются не к отдельной частице, а ко всей траектории целиком. Например, при применении метода расщепления в некоторой вершине из одной траектории получаются несколько новых, совпадающих друг с другом до этой вершины.

Многие весовые методы, разработанные для вычисления аддитивных по столкновениям функционалов, очень легко переносятся на случай развёртывания или разыгрывания супертреков. В работах [37, 38] в рамках концепции супертреков сформулированы весовые методы разыгрывания со смещённой плотностью вероятности, расщепления, русской рулетки и DXTRAN.

Метод развёртывания нашел воплощение во многих работах, например, в программах MCNP5 [40, 67, 80, 82], MCNPX [58] и MCBEND [77]. Метод разыгрывания супертреков кажется простым, но он требует разработки нового или глубокой переработки существующего программного обеспечения для его реализации. В работах [39, 47] выполнена модификация программы MCNP для поддержки концепции супертреков. В работе [83] используется метод, очень похожий на метод разыгрывания супертреков.

В перечисленных работах, использующих концепцию супертреков, ведётся вычисление значений небольцмановских функционалов определённого класса, в которых частицы, относящиеся к разным ветвящимся траекториям, делают независимые вклады в значение функционала. Другими словами, отклик детектора на траектории S_1, S_2, ..., S_k можно представить в виде

$$q(S_1, S_2, \ldots, S_k) = q(S_1) + q(S_2) + \ldots + q(S_k).$$

Такие функционалы называются аддитивными по траекториям. Не все функционалы обладают этим свойством, например, иногда важно учитывать совпадения, вызванные фоновым излучением или отражён-

ными от удаленных предметов частицами. Такие совпадения могут быть учтены в математических моделях детекторов, не делающих различия между частицами, принадлежащими разным супертрекам, и частицами, принадлежащими одному и тому же супертреку.

В настоящей работе предложенная в [38] концепция супертреков обоснована и обобщена на случай вычисления неаддитивных по траекториям функционалов. Математическое обоснование несмещённости оценки среднего значения функционала ведётся традиционным способом через усреднение по всем возможным ветвящимся траекториям, в то время как в работе [37] акцент делается на обоснование предложенных способов через разбор большого количества примеров.

Цель

Целью настоящей работы является разработка весовых методов Монте-Карло для вычисления отклика приборов, описываемых неаддитивными функционалами.

Методы исследований

Методами исследований, использованными в настоящей работе, являются методы вычислительной математики, математического анализа, теории вероятностей и математической статистики, теории весовых методов Монте-Карло и теории переноса излучения. Программный код выполнен на языках Fortran-90, C++ и bash. Для расчётов использовался многопроцессорный вычислительный кластер с поддержкой HP-MPI и многопроцессорная рабочая станция.

Научная новизна

1. Концепция супертреков обобщена на случай вычисления функционалов, учитывающих совпадения между частицами, принадлежащими разным ветвящимся траекториям.

2. Впервые получено доказательство несмещённости весовых оценок в рамках концепции супертреков посредством их осреднения на множестве всех ветвящихся траекторий.

3. Построено представление функций отклика физических приборов, работающих по схемам совпадений, в виде неаддитивных по траекториям функционалов. Введено новое свойство аддитивности по времени, которым обладают функционалы $q(S_1, S_2, \ldots, S_k)$, описывающие работу физических приборов. Впервые доказано, что для оценки среднего значения таких функционалов достаточно единственной реализации кортежа $(S_1, S_2, \ldots, S_k)$ из ветвящихся траекторий.

4. Впервые для учёта случайных совпадений применены весовые методы, разработанные автором и реализованные в виде комплекса программ.

Практическая значимость работы

Основной практической ценностью полученных результатов является многократное ускорение расчётов в прикладных задачах радиационной физики.

Разработан универсальный программный комплекс, позволяющий оптимизировать геометрические параметры приборов, работающих по схемам совпадений.

Показано, что наиболее эффективной геометрической конфигурацией комптоновского гамма-спектрометра с точки зрения отношения количества истинных совпадений к полному количеству зарегистрированных

совпадений является конфигурация при меньших расстояниях между слоями детекторов.

Проведен расчёт базовых спектров углерода, азота и кислорода в методе меченых нейтронов.

Разработанные программы использовались для теоретической оценки количества совпадений в работах [9, 61, 68, 71].

В ходе исследований эмпирически проверены статистические свойства некоторых популярных в настоящее время программных генераторов псевдослучайных чисел при помощи теста на равномерное заполнение единичного гиперкуба [30]. Тесты позволили обнаружить ошибку в реализации одного из генераторов библиотеки CLHEP. Для остальных генераторов найдены участки генерируемых ими последовательностей с хорошими и плохими статистическими свойствами.

Достоверность

Достоверность полученных теоретических результатов обеспечивается их проверкой при помощи численного решения тестовых задач. Многократные сравнения результатов весового моделирования с результатами аналогового моделирования подтверждают несмещённость предлагаемой в настоящей работе оценки среднего значения функционала. Проведены проверки разработанных программных модулей на задачах с известными теоретическими решениями.

Разработанная модель сцинтилляционного детектора получена обобщением известной и хорошо себя зарекомендовавшей в работах многих авторов модели детектора на случай неаддитивных по траекториям функционалов. Результаты оптимизации геометрической конфигурации комптоновского гамма-спектрометра имеют наглядный физический смысл. Для модели интроскопа, работающего по методу меченых нейтронов, проведено сравнение расчётного спектра углерода с экспериментальным.

Положения, выносимые на защиту

1. Обобщение концепции супертреков на случай неаддитивных функционалов.

2. Обоснование концепции супертреков через доказательство несмещённости весовой оценки посредством усреднения по множеству ветвящихся траекторий.

3. Представление откликов приборов, работающих по схемам совпадений, в виде неаддитивных функционалов. В число приборов входит комптоновский гамма-спектрометр и интроскоп, работающий по методу меченых нейтронов.

4. Математическая модель комптоновского гамма-спектрометра, различающая истинные и ложные совпадения разных типов.

5. Комплекс программ, позволяющий вычислять среднее значение неаддитивных по траекториям функционалов.

Личный вклад автора

Личный вклад соискателя заключается в обосновании и обобщении концепции супертреков, разработке способов применения весовых методов Монте-Карло для вычисления неаддитивных функционалов, разработке математических моделей комптоновского гамма-спектрометра и интроскопа, работающего по методу меченых нейтронов, и их программной реализации, тестировании разработанного программного обеспечения. Все результаты, представленные в диссертации, получены соискателем самостоятельно или при непосредственном его участии.

Апробация работы

Результаты, изложенные в диссертации, докладывались и обсуждались на следующих конференциях и семинарах

- 7-ая международная конференция «Люминесцентные детекторы и преобразователи ионизирующего излучения» LUMDETR-2009 (Краков, Польша, 2009 г.);
- Пятая Всероссийская конференция «Проблемы обеспечения взрывобезопасности и противодействия терроризму» (Санкт–Петербург, 2010 г.);
- семинар кафедры компьютерного моделирования ФАЛТ МФТИ;
- семинар 11 отдела Института прикладной математики им. Келдыша «Вычислительные методы и математическое моделирование»;
- семинар кафедры статистического моделирования математико-механического факультета СПбГУ;
- научные конференции МФТИ «Современные проблемы фундаментальных и прикладных наук», в секциях кафедр автоматизированных биотехнических систем и высшей математики;

Разработанные программы были использованы для оценки количества случайных совпадений в работах [9, 61, 68, 71].

По теме проводимых исследований соискателем опубликовано 16 работ, из них 3 — в изданиях из списка ВАК. Семь работ выполнены без соавторов.

Получено свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2012613937 «Программный комплекс для вычисления неаддитивных функционалов весовыми методами Монте-Карло».

Структура работы

Первая глава работы посвящена построению математических моделей приборов, работающих по схемам совпадений. Отклик прибора описывается функционалом $q(S_1, S_2, \ldots, S_k)$, где S_1, S_2, $\ldots$, S_k – реализации ветвящихся траекторий. Показано, что в зависимости от

того, какие физические эффекты необходимо учитывать, функционал может быть аддитивным по столкновениям, по траекториям или не быть аддитивным вообще. Модели приборов, работающих по схемам совпадений, описываются неаддитивными функционалами.

Введено свойство аддитивности по времени. Пусть траектории разыгрываются в порядке увеличения момента времени рождения первичной частицы. Пусть в интервале времени (t_1, t_2) в системе не существует частиц. Пусть траектории, существующие до момента времени t_1, имеют номера от 1 до $k_1 - 1$, а траектории, существующие после t_2 - от k_1 до k. Пусть $t_2 - t_1 > T$, где T – некоторый параметр. Тогда, если

$$q(S_1, S_2, \ldots, S_k) = q(S_1, S_2, \ldots, S_{k_1-1}) + q(S_{k_1}, S_{k_1+1}, \ldots, S_k),$$

то будем говорить, что функционал $q(S_1, S_2, \ldots, S_k)$ удовлетворяет свойству аддитивности по времени с параметром T.

Проведя разбиение на слагаемые по всем таким интервалам времени (t_1, t_2), получаем, что $q(S_1, S_2, ..., S_k)$ равен сумме случайного количества слагаемых. Доказано, что все слагаемые, быть может, кроме последнего независимы в совокупности и одинаково распределены.

Выполнен обзор статей, посвящённых моделированию сцинтилляционных детекторов и приборов на их основе. Обоснован выбор простейшей модели сцинтилляционного детектора, в которой за отклик детектора принимается оставленная частицами в чувствительном объёме энергия.

Описаны математические модели электронного дифференциального спектрометра и электронной схемы совпадений, обрабатывающих сигналы сцинтилляционных детекторов.

На основе описанных моделей разработана модель интроскопа, работающего по методу меченых нейтронов, и комптоновского гамма-спектрометра. Модель интроскопа работает в приближении аддитивности по траекториям. Модель комптоновского гамма-спектрометра проводит раздельных подсчёт истинных событий и ложных событий разного типа. Предложен критерий для оптимизации геометрической конфигурации комптоновского гамма-спектрометра.

Модели приведены к одному формату входных данных и могут быть описаны функционалом $q(S_1, S_2, \ldots, S_k)$. Это позволит абстрагироваться от особенностей конкретной модели и построить общие универсальные весовые методы.

Вторая глава посвящена построению универсальных численных методов для вычисления среднего значения неаддитивных функционалов $q(S_1, S_2, \ldots, S_k)$, с учётом ветвлений траекторий. Обзор литературы, проведённый в этой главе, показал, что наиболее универсальным имитационным способом вычисления неаддитивных функционалов является концепция супертреков.

Выписана предлагаемая в настоящей работе оценка среднего значения неаддитивного функционала. Обоснование несмещённости предлагаемой оценки проведено через доказательство равенства математического ожидания весовой оценки математическому ожиданию величины, полученной аналоговым моделированием. Вычисление математического ожидания в обоих случаях проведено путём усреднения по всем возможным ветвящимся траекториям.

Третья глава посвящена техническим аспектам построения вычислительных моделей приборов, работающих по схемам совпадений. В этой главе обоснован выбор кода программы MCNP в качестве транспортного кода. Особое внимание уделено подключению кода MCNP и сбору необходимой для развёртывания супертреков информации.

Показано, что задача восстановления необходимой информации о ветвящихся траекториях по данным кода MCNP может быть решена сравнительно просто в двух случаях – в схемах совпадений, и в задачах, в которых несущественна корреляция между супертреками. В соответствии с описанным в третьей главе способом подключения кода MCNP разработано программное обеспечение для генерации супертреков, которые являются входными данными подпрограмм, разработанных во второй главе.

Четвертая глава посвящена тестированию разработанного программного обеспечения. Тестирование проведено сначала для каждого модуля по отдельности, а затем для всего программного обеспечения в

целом. Эмпирическая проверка несмещённости предлагаемой в настоящей работе оценки случайной величины проведена на задаче о бросании нескольких точек на единичный отрезок. Проверка правильности подключения кода MCNP проводилась путём сравнения получаемых от этого кода данных с данными трассировки траекторий частиц. Проверка правильности работы функций, имитирующих функционирование электронной схемы совпадений, проводилась на простой задаче, для которой известна аналитическая оценка количества совпадений в зависимости от количества испущенных источником частиц. Для комптоновского гамма-спектрометра предложен критерий, при помощи которого можно отделить смоделированные истинные совпадения от ложных. Показано, как предложенный критерий может быть применен для оптимизации геометрической конфигурации прибора, работающего по схеме двойных рассеяний. Расчёты показали, что использование предлагаемых весовых методов существенно ускоряет скорость расчётов по сравнению с аналоговыми методами.

Заключение содержит основные результаты работы.

Приложение А посвящено построению вероятностного пространства на множестве всех ветвящихся траекторий.

Приложение Б содержит формулировки и доказательства таких свойств используемой в настоящей работе операции усреднения по ветвящимся траекториям, как существование среднего, линейность и возможность перестановки порядка усреднения по нескольким траекториям.

Приложение В содержит описание способа подключения транспортного кода программы MCNP.

Приложение Г для справки содержит строгое математическое обоснование метода Монте-Карло.

Приложение Д посвящено расчёту базовых спектров углерода, азота и кислорода при помощи разработанной модели интроскопа, работающего по методу меченых нейтронов.

Глава 1

Математические модели многодетекторных приборов

1.1 Свойство аддитивности

1.1.1 Аддитивность по столкновениям

Пусть траектория частицы S состоит из точек фазового пространства x_0, x_1, ..., x_k, соответствующих рождению и последующим столкновениям частицы. Тогда для функционала $q(S)$, описывающего отклик аддитивного по столкновениям детектора, на который влияют только столкновения частиц, справедливо представление

$$q\left(S\right) = \sum_{i=1}^{k} q\left(x_i\right). \tag{1.1}$$

Именно для оценки среднего значения функционалов, обладающих таким свойством аддитивности, разработано достаточное количество весовых методов Монте-Карло. Такими функционалами можно представить различные характеристики поля излучения, например, количество столкновений частиц в заданном элементе объёма. Как правило, результатом расчётов являются средние значения этих величин, отнесённые к количеству частиц, испущенных источником. Для устранения возможной путаницы будем называть рассмотренное свойство аддитивности (1.1) свойством аддитивности по столкновениям.

Свойство аддитивности по столкновениям иногда удобно обобщить следующим образом

$$q\left(S\right) = \sum_{i=1}^{k-1} q\left(x_i \to x_{i+1}\right),$$

что даёт возможность отнести к аддитивным функционалам ток или поток частиц через заданную поверхность. Например, для вычисления тока частиц через поверхность величина $q(x_i \to x_{i+1})$ принимается равной 1, если участок траектории от x_i до x_{i+1} пересекает поверхность, иначе она равна 0.

Ещё более общий класс аддитивных функционалов рассматривается в работе [14], в которой вводятся функционалы, представимые в виде суммы столкновительной части, трековой, мгновенной и поверхностой. Столкновительная часть представляется в виде суммы вкладов от всех столкновений, трековая - в виде суммы от всех прямолинейных участков, мгновенная часть определяется положением всех частиц в заранее определённые моменты времени, а поверхностая - суммой по всем пересечениям частицами выбранной поверхности.

1.1.2 Аддитивность по траекториям

Если моделируется работа спектрометра на базе сцинтилляционного детектора, то за отклик такого прибора обычно принимается количество попаданий в выбранный канал спектрометра. Пусть S — реализация ветвящейся траектории. Функционал, описывающий количество попаданий в n-ый канал спектрометра, имеет вид

$$q\left(S\right) = \chi_n\left(\varepsilon\left(S\right)\right),$$

где $\varepsilon(S)$ — суммарная энергия, потерянная частицей в чувствительном объёме детектора, $\chi_n(E)$ — функция, равная 1, если энергия E попадает в интервал энергий n-ого канала спектрометра, и равная 0, если не попадает.

Рассмотрим пример (см. рис. 4). Пусть в детектор попадает некоторая частица, которая в точках x_1 и x_2 теряет энергии ε_1 и ε_2. Обозначим номера каналов спектрометра, в которые попадают эти энергии, через n_1 и n_2. Если бы произошло столкновение только в точке x_i, то отклик детектора $q(x_i)$ на столкновение x_i был бы равен 1, если номер

рассматриваемого канала n совпадает с номером n_i, иначе он равен 0. То есть $q(x_i) = \mathbb{I}(n = n_i)$, где $\mathbb{I}(A)$ — индикатор события A. Номер канала спектрометра, в который попадает сумма энергий $\varepsilon = \varepsilon_1 + \varepsilon_2$ обозначим через n_3. Отклик детектора на оба столкновения равен 1, если $n = n_3$, иначе он равен 0, то есть $q(x_1, x_2) = \mathbb{I}(n = n_3)$. Очевидно, что $q(x_1, x_2) \neq q(x_1) + q(x_2)$, то есть рассмотренный функционал уже не является аддитивным по столкновениям.

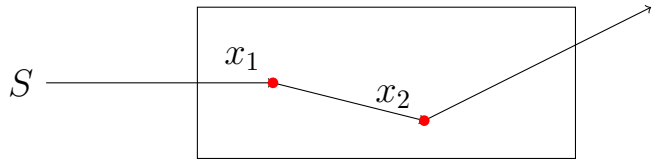

Рис. 4. Вычисление оставленной в детекторе энергии.

Отклик детектора на k траекторий $S_1, S_2, \ldots, S_k$ по-прежнему можно представить в виде суммы

$$q(S_1, S_2, \ldots, S_k) = q(S_1) + q(S_2) + \ldots + q(S_k), \tag{1.2}$$

то есть отклики на каждую траекторию расчитываются отдельно друг от друга. Функционалы, обладающие свойством (1.2), будем называть аддитивными по траекториям.

Для вычисления средних значений неаддитивных по столкновениям, но аддитивных по траекториям функционалов весовые методы разработаны недостаточно. В виде таких функционалов можно представить количество обнаруженных совпадений, если достаточно учитывать совпадения, вызванные одной и той же частицей. Так сделано в работах [56], [73], [79], посвященных моделированию схем совпадений.

1.1.3 Неаддитивные функционалы

Для учёта совпадений, вызванных частицами, относящимися к разным ветвящимся траекториям, функционалы вида (1.2) уже не годятся. В этом случае функционал, описывающий количество зарегистрирован-

ных прибором совпадений, можно записать в самом общем виде

$$q(S_1, S_2, \ldots, S_k), \tag{1.3}$$

где S_1, S_2, …, S_k — реализации случайных траекторий, k — количество частиц, испущенных источником, при этом ни одно из рассмотренных выше свойств аддитивности не предполагается.

Приведём примеры неаддитивных функционалов. Пусть в детектор сначала попадает первая частица(см. рис. 5), траектория которой обозначена через S_1. В точке x_1 частица теряет энергию ε_1. Пусть этой энергии соответствует канал спектрометра n_1, то есть $q(S_1) = \mathbb{I}(n = n_1)$. Для второй частицы, траекторию которой обозначим через S_2, потерянную в детекторе в точке x_2 энергию обозначим через ε_2. Пусть она попадает в канал спектрометра с номером n_2, $q(S_2) = \mathbb{I}(n = n_2)$. Сумма откликов детектора на эти две траектории $q(S_1) + q(S_2)$ равна 2, если номер рассматриваемого канала спектрометра n совпадает с номерами n_1 и n_2 одновременно ($n = n_1 = n_2$), равна 1, если номер n совпадает либо с n_1, либо с n_2, иначе она равна нулю.

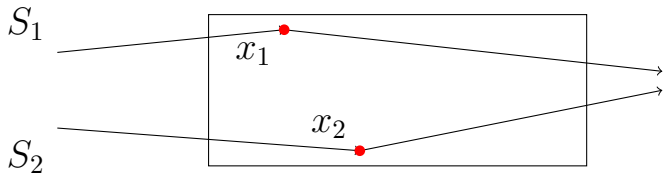

Рис. 5. Вычисление энергии сцинтилляционной вспышки в случае одновременного попадания двух частиц.

В случае, когда в детектор попадают две эти частицы одновременно, энергия сцинтилляционной вспышки равна $\varepsilon_1 + \varepsilon_2$. Номер канала спектрометра, в который попадает эта энергия, обозначим через n_3, $q(S_1, S_2) = \mathbb{I}(n = n_3)$. Очевидно, что $q(S_1, S_2) \neq q(S_1) + q(S_2)$.

Рассмотрим схему совпадений (см. рис. 6) в качестве второго примера. Прибор срабатывает тогда, когда срабатывают оба детектора D_1 и D_2 одновременно. Пусть в результате соударения частицы в точке A образовалось две вторичных частицы. Одна из них испытала соударение

в точке x_1 внутри детектора D_1, вторая — в x_2 внутри детектора D_2. В этом случае регистрируется совпадение, то есть отклик прибора $q(x_1, x_2) = 1$. Если соударение произошло только в одном детекторе, то совпадение не регистрируется, то есть $q(x_1) = q(x_2) = 0$. Следовательно, $q(x_1, x_2) \neq q(x_1) + q(x_2)$, то есть отклик прибора в этой схеме совпадений не описывается аддитивным по столкновениям функционалом.

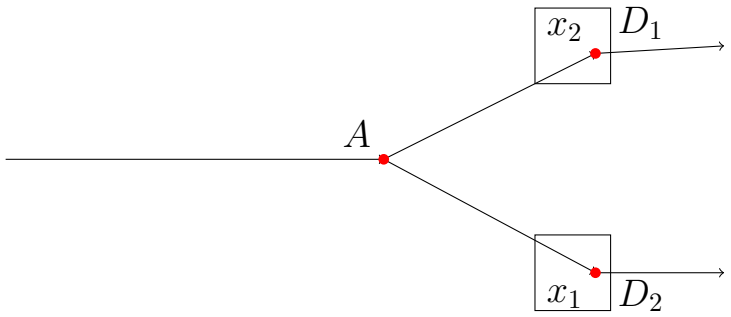

Рис. 6. Регистрация совпадения, вызванного одновременным попаданием двух частиц.

Можно показать, что отклик прибора, работающего по схеме совпадений, не всегда описывается аддитивным по траекториям функционалом. На рис. 7 показан случай, когда вторая частица, родившаяся в точке A не попадает в детектор D_2, но в него случайно попадает частица, относящаяся к траектории S_2 (в таком случае говорят о случайном совпадении). Очевидно, что $q(S_1, S_2) \neq q(S_1) + q(S_2)$. Следовательно, в задачах, в которых важно учесть случайные совпадения, отклик прибора не может быть описан аддитивным по траекториям функционалом.

Аддитивный по столкновениям функционал является частным случаем аддитивного по траекториям функционала. Если функционал аддитивен по траекториям, то он будет частным случаем функционала вида (1.3), неаддитивного ни в одном смысле.

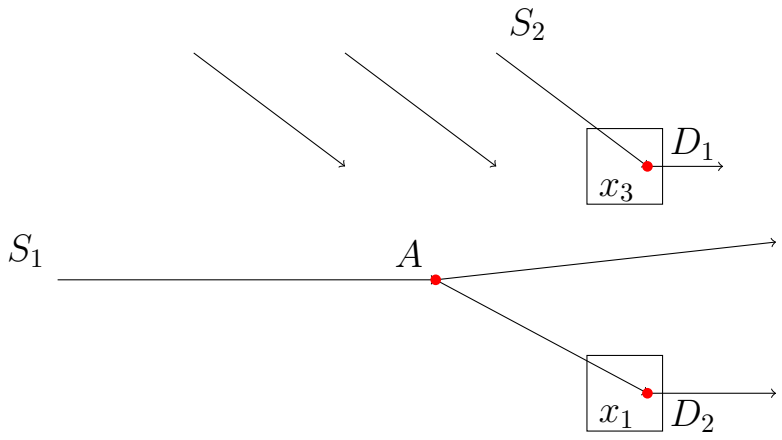

Рис. 7. Учёт случайных совпадений.

1.1.4 Аддитивность по времени

1.1.4.1 Определение

Модели приборов, рассматриваемые в настоящей работе, не являются аддитивными ни по столкновениям, ни по траекториям. Однако модели физических приборов всё же могут быть описаны аддитивными в некотором смысле функционалами. Например, электронная схема, обрабатывающая сигнал ФЭУ в сцинтилляционном детекторе, при превышении сигналом некоторого порога, переключается в режим интегрирования сигнала. Спустя некоторое время полученное значение энергии передаётся спектрометру, который прибавляет единицу к счётчику числа попаданий в соответствующий интервал энергий. После этого прибор возвращается в состояние ожидания следующей частицы. Рассмотренный алгоритм работы наводит на мысль о том, что функционал $q(S_1, S_2, \ldots, S_k)$ в некоторых случаях всё же можно разбить на сумму слагаемых.

Будем предполагать, что супертреки S_1, S_2, $\ldots$, S_k упорядочены по моменту времени рождения частицы. Упорядочить их всегда можно, если $q(S_1, S_2, \ldots, S_k)$ обладает свойством **симметрии**, то есть не меняет своего значения при перестановке любых двух аргументов.

Обозначим через T_0 интервал времени, необходимый прибору, чтобы вернуться в исходное состояние. Обозначим через T_i, $i = 1, 2, \ldots, l-1$,

интервалы времени, в течение которых в системе не существует частиц вообще, причем будем рассматривать только интервалы длительнее T_0, то есть

$$T_i > T_0, \tag{1.4}$$

Рассмотрим один такой интервал $T_i = (t_1, t_2)$ с номером i. Все траектории можно разбить на две группы. К первой группе относятся траектории, для которых все моменты времени существования частиц внутри поверхности меньше t_1. Ко второй группе относятся траектории, для которых эти моменты времени больше t_2. Пусть индексы траекторий, относящихся к первой группе, меняются от 1 до k_i, а ко второй — от k_i+1 до k. Таким образом, построены номера k_i, причём $1 \leq k_1 < k_2 < \ldots < k_{l-1} < k_l = k$.

Если выполняется

$$q(S_1, S_2, \ldots, S_k) = q(S_1, S_2, \ldots, S_{k_1}) + q(S_{k_1+1}, S_{k_1+2}, \ldots, S_{k_2}) + \\ + \ldots + q(S_{k_{l-1}+1}, S_{k_{l-1}+2}, \ldots, S_k), \tag{1.5}$$

то будем говорить, что функция детектора обладает **свойством аддитивности по времени** с параметром T_0.

Если интервал времени между испусканием частиц источником бесконечно большой, то моменты существования частиц из любых двух траекторий разделены бесконечным интервалом времени. Тогда в выражении (1.5) разбиение на слагаемые происходит при каждом значении индекса k_1, и выражение (1.5) переходит в (1.2).

1.1.4.2 Свойства

Пусть разыграна бесконечная неубывающая последовательность $\{t_i\}$ моментов времени рождения первичных частиц. Также имеется бесконечная последовательность супертреков $\{S_i\}$, причём i-ый супертрек порождается i-ой первичной частицей. Пусть на множестве всех пар последовательностей $\{t_i\}$ и $\{S_i\}$ задан функционал $f(t_1, t_2, \ldots; S_1, S_2, \ldots)$

(здесь моменты времени рождения первичной частицы специально отделяются от описания супертрека).

Обозначим $\{\tau_i\}$ последовательность интервалов времени между рождениями частиц, $\tau_i = t_{i+1} - t_i$. Элементы последовательности τ_i распределены показательно с плотностью вероятности $\lambda e^{-\lambda t}$ и независимы. Будем считать функционал $f(t_1, t_2, \ldots; S_1, S_2, \ldots)$ **однородным по времени**, то есть представимым в виде $f(t_1, t_2, \ldots; S_1, S_2, \ldots) = \breve{f}(\tau_1, \tau_2, \ldots; S_1, S_2, \ldots)$. Другими словами, показания детектора не зависят от выбора начала отсчёта времени, а также от момента включения прибора, лишь бы прибор был включен до рождения самой первой частицы.

Пусть после поглощения r-ой частицы выполняется условие (1.4). Рассмотрим две случайных величины $f_1 = \breve{f}(\tau_1, \tau_2, \ldots; S_1, S_2, \ldots)$ и $f_2 = \breve{f}(\tau_{r+1}, \tau_{r+2}, \ldots; S_{r+1}, S_{r+2}, \ldots)$. Элементы хвоста $\{\tau_{r+i}\}$ последовательности $\{\tau_i\}$ распределены так же, как и элементы всей последовательности целиком, не зависимо от того, является ли r случайной величиной или нет. То же самое можно сказать и про последовательности $\{S_{r+i}\}$ и $\{S_i\}$. Следовательно, случайные величины f_1 и f_2 одинаково распределены.

Для доказательства одинаковой распределённости слагаемых в формуле (1.5) осталось взять в качестве $\breve{f}(\tau_1, \tau_2, \ldots; S_1, S_2, \ldots)$ значение первого слагаемого в этой формуле (отклик детектора на начальные члены последовательностей $\{\tau_i\}$ и $\{S_i\}$ до момента обрыва их условием (1.4)), а в качестве r взять k_1. При таком выборе получаем, что f_1 является первым слагаемым формулы (1.5), а f_2 – вторым слагаемым. Так как все члены последовательностей $\{\tau_i\}$ и $\{S_i\}$ имеют одинаковое распределение, то f_1 и f_2 то же имеют одинаковое распределение.

При этом первое слагаемое зависит от членов последовательностей с номерами от 1 до $k_1 - 1$, а второе – от k_1 до k_2. Так как члены последовательностей $\{\tau_i\}$ и $\{S_i\}$ разыгрываются независимо друг от

друга и независимо от номера i, то независимыми будут первые два слагаемых в (1.5) [1].

Таким же способом легко показать, что любые первые k слагаемых независимы в совокупности и одинаково распределены.

Возвращаясь к обозначениям в формуле (1.5) получаем, что все слагаемые в этой формуле, быть может, кроме последнего независимы в совокупности и имеют одинаковое распределение. Последнее (l-ое слагаемое) может иметь другое распределение, так как величины k_1, k_2, ..., k_{l-1} выбираются из условия (1.4), а величина $k_l = k$ задаётся константой.

Требование однородности функционала $f = f(\tau_1, \tau_2, \ldots; S_1, S_2, \ldots)$ можно заменить на $f = f(t, \tau_1, \tau_2, \ldots; S_1, S_2, \ldots)$, где t – интервал времени до рождения первой частицы с момента времени включения прибора (или момента времени, когда прибор вышел из мёртвого состояния и готов регистрировать новые события). Но в этом случае принципиально, что бы интервалы времени были распределены показательно, в то время как ранее это свойство не использовалось. Только для показательного распределения

$$U(t)U(s) = U(t+s),$$

где $U(t)$ – вероятность того, что время ожидания рождения следующей частицы превысит t, $U(t) = e^{-\lambda t}$ (свойство показательного распределения, известное, как парадокс ожидания). Интервал времени t до рождения следующей частицы не зависит от того, в какой момент времени прибор включился, и тоже имеет показательное распределение с плотностью $\lambda e^{-\lambda t}$.

[1] Несмотря на то, что $f_2 = \breve{f}(\tau_{k_1+1}, \tau_{k_1+2}, \ldots; S_{k_1+1}, S_{k_1+2}, \ldots)$ формально зависит от k_1, $k_1 = k_1(\{\tau_i\}, \{S_i\})$, то есть зависит от всех членов обоих последовательностей, как и $f_1 = \breve{f}(\tau_1, \tau_2, \ldots; S_1, S_2, \ldots)$

1.2 Требования к разрабатываемым математическим моделям

Как было уже показано, модель детектора может описываться неаддитивным функционалом или функционалом, обладающим одним из свойств аддитивности. Выбор, каким свойством аддитивности должен обладать функционал, зависит от того, события каких типов должны учитываться в разрабатываемой модели прибора. Наиболее общим случаем является неаддитивный функционал. Дальнейшие рассуждения строятся именно для случая неаддитивного функционала, если это не оговорено особо.

Разрабатываемые модели приборов являются имитационными моделями, так как имитационные методы Монте-Карло обладают большей универсальностью и потенциальной возможностью расширения их функциональности. При имитационном моделировании разыгрываются ветвящиеся траектории частиц, которые являются входными данными для моделей детекторов. Ветвящаяся траектория описывается деревом (теория графов) и фазовыми координатами частиц в вершинах дерева. Фазовые координаты состоят из пространственных координат, направления скорости, энергии и времени. Никаких других данных о траекториях представленные модели не используют.

Вопрос о том, как разыгрывать ветвящиеся траектории частиц, в настоящей главе не рассматривается.

Современной тенденцией является построение сложных многомодульных программ. Требование модульности выдвигается ко всем разрабатываемым программным комплексам. В настоящей работе при разработке математических моделей приборов физически различные устройства (сцинтилляционный детектор, дифференциальный спектрометр, электронная схема совпадений) рассматриваются отдельно друг от друга. Затем из уже разработанных моделей отдельных устройств собирается модель нужного прибора.

Дополнительным требованием является раздельный подсчёт истинных и различного типа ложных совпадений. Это требование наиболее актуально в модели комптоновского гамма-спектрометра.

Моделируемыми приборами являются спектрометр на основе сцинтилляционного детектора, комптоновский гамма-спектрометр, интроскоп, работающий по методу меченых нейтронов.

1.3 Моделирование сцинтилляционного детектора

1.3.1 Выбор модели сцинтилляционного детектора

Моделированию сцинтилляционных детекторов посвящены многие работы, например, [43, 76, 85, 86]. В них под сцинтилляционным детектором понимается сборка, состоящая из чувствительного сцинтилляционного вещества, ФЭУ и электронной схемы, обрабатывающей сигналы ФЭУ. В разных моделях можно выделить части, отвечающие за моделирование одного или нескольких из перечисленных элементов. Учет влияния других элементов детектора на выходной сигнал, например, влияния усилителя сигнала ФЭУ, как правило не проводится. Перечисленные три элемента сцинтилляционного детектора отличаются друг от друга с точки зрения возможностей точного моделирования их работы. Наиболее сложными для моделирования и вносящими наибольшую погрешность являются процессы, проходящие в сцинтилляционном веществе, в то время как преобразование аналогового сигнала ФЭУ в цифровой и преобразование цифрового сигнала внутри электронной схемы может быть смоделировано сравнительно просто. Учет искажений, вносимых ФЭУ (например, учёт инерционности ФЭУ), в большинстве случаев не является необходимым и проводится не во всех работах.

В простейшем случае принимается, что отклик сцинтилляционного детектора пропорционален энергии, оставленной частицей в чувствительном объеме детектора. В частности, принимается, что отклик де-

тектора не зависит от того, в какой части чувствительного объема произошла сцинтилляционная вспышка. Для детекторов протяженной формы справедливость этого предположения проверялась в работе [54]. В этой работе показано, что для протяженного стержня LSO длиной 3 см энергия, соответствующая середине фотопика, может меняться в два раза в зависимости от того, какая область стержня облучается. Сечение стержня — квадрат со стороной 2—3 мм. Для кристаллов другой формы положение фотопика может меняться еще значительнее. Также известно, что энергия сцинтилляционной вспышки не всегда пропорциональна потерянной частицей энергии. В работе [72] показано, что для кристалла LSO пропорциональность нарушается при энергии падающих квантов в диапазоне от 5 до 60 кэВ. Несмотря на перечисленные факты, предположение о пропорциональности отклика потерянной энергии и независимости его от того, в какой части сцинтиллятора произошла вспышка, вполне приемлемо для большинства задач (в том числе и для LSO в рассматриваемом нами диапазоне энергий в несколько МэВ). Расчет величины потерянной энергии прост в реализации и присутствует во многих программах, моделирующих траектории частиц методом Монте-Карло.

В настоящей работе за измеренную энергию сцинтилляционной вспышки принимается суммарная энергия, потерянная частицами в чувствительном объёме детектора.

Выбор момента пересечения частицей границы детектора за момент времени начала сцинтилляционной вспышки может быть обоснован тем, что время интегрирования (порядка 1 мкс) существенно больше характерного времени нахождения частицы внутри чувствительной области детектора (порядка $l/v \approx 1 - 10$ нс, $l \approx 10$ см — размер детектора, v — скорость частицы, сравнима со скоростью света) и больше характерного времени сцинтилляционной вспышки (до нескольких сотен наносекунд). В обоих случаях за время интегрирования будут учтены все взаимодействия частицы внутри сцинтилляционного вещества. Но таким выбором вносится систематическая погрешность в определение момента

времени начала вспышки (порядка l/v), которая в настоящей работе не существенна.

Для более точного определения момента, когда фототок превысит пороговое значение, в работах [43, 87] моделируется форма сигнала ФЭУ. В них производится моделирование распространения сцинтилляционных фотонов с учётом известных законов нарастания и спада интенсивности сцинтилляционной вспышки и с учётом качества обработки поверхностей кристаллов. В этих же работах для моделирования работы ФЭУ используется функция отклика ФЭУ на попадание фотона на фотокатод. Помимо этого в работе [43] учитывается качество обработки поверхностей кристаллов. Возможность моделирования сцинтилляционных фотонов присутствует в GEANT4 [53].

В работе [86] приводится формула, отражающая закон спада во времени интенсивности испускания фотонов в точке, где произошла сцинтилляционная вспышка. Зависимость с двумя экспонентами, отражающая нарастание и спад сигнала, приведена, например, в работе [59]. Более детальное описание обоих зависимостей приведено в [76]. Моделирование движения электронов внутри ФЭУ при расчете схем совпадений встречается редко. В работах [43] используется аналитическая формула, приведённая в [64], отражающая отклик ФЭУ на попадание на фотокатод фотона. Фундаментальные ограничения на точность определения момента попадания фотона на фотокатод, следующие из статистического распределения моментов появления фотоэлектронов, приведены в [75].

Используемая в настоящей работе модель детектора может быть с успехом заменена на одну из моделей, рассмотренных выше. Несмотря на то, что некоторые из этих моделей являются сугубо аналоговыми, они вписываются в общий случай неаддитивного функционала и могут быть сопряжены с разрабатываемыми весовыми методами.

1.3.2 Вычисление потерянной энергии

Потерянную энергию можно вычислить несколькими разными способами. Один из них — суммирование потерь энергии частицей в каждой

точке взаимодействия внутри чувствительного объёма детектора. Для этого в некоторых работах даже вводится дополнительная фазовая координата, равная потерянной частицей энергии [1]. Альтернативным методом, используемым в настоящей работе, является вычисление разности энергии частицы на входе в детектор и на выходе из него. Выбор в пользу этого метода был сделан после анализа возможностей реализации обоих способов с использованием кода программы MCNP.

Потерянная энергия может вычисляться двумя способами: как для отдельной частицы, так и для нескольких частиц, если они попадают в детектор одновременно.

В первом способе при вычислении отклика детектора учитываются только частицы, порожденные одной и той же первичной частицей, включая саму первичную частицу. Другими словами, для каждой ветвящейся траектории S вычисляется отклик $q(S)$, а отклик детектора на несколько траекторий равен сумме откликов на каждую траекторию в отдельности (выполняется аддитивность по траекториям). Этот способ соответствует счетчику F8 программы MCNP. На рис. 8, иллюстрирующем рассматриваемый способ, энергия сцинтилляционной вспышки будет равна $E_1 - E_2 - E_3 + E_4 - E_5$.

Во втором способе учитывается, что во время интегрирования сигнала ФЭУ может появиться еще одна частица, относящаяся к другой траектории. Новая частица вызывает сцинтилляционные вспышки, накладывающиеся на вспышки от первой частицы. Для учета этого производится имитация работы электронного блока, интегрирующего сигнал ФЭУ. За момент времени начала сцинтилляционной вспышки принимается момент пересечения частицей границы детектора. От этого момента времени отсчитывается интервал времени, в течение которого при расчете потерянной энергии учитываются все частицы, попадающие внутрь детектора. На рис. 9 энергия сцинтилляционной вспышки попрежнему равна $E_1 - E_2 - E_3 + E_4 - E_5$, но эта величина складывается из слагаемых, относящихся к разным траекториям S_1 и S_2.

Очевидно, что необходимым условием влияния частицы на отклик детектора является пересечение частицей поверхности детектора. Суще-

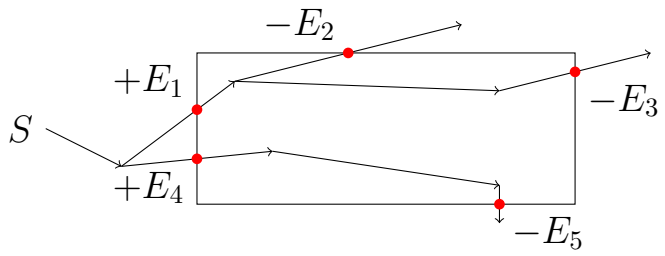

Рис. 8. Вычисление энергии сцинтилляционной вспышки. Первый случай.

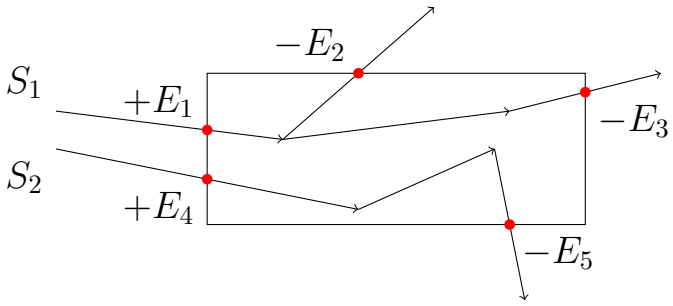

Рис. 9. Вычисление энергии сцинтилляционной вспышки. Второй случай.

ственными для вычисления отклика детектора параметрами траектории являются энергия частицы при входе в детектор, энергия частицы при выходе из детектора, моменты времени пересечения частицей границ детектора.

1.3.3 Входные и выходные данные моделей детектора

За входные данные всех рассматриваемых ниже моделей принимаются точки пересечения частицами поверхности детектора. В нестационарном случае в описание точек пересечения входит время.

Выходными данными является последовательность импульсов, снимаемых с интегрирующего сигнал ФЭУ блока электроники. Каждый импульс характеризуется энергией и временем прихода фронта. В рамках выбранной математической модели сцинтилляционного детектора

энергия импульса равна энергии вспышки и равна энергии, потерянной частицами в чувствительном веществе детектора.

1.3.4 Формулировка используемого алгоритма

1.3.4.1 Выделение точек пересечения частицами границ детектора

Сформулируем алгоритм, по которому в настоящей работе вычисляется потерянная энергия. Примем за отчёт детектора энергию частицы, оставленную внутри некоторой пространственной области D (в этой области находится чувствительное вещество детектора). Обозначим поверхность, ограничивающую эту область, через F.

Каждая ветвящаяся траектория описывается деревом, состоящим из вершин в фазовом пространстве и направленных рёбер, соединяющих вершины. Так как ребро соединяет две точки в трёхмерном физическом пространстве, то можно говорить о пересечении ребра с поверхностью F. Для каждой точки пересечения на основании указанных данных о траектории можно вычислить моменты времени, в которые частица, двигаясь вдоль ребра, попадает в каждую из точек пересечения. Множество всех точек пересечения прямолинейных участков траектории с поверхностью F будем называть пересечением траектории с поверхностью F. Пусть t — момент времени пересечения частицей поверхности F, E — энергия частицы, s — направления движения частицы, равное 1 при движении частицы внутрь области D, и -1 — наружу. Совокупность $A = \{t, E, s\}$ будем называть *событием*. Событие соответствует пересечению частицей границы детектора.

Множество всех событий распадается на два подмножества A^+ и A^-. В подмножество A^+ входят те события, для которых $s = 1$, в подмножество A^- — события, для которых $s = -1$. О любых двух событиях $A_1 \in A^+$ и $A_2 \in A^-$, образованных пересечением одной и той же траектории с поверхностью F, будем говорить, что событие A_2 *следует* за событием A_1, если путь в дереве, описывающем ветвящуюся траекторию, от A_1 до A_2 полностью лежит внутри области D. В случае

неразмножающей среды физически это означает, что после входа в область D в момент времени t_1 частица вышла из нее в момент времени t_2. В случае размножающей среды за одним событием A_1 может следовать несколько событий A_2, A_3 и т. д., причём все дочерние частицы, родившиеся внутри D, первый раз покидают область D в моменты времени соответственно t_2, t_3 и т. д.

На рис. 10 приведён пример разбиения пересечений ветвящейся траектории с границей области на подмножества A^+ и A^-. В точке C в результате столкновения родилось две вторичных частицы. Попаданию первой частицы в область D соответствует событие A_1^+. Внутри области D из этой частицы образовалось опять две вторичных частицы, при вылете которых из области D происходят события $A_{1,1}^-$ и $A_{1,2}^-$. Вторая частица, родившаяся в точке C, попадает в область D два раза. Первое посещение соответствует событиям A_2^+ и $A_{2,1}^-$, второе — A_3^+ и $A_{3,1}^-$. За событием A_1^+ следуют события $A_{1,1}^-$ и $A_{1,2}^-$, за событием A_2^+ — $A_{2,1}^-$, за событием A_3^+ — $A_{3,1}^-$.

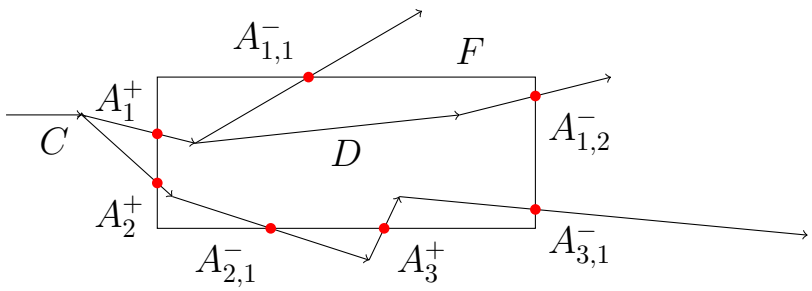

Рис. 10. Пересечение ветвящейся траектории и границы области.

Пусть $A_i^+ = \{t_i^+, E_i^+, s_i^+\}$ — множество всех событий, полученных пересечением разыгранных методом Монте-Карло траекторий с областью D и соответствующих вхождению частиц в область D, $s_i^+ = 1$, $i = 1, 2, \ldots, n$; $A_{ij}^- = \{t_{ij}^-, E_{ij}^-, s_{ij}^-\}$ — следующие за A_i^+ события, соответствующие вылету частиц из области D, $s_{ij}^- = -1$, $j = 1, 2, \ldots, n_i$. Потерянная при i-ом попадании в область D энергия равна

$$\varepsilon_i = E_i^+ - \sum_{j=1}^{i=n_i} E_{ij}^-, \tag{1.6}$$

эта величина имеет смысл вклада в энергию сцинтилляционной вспышки, сделанного событием A_i^+. Определим теперь, какие события A_i^+ внесут вклад в энергию сцинтилляционной вспышки. Возможны два способа отбора событий.

1.3.4.2 Случай $Q = q(S)$

В первом способе отклик детектора рассчитывается для каждой траектории в отдельности ($q(S_1, S_2, \ldots, S_k)$ аддитивен по траекториям). При этом энергия вспышки χ_j, вызванная частицами траектории S_j рассчитывается по формуле

$$\chi_j = \sum_{i:A_i^+ \in S_j \cap D} \varepsilon_i, \tag{1.7}$$

где суммирование ведётся по всем номерам i, при которых события A_i^+ соответствуют точкам вхождения в область D частиц выбранной траектории S_j. Физически этот случай означает, что время между испусканием частиц источником несоизмеримо больше характерной временной длительности вспышки.

Для удобства перечислим основные шаги алгоритма в случае $Q = q(S)$ вместе:

1. Для каждой траектории найти все пересечения с границей области D и определить множества событий $\{A_i^+\}$ и $\{A_{ij}^-\}$.

2. Для каждого события A_i^+ вычислить величину ε_i по формуле (1.6).

3. Для каждой траектории определить энергию сцинтилляционной вспышки по формуле (1.7).

1.3.4.3 Случай $Q = q(S_1, S_2, \ldots, S_k)$

Во втором способе производится выбор событий A_i^+, попадающих в окно интегрирования. Будем считать, что множество $\{A_i^+\}$ упорядочено по моменту времени пересечения области D, то есть $t_{i+1}^+ \geq t_i^+$. Среди

моментов времени t_i^+ выберем первые n_{int} моментов таким образом, чтобы

$$\begin{cases} t_{n_{int}} - t_1 \leqslant \tau_{int} \\ t_{n_{int}+1} - t_1 > \tau_{int}, \end{cases} \tag{1.8}$$

где τ_{int} — длительность временного окна, в течение которого производится интегрирование сигнала ФЭУ. Если количество элементов во множестве $\{t_n\}$ мало и не позволяет удовлетворить второму неравенству, то за номер n_{int} принимается последний номер в упорядоченном множестве $\{t_n\}$. Все сцинтилляционные вспышки с энергиями ε_1, ε_2, …, $\varepsilon_{n_{int}}$ попадают внутрь окна, в течение которого производится интегрирование сигнала ФЭУ. Измеренная детектором энергия равна

$$\chi_1 = \varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \ldots + \varepsilon_{n_{int}}, \tag{1.9}$$

причём за время открытия окна интегрирования принимается время прихода фронта первой вспышки, попавшей в окно времени интегрирования, которое равно t_1. Определим теперь индекс n_{dead} таким образом, что

$$\begin{cases} t_{n_{dead}+n_{int}} - t_1 \leqslant \tau_{int} + \tau_{dead} \\ t_{n_{dead}+n_{int}+1} - t_1 > \tau_{int} + \tau_{dead} \end{cases} \tag{1.10}$$

где τ_{dead} — мёртвое время детектора, в течение которого все вспышки игнорируются. Аналогично выбору n_{int}, если второе неравенство не может быть удовлетворено, то в качестве номера $n_{dead}+n_{int}$ надо выбрать последний номер в упорядоченном множестве $\{t_n\}$. Из множества $\{A_i^+\}$ уберем первые $n_{int} + n_{dead}$ событий, после чего алгоритм возвращается в исходное состояние, но с уже меньшим количеством событий. Повторяя перечисленные шаги до тех пор, пока множество $\{A_i^+\}$ не пусто, получаем последовательно энергии второй, третьей и т. д. сцинтилляционных вспышек χ_2, χ_3, …, χ_p и моменты времени их возникновения t_2, t_3, …, t_p.

Для удобства перечислим основные шаги изложенного алгоритма в случае $Q = q(S_1, S_2, \ldots, S_k)$ ещё раз:

1. Для каждой траектории найти все пересечения с границей области D и определить множества событий $\{A_i^+\}$ и $\{A_{ij}^-\}$.

2. Для каждого события A_i^+ вычислить величину ε_i по формуле (1.6).

3. Множество пар чисел $\{(t_i, \varepsilon_i)\}$ отсортировать по возрастанию времени t_i пересечения границы области D.

4. Определить последовательность измеренных детектором энергий $\chi_1, \chi_2, \ldots, \chi_p$ и моменты времени $t_1, t_2, \ldots, t_p$, используя формулы (1.8), (1.9), (1.10)

В обоих случаях $Q = q(S)$ и $Q = q(S_1, S_2, \ldots, S_k)$ временной интервал T_0, за который модель сцинтилляционного детектора успевает вернуться в исходное состояние, равен сумме $\tau_{int} + \tau_{dead}$.

1.4 Моделирование спектрометра

Объектом моделирования является многоканальный спектрометр, функциями которого является определение, в какой канал попадает зарегистрированный импульс, и увеличение счётчика этого канала.

За входные данные модели спектрометра принимается совокупность выходных данных моделей детекторов. Это последовательность измеренных детектором энергий χ_i и моменты времени t_i для каждого детектора.

Пусть χ_i — энергия сцинтилляционной вспышки, пусть E_n — энергетические границы каналов, $n = 0, 1, \ldots, N$. Модель спектрометра определяет номер канала n такой, что

$$\chi_i \in [E_n, E_{n+1}), 0 \leq n \leq N.$$

Затем количество попаданий в этот канал увеличивается на единицу. Выходными данными модели является вектор, компоненты которого показывают количество попаданий в каждый из каналов спектрометра. Все

выводимые в настоящей работе формулы доказываются для скалярных случайных величин, но они легко могут быть перенесены на случай векторных случайных величин.

Временной интервал T_0, за который спектрометр успевает вернуться в исходное состояние (см. п. 1.1.4), может быть выбран равным временному интервалу T_0 модели сцинтилляционного детектора. Неучитывание параметров электронной схемы оправдывается тем, что характерное время реакции электронной схемы существенно меньше времени интегрирования τ_{int} сигнала ФЭУ в сцинтилляционном детекторе. Последний параметр как раз и определяет T_0

1.5 Моделирование электронной схемы совпадений

Объектом моделирования является электронная схема, обрабатывающая сигналы ФЭУ, в составе комптоновского гамма-спектрометра. Схемы совпадений характеризуются следующими основными параметрами: разрешающим временем τ_{per} (максимальный временной сдвиг между входными сигналами, при котором они регистрируются как одновременные, от англ. permission time), чувствительностью (минимальный уровень входных сигналов, поступающих одновременно на все входы схемы совпадений), мёртвым временем τ_{par} (от англ. paralysis time). В настоящей работе учитываются только разрешающее время и мёртвое время схемы совпадений, в остальном схема совпадений считается идеальной. Мёртвое время τ_{par} обычно намного меньше разрешающего времени τ_{per}.

Как и в случае спектрометра, за входные данные модели схемы совпадений принимается совокупность выходных данных моделей детекторов.

Модель электронной схемы совпадений имеет три состояния (см. рис. 11): основное состояние, состояние ожидания сигнала от второго

детектора и состояние отработки мёртвого времени. Выделим условия, при которых модель переходит из одного состояния в другое.

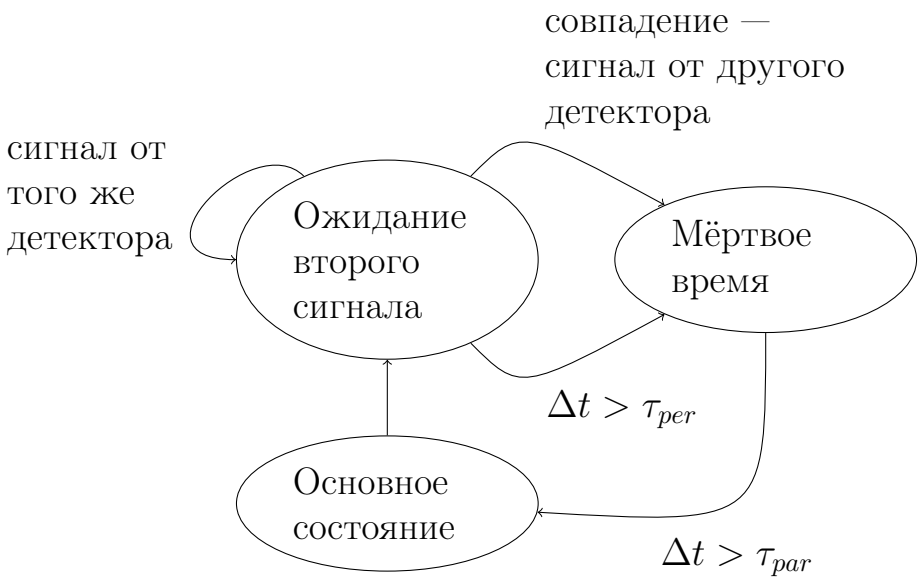

Рис. 11. Диаграмма состояний модели электронной схемы совпадений.

В начальный момент времени модель находится в основном состоянии и ждёт появления сигнала от одного из сцинтилляционных детекторов. При поступлении сигнала модель переходит в состояние ожидания появления сигнала от второго детектора. Здесь возможны три альтернативных пути развития событий. Первый путь реализуется, если пришёл сигнал от того же самого детектора. Тогда модель ведёт себя так же, как если бы она находилась в основном состоянии на момент прихода этого сигнала. Второй путь реализуется, если пришёл сигнал от другого детектора. В этом случае модель регистрирует совпадение и переходит в состояние отработки мёртвого времени. Третий путь — если в течение времени τ_{per} не пришёл ни один сигнал. Тогда модель опять переходит в состояние отработки мёртвого времени. В состоянии отработки мёртвого времени схема находится в течение времени τ_{par} и ни на что не реагирует, затем переходит в основное состояние.

Временной интервал T_0 для электронной схемы совпадений, за который она успевает вернуться в исходное состояние при отсутствии сигналов от сцинтилляционных детекторов, составляет $\tau_{per} + \tau_{par}$. Для

модели, состоящей из моделей сцинтилляционных детекторов и модели схемы совпадений, в качестве интервала T_0 выбирается сумма интервалов T_0 для обоих моделей, равная $\tau_{int} + \tau_{dead} + \tau_{per} + \tau_{par}$.

1.6 Моделирование интроскопа, работающего по методу меченых нейтронов

1.6.1 Метод меченых нейтронов

В настоящее время возможности применения метода меченых нейтронов (ММН) для идентификации скрытых веществ исследуется во многих лабораториях мира [17, 26, 42, 46, 48, 60]. К практическим применениям ММН относятся обнаружение запрещённых к транспортировке веществ в закрытых контейнерах, поиск взрывчатых веществ, каротаж скважин и другие.

Суть метода меченых нейтронов (ММН) заключается в следующем. При бомбардировке тритиевой мишени потоком дейтронов в ходе реакции

$$T(d,n)^4He$$

образуются быстрые моноэнергетические нейтроны с энергией $14,1$ МэВ, и альфа-частицы с энергией $3,5$ МэВ, которые разлетаются под углом примерно 180 градусов в системе центра масс. Нейтроны образуют поток зондирующего излучения.

Направление и момент времени вылета альфа-частицы измеряется специальным многосекционным детектором. По этим данным вычисляется направление и момент времени вылета сопутствующего ей нейтрона. Нейтроны, проникая в инспектируемый объект, взаимодействуют с его веществом, и в результате протекания реакции образуют гамма-кванты с характерным для инспектируемого вещества энергетическим спектром. Разница во времени между регистрацией гамма-кванта и альфа частицы позволяет судить о месте взаимодействия нейтрона с веществом и, таким образом, позволяет получить информацию о пространственном

положении изотопа, испустившего гамма-квант. Измерение спектра индуцированных гамма-квантов позволяет идентифицировать вещество.

Во многих приложениях ММН остро стоит вопрос об уменьшении времени, необходимом для измерения спектра гамма-излучения, но достаточного для проведения идентификации. К решению этого вопроса подходят с двух сторон. Первый путь – оптимизация параметров измерительного прибора. Второй – разработка новых алгоритмов распознавания измеренных спектров. В обоих случаях используются методы математического моделирования, так как они позволяют существенно сэкономить время на разработку прибора и ресурсы.

1.6.2 Моделирование прибора

Приборы, работающие по методу ММН, состоят из генератора меченых нейтронов, одного или нескольких детекторов гамма-излучения и электронной схемы, обрабатывающей сигналы детекторов. Алгоритм обработки сингалов отдельных детекторов сложен и для системы EURITRACK описан, например, в [52]. Возможно построение упрощенной модели прибора, работающего по методу меченых нейтронов, на основе уже разработанных моделей сцинтилляционного детектора и электронной схемы совпадений.

При моделировании траекторий нейтронов методом Монте-Карло время и направление вылета нейтрона известно, для их определения разыгрывать траекторию альфа-частицы нет необходимости. Вместо этого каждый нейтрон, покинувший источник, считается меченым. В настоящей работе траектории альфа-частиц не разыгрываются.

Предполагается, что функционал, описывающий отклик прибора, аддитивен по траекториям. При этом выбрасываются из рассмотрения случайные совпадения, вызванные возвращением многократно рассеянных гамма-квантов. Другими словами, не рассматриваются случайные совпадения, вызванные неправильным сопоставлением попавшего в детектор гамма-кванта и испущенного нейтрона. Это предположение оправдывается тем, что эксплуатация прибора в условиях, когда

указанные случайные совпадения будут играть существенную роль, не предполагается.

Построенная в этой главе модель прибора характеризуется двумя параметрами – интервал времени от момента вылета нейтрона до момента открытия временного окна и длительность временного окна. Оба параметра выбираются так, чтобы во временное окно попадали гамма-кванты, приходящие из инспектируемого объекта.

Модель интроскопа (см. рис. 12), работающего по методу меченых нейтронов, построена из модели сцинтилляционного детектора (п. 1.3.4) и модели спектрометра (п. 1.4). К модели спектрометра добавлена проверка условия, позволяющего осуществить стробирование, то есть выделить только те сигналы, которые попадают во временной интервал. Входными данными всей модели являются события A_i^+ и A_{ij}^-, соответствующие пересечению траекторий S_1, S_2, …, S_k с границами чувствительного вещества детектора. Выходными данными является массив, отражающий количество попаданий в каждый из каналов спектрометра.

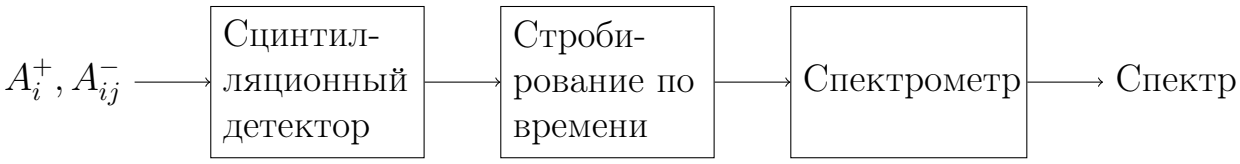

Рис. 12. Модель прибора, работающего по методу меченых нейтронов.

1.7 Моделирование комптоновского гамма-спектрометра

1.7.1 Приложения и принцип работы комптоновских гамма-спектрометров

Областью приложения гамма-телескопов помимо гамма-астрономии является дистанционное обнаружение ядерного оружия, утечек в местах захоронения радиоактивных отходов и на территориях действующих

атомных электростанций, контроль за перемещением делящихся материалов, медицинская томография и другие.

Одной из разновидностей приборов, позволяющих определить направление прилёта гамма-квантов, являются комптоновские гамма-спектрометры. Ярким примером комптоновского гамма-спектрометра является гамма-телескоп COMPTEL.

На рис. 13 приведена геометрическая конфигурация комптоновского гамма-спектрометра. Рассмотрим принцип работы этого прибора. Прибор состоит из двух слоев сцинтилляционных детекторов. Пусть гамма-квант испытал одиночное комптоновское рассеяние в одном из детекторов первого слоя и полное поглощение в детекторе второго слоя. Тогда можно определить исходную энергию гамма-кванта и энергию, потерянную им при комптоновском рассеянии.

Потерянная при рассеянии энергия ΔE измеряется первым детектором, потерянная при полном поглощении энергия E_1 – вторым. Исходная энергия E_0 определяется как сумма $E_0 = E_1 + \Delta E$.

Зная исходную энергию и потерянную энергию можно вычислить угол θ, на который отклонился гамма-квант при комптоновском рассеянии, из соотношения

$$E_1 = E_0 \frac{1}{1 + \frac{E_0}{m_e c^2}\left(1 - cos\theta\right)},$$

где $m_e c^2$ – энергия покоя электрона. С учётом пространственного расположения детекторов можно определить конус возможных направлений на источник. В идеальном случае конусы, соответствующие таким совпадениям, пересекаются в пространстве по лучу, направленному на точечный источник.

В качестве разрешающего времени τ_{per} электронной схемы совпадений выбирается время, достаточное, чтобы рассеянный в первом слое гамма-квант достиг второго слоя.

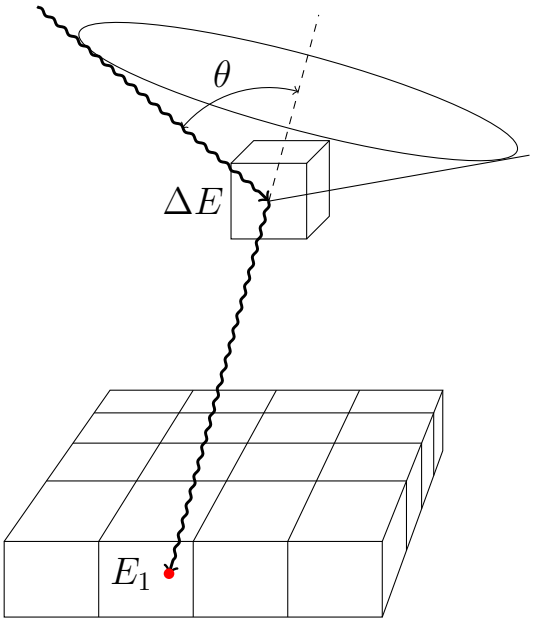

Рис. 13. Схема комптоновского гамма-спектрометра

1.7.2 Модель комптоновского гамма-спектрометра

Структура модели комптоновского гамма-спектрометра повторяет структуру физического прибора (рис. 14). Один и тот же алгоритм, рассмотренный при построении модели сцинтилляционного детектора в п. 1.3.4, используется для моделирования работы всех сцинтилляционных детекторов в приборе. При моделировании работы электронной схемы совпадений используется алгоритм, рассмотренный в п. 1.5.

Временной интервал T_0, за который модель комптоновского гамма-спектрометра успевает вернуться в исходное состояние, выбирается равным $\tau_{int} + \tau_{dead} + \tau_{per} + \tau_{par}$, как это указано в п. 1.5.

Разработанная модель комптоновского гамма-спектрометра имеет две отличительные черты. Первая из них – это учёт совпадений, вызванных разными частицами (функционал, описывающий модель, не является аддитивным по траекториям). Для учёта таких совпадений необходимо обращать внимание только на момент времени обнаружения частицы каким-либо из детекторов, не учитывая номер разыгрываемой ветвящейся траектории. В большинстве программ, предназначенных для подсчёта совпадений, программа возвращается в исходное состояние

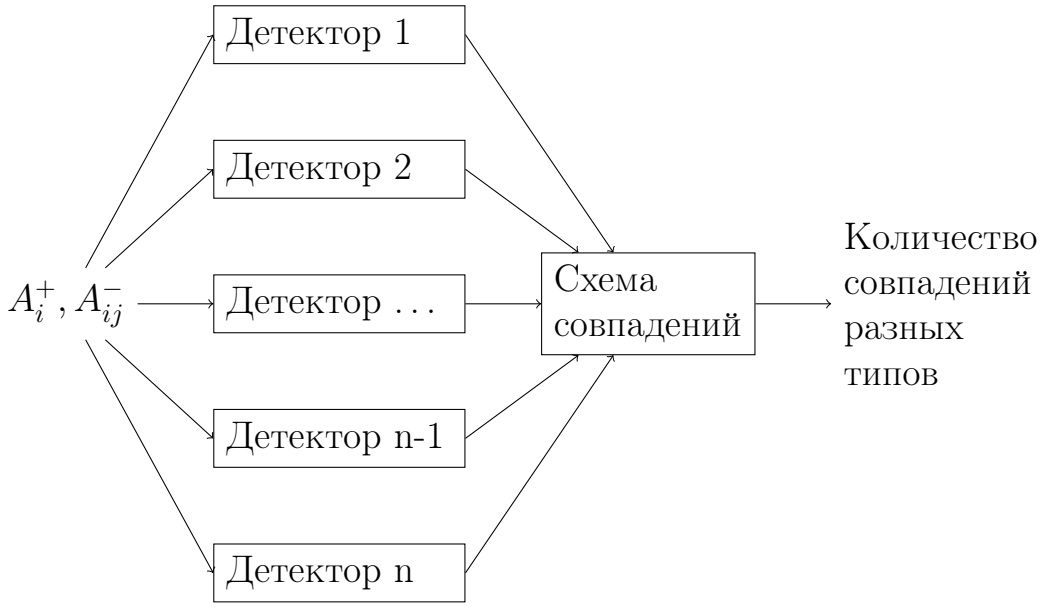

Рис. 14. Модель комптоновского гамма-спектрометра.

после окончания моделирования каждой ветвящейся траектории, то есть вычисляется функционал $q(S_1) + q(S_2) + \ldots + q(S_k)$. Так сделано, например, в работах [45, 74, 83].

Прогонка модели выполняется в два этапа. Сначала производится моделирование работы сцинтилляционных детекторов. Выходными данными на этом шаге являются хронологические последовательности откликов (χ_i, t_i), полученные для каждого сцинтилляционного детектора. Затем из откликов всех детекторов образуется единая последовательность, которая в хронологическом порядке подаётся на вход модели электронной схемы совпадений.

Вторая особенность разрабатываемой модели комптоновского гамма-спектрометра состоит в учёте типа реакций, произошедщих в детекторе первого слоя и детекторе второго слоя. Учёт типа реакций позволяет определить, является совпадение истинным или ложным. После раздельного подсчёта количества истинных и ложных совпадений можно вычислить отношение

$$\eta = \frac{N_{true}}{N_{total}}, \tag{1.11}$$

где N_{total} – полное количество зарегистрированных совпадений, N_{true} – количество зарегистрированных истинных совпадений. Коэффициент η имеет смысл избирательности прибора. Геометрические параметры прибора должны быть выбраны так, чтобы максимизировать η при определённых условиях работы прибора. Как в рамках модели различать истинные совпадения и ложные совпадения разных типов описано в п. 1.7.3.

Для комптоновского спектрометра с тремя рассеяниями похожие исследования проводились в работе [63], целью которых была оптимизация геометрических параметров прибора, при которых регистрируется максимальное количество истинных совпадений. Однако в этой работе не проводится различие между ложными совпадениями различных типов, и не учитываются ложные совпадения, вызванные разными частицами (прибор описывается аддитивным по траекториям функционалом).

1.7.3 Определение типа совпадений

В случае, когда событие в первом детекторе вызвано одиночным комптоновским рассеянием, а событие во втором детекторе – поглощением гамма-кванта, то совпадение является истинным. Другие совпадения являются ложными. На практике отличить истинные совпадения от ложных невозможно. Поэтому при разработке приборов, работающих на эффекте двойных рассеяний, важно минимизировать вероятность ложных совпадений.

Для простоты ограничимся моделированием распространения гамма-квантов, причём для гамма-квантов учитываются только эффект Комптона и фотопоглощение. Эффект рождения электрон-позитронных пар не рассматривается. Предполагается также, что электроны теряют всю свою энергию в том месте, где они появились, и она полностью переходит в энергию сцинтилляционной вспышки (это достигается при больших размерах кристалла, когда можно пренебречь краевыми эффектами для электронов).

Для обеспечения последующих этапов разрабатываемого алгоритма информацией, из которой можно установить истинность или ложность совпадения, каждый отчёт сцинтилляционного детектора дополняется следующей информацией: число вошедших в детектор частиц, число вышедших частиц и число соударений внутри детектора за время интегрирования сигнала ФЭУ. С учётом сделанных ограничений на моделирование физических процессов можно утверждать, что если все три числа равны единице, то внутри детектора произошло одиночное комптоновское рассеяние. Если число вышедших частиц равно нулю, а число вошедших равно единице, то в детекторе произошло поглощение гамма-кванта.

Итак, совпадение будет истинным при выполнении следующих шести условий:

1. количество частиц, вошедших в детектор первого слоя, равно 1;
2. количество частиц, вышедших из детектора первого слоя, равно 1;
3. количество соударений внутри детектора первого слоя равно 1;
4. количество частиц, вошедших в детектор второго слоя, равно 1;
5. количество частиц, вышедших из детектора второго слоя, равно 0.
6. частицы, вошедшие в детектор первого слоя и в детектор второго слоя, принадлежат одной и той же ветвящейся траектории.

Проверка этих шести условий позволяет отнести каждое зарегистрированное двойное совпадение к одной из 2^6 групп, причём только одна из этих групп будет соответствовать истинным совпадениям. Подсчитав число попаданий в эту группу можно вычислить коэффициент η. При помощи анализа распределения количества совпадений по этим группам можно указать способы повышения коэффициента η.

1.8 Результаты

Функционал, описывающий отклик прибора, регистрирующего ядерное излучение, может быть аддитивным по столкновениями, аддитивным по траекториям или неаддитивным. Выполнение того или иного свойства аддитивности связано с тем, события каких типов должны быть учтены в математической модели прибора. Неаддитивные функционалы являются наиболее общим случаем. Показано, что неаддитивные функционалы, описывающие отклик физических приборов, всё же могут быть разбиты на сумму слагаемых. Условием разбиения является отсутствие частиц в течение длительного интервала времени. Такое свойство аддитивности названо аддитивностью по времени. Доказана независимость и одинаковая распределённость слагаемых, на которые распадается аддитивный по времени функционал.

В качестве отклика сцинтилляционного детектора выбрана модель, согласно которой за отклик детектора принимается энергия, оставленная всеми частицами за время интегрирования сигнала ФЭУ. Выбранная модель обобщена на случай неаддитивного по траекториям функционала.

Модель сцинтилляционного детектора дополнена возможностью учёта типа реакции, что позволяет отделить в рамках построенной на её основе модели комптоновского гамма-спектрометра истинные совпадения от ложных. Предложен критерий для оптимизации геометрических параметров комптоновского гамма-спектрометра.

Предложена модель интроскопа, работающего по методу меченых нейтронов, которая работает в приближении аддитивности по траекториям.

Все изложенные модели физических приборов являются имитационными. Модели приборов, работающих по схемам совпадений, строятся из моделей сцинтилляционного детектора и электронной схемы совпадений.

Модели приведены к одному формату входных данных и могут быть описаны функционалом $q(S_1, S_2, \ldots, S_k)$. Это позволит абстрагироваться от особенностей конкретной модели и построить общие универсальные весовые методы.

Глава 2

Весовой алгоритм вычисления среднего неаддитивных функционалов

2.1 Существующие способы вычисления среднего небольцмановских функционалов

В классических работах, в частности в книгах В. В. Учайкина, А. А. Лагутина [25], С. М. Ермакова [7], Г. А. Михайлова [16], разработка весовых методов ведётся для вычисления функционалов определённых классов. Наиболее изученным классом является класс больцмановских функционалов, представимых в виде

$$(f, h) = \int f(x)h(x)dx,$$

где x — фазовые координаты частицы, $f(x)$ — плотность столкновений, $h(x)$ — функция детектора, интегрирование ведётся по всему фазовому пространству. Также разработаны методы для вычисления квадрата аддитивного функционала или любой его натуральной степени [12, 13]. Построение общего численного метода Монте-Карло для произвольных функционалов в этих и многих других работах ограничивается аналоговым методом.

В работе [25] рассматриваются детекторы, отклик которых представим в виде главной части, являющейся аддитивной, и малой неаддитивной добавки. Для вычисления показаний детекторов такого типа развит подход, называемый поливариантным разложением. Теоретически такой

подход годится для вычисления среднего любых неаддитивных функционалов, но на практике он применим в тех случаях, когда все члены разложения, начиная с некоторого номера, становятся равными нулю.

В некоторых работах учитывается только одна исходящая частица даже в тех случаях, когда из реакции может выходить несколько частиц. Несмещённость оценки при этом достигается корректировкой статистического веса. Так сделано, например, в работах [1, 41], в которой возможность учёта только одной выходящей частицы позволила разработать сопряжённые методы вычисления небольцмановских функционалов. Возможность учёта только одной частицы при моделировании реакции физически означает то, что вероятность одновременного попадания в детектор нескольких ветвей траектории мала. Это условие выполняется, например, в задачах, где чувствительная область детектора мала.

Предложенный в работах [1, 41] общий подход для расчёта небольцмановских функционалов заключается в расширении фазового пространства дополнительной переменной. Например, в случае расчёта спектра потерянной энергии — это поглощённая энергия частицы, в случае моделирования схем совпадений — это индикаторы внесения вклада в показания различных детекторов.

Обобщая сказанное выше, можно утверждать, что в большей части литературы, посвящённой весовому моделированию, рассматриваются различные специальные классы небольцмановских функционалов. Совершенно очевидно, что модели детекторов во многих задачах могут не попадать ни в один из рассмотренных классов. Также можно заключить, что учёт ветвлений в траекториях представляет собой отдельную сложность.

От указанных недостатков свободен общий теоретико-вероятностный подход, согласно которому вычисляется среднее значение случайной величины, заданной на множестве всех ветвящихся траекторий, по некоторой вероятностной мере. Этот подход, намеченный в классических учебниках [23, 57], адаптирован для численных расчётов в работах [7, 18]. В работах [3, 8, 16] на достаточно строгом уровне изложены весовые методы Монте-Карло для вычисления

среднего случайной величины, заданной на абстрактном вероятностном пространстве.

В настоящей работе концепция супертреков обосновывается в рамках общего теоретико-вероятностного подхода применением весовых методов Монте-Карло для вычисления интеграла

$$Mq = \int q(S)P(dS), \tag{2.1}$$

где интегрирование ведётся по всем возможным ветвящимся траекториям, P — вероятностная мера, $q(S)$ — усредняемый функционал. Исходом случайного испытания в методе Монте-Карло является ветвящаяся траектория S. При вычислении этого интеграла можно ветвящиеся траектории разыгрывать со смещенной плотностью вероятности $p'(S)$, а в качестве весового множителя использовать $w(S) = p(S)/p'(S)$, где $p(S)$ — несмещённая (физическая) плотность вероятности реализации траектории S.

Концепция супертреков привлекает отсутствием существенных ограничений на функционал $q(S)$. Ценность концепции супертреков состоит в её универсальности, которая проявляется в возможности построения весового алгоритма моделирования во всех случаях, когда возможно построение аналогового алгоритма. Однако в работе [37] строгому обоснованию концепции супертреков уделено недостаточно внимания, но приводится разбор многочисленного множества примеров.

2.2 Концепция супертреков

В работе [37] предлагается «запоминать» при моделировании физически совместно осуществимые траектории первичной и всех вторичных частиц, и при вычислении отклика детектора рассматривать такие траектории совместно. Совокупность траектории первичной частицы и всех вторичных частиц в [37] названа супертреком. Супертрек является исходом статистического испытания при вычислении интеграла (2.1) методом Монте-Карло.

Супертрек — это минимальная единица, к которой могут быть применены весовые методы Монте-Карло. Статистический вес приписывается всему супертреку, а не каждому столкновению в отдельности.

Новый супертрек создается вместе с рождением новой частицы в некоррелированном источнике. Этот супертрек имеет вес $w = 1$ и содержит траекторию только вновь рожденной частицы. Если в результате какого-нибудь физического процесса рождаются вторичные частицы, то их траектории добавляются к тому же супертреку, которому принадлежит траектория первичной частицы.

Рассмотрим весовые методы разыгрывания супертреков. При разыгрывании траектории частицы со смещённой плотностью вероятности без использования супертреков её вес умножается на корректирующий множитель. При использовании концепции супертреков на этот множитель умножается вес всего супертрека.

При расщеплении траектории частицы образуются несколько взаимоисключающих траекторий той же самой частицы. Они являются взаимоисключающими, так как физическая частица пошла бы только по одной из них. Если расщепляется одна из траекторий частиц, входящих в супертрек, то расщеплению подвергается весь супертрек. В каждый из новых супертреков входит по одной из получившихся ветвей траектории, подвергшейся расщеплению, и все остальные траектории из исходного супертрека. При этом каждый из новых супертреков по-прежнему содержит только физически осуществимые вместе траектории, и не одна из траекторий не потеряна. Но новые супертреки являются взаимоисключающими, так как они содержат взаимоисключающие траектории одной и той же частицы. Новые супертреки имеют суммарный вес, равный весу исходного супертрека.

При игре в русскую рулетку обрывается весь супертрек (его вес становится равным нулю). Было бы неправильно обрывать отдельные траектории частиц, входящих в супертрек. Аналогичные рассуждения можно привести и для других весовых методов. В частности, при применении метода DXTRAN (см., например, [28, 89]) супертрек расщепляется на два новых супертрека. В один из них входит DXTRAN-

ветвь траектории частицы, в другой — обычная траектория. После расщепления супертрек, содержащий обычную частицу (не-DXTRAN), играет в русскую рулетку. Более подробно суть метода DXTRAN описана в п. 2.7.5.1 настоящей главы.

Вместо вычисления величины

$$Q = q\left(S\right),$$

где S — супертрек, в концепции супертреков предлагается использовать весовые методы при моделировании траекторий частиц и вычислять величину

$$Q^* = wq\left(S\right),$$

где w — вес супертрека. В рамках концепции супертреков предложен способ вычисления веса w в процессе разыгрывания супертрека при применении метода расщепления частицы, метода русской рулетки, поглощения уменьшением веса и разыгрывания траекторий со смещенной плотностью вероятности рассеяния. При использовании этого способа математическое ожидание величины Q^* будет равно математическому ожиданию величины Q. Особое внимание уделено возможности реализации этого подхода с использованием программы MCNP. Однако автор концепции ограничился рассмотрением функционалов, аддитивных в смысле (1.2), где каждое слагаемое $q(S)$ зависит только от одного супертрека. В настоящей работе приводится обобщение концепции супертреков на случай, когда

$$Q = q\left(S_1, S_2, \ldots, S_k\right) \neq \sum_{i=1}^{k} q\left(S_i\right).$$

2.3 Формулировка предлагаемого алгоритма

Для того, чтобы подчеркнуть использование предложенных в [37] весовых методов будем использовать термин «супертрек» для обозначения ветвящейся траектории.

Пусть в результате весового моделирования k супертреков i-ый супертрек расщепился на m_i супертреков S_{ij} с весами w_{ij}, $i = 1..k$, $j = 1..m_i$. Предлагаемый алгоритм сводится к вычислению среднего значения случайной величины

$$Q^* = \sum_{j_1=1}^{m_1} \sum_{j_2=1}^{m_2} \dots \sum_{j_k=1}^{m_k} q(S_{1j_1}, S_{2j_2}, \dots, S_{kj_k}) \cdot w_{1j_1} w_{2j_2} \dots w_{kj_k} \tag{2.2}$$

вместо вычисления среднего значения случайной величины

$$Q = q(S_1, S_2, \dots, S_k). \tag{2.3}$$

Целью этой главы является доказательство несмещённости оценки Q^*, то есть доказательство равенства

$$MQ = MQ^*. \tag{2.4}$$

Практический смысл этого равенства состоит в том, что вместо проведения большого количества статистических испытаний для вычисления среднего величины Q, можно вычислять среднее величины Q^*, проведя гораздо меньшее количество испытаний с использованием весовых методов. К весовым методам, применимость которых к вычислению Q^* доказана в настоящей работе, относятся: моделирование со смещенной плотностью вероятности, расщепление, русская рулетка и DXTRAN.

2.4 Фазовое пространсво

Будем описывать состояние частицы тремя величинами

$$x = (\mathbf{x}, \mathbf{\Omega}, E)\,,$$

где $\mathbf{x}$ — пространственные координаты частицы, $\mathbf{\Omega}$ — единичный вектор направления скорости частицы, E — «обобщенная» энергия частицы. Она совпадает с энергией частицы в случае, если моделируются частицы только одного типа. Точка x является элементом фазового пространства $\mathbb{R}^6$.

В фазовом пространстве выделим полуоткрытый прямоугольник $X = \{x : A_i \leq x_i < B, i = 1, 2, \ldots, 7\}$ (расчётная область), где x_i обозначает i-ую координату точки x из фазового пространства, $A_i < B_i$ для всех $i = 1, 2, \ldots, 7$. Будем предполагать, что $x \in X$.

В случае моделирования блужданий частиц разных типов в переменной E учитывается не только энергия, но и тип частицы, используя концепцию обобщенной частицы. Согласно этой концепции тип частицы определяется дополнительной переменной ξ, принимающей дискретные значения. Пусть ε — физическая энергия частицы, а ξ — тип этой частицы, $\xi = 1, 2, \ldots, K$, где K — количество типов частиц в задаче. Пусть множество возможных значений энергий частиц ограничено, то есть $0 < \varepsilon \leqslant E_{max}$. Тогда под величиной E понимается

$$E = \varepsilon + (\xi - 1)\, E_{max}.$$

Приведённая формула устанавливает взаимнооднозначное соответствие между физической энергией частицы ε и её типом ξ с одной стороны и используемой в дальнейшем величиной E с другой стороны (по этой причине величину E будем называть в дальнейшем просто энергией). Благодаря этому при определении математических ожиданий вычисляемых величин можно проводить усреднение только по энергии E, не проводя усреднение по типам частиц.

2.5 Вероятностное пространство

2.5.1 Способы описания ветвящихся траекторий

В классических работах [23, 57] рассмотрены разные случаи ветвящихся процессов, из которых нас будут интересовать только процессы с дискретным временем (время – номер поколения). Эти процессы можно поделить на две группы. В первой группе относятся процессы, в которых в каждый момент времени важно знать только фазовые координаты частиц из текущей популяции. Ко второй группе – процессы, в которых кроме фазовых координат частиц важно знать еще и родословную частиц (какое место занимает частица в дереве поколений).

Если не учитывать родословную частиц, то одному и тому же ветвящемуся процессу может соответствовать несколько разных физических процессов распространения частиц с размножением. При этом становится непонятно, как задать вероятность на подмножествах таких процессов, чтобы она адекватно описывала физическую реальность.

Наиболее полным способом описания родословной частиц является способ [57], в котором каждой частице ставится в соответствие помимо её фазовых координат мультииндекс. Мультииндекс задает путь от корня дерева, описывающего ветвящуюся траекторию, до соответствующей вершины.

С использованием такого способа описания траекторий в работах С. М. Ермакова [5–7] и В. В. Некруткина [18, 19] построены численные методы Монте-Карло для оценки аддитивного функционала, зависящего от решения нелинейного уравнения, описывающего перенос частиц с размножением. Плотность вероятности реализации ветвящейся траектории в перечисленных работах записывается в виде произведения плотностей вероятностей переходов от одной точки к другой. Структура произведения (количество множителей и их вид) в некотором смысле повторяет структуру ветвящейся траектории. Здесь не будем явно приводить выражение для плотности вероятности реализации ветвящейся

траектории из [7] ввиду его громоздкости и необходимости многочисленных последующих пояснений.

Способ описания ветвящихся траекторий, использованный в настоящей работе, отличается от рассмотренного выше способа только описанием дерева супертрека, задающего родственные связи между частицами. В настоящей работе дерево кодируется всего одним натуральным числом. Выражение для плотности реализации ветвящейся траектории записывается в специальном виде, похожем на выражение для плотности вероятности реализации неветвящейся траектории

$$p(S) = p(x_0)p(x_0 \to x_1)p(x_1 \to x_2)\dots p(x_{n-1} \to x_n)g(x_n),$$

где n — длина траектории, x_i — точки столкновения, $p(x_0)$ — плотность источников, $p(x_i \to x_{i+1})$ — вероятность того, что частица испытает следующее столкновение в точке x_{i+1} при условии, что предыдущее было в точке x_i, $g(x_n)$ — вероятность поглощения в точке x_n. Новая форма записи выражения позволила практически без изменений перенести доказательства несмещённости весовых оценок со случая неветвящихся траекторий на случай ветвящихся траекторий.

2.5.2 Математическое описание супертреков

2.5.2.1 Дерево супертрека

Введём математическое описание супертрека, которое затем конкретизируем. Обозначим через M (multiplicity, кратность) максимально возможное для решаемой задачи количество частиц, получающееся в результате физической реакции из одной исходной частицы. Совокупности траектории исходной частицы и траекторий вторичных частиц можно поставить в соответствие дерево. Вершины дерева соответствуют столкновениям частицы, из каждой вершины выходит не более чем M ветвей. Корень дерева соответствует испусканию первичной частицы источником. Под высотой дерева будем понимать максимальное расстояние от корня дерева до какой-нибудь его вершины.

В таком виде дерево описывает только «родственные» связи между первичной и вторичными частицами. Для полного описания траекторий поставим в соответствие каждой вершине дерева точку фазового пространства x_i с фазовыми координатами частицы непосредственно *до столкновения.* Дерево с указанием фазовых координат точек столкновения будем называть супертреком.

Способ описания дерева можно выбрать любым. Например, в библиотеке GEANT дерево представляет собой массив линейных (без ветвлений) участков ветвящейся траектории. В настоящей работе будет показано, что при условии конечности M структуру дерева супертрека можно закодировать одним натуральным числом, что является очень удобным при теоретических исследованиях.

Рассмотренный способ описания супертрека обладает избыточностью, связанной с тем, что если заданы пространственные координаты двух последовательных точек столкновения, то направление скорости частицы перед столкновением во второй точке может быть вычислено. Такая избыточность не влияет на выкладки, проводимые в настоящей работе, и может быть учтена введением δ-функции в плотности вероятностей рассеяния, как это делается в большинстве работ. Дальше будет показано, как направление скорости частицы $\mathbf{\Omega}$ можно исключить из описания супертрека.

2.5.2.2 Кодирование структуры супертреков

В этом пункте показано, что структуру дерева супертрека можно однозначно задать натуральным числом. Для этого всё множество супертреков разбивается на счётное количество подмножеств, в каждом из которых деревья супертреков имеют одинаковую структуру. Номер подмножества однозначно определяет структуру супертрека.

Итак, разобьем множество $\mathbb{S}$ всех возможных супертреков на счётное количество попарно непересекающихся подмножеств $\mathbb{S}'_n$. Подмножество $\mathbb{S}'_n$ содержит только такие супертреки, деревья которых имеют высоту n. Очевидно, что $\mathbb{S}'_i \bigcap \mathbb{S}'_j = \{\emptyset\}$, если $i \neq j$, и $\bigcup\limits_{n=1}^{\infty} \mathbb{S}'_i = \mathbb{S}$.

Количество разнообразных деревьев (без уточнения фазовых координат узлов) внутри каждого подмножества $\mathbb{S}'_n$ ограничено, так как высота дерева равна числу n, а количество потомков у каждой вершины ограничено числом M. Таким образом каждое множество $\mathbb{S}'_n$ можно разбить на конечное число попарно непересекающихся подмножеств $\mathbb{S}'_{n,k}$, считая, что супертреки, имеющие одинаковые (без уточнения фазовых координат узлов) деревья, относятся к одному и тому же подмножеству. Из вышесказанного следует, что множество всех возможных супертреков $\mathbb{S}$ можно разбить на счётное количество подмножеств $\mathbb{S}'_{n,k}$.

Так как пределы изменения индекса k не принципиальны, то для упрощения дальнейшей записи целесообразно перенумеровать все подмножества $\mathbb{S}'_{n,k}$, используя только один индекс. Новая нумерация соответствует обходу подмножеств $\mathbb{S}'_{n,k}$ сначала в порядке увеличения индекса k при фиксированном n, затем увеличивается n на единицу, и обход ведётся опять по k и т. д. Обозначим перенумерованные подмножества через $\mathbb{S}_n$, $n = 1, 2, \ldots, \infty$. Каждое такое подмножество содержит супертреки с одинаковыми деревьями, то есть натуральное число n однозначно определяет структуру ветвящейся траектории.

2.5.2.3 Нумерация вершин супертреков

Уточним, как нумеруются вершины дерева супертреков, входящих в одно и тоже множество $\mathbb{S}_n$. Вершина, соответствующая испусканию частицы источником (корень дерева) имеет номер 1 (см. рис. 15). Вершина, в которой произошло первое столкновение, имеет номер 2. Далее выделяются все вершины, отстоящие от корня на два поколения (в теории графов — все вершины второго яруса). Выделенные вершины можно последовательно нумеровать в произвольном порядке. Затем выделяются все вершины, отстоящие от корня на три поколения, на четыре и т. д. (нумерация по поколениям).

Указанный способ нумерации вершин обладает следующим свойством. Пусть две произвольно выбранные вершины имеют номера i и j. Из того, что $i > j$, следует, что вершина номер i содержится в том

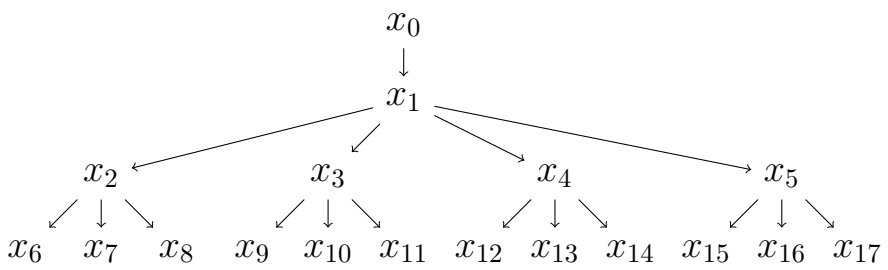

Рис. 15. Нумерация верщин супертрека.

же поколении частиц, что и вершина номер j, или в более позднем. В дальнейшем будет показано, что это свойство позволяет выразить условную плотность вероятности $p_n(x_i|x_0, x_1, \ldots, x_{i-1})$ того, что вершина с номером i будет иметь координаты x_i, при условии, что все предыдущие вершины уже разыграны и имеют координаты x_0, x_1, $\ldots$, x_{i-1}, только лишь через известные вероятности переходов от настоящего момента времени к следующему моменту времени (от одной вершины дерева супертрека к следующей).

2.5.2.4 Математическое описание супертреков

Под супертреком будем понимать пару (n, z). Натуральное число n кодирует структуру дерева супертрека. Кортеж $z = (x_0, x_1, \ldots, x_{k_n})$, $x_i \in X$ для всех $i = 0, 1, \ldots, k_n$, задаёт фазовые координаты частиц до столкновения в соответствующих узлах дерева.

2.5.3 Плотность вероятности

2.5.3.1 Физические вероятности

Плотность источников по прежнему будем обозначать через $p(x)$, а вероятность поглощения через $g(x)$. Пусть x — точка фазового пространства, в которой произошло столкновение частицы. Обозначим плотность вероятности того, что после столкновения из реакции выйдет m частиц, первая из которых в следующий раз испытает столкновение в точке x_1, вторая — в x_2, $\ldots$, m-ая — в x_m (частицы различимы, то есть важна их

нумерация), через

$$p\left(x \to x_1, x_2, \ldots, x_m\right). \tag{2.5}$$

Перестановка номеров точек $x_1, x_2, \ldots, x_m$ физически не меняет картины прошедшей в точке x реакции столкновения. Эта особенность должна быть учтена в функции $p\left(x \to x_1, x_2, \ldots, x_m\right)$, отличающейся от физической плотности вероятности, в которой не важна нумерация частиц, множителем $1/m!$.

Вероятность того, что после столкновения из реакции выйдет m частиц, определяется выражением

$$P_m\left(x\right) = \int\limits_{X^m} p\left(x \to x_1, x_2, \ldots, x_m\right) dx_1 dx_2 \ldots dx_m.$$

Будем полагать, что

$$P_0\left(x\right) = g\left(x\right).$$

Условная плотность вероятности того, что первая частица испытает следующий раз столкновение в точке x_1, вторая — в x_2, m-ая — в x_m, при условии, что из реакции вышло m частиц, определяется формулой

$$p\left(x \to x_1, x_2, \ldots, x_m \middle| m\right) = \frac{p\left(x \to x_1, x_2, \ldots, x_m\right)}{P_m\left(x\right)}.$$

Условия нормировки запишутся следующим образом

$$\sum_{m=1}^{M} P_m\left(x\right) + g(x) = 1, \tag{2.6}$$

где M — максимально возможное количество частиц после столкновения, и

$$\int p\left(x_0, x_1, \ldots, x_n | m\right) dx_0 dx_1 \ldots dx_n = 1. \tag{2.7}$$

2.5.3.2 Плотность вероятности реализации супертрека

Каждому супертреку сопоставим функцию $p(S)$, которая имеет смысл плотности вероятности (пока $p(S)$ можно воспринимать просто

как функцию супертрека, с помощью которой будет порождена вероятностная мера). Для дальнейшего использования запишем функцию плотности вероятности реализации супертрека $p\,(S)$ в специальном виде. Рассмотрим пример (см. рис. 16). Пусть частица родилась в точке x_0, испытала столкновение в точке x_1, в результате которого родились три частицы. Одна из них испытала столкновение в x_2 и поглотилась, вторая в x_3 и поглотилась. Третья — в x_4 рассеялась, затем поглотилась в x_5 . Плотность вероятности реализации такого супертрека равна

$$p(S) = p(x_0)p(x_0 \to x_1)p(x_1 \to x_2, x_3, x_4)p(x_4 \to x_5)g(x_2)g(x_3)g(x_5) \tag{2.8}$$

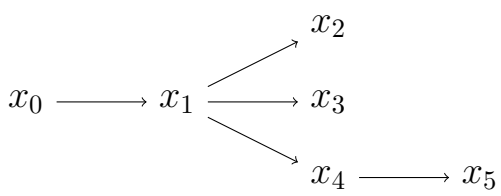

Рис. 16. К примеру на вычисление плотности вероятности реализации супертрека

Введём функции

$$\begin{aligned}
p(x_1|x_0) &= p(x_0 \to x_1)P_3(x_1),\\
p(x_2|x_0, x_1) &= \int p(x_1 \to x_2, x_3, x_4|m = 3)dx_3dx_4g(x_2),\\
p(x_3|x_0, x_1, x_2) &= \frac{\int p(x_1 \to x_2, x_3, x_4|m = 3)dx_4}{\int p(x_1 \to x_2, x_3, x_4|m = 3)dx_3dx_4}g(x_3)\\
p(x_4|x_0, x_1, x_2, x_3) &= \frac{p(x_1 \to x_2, x_3, x_4|m = 3)}{\int p(x_1 \to x_2, x_3, x_4|m = 3)dx_4}P_1(x_4),\\
p(x_5|x_0, x_1, \ldots, x_4) &= p(x_4 \to x_5|m = 1)g(x_5).
\end{aligned}$$

Поясним их физический смысл. Функция $p(x_1|x_0)$ имеет смысл дифференциальной по x_1 плотности вероятности того, что частица, родившись в точке x_0, испытает первое столкновение в точке x_1, и в результате этого

столкновения из реакции выйдет три частицы. Функция $p(x_2|x_0, x_1)$ имеет смысл дифференциальной по x_2 условной плотности вероятности того, что первая вышедшая из реакции частица, испытает столкновение в точке x_2 и поглотится в ней при условии, что в точке x_1 из реакции вышло 3 частицы. Функция $p(x_4|x_0, x_1, x_2, x_3)$ имеет смысл дифференциальной по x_4 условной плотности вероятности того, что третья частица, вышедшая из реакции, испытает столкновение в точке x_4, и в результате реакции в точке x_4 произойдёт рассеяние при условии, что в точке x_1 из реакции вышло три частицы, первая из которых испытала столкновение в точке x_2, а вторая — в x_3. Функция $p(x_5|x_0, x_1, \ldots, x_4)$ имеет смысл дифференциальной по x_5 условной плотности вероятности того, что за соударением в точке x_4 следует соударение в точке x_5 с поглощением при условии, что в точке x_4 произошло рассеяние (из реакции вышла одна частица).

Теперь плотность вероятности $p(S)$ можно записать в виде

$$p(S) = p(x_0) \prod_{i=1}^{5} p(x_i|x_0, x_1, \ldots, x_{i-1}),$$

алгебраическими преобразованиями нетрудно убедиться, что это выражение эквивалентно выражению (2.8).

Аналогично рассмотренному случаю плотность вероятности реализации произвольного супертрека $S \in \mathbb{S}_n$ можно записать в виде

$$p(S) = p(x_0) \prod_{i=1}^{k_n} p_n(x_i|x_0, x_1, \ldots, x_{i-1}), \tag{2.9}$$

где функция $p_n(x_i|x_0, x_1, \ldots, x_{i-1})$ вычисляется по следующему правилу. Обозначим через j номер вершины, являющейся родителем по отношению к вершине с номером i, $j < i$ Обозначим через m количество вышедших из столкновения в точке x_j частиц, а через m' — количество частиц, вышедших из столкновения в точке x_i. Если $m = 1$, то

$$p_n(x_i|x_0, x_1, \ldots, x_{i-1}) = p(x_j \to x_i|m = 1)P_{m'}(x_i),$$

Пусть теперь $m > 1$. Обозначим через $n_1, n_2, \ldots, n_m$ номера вершин, следующих за вершиной j. Среди них есть номер, равный i. Пусть это будет номер n_l, $1 \leqslant l \leqslant m$. В этом случае примем

$$p_n(x_i|x_0, \ldots, x_{i-1}) = \frac{\int p(x_j \to x_{n_1}, \ldots, x_{n_m}|m) dx_{n_{l+1}} dx_{n_{l+2}} \ldots dx_{n_m}}{\int p(x_j \to x_{n_1}, \ldots, x_{n_m}|m) dx_{n_l} dx_{n_{l+1}} \ldots dx_{n_m}} P_{m'}(x_i).$$

После подстановки приведённых выражений в (2.9) и алгебраических преобразований получаем произведение вероятностей переходов вида (2.5) и вероятностей поглощения $g(x)$, повторяющее структуру выбранного супертрека S. В полученной формуле узлам, в которых не произошло поглощения частицы, будет соответствовать множитель (2.5), а точкам поглощения — множитель $g(x)$.

Вид формулы (2.9) отражает особенность разыгрывания траекторий частиц — для разыгрывания очередной точки достаточно знать координаты всех предыдущих точек. Нумерация вершин в супертреке построена так, что все предыдущие точки будут иметь номер, меньший, чем номер разыгрываемой точки.

Формула (2.9) алгебраически тождественна формулам, задающим плотность вероятности реализации ветвящейся траектории в работах [7, 18].

Формула (2.9) не требует выполнения свойства марковости процесса, но это свойство отражается в явном виде множителей $p_n(x_i|x_0, x_1, \ldots, x_i)$. Эти множители определялись как раз из условия того, что для разыгрывания очередной точки супертрека достаточно знать координаты только ей непосредственно предшествующей точки.

Сам вид множителей в (2.9)

$$p(x_i|x_0, x_1, \ldots, x_{i-1})$$

позволяет при дальнейшем усреднении по супертрекам избавиться от δ-функции, учитывающей связь физических координат двух последовательных точек столкновения и направления скорости частицы при движении между ними. Для этого достаточно исключить из описания

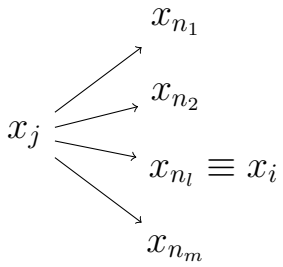

Рис. 17. К выводу формулы условной вероятности $p(x_n|x_0, x_1, \ldots, x_{n-1})$.

вершин супертреков скорость частицы $\mathbf{\Omega}$. Тогда каждой вершине ставится в соответствие только пространственная координата $\mathbf{x}$ и обобщённая энергия E. По энергии однозначно вычисляется модуль скорости $|\mathbf{\Omega}|$ частицы. Направление скорости можно вычислить как

$$\mathbf{\Omega} = \frac{\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1}{|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1|},$$

где $\mathbf{x}_1$ и $\mathbf{x}_2$ – пространственные координаты частицы в двух предыдущих столкновениях.

Так как для вычисления плотности вероятности рассеяния частицы необходимо теперь знать координаты двух предыдущих точек столкновения, то свойство марковости процесса нарушается. Математическое описание супертрека по-прежнему содержит достаточное количество информации для вычисления вероятностей всех переходов, но уже нет необходимости использовать δ-функцию.

В дальнейшем будем считать, что при использовании записи $p(x_i|x_0, x_1, \ldots, x_{i-1})$ скорость (модуль и направление) частиц при столкновениях в описание супертрека не входит.

2.5.4 Построение вероятностного пространства

2.5.4.1 Обзор литературы

В работе [57] траектория частицы задаётся кортежем $(n_1, l_1; n_2, l_2; \ldots; l_i, n_i)$, где i – мультииндекс, задающий положение вершины в дереве, l_i – длительность жизни частицы, $l_i > 0$, n_i –

количество потомков у частицы. На множестве таких траекторий построено вероятностное пространство, способ построения которого не изменится, если под l_i подразумевать элемент пространства X.

В работе [4] построен марковский ветвящийся процесс, описывающий процесс размножения и гибели частиц. Пусть $(\mathcal{D}, \mathcal{A})$ – измеримое пространство, являющееся фазовым пространством для координат частиц. Фазовым пространством марковского процесса является пространство $D = \bigcup\limits_{n=0}^{\infty} \mathcal{D}^n$, $\mathcal{D}^0 = \{\Delta\}$ (состояние поглощения). На пространстве D введена σ-алгебра $\mathcal{F}$, построенная естественным образом по σ-алгебре $\mathcal{A}$ и одноточечному множеству $\{\Delta\}$. Далее построена переходная функция

$$P\left\{x, A_1 \times A_2 \times \ldots \times A_n\right\},$$

где $x \in \mathcal{D}^n$, $A_i \subset \mathcal{D}^{k_i}$, $i = 1, 2, \ldots, n$, $n \geq 1$. Стоит отличать эту функцию от вероятности перехода $P(x, Y)$, где $x \in \mathcal{D}^n$, $Y \in \mathcal{F}$. Последняя функция не учитывает, каким образом процесс перешёл из состояния x в состояние из Y.

Переходная функция порождает некоторый марковский процесс (см. [2], стр. 108), при этом на множестве всех реализаций марковского процесса можно построить цилиндрическую σ-алгебру и вероятностную меру. Каждый марковский процесс однозначно соответствует какому-либо супертреку, а каждый супертрек – марковскому процессу. Потому можно считать, что таким образом на множестве всех супертреков введена σ-алгебра и вероятностная мера, то есть построено вероятностное пространство $(\mathbb{S}, \mathcal{H}, P)$.

2.5.4.2 Непосредственное построение вероятностного пространства

В приложении А приведён способ непосредственного построения вероятностного пространства. Сначала определяется полукольцо подмножеств множества всех супертреков $\mathbb{S}$ и на нём определяется мера.

Затем эта мера продолжается с полукольцо на кольцо, а затем на σ-алгебру.

В дальнейшем будем считать, что вероятностное пространство $(\mathbb{S}, \mathcal{H}, P)$ построено.

2.5.4.3 Вероятностное пространство $(\mathbb{S}^k, \mathcal{H}^k, P^k)$

Функционал $q(S_1, S_2, \ldots, S_l)$ задан на множестве $\mathbb{S} \times \mathbb{S} \times \ldots \times \mathbb{S}$. Обозначим произведение вероятностных пространств $(\mathbb{S}, \mathcal{H}, P)$, взятых k раз, через $(\Omega, \mathcal{A}, \mu)$, $\Omega = \mathbb{S} \times \mathbb{S} \times \ldots \times \mathbb{S}$, $\mathcal{A} = \mathcal{H} \times \mathcal{H} \times \ldots \times \mathcal{H}$, $\mu = P \times P \times \ldots \times P$. Элементом Ω является кортеж супертреков $(S_1, S_2, \ldots, S_k)$.

Математическое ожидание функционала $q(S_1, S_2, \ldots, S_k)$ выражается интегралом

$$Mq = \int\limits_{\mathbb{S}\times\ldots\times\mathbb{S}} q(S_1, S_2, \ldots, S_k)\mu(dS_1 \times \ldots \times dS_k).$$

По теореме Фубини Mq можно вычислять как повторный интеграл

$$Mq = \int\limits_{\mathbb{S}} \int\limits_{\mathbb{S}} \ldots \int\limits_{\mathbb{S}} q(S_1, S_2, \ldots, S_k)P(dS_1)P(dS_2)\ldots P(dS_k).$$

и порядок интегрирования можно менять (в приложении Б это свойство доказано, опираясь на свойства интеграла Римана и функциональных рядов). Следующий пункт посвящён вычислению интеграла

$$\int\limits_{\mathbb{S}} q(S_1, S_2, \ldots, S_i)P(dS_i) = \int\limits_{\mathbb{S}} q'(S)P(dS),$$

где $i = 1, 2, \ldots, k$.

2.5.5 Усреднение по супертрекам

Для дальнейшего использования определим операцию усреднения по супертреку. Пусть $p_n(x_0, x_1, \ldots, x_{k_n})$ — плотность вероятности ре-

ализации супертрека S такого, что $S \in \mathbb{S}_n$ и координаты частиц, относящихся к этому супертреку, *до столкновений* в соответствующих точках равны x_0, x_1, $\ldots$, x_{k_n}, k_n – количество вершин у супертреков из множества $\mathbb{S}_n$. Пусть дана некоторая случайная величина $q(S)$. В функции $q(S)$ перейдем к покоординатной записи, приняв

$$q(S) = q_n(x_0, x_1, \ldots, x_{k_n}).$$

При использовании покоординатной записи важно заранее знать, к какому множеству $\mathbb{S}_n$ относится супертрек S.

Математическое ожидание случайной величины $Q = q(S)$ равно

$$MQ = \int\limits_{\mathbb{S}} q(S)P(dS) =$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} \int\limits_{\mathbb{S}_n} q_n\left(x_0, x_1, \ldots, x_{k_n}\right) p_n\left(x_0, x_1, \ldots, x_{k_n}\right) dx_0 dx_1 \ldots dx_{k_n}, \tag{2.10}$$

где суммирование выполняется по всем множествам $\mathbb{S}_n$, а интегрирование ведётся для осреднения по всем возможным супертрекам $S \in \mathbb{S}_n$ $((x_0, x_1, \ldots, x_{k_n}) \in X^{k_n+1})$. Введем обозначение

$$\int q\left(S\right) dS \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{n=1}^{\infty} \int\limits_{\mathbb{S}_n} q_n\left(x_0, x_1, \ldots, x_{k_n}\right) p_n\left(x_0, x_1, \ldots, x_{k_n}\right) dx_0 dx_1 \ldots dx_{k_n}. \tag{2.11}$$

Выражение (2.10) можно кратко записать в виде

$$MQ = \int q\left(S\right) dS.$$

При $q \equiv 1$ получаем условие нормировки

$$\int dS = 1. \tag{2.12}$$

Если моделирование траекторий ведётся со смещенной плотностью вероятности $p'_n(x_0, x_1, \ldots, x_{k_n})$, то математическое ожидание функционала $q(S)$ равно

$$MQ = \int q(S) d'S \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{n=1}^{\infty} \int\limits_{\mathbb{S}_n} q_n\left(x_0, x_1, \ldots, x_{k_n}\right) p'_n\left(x_0, x_1, \ldots, x_{k_n}\right) dx_0 dx_1 \ldots dx_{k_n} \quad (2.13)$$

В приложении Б доказаны такие свойства операции усреднения, как существование конечной суммы ряда, линейность по $q(S_1, S_2, \ldots, S_k)$ и возможность смены порядка интегрирования в повторном интеграле, то есть равенство

$$\int\int q(S_1, S_2) dS_1 dS_2 = \int\int q(S_1, S_2) dS_2 dS_1$$

2.6 Аналоговое моделирование

В случае неаддитивного детектора вычисляется величина

$$Q = q\left(S_1, S_2, \ldots, S_k\right),$$

где S_1, S_2, $\ldots$, S_k — разыгранные методом Монте-Карло супертреки. Усредняя по пространству $\left(\mathbb{S}^k, \mathcal{H}^k, P^k\right)$, получаем

$$MQ = \int\int\int q\left(S_1, S_2, \ldots, S_k\right) dS_1 dS_2 \ldots dS_k, \quad (2.14)$$

где $p(S_1, S_2, \ldots, S_k)$ — плотность вероятности реализации совокупности супертреков S_1, S_2, $\ldots$, S_k.

2.7 Обоснование предлагаемого алгоритма

2.7.1 Схема доказательства

Целью настоящего раздела является доказательство равенства (2.4) при использовании комбинации весовых методов, рассмотренных ниже. Для каждого такого метода доказательство проводится отдельно, используя введенные ранее обозначения. В последней части этого раздела приводится доказательство для случая, когда при моделировании траекторий частиц используется комбинация всех рассматриваемых весовых методов.

Обоснование метода Монте-Карло приведено в приложении Г. Классической схемой исследования любого весового метода является обоснование несмещённости и оценка дисперсии.

Доказательство несмещённости для каждого весового метода в отдельности приводится в случае, когда он применяется только при разыгрывании одного супертрека. В силу доказанного в приложении Б свойства о перестановке порядка интегрирования по супертрекам можно считать, что номер этого супертрека равен 1.

При проведении доказательств несмещённости весовых оценок нельзя ограничиться рассмотрением абстрактного вероятностного пространства $(\Omega, \mathcal{A}, \mu)$, так как при этом из рассмотрения выпадает конкретный алгоритм вычисления статистических весов. Именно этот алгоритм и представляет собой ценность концепции супертреков.

При получении оценок дисперсии, наоборот, использовались самые общие предположения о вероятностном пространстве. Этих предположений достаточно, чтобы показать уменьшение дисперсии при использовании весовой оценки. В методе русской рулетки дисперсия, наоборот, увеличивается. Но в конечном итоге, экономия процессорного времени возникает из-за того, что проигравшие в русскую рулетку траектории обрываются.

2.7.2 Разыгрывание со смещённой плотностью вероятности

2.7.2.1 Общий случай (метод существенной выборки)

Несмещенность оценки. Пусть на алгебре событий $\mathcal{A}$ задана ещё одна вероятностная мера μ', причем если для какого-то $D \in \mathcal{A}$ выполняется $\mu'(D) = 0$, то и $\mu(D) = 0$. Введём весовую оценку математического ожидания Mq

$$Q^* = q(\gamma)w(\gamma),$$

где элементарный исход γ разыгрывается с вероятностью μ', т.е $P\{\gamma \in A\} = \mu'(A)$, а $w(\gamma) = \frac{d\mu}{d\mu'}$ – производная Радона-Никодима, имеющая смысл статистического веса. Тогда

$$MQ^* = MQ.$$

Это легко доказать

$$MQ^* = \int\limits_{\Omega} q(\gamma)w(\gamma)\mu'(d\gamma) = \int\limits_{\Omega} q(\gamma)\frac{d\mu}{d\mu'}(\gamma)\,\mu'(d\gamma) =$$
$$= \int\limits_{\Omega} q(\gamma)\mu(d\gamma) = MQ.$$

Так как μ' отличается от μ, то рассматриваемый весовой метод также называют методом разыгрывания со смещённой плотностью вероятности. Алгоритму вычисления производной Радона-Никодима посвящён п. 2.7.2.2.

Скорость сходимости. Пусть во множестве Ω существует подмножество $A \in \mathcal{A}$ такое, что $q(\gamma) = 0$ для всех γ из $\Omega \setminus A$. Оценим разность дисперсий $DQ^* - DQ$

$$DQ^* - DQ = MQ^{*2} - (MQ^*)^2 - MQ^2 + (MQ)^2 = MQ^{*2} - MQ^2.$$

Так как $q \geq 0$ только внутри области A, то

$$MQ^{*2} = \int\limits_A q^2(\gamma) w^2(\gamma) \mu'(d\gamma) = \int\limits_A q^2(\gamma) w(\gamma) \mu(d\gamma)$$
$$MQ^2 = \int\limits_A q^2(\gamma) \mu(d\gamma).$$

Разность дисперсий запишется в виде

$$DQ^* - DQ = \int\limits_A q^2(\gamma) \left(w(\gamma) - 1\right) \mu(d\gamma).$$

Чтобы $DQ^* < DQ$, достаточно, чтобы для любых $\gamma \in A$ выполнялось $w(\gamma) < 1$. Практический вывод заключается в том, что нужно выбрать такую меру μ', чтобы производная Радона-Никодима $w(\gamma)$ была как можно меньше внутри области A.

2.7.2.2 Концепция супертреков

Пусть функция $p(S)$ порождает вероятностную меру P, а функция $p'(S)$ — меру P'. Пусть метод существенной выборки применяется при разыгрывании 1-ого супертрека. Величина Q^*, вычисляемая рассматриваемым весовым методом, равна

$$Q^* = q(S_1, S_2, \ldots, S_k) w(S_1),$$

где $w(S_1)$ - вес супертрека S_1.

Задача заключается в представлении алгоритма вычисления статистического веса $w(S_1)$ (производной Радона-Никодима), при котором $MQ^* = MQ$, то есть

$$\int q(S_1, S_2, \ldots, S_k) w(S_1) d'S_1 dS_2 \ldots dS_k$$
$$= \int q(S_1, S_2, \ldots, S_k) dS_1 dS_2 \ldots dS_k.$$

Для сокращения записи интегрирование по $S_2, S_3, \ldots, S_k$ будем опускать, а оставшуюся переменную S_1 переобозначим за S.

Математическое ожидание величны Q^* можно записать в виде (с учётом (2.10) и (2.11))

$$MQ^* = \int q(S)w(S)d'S = \sum_{n=1}^{\infty} \int\limits_{\mathbb{S}_n} q(S)w(S)d'S. \tag{2.15}$$

Зафиксируем номер n и рассмотрим множество супертреков $\mathbb{S}_n$. Пусть разыгрывание траектории частицы при переходе от i-ого узла к j-ому ведётся с использованием смещенной плотности вероятности рассеяния $p'(x_i \to x_j)$. Для компенсации этого вес супертрека умножается на величину w_j, которая определяется после разыгрывания точки x_j и равна

$$w_j = \frac{p(x_i \to x_j)}{p'(x_i \to x_j)}.$$

В общем случае

$$w_j = \frac{p(x_j|x_0, x_1, \ldots, x_{j-1})}{p'(x_j|x_0, x_1, \ldots, x_{j-1})}. \tag{2.16}$$

Вес всего супертрека определяется формулой

$$w(S) = \prod_{j=1}^{k_n} w_j,$$

в которой произведение вычисляется для всех узлов супертрека (k_n – количество узлов супертрека). Интеграл по множеству $\mathbb{S}_n$ в (2.15) равен

$$\int\limits_{\mathbb{S}_n} q(S)w(S)d'S =$$
$$= \int\limits_{\mathbb{S}_n} q(S)p(x_0) \prod_{j=1}^{k_n} \frac{p(x_j|x_0, \ldots, x_{j-1})}{p'(x_j|x_0, \ldots, x_{j-1})} \prod_{j=1}^{k_n} p'(x_j|x_0, \ldots, x_{j-1}) dx_0 \ldots dx_{k_n}, \tag{2.17}$$

в правой части для краткости $q(S)$ обозначает $q_n(x_0, x_1, \ldots, x_{k_n})$. После сокращения величин $p'(x_j|x_1, \ldots, x_{j-1})$ это выражение будет совпадать с выражением

$$\int\limits_{\mathbb{S}_n} q(S)dS = \int\limits_{\mathbb{S}_n} q_n(x_1, \ldots, x_s)p(x_0)\prod_{j=1}^{k_n} p(x_j|x_0, \ldots, x_{j-1})dx_0 \ldots dx_{k_n}. \tag{2.18}$$

Итак, (2.15) с учётом (2.17) и (2.18) можно записать в виде

$$MQ^* = \int q(S)w(S)d'S = \sum_{n=1}^{\infty}\int\limits_{\mathbb{S}_n} q(S)w(S)d'S =$$
$$= \sum_{n=1}^{\infty}\int\limits_{\mathbb{S}_n} q(S)dS = \int q(S)dS = MQ.$$

Последнее равенство означает, что при использовании смещенной плотности вероятности $p'(x_i|x_0, x_2, \ldots, x_{i-1})$ и весовых множителей (2.16) при разыгрывании супертрека, оценка MQ^* получается несмещённой. Правило (2.16) вычисления весовых множителей совпадает с правилом при оценке аддитивных функционалов.

2.7.3 Расщепление

2.7.3.1 Общий случай

Несмещённость оценки. В результате применения метода расщепления при проведении каждого статистического испытания вместо одного исхода γ получается несколько исходов γ_j, $j = 1, 2, \ldots, m$. При этом величины $q(\gamma_j)$ не являются независимыми.

Весовая оценка математического ожидания Mq, предлагаемая в методе расщепления, имеет вид

$$Q^* = \sum_{j=1}^{m} q(\gamma_j)\omega_j(\gamma_j),$$

где статистические веса неотрицательны и удовлетворяют условию

$$\sum_{j=1}^{m} \omega_j(\gamma_j) = 1.$$

Докажем несмещённость оценки, то есть равенство $MQ^* = Mq$.

Математическое ожидание весовой оценки равно

$$MQ^* = \sum_{j=1}^{m} \int\limits_{\Omega} q(\gamma_j)\omega_j(\gamma_j)\mu(d\gamma_j)$$

Опуская в переменной интегрирования индекс j и внося знак суммы под интеграл, получаем

$$MQ^* = \int\limits_{\Omega} q(\gamma) \sum_{j=1}^{m} \omega_j(\gamma)\mu(d\gamma) = \int\limits_{\Omega} q(\gamma)\mu(d\gamma),$$

что доказывает равенство $MQ^* = Mq$.

Скорость сходимости. Для простотоы предположим, что $w_j(S_j) = w_j = 1/m$ для всех $j = 1, 2, \ldots, m$. Для зависимых случайных величин ξ_1, ξ_2, $\ldots$, ξ_m

$$D(\xi_1 + \xi_2 + \ldots + \xi_m) = \sum_{j=1}^{m} D(\xi_j) + 2 \sum_{1 \le i < l \le m} cov(\xi_i, \xi_l).$$

Подставляя сюда $\xi_i = \frac{1}{m} q(\gamma_i)$ с учётом $Dq(\gamma_i) = DQ$, получаем

$$D(Q^*) = mD\left(\frac{Q}{m}\right) + 2 \sum_{1 \le i < l \le m} cov\left(\frac{q(\gamma_i)}{m}, \frac{q(\gamma_l)}{m}\right).$$

Согласно неравенству Коши-Буняковского $cov^2(\xi_i, \xi_j) \le D\xi_i D\xi_j$, следовательно

$$D(Q^*) \le \frac{1}{m} DQ + \frac{m(m-1)}{m^2} DQ = DQ.$$

Минимальное значение $D(Q^*)$ достигает, когда $cov(q(\gamma_i), q(\gamma_l)) = 0$ при $i \neq l$, то есть когда все траектории γ_j разыгрываются независимо. Максимальное значение, равное дисперсии аналоговой оценки DQ, достигается, когда ковариация равна 1.

2.7.3.2 Концепция супертреков

Пусть в результате применения метода расщепления при моделировании супертрека S_1 он расщепился на m взаимоисключающих реализаций $S_{1,j}$, $j = 1, 2.., m$. В это множество входят не только супертреки, полученные расщеплением исходного супертрека, но и супертреки, полученные повторным расщеплением уже расщеплённых супертреков. Согласно [37] веса супертреков при использовании метода расщепления при очередном соударении моделируемой частицы вычисляются по правилу, совпадающему с правилом вычисления весов расщеплённых частиц.

Обозначим вес каждого из супертреков $S_{1,j}$ через w_j, причём будем предполагать, что $w_j = w_j(S_{1,j})$. Число m известно заранее и одно и то же для всех статистических испытаний. Если в результате разыгрывания очередного супертрека он расщепился меньше, чем на m новых супертреков, или не расщепился совсем, будем полагать, что веса супертреков w_j, начиная с некоторого номера, равны нулю.

Предположим, что при расщеплении всегда выполняется равенство баланса весов, то есть для любых супертреков S_{11}, S_{12}, ..., S_{1m} выполняется

$$\sum_{j=1}^{m} w_j(S_{1j}) = 1. \tag{2.19}$$

Другими словами, суммарный вес супертреков, полученных расщеплением, всегда должен быть равен весу нерасщеплённого супертрека. Частным случаем этого равенства является условие

$$\sum_{j=1}^{m} w_j(S) = 1, \tag{2.20}$$

справедливое при любом выборе супертрека S. Оно получается из (2.19) выбором $S_{11} = S_{12} = \ldots = S_{1m} = S$.

Величина Q^* при использовании метода расщепления вычисляется по формуле

$$Q^* = \sum_{j=1}^{m} q(S_{1,j}, S_2, \ldots, S_k) w_j(S_{1,j}).$$

Математическое ожидание величины Q^* равно

$$MQ^* = \sum_{j=1}^{m} \int q(S_{1,j}, S_2, \ldots, S_k) w_j(S_{1,j}) dS_{1,j} dS_2 \ldots dS_k.$$

Переобозначив переменные $S_{1,j}$ через S_1, получаем

$$MQ^* = \int q(S_1, S_2, \ldots, S_k) \sum_{j=1}^{m} w_j(S_1) dS_1 dS_2 \ldots dS_k.$$

С учётом (2.20) получаем, что $MQ^* = MQ$.

Условие (2.19) налагает некоторые незначительные в большинстве случаев ограничения на алгоритм, расщепляющий супертрек. А именно, решение о том, на сколько реализаций расщеплять супертрек, и чему равен весовой множитель для каждой реализации, принимается только на основании доступных данных о супертреке. В частности, решение о расщеплении супертрека может быть принято в зависимости от того, в какой области пространства произошло столкновение.

2.7.4 Русская рулетка

2.7.4.1 Общий случай

Несмещённость оценки. Рассмотрим вероятносное пространство $(\Xi, \mathcal{B}(\Xi), L)$. Множество $\Xi = [0, 1]$, L – вероятностная мера. Случайная величина $\xi : \Xi \to \mathbb{R}$ равномерно распределена на $[0, 1]$. Введём случайную величину $v : \Omega \to [0, 1]$, имеющую смысл вероятности выживания в русской рулетке.

Рассмотрим вероятностное пространство $(\Omega \times \Xi, \mathcal{A} \otimes \mathcal{B}(\Xi), \mu \otimes L)$. Предлагаемая весовая оценка имеет вид

$$Q^* = q(\gamma)\mathbb{I}(\xi < v(\gamma))\frac{1}{v(\gamma)}.$$

Математическое ожидание MQ^* равно

$$MQ^* = \int\limits_{\Omega\times\Xi} q(\gamma)\mathbb{I}(\xi < v(\gamma))\frac{1}{v(\gamma)}\mu \otimes L(d\gamma \times d\xi).$$

Используя теорему Фубини и

$$\int\limits_{\Xi} \mathbb{I}(\xi < v(\gamma))\frac{1}{v(\gamma)}L(d\xi) = 1$$

получаем, что $MQ^* = MQ$.

Скорость сходимости. Так как $0 < v(\gamma) \leq 1$, то

$$\int\limits_{\Xi} \mathbb{I}(\xi < v(\gamma))\frac{1}{v^2(\gamma)}L(d\xi) > \int\limits_{\Xi} \mathbb{I}(\xi < v(\gamma))\frac{1}{v(\gamma)}L(d\xi) = 1.$$

Получаем, что

$$MQ^{*2} = \int\limits_{\Omega\times\Xi} q^2(\gamma)\mathbb{I}(\xi < v(\gamma))\frac{1}{v^2(\gamma)}\mu \otimes L(d\gamma \times d\xi) >$$
$$= \int\limits_{\Omega} q^2(\gamma)\mu(d\gamma) = MQ^2.$$

Следовательно, $DQ^* > DQ$, то есть при использовании метода русской рулетки дисперсия возрастает. Экономия машинного времени получается в результате обрыва разыгрываемых траекторий (если вес траектории становится равным нулю, то её можно не разыгрывать дальше, в том числе, и при использовании формулы (2.2)), и фиксированный уровень

статистической погрешности может быть достигнут быстрее, чем без использования метода русской рулетки.

2.7.4.2 Концепция супертреков

При использовании концепции супертрека метод русской рулетки применяется ко всем супертреку. Пусть $v(S_1)$ – вероятность выживания. Если супертрек не перескает область, в которой применяется метод русской рулетки, то полагается, что $v(S_1) = 1$. При выживании вес супертрека умножается на величину $w^{rr}(S_1) = 1/v(S_1)$, в противном случае вес становится равным нулю и супертрек прерывается, не внеся вклад в значение величины Q^*. Докажем, что при таких правилах $MQ^* = MQ$. Представим величину Q^* в виде

$$Q^* = q(S_1, S_2, \ldots, S_k) w^{rr}(S_1) \mathbb{I}(L),$$

где случайное событие $L = \{\xi < v(S_1)\}$ заключается в выживании супертрека, а случайная величина $\mathbb{I}(L)$ равна 1, если супертрек S_1 выжил в русской рулетке, и равна 0 в противном случае. Математическое ожидание величины Q^* равно

$$MQ^* = \int q(S_1, S_2, \ldots, S_k) \frac{1}{v(S_1)} M(\mathbb{I}(L)|S_1) dS_1 \tag{2.21}$$

Условное математическое ожидание величины $\mathbb{I}(L)$ равно $v(S_1)$. После сокращения на $v(S_1)$ получаем выражение, совпадающее с MQ. Как и в случае с расщеплением запись $v(S_1)$ указывает, что алгоритм, решающий, когда происходит игра в русскую рулетку, и когда частица выживает в русской рулетке, может опираться только на данные о супертреке S_1.

2.7.5 DXTRAN

2.7.5.1 Суть метода DXTRAN

Метод DXTRAN является одним из самых сложных весовых методов, реализованных в программах для вычисления аддитивных функционалов. Алгоритм метода DXTRAN хорошо описан в [66]. Похожий на него метод, названный *Forced Detection*, предложен в [51].

Метод DXTRAN предполагает генерацию и последующее моделирование псевдочастиц в направлении на выделенную сферу, окружающую область детекторов и называемую DXTRAN-сферой. При каждом столкновении частиц за пределами DXTRAN-сферы рождается псевдочастица, которая переносится без столкновений в одну из точек на поверхности сферы. Рассеяние же самой частицы разыгрывается обычным способом. Если траектория частицы до следующей точки столкновения не пересекает сферу, то частица переносится в эту точку с неизмененным весом, если же пересекает, то траектория частицы обрывается (её вес становится равным нулю). Псевдочастицы, достигнув поверхности сферы, продолжают дальше двигаться как обычные частицы, для которых метод DXTRAN больше не применяется. Но так как все они начинают движение внутрь сферы, то с большой вероятностью они попадают в детектор. Энергия DXTRAN-частицы определяется после моделирования её направления. Псевдочастицу далее будем называть DXTRAN-частицей, чтобы отличить её от обычной частицы.

В документации [66] к программе MCNP, а также в работах [37, 38] метод DXTRAN обосновывается подведением баланса весов. В работе автора [28] дано математическое обоснование метода DXTRAN для оценки значений аддитивных функционалов на основе соотношений взаимности для различающихся систем [20, 31, 32] . Нижеприведенное доказательство несмещённости оценки повторяет часть выкладок, проведенных в [28].

Кратко сформулировать суть метода DXTRAN можно следующим образом. Обозначим через Ω - направление рассеяния частицы, $p(\Omega)$ - физическая плотность вероятности того, что частица будет рассеяна в

направлении Ω, $p'(\Omega)$ - вспомогательная плотность вероятности, с которой ведётся разыгрывание направления рассеяния DXTRAN-частицы. Плотность вероятности $p'(\Omega)$ равна 0, если направление Ω не указывает на DXTRAN-сферу, и

$$\int\limits_{\Omega_S} p'(\Omega)\, d\Omega = 1,$$

где Ω_S — множество направлений, указывающих на DXTRAN-сферу. Обозначим оптический путь от точки столкновения до DXTRAN-сферы по направлению Ω через $s(\Omega)$. Вес DXTRAN-частицы после определения направления Ω умножается на множитель

$$w_2 = \frac{p(\Omega) \cdot e^{-s(\Omega)}}{p'(\Omega)}. \tag{2.22}$$

Вес обычной частицы равен произведению веса исходной частицы и множителя w_1, который равен 0, если траектория частицы до следующего столкновения пересекает DXTRAN-сферу, и равен 1, если не пересекает.

В случае использования концепции супертреков, вместо одного исходного супертрека S_1 создается два новых супертрека: S_{11} и S_{12}. В первый из них входит частица, рассеяние которой произошло обычным способом. Его вес равен весу исходного супертрека, умноженному на w_1. Во второй — DXTRAN-частица, его вес равен весу исходного супертрека, умноженному на w_2. Без ограничения общности будем считать, что вес исходного супертрека равен 1. Согласно предлагаемому методу вместо величины Q вычисляется величина

$$Q^* = q(S_{11}, S_2, \ldots, S_k) \cdot w_1 + q(S_{12}, S_2, \ldots, S_k) \cdot w_2 \tag{2.23}$$

Для краткости зависимость функционала $q(S_1, S_2, \ldots, S_k)$ от супертреков S_2, S_3, $\ldots$, S_k будем опускать, записывая $q = q(S_1)$. Если метод DXTRAN применяется многократно, то вычисляется величина

$$Q^* = q(S_{11}, S_2, \ldots, S_k) \cdot w_1 + \sum_{j=2}^{m} q(S_{1j}, S_2, \ldots, S_k) \cdot w_j, \tag{2.24}$$

где S_{11} – обычный супертрек, S_{1j} – DXTRAN-супертреки, $j > 1$, $m = m(S_{11})$ – количество получившихся DXTRAN-супертреков. Согласно концепции супертреков, каждый вес w_j при $j > 1$ получается умножением веса, который был у супертрека S_{11} до применения DXTRAN в соответствующей вершине, на множитель вида (2.22). Вес w_j равен 0, если супертрек S_{11} не выжил к моменту j-ого применения метода DXTRAN (его вес стал равным нулю), иначе он определяется формулой (2.22). Вес w_1 равен 1, если обычный супертрек S_{11} выжил при всех применениях метода DXTRAN, иначе он равен 0.

Связь метода DXTRAN с методом расслоённой выборки заключается в следующем. Всё множество супертреков $\mathbb{S}$ распадается на счётное количество подмножеств, которые попарно не пересекаются. В первое подмножество входят супертреки, не пересекающие DXTRAN-сферу. В n-ое – впервые пересекающие её после $n-1$-ого применения метода DXTRAN, $n > 1$. То образом, по признаку, когда произошло первое пересечение DXTRAN-сферы, строится разбиение множества $\mathbb{S}$. В методе DXTRAN при разыгрывании одного статистического исхода параллельно получается несколько супертреков из разных подмножеств $\mathbb{S}$. Как показано ниже, весовая оценка Q^* есть ни что иное, как взвешенная сумма средних значений случайной величины q по каждому из подмножеств.

2.7.5.2 Обоснование несмещённости оценки Q^* при использовании метода DXTRAN в одной вершине

Пусть метод DXTRAN применяется однократно. Введём два индикатора $\mathbb{I}_1(S)$ и $\mathbb{I}_2(S)$. Индикатор $\mathbb{I}_1(S)$ равен 1, если супертрек S является обычным супертреком, и равен 0, если супертрек S является DXTRAN-супертреком. Индикатор $\mathbb{I}_2(S)$ равен 1, если супертрек S является DXTRAN-супертреком, иначе он равен 0. Такие индикаторы построить можно, так как у супертрека S всегда можно указать пару смежных вершин, при переходе между которыми применялся метод DXTRAN, и указать, пересекал ли супертрек DXTRAN-сферу при пере-

ходе между этими вершинами. Если супертрек пересекал зону, в которой при столкновении частиц применяется метод DXTRAN, несколько раз, то учитывается только первое столкновение внутри зоны, так как в настоящем пункте рассматривается однократное применение DXTRAN.

Физическая точка, в которой происходит столкновение частицы с применением метода DXTRAN, не зависит от того, в какое подмножество $\mathbb{S}_n$ попадает супертрек, но вершина, соответствующая точке столкновения, в разных подмножествах $\mathbb{S}_n$ будет иметь свой номер. Пусть рассматриваемый супертрек S принадлежит $\mathbb{S}_n$. Обозначим номер вершины, в которой применяется метод DXTRAN, через D_n, а номер вершины, в которую попадает DXTRAN-частица, обозначим через E_n, $E_n > D_n$.

Вероятность того, что при очередном статистическом испытании получится DXTRAN-супертрек S_{12}, равна

$$d_2 S_{12} = \mathbb{I}_2(S_{12}) p'_n(x_{E_n}|x_0, \ldots, x_{E_n-1}) p(x_0) \prod_{\substack{i=1,\\ i\neq E_n}}^{k_n} p(x_i|x_0, \ldots, x_{i-1}) dx_0 \ldots dx_{k_n}, \tag{2.25}$$

где $p'_n(x_{E_n}|x_0, \ldots, x_{E_n-1})$ — смещённая плотность вероятности, с которой разыгрывается рассеяние DXTRAN-частицы. Эта формула отличается от введенной раньше формулы (2.9) только множителем, соответствующим переходу между вершинами, выполняемому с использованием метода DXTRAN. Обозначение $d_2 S_{12}$ указывает на то, что супертрек S_{12} должен получиться при первом применении метода DXTRAN (в формуле (2.24) соответствует слагаемому при $j = 2$).

С учётом (2.25) и (2.9) среднее значение (2.23) запишется в компактом виде

$$MQ^* = \int q(S_{11}) \mathbb{I}_1(S_{11}) dS_{11} + \int q(S_{12}) \mathbb{I}_2(S_{12}) \omega_2 d_2 S_{12}. \tag{2.26}$$

Множители $\mathbb{I}_1(S_{11})$ и $\mathbb{I}_2(S_{12})$ указывают, что интегрирование в первом слагаемом ведётся по множеству всех обычных супертреков, а во втором слагаемом – по множеству всех DXTRAN-супертреков.

Эквивалентная формула в развернутом виде имеет вид

$$MQ^* = \sum_{n=1}^{\infty} \int q(S_{11})\mathbb{I}_1(S_{11})p(x_0) \prod_{i=1}^{k_n} p(x_i|x_0,\ldots,x_{i-1})dx_0dx_1\ldots dx_{k_n} + \sum_{n=1}^{\infty} \int q(S_{12})\mathbb{I}_2(S_{12})\omega_2 p'_n(x_{E_n}|x_0,x_1,\ldots,x_{E_n-1})p(x_0)\cdot \cdot \prod_{\substack{i=1,\\ i\neq E_n}}^{k_n} p(x_i|x_0,x_1,\ldots,x_{i-1})dx_0dx_1\ldots dx_{k_n}, \quad (2.27)$$

где супертреки S_{11} и S_{12} задаются их вершинами x_0, x_1, $\ldots$, x_{k_n} и условиями $S_{11} \in \mathbb{S}_n$, $S_{12} \in \mathbb{S}_n$. Первое слагаемое соответствует усреднению по всем возможным траекториям обычной частицы, второе – по всем возможным траекториям DXTRAN-частицы.

Преобразуем подынтегральное выражение второго слагаемого в (2.27). Обозначим точку на сфере, в направлении которой рассеивается DXTRAN-частица, через A_n (см. рис. 18). Плотность вероятности $p'(x_{D_n} \to x_{E_n})$ того, что DXTRAN-частица рассеется из точки x_{D_n} в точку A_n на сфере, а затем без столкновений достигнет точки x_{E_n} равна

$$p'_n(x_{E_n}|x_0,x_1,\ldots,x_{E_n-1}) = p'(\Omega)\cdot e^{-s(x_{A_n}\to x_{E_n})}, \quad (2.28)$$

где $s\,(x \to y)$ – длина оптического пути из точки x в точку y. Умножая на w_2 с учётом (2.22) и равенства

$$e^{-s(x_{D_n}\to x_{E_n})} = e^{-s(x_{D_n}\to x_{A_n})}e^{-s(x_{A_n}\to x_{E_n})}$$

получаем

$$w_2 p'_n(x_{E_n}|x_0,x_1,\ldots,x_{E_n-1}) = p(\Omega)\cdot e^{-s(x_{D_n}\to x_{E_n})}. \quad (2.29)$$

Это выражение эквивалентно выражению для несмещённой (физической) плотности вероятности $p\left(x_{E_n}|x_0, x_1, \ldots, x_{D_n}, \ldots, x_{E_n-1}\right)$. То есть доказано, что весовой множитель (2.22) для DXTRAN-частицы вычисляется по формуле

$$\omega_2 = \frac{p'_n(x_{E_n}|x_0, x_1, \ldots, x_{E_n-1})}{p_n(x_{E_n}|x_0, x_1, \ldots, x_{E_n-1})}.$$

Поэтому (2.27) можно записать в виде

$$MQ^* = \sum_{n=1}^{\infty} \int q(S_{11})\mathbb{I}_1(S_{11})p(x_0) \prod_{i=1} p(x_i|x_0, \ldots, x_{i-1}) dx_0 \ldots dx_{k_n} + \\ + \sum_{n=1}^{\infty} \int q(S_{12})\mathbb{I}_2(S_{12})p(x_0) \prod_{i=1} p(x_i|x_0, \ldots, x_{i-1}) dx_0 \ldots dx_{k_n}.$$

Оба ряда сходятся абсолютно. Объединяя их в один, и учитывая, что для любого супертрека S выполняется $\mathbb{I}_1(S) + \mathbb{I}_2(S) = 1$ (для каждого супертрека можно сказать, является ли он DXTRAN-супертреком или обычным супертреком), получаем

$$MQ^* = \sum_{n=1}^{\infty} \int q(S_1)p(x_0) \prod_{i=1}^{k_n} p(x_i|x_0, x_1, \ldots, x_{i-1}) dx_1 dx_2 \ldots dx_{k_n} = \\ = \int q(S_1) dS_1. \quad (2.30)$$

Отсюда следует, что $MQ^* = MQ$.

2.7.5.3 Обоснование несмещённости оценки Q^* при использовании метода DXTRAN в нескольких вершинах

Рассмотрим теперь случай, когда при моделировании супертрека S_1 алгоритм, отвечающий за создание DXTRAN-частиц, создаёт эти частицы не в одной вершине супертрека S_1, а в некотором множестве вершин супертрека S_1. Как и ранее будем считать, что номера этих

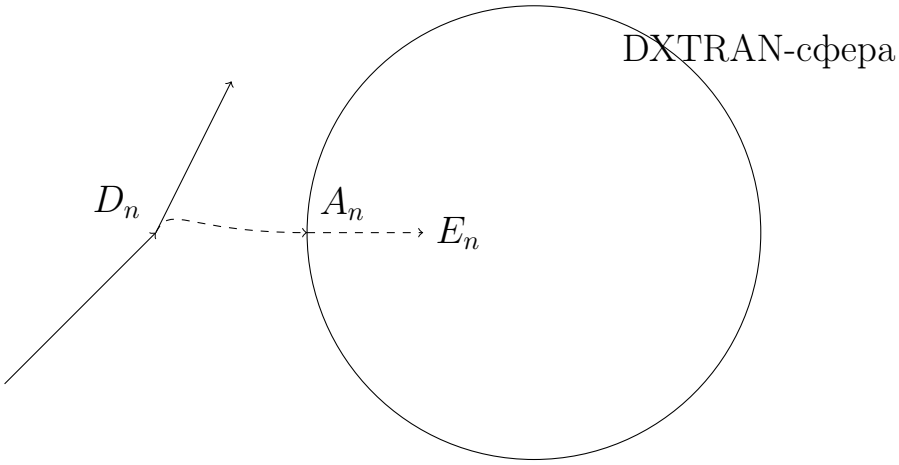

Рис. 18. Нумерация вершин при применении метода DXTRAN

вершин определяются только на основании доступной информации о супертреке S_1. Пусть в результате применения этого метода образовалось $m-1$ супертреков S_{12}, S_{13}, …, S_{1m}, порождённых методом DXTRAN в вершинах с номерами V_2, V_3, …, V_m супертрека S_{11}, где $m = m(S_1)$. Супертрек S_{11} по-прежнему содержит только обычные частицы.

На рис. 19 приведён пример многократного применения метода DXTRAN. Супертрек S_{11}, содержащий в себе только обычные частицы, состоит из ветвей V_1—V_2—V_3—…—V_4—V_5 и V_3—V_{3a} − − − …. Супертрек S_{12}, полученный при применении метода DXTRAN в вершине V_2, состоит из ветвей V_1—V_2—A_{n_2}—…. В вершине V_3 происходит столкновение, в результате которого образуется ещё одна частица. К одной из них применяется метод DXTRAN. Другая частица будет входить как в супертрек S_{11}, содержащий обычную частицу, так и в супертрек S_{13}, содержащий DXTRAN-частицу. Таким образом, супертрек S_{13} состоит из ветвей V_1—V_2—V_3—A_{n_3}—… и V_3—V_{3a} − − − …. Супертрек S_{14} состоит из ветвей V_1—V_2—V_3—V_4—A_{n_4}—… и V_3—V_{3a} − − − ….

Введем индикаторы $\mathbb{I}_1(S)$, $\mathbb{I}_2(S)$, …, $\mathbb{I}_m(S)$. Индикатор $\mathbb{I}_1(S)$ равен 1, если супертрек S является обычным супертреком, иначе он равен 0. Индикатор $\mathbb{I}_j(S)$ равен 1, если супертрек S является DXTRAN-супертреком, полученным при $j-1$-ом применении метода DXTRAN, иначе он равен 0.

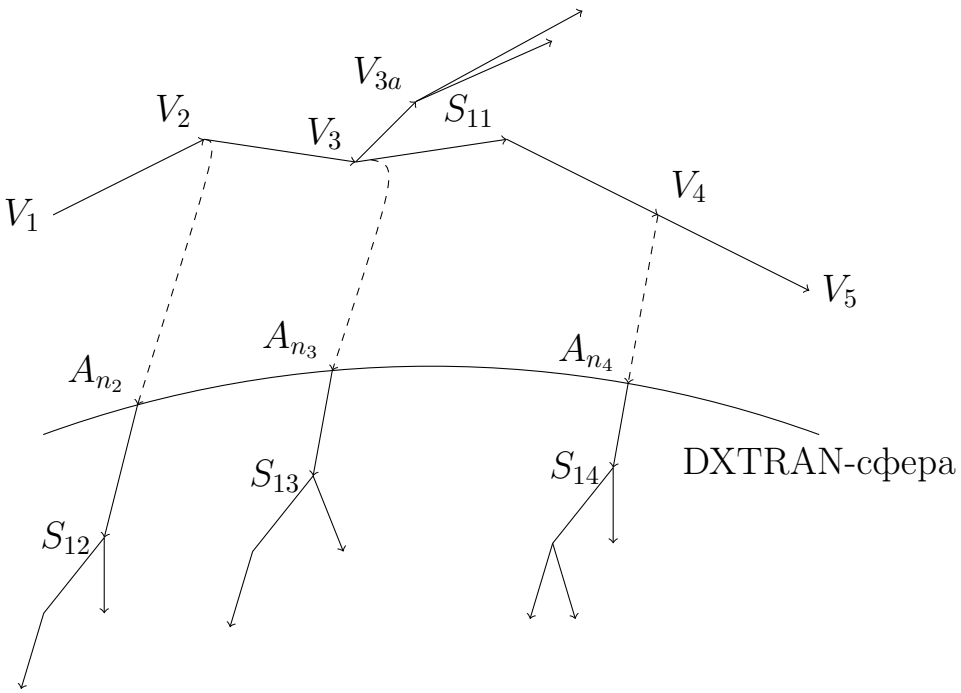

Рис. 19. Применение весового метода DXTRAN в несколько раз.

Для того, чтобы определить, является ли S супертреком, полученным при j-ом применении метода DXTRAN, надо подсчитать количество попаданий супертрека S в область, в которой применяется метод DXTRAN. При этом при первых $j-1$ попаданиях супертрек S должен продолжаться как обычный супертек, то есть не пересекать DXTRAN-сферу непосредственно после этих попаданий. При j-ом попадании супертрек S должен себя вести как DXTRAN-супертрек, то есть пересекать DXTRAN-сферу при переходе между вершиной, соответствующей попаданию, и следующей за ней вершиной.

Введением индикаторов $\mathbb{I}_j(S)$ всё множество супертреков $\mathbb{S}$ разбивается на счётное количество подмножеств. На каждом таком подмножестве равен единице только один из индикаторов. При этом выполняется

$$\sum_{j=1}^{\infty} \mathbb{I}_j(S) = 1. \tag{2.31}$$

Приведенное равенство отражает тот факт, что любой супертрек попадает в одно и только одно такое подмножество.

Аналогично (2.25) можно записать вероятность того, что в j-ом слагаемом бесконечной суммы при очередном статистическом испытании получится супертрек S_{1j}. Она равна

$$d_j S_{1j} = \mathbb{I}_j(S_{1j}) p'_n(x_{E_n}|x_0, \ldots, x_{E_n-1}) p(x_0) \prod_{\substack{i=1,\\ i\neq E_n}}^{k_n} p(x_i|x_0, \ldots, x_{i-1}) dx_0 \ldots dx_{k_n} \tag{2.32}$$

По-прежнему, n указывает, какому множеству $\mathbb{S}_n$ принадлежит супертрек S_{1j}, D_n и E_n – номера вершин, при переходе между которыми применяется метод DXTRAN. Числа n, D_n и E_n для каждого j свои, но эту зависимость будем опускать, чтобы избежать громоздких обозначений.

Среднее значение (2.24) с учётом введенных обозначений можно записать в виде

$$MQ^* = \int q(S_{11}) \mathbb{I}_1(S_{11}) dS_{11} + \sum_{j=2}^{\infty} \int q(S_{1j}) w_j \mathbb{I}_j(S_{1j}) d_j S_{1j}, \tag{2.33}$$

аналогичном формуле (2.26).

Выполняя алгебраические преобразования слагаемых под знаком суммы согласно формулам (2.28) и (2.29), получаем

$$MQ^* = \int q(S_{11}) \mathbb{I}_1(S_{11}) dS_{11} + \sum_{j=2}^{\infty} \int q(S_{1j}) \mathbb{I}_j(S_{1j}) dS_{1j},$$

Правая часть представляет собой сумму слагаемых, каждое из которых пропорционально среднему значению функционала по подмножеству, выделяемому соответствующим индикатором $\mathbb{I}_j(S_{1j})$. Это говорит о том, что метод DXTRAN является частным случаем метода расслоённой выборки. Суть метода расслоённой выборки заключается в разбиении всего множества элементарных исходов статистического испытания на подмножества, и определении методом Монте-Карло среднего по каждому из подмножеств. Среднее по всему множеству определяется как взвешенная сумма от средних по подмножествам.

Переставляя знаки суммирования и интегрирования местами, получаем

$$MQ^* = \int \sum_{j=1}^{\infty} q(S_1)\mathbb{I}_j(S_1)dS_1.$$

В силу (2.31) получаем

$$MQ^* = \int q(S_1)dS_1 = MQ,$$

что и требовалось доказать.

Приведенное в этом разделе доказательтсво копирует основные шаги доказательства из работы автора [28] с точностью до обозначений, и обобщает работу [28]. А именно, в работе [28] рассматриваются только аддитивные в смысле (1.1) функционалы, а количество частиц, выходящих из реакций столкновения, не превышает одну. В случае, когда среда является неразмножающей, а оцениваемый функционал – аддитивным, приведённое доказательство несмещённости оценки Q^* полностью копирует доказательство из работы [28].

2.7.6 Доказательство основной теоремы

Приведенные выше доказательства несмещённости оценки Q^* предполагают, что применяется только один из рассмотренных весовых методов. В настоящем пункте рассматривается случай, когда применяется комбинация этих весовых методов. Итак, пусть при моделировании супертрека S_1 применяется метод DXTRAN, в результате которого порождаются DXTRAN-частицы. Обозначим весовой множитель, соответствующий обычному (не-DXTRAN) супертреку через $w_1(S_{11})$, а весовые множители, соответствующие DXTRAN-супертрекам через $w_j(S_{11})$. К DXTRAN-супертрекам может быть применён метод расщепления. Расщепление DXTRAN-супертрека S_{1j} на m_j супертреков приводит к

появлению супертреков S_{1ji} с весовыми множителями $w_{ji}(S_{1ji})$, причём

$$\sum_{i=1}^{m_j} w_{ji}(S_{1ji}) = 1. \tag{2.34}$$

Пусть также к любому из супертреков S_{1ji} и S_{11} применяется русская рулетка. Соответствующие весовые множители равны $w_{1ji}^{rr}(S_{1ji})$ и $w_{11}^{rr}(S_{11})$ соответственно. Индикаторы выживания супертреков обозначим $\mathbb{I}(L_{1ji})$ и $\mathbb{I}(L_{11})$ соответственно, где L_{1ji} и L_{11} – события, заключающиеся в выживании соответствующих супертреков в русской рулетке.

Случайная величина Q^* при таком комбинированном методе весового моделирования запишется в виде

$$Q^* = w_1(S_{11})w_{11}^{rr}(S_{11})\mathbb{I}(L_{11})q(S_{11})\mathbb{I}_1(S_{11}) + \sum_{j=2}^{\infty}\sum_{i=1}^{m_j} w_j(S_{11})w_{ji}(S_{1ji})w_{1ji}^{rr}(S_{1ji})\mathbb{I}(L_{1ji})q(S_{1ji})\mathbb{I}_j(S_{1ji}). \tag{2.35}$$

Выполняя выкладки, аналогичные выкладкам, сделанным при обосновании метода DXTRAN, получаем, что среднее значение Q^* равно

$$MQ^* = \int w_1(S_{11})w_{11}^{rr}(S_{11})\mathbb{I}(L_{11})q(S_{11})\mathbb{I}_1(S_{11})dS_{11} + \sum_{j=2}^{\infty}\sum_{i=1}^{m_j}\int w_j(S_{11})w_{ji}(S_{1ji})w_{1ji}^{rr}(S_{1ji})M(\mathbb{I}(L_{1ji})|S_{1ji}))q(S_{1ji})\mathbb{I}_j(S_{1ji})d_jS_{1ji}.$$

Используя условие (2.34) и учитывая, что $M(\mathbb{I}(S_{1ji})|S_{1ji})) = 1/w_{1ji}^{rr}$, $M\left(\mathbb{I}\left(S_{11}\right)|S_{11}\right)) = 1/w_{11}^{rr}$, получаем формулу (2.33), для которой равенство $MQ^* = MQ$ уже доказано.

Если в дополнение к уже перечисленным весовым методам используется метод разыгрывания траекторий со смещённой плотностью вероятности, то в каждом слагаемом добавится дополнительный множитель (2.16), а усреднение будет вестись согласно (2.13). Нетрудно показать, что в этом случае по-прежнему $MQ^* = MQ$.

Формула (2.35) имеет простую структуру. В результате применения описанных весовых методов вместо одной реализации супертрека S_1 получается некоторое множество взаимоисключающих реализаций $\{S_{11}, S_{111}, \ldots, S_{1mm_m}\}$. Для каждой реализации вес определяется как произведение весовых множителей использованных весовых методов. Величина Q^* равна взвешенной сумме откликов детектора $q(S)$ на каждую реализацию супертрека.

2.8 Случай функционала, не аддитивного по траекториям

Докажем формулу (2.2), для этого найдём математическое ожидание случайной величины, задаваемой этой формулой. Согласно теореме Фубини усреднение можно выполнять последовательно по каждому аргументу. Усредняя по S_1, получаем

$$M_{S_1}Q^* = \sum_{j_1=1}^{m_1}\int\sum_{j_2=1}^{m_2}\ldots\sum_{j_k=1}^{m_k} q(S_{1j_1},,\ldots,S_{kj_k})\cdot\omega_{1j_1}(S_{1j_1})\ldots\omega_{kj_k}(S_{kj_k})P'(dS_1) = \int\sum_{j_2=1}^{m_2}\ldots\sum_{j_k=1}^{m_k} q(S_1,S_{2j_2},\ldots,S_{kj_k})\cdot\omega_{2j_2}(S_{2j_2})\omega_{3j_3}(S_{3j_3})\ldots\omega_{kj_k}(S_{kj_k})P(dS_1) \tag{2.36}$$

Усредняя последовательно по остальным аргументам, получаем

$$MQ^* = \int\int\ldots\int q(S_1,S_2,\ldots,S_k)\cdot P(dS_1)P(dS_2)\ldots P(dS_k) = \int q(S_1,S_2,\ldots,S_k)\cdot P(dS_1\times dS_2\times\ldots\times dS_k) = MQ \tag{2.37}$$

Последнее равенство доказывает несмещённость оценки (2.2).

2.9 Нестационарная схема

Для моделирования нестационарной схемы достаточно дополнить набор фазовых координат временем. Будем считать, что рассматриваемый процесс распространения излучения ограничен по времени, то есть $0 \leqslant t < T$. Будем считать, что активность источника и свойства среды зависят от времени по известному закону.

Вместо того, чтобы добавлять к описанию каждой вершины супертрека свой момент времени, достаточно добавить его только к описанию первой вершины. Моменты времени попадания частиц во все последующие вершины супертрека могут быть вычислены, так как геометрические расстояния между вершинами и скорость (энергия) частицы уже входят в описание супертрека. Итак, в нестационарном случае описание супертрека дополняется моментом времени t рождения исходной частицы.

Функция источника в нестационарном случае записывается в виде $p(t, x_0)$ и имеет смысл дифференциальной по времени t и координате x_0 плотности вероятности того, что частица будет испущена в момент времени t в точке x_0.

Свойствами среды, влияющими на длину свободного пробега частицы и на исход реакций столкновения, являются, например, плотность и изотопный состав. С учётом нестационарности этих свойств плотность вероятности реализации супертрека S может быть записана в виде

$$p(S) = p(t, x_0) \prod_{i=1}^{k_n} p_n(x_i | t, x_0, x_1, \ldots, x_{i-1}),$$

где $p_n(x_i | t, x_0, x_1, \ldots, x_{i-1})$ — дифференциальная по x_i плотность вероятности того, что следующее столкновение частица испытает в точке x_i, при условии, что она испущена в точке x_0 в момент времени t, а координаты вершин супертрека $S \in \mathbb{S}_n$ с номерами, меньшими i, равны x_0, x_1, $\ldots$, x_{i-1}.

Осреднение по супертреку, записываемое в виде (2.11) для стационарной схемы, теперь записывается в виде

$$\int q\left(S\right) dS \stackrel{\text{def}}{=}$$
$$\sum_{n=1}^{\infty} \int\limits_{\mathbb{S}_n} q_n\left(t, x_0, x_1, \ldots, x_{k_n}\right) p_n\left(t, x_0, x_1, \ldots, x_{k_n}\right) dt dx_0 dx_1 \ldots dx_{k_n},$$

где t — момент времени испускания частицы источником, $q_n(t, x_0, x_1, \ldots, x_{k_n})$ — функция детектора, $p_n(t, x_0, x_1, \ldots, x_{k_n})$ — дифференциальная по времени t и координатам x_0, x_1, …, x_{k_n} плотность вероятности осуществления супертрека S, $S \in \mathbb{S}_n$. Интеграл по t берется в конечных пределах (собственный интеграл). Для определённой таким образом операции усреднения по супертрекам остаются справедливыми все свойства, доказанные ранее в приложении Б.

Функцию детектора в случае нестационарной схемы можно записать в виде

$$q(S) = q_n(t, x_0, x_1, \ldots, x_{k_n}).$$

Применение любого из рассмотренных весовых методов к супертреку не меняет момент времени рождения первичной частицы супертрека. В частности, при расщеплении супертрека возникают несколько новых супертреков с одним и тем же временем рождения первичной частицы.

Доказательство несмещённости оценки (2.4) в нестационарном случае остаётся справедливым, так как в нём ничего не меняется за исключением того, что везде к интегрированию по фазовой переменной x_0 добавляется интегрирование по времени t.

При добавлении времени к описанию супертрека точке рождения исходной частицы будет соответствовать точка пространства $X \times [0, T)$, где T – некоторое число. Однако это никак не отразится на построении вероятностного пространства, так как пространство $X \times [0, T)$ по-прежнему остаётся конечномерным полуоткрытым прямоугольником.

2.10 Способ вычисления весовой оценки для схемы совпадений

2.10.1 Представление отлика схемы совпадений в виде суммы

Во многих расчётах для достижения требуемого значения статистической погрешности требуется разыгрывание до нескольких миллионов траекторий частиц. Если $m > 1$, количество слагаемых в сумме (2.2) будет выражаться огромным числом и время, затрачиваемое на перебор всех слагаемых будет весьма значительным. В этом пункте описан способ, как можно существенно сократить время расчёта при использовании весовых методов, в которых сумма весов частиц сохраняется. К этим методам относятся все рассмотренные ранее весовые методы, за исключением DXTRAN, в котором сумма весов сохраняется «в среднем» [66].

В случае, если используются только такие методы расщепления, в которых на каждом шаге сумма весов порожденных частиц равна весу исходной частицы, то есть для любого v выполняется $\sum\limits_{j_v=1}^{m_v} w_{v,j_v} = 1$, то для любого натурального $a < k$ справедливо равенство

$$\sum_{j_1=1}^{m}\sum_{j_2=1}^{m}\ldots\sum_{j_a=1}^{m}\ldots\sum_{j_k=1}^{m} q(S_{1,j_1}, S_{2,j_2}, \ldots, S_{a,j_a}) = \sum_{j_1=1}^{m}\sum_{j_2=1}^{m}\ldots\sum_{j_a=1}^{m} q(S_{1,j_1}, S_{2,j_2}, \ldots, S_{a,j_a}). \tag{2.38}$$

Смысл этого равенства состоит в том, что суммирование по индексам, от которых не зависит выражение под знаком суммы, можно опустить.

Пусть функционал обладает свойством аддитивности (1.5). Выражение (2.2) с учётом (1.5) и (2.38) может быть записано в виде

$$Q^* = Q_1^* + Q_2^* + \ldots + Q_l^*. \tag{2.39}$$

Величины Q_v^*, $v = 1, 2, \ldots, l$ вычисляются по формуле (2.2), в которой вместо исходного набора супертреков $\{S_{ij}\}$ используется только его часть при $i = k_{v-1} + 1, k_{v-1} + 2, \ldots, k_v$. За счёт этого существенно сокращается количество рассматриваемых комбинаций при вычислении Q^*. Выбору индексов k_v, по которым происходит разбиение исходного набора супертреков, посвящен следующий пункт.

2.10.2 Выбор индексов разбиения

Момент испускания первичной частицы для всех супертреков S_{ij} при фиксированном значении индекса i один и тот же. Обозначим его через t_i. Будем также считать, что из условия $i_1 < i_2$ следует, что $t_{i_1} < t_{i_2}$.

Перейдем теперь к методу выбора количества разбиений l и номеров k_1, k_2, $\ldots$, k_l. Обозначим через Δt_{ij} разность между моментом времени поглощения последней частицы супертрека S_{ij} и моментом времени испускания первичной частицы t_i. Величина Δt_{ij} имеет смысл временной длительности супертрека S_{ij}. Введём величину

$$T_r = t_{r+1} - \max_{1 \le i \le r} \left(t_i + \max_{1 \leqslant j \leqslant m_i} \Delta t_{ij} \right),$$

где $r = 1, 2, \ldots, k-1$. Эта величина имеет смысл интервала времени между поглощением последней частицы супертреков S_{ij} с номерами $i = 1, 2, \ldots, r$ и испусканием $r+1$-ой частицы. Если $T_i > 0$, то в течение интервала времени $T_i > 0$ в рассматриваемой системе никаких частиц нет. Выберем число l и все номера k_1, k_2, $\ldots$, k_{l-1} такие, что для любого $i = 1, 2, \ldots, l-1$

$$T_{k_i} \geqslant T_0, \tag{2.40}$$

где T_0 – интервал времени, за который прибор после регистрации последней частицы успевает вернуться в исходное состояние. Крайние значения выбираем равными $k_0 = 0$ и $k_l = k$.

Условие (2.40) означает, что после поглощения последней частицы из k_i-ого супертрека прибор успеет вернуться в начальное состояние. При

таком выборе для любого набора номеров j_1, j_2, $\ldots$, j_k разбиение на слагаемые происходит одним и тем же способом

$$q\left(S_{1,j_1}, S_{2,j_2}, \ldots, S_{k,j_k}\right) = q\left(S_{1,j_1}, \ldots, S_{k_1,j_{k_1}}\right) + q\left(S_{k_1+1,j_{k_1+1}}, \ldots, S_{k_2,j_{k_2}}\right) +$$
$$\ldots + q\left(S_{k_{l-1}+1,j_{k_{l-1}+1}}, \ldots, S_{k_l,j_{k_l}}\right) = \sum_{v=1}^{l} q\left(S_{k_{v-1}+1,j_{k_{v-1}+1}}, \ldots, S_{k_v,j_{k_v}}\right).$$

Итак, алгоритм вычисления среднего величины Q^* из (2.2) с учётом рассмотренного способа оптимизации, состоит из следующих шагов.

1. Всё множество полученных методом Монте-Карло супертреков $\{S_{ij}\}$ разбивается на группы по индексу i согласно (2.40).

2. Для каждой группы вычисляется среднее значение величины Q_i^* обычным способом по формуле (2.2).

3. Полученные значения суммируются согласно (2.39).

2.10.3 Вычисление среднего значения методом Монте-Карло

Согласно классическому методу Монте-Карло при вычислении среднего значения величины

$$Q' = \frac{q(S_1, S_2, \ldots, S_k)}{k}, \tag{2.41}$$

требуется разыграть N кортежей $(S_1, S_2, \ldots, S_k)$ по k траекторий каждый, при этом среднее вычисляется по формуле

$$\langle Q' \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \frac{q(S_1, S_2, \ldots, S_k)}{k}. \tag{2.42}$$

Рассмотрим набор супертреков S_i в количестве kN штук

$$\begin{array}{llll} S_1, & S_2, & \dots & S_k, \\ S_{k+1}, & S_{k+2}, & \dots & S_{2k}, \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ S_{k(N-1)+1}, & S_{k(N-1)+2}, & \dots & S_{kN}. \end{array}$$

Используя свойство аддитивности по времени, отклик детектора на kN траекторий $q(S_1, S_2, \dots, S_{kN})$ можно представить в виде суммы слагаемых (1.5). Обозначим множество номеров, при которых происходит разбиение на слагаемые, через K.

Отклик детектора на k траекторий $q(S_{n\cdot k+1}, S_{n\cdot k+2}, \dots, S_{n\cdot k+k})$, $n = 0, 1, \dots, N-1$ тоже можно представить в виде суммы (1.5), множество индексов разбиения при этом обозначив через K_n. Причём выполняется $K_i \cap K_j = \emptyset$ при $i \neq j$.

Очевидно, что $K \subset K_1 \cup K_2 \cup \ldots \cup K_n \cup \{k, 2k, 3k, \dots, (N-1)k\}$, то есть множество K отличается от $K_1 \cup K_2 \cup \ldots \cup K_n$ добавлением не более чем $N-1$ номеров. При добавлении номера в K, если его ещё там нет, в правой части (1.5) вместо одного из слагаемых образуется два новых слагаемых. То есть разница между $q(S_1, S_2, \dots, S_{kN})$ и

$$\sum_{n=1}^{N-1} q(S_{n\cdot k+1}, S_{n\cdot k+1}, \dots, S_{n\cdot k+k})$$

состоит в $3(N-1)$ слагаемых, остальные слагаемые одинаковы.

Пусть существует такое $C > 0$, что все слагаемые в правой части (1.5) по модулю меньше C. Приборы, рассмотренные в главе 1, удовлетворяют этому условию: $q(S_1, S_2, \dots, S_k) = 1$, если событие обнаружено, и 0, если не обнаружено. Принципиальным фактом является, что отклик детектора $q(S_1, S_2, \dots, S_k)$ должен быть ограничен, только если при данной реализации супертреков S_1, S_2, ..., S_k его нельзя разбить на слагаемые по свойству аддитивности по времени. Для произвольного набора супертреков $q(S_1, S_2, \dots, S_k)$ может быть неограничен.

Тогда разность между (2.41) и (2.42) удовлетворяет

$$|Q' - \langle Q' \rangle| < \frac{3C \cdot (N-1)}{kN} = O\left(\frac{1}{k}\right).$$

Таким образом оправдана возможность вычисления среднего отклика детектора на одну испущенную частицу для аддитивных по времени детекторов по формуле (2.41) с использованием одного кортежа из kN супертреков, вместо использования N кортежей по k супертреков в каждом.

Этот результат имеет простой смысл. Так как аддитивная по времени величина $q(S_1, S_2, \ldots, S_k)$ представляет собой сумму большого количества одинаково распределённых случайных величин, то о среднем значении этой случайной величины можно судить по одной её реализации. Опираясь на физический смысл, можно утверждать, что количество членов в формуле (2.41) не играет существенной роли, лишь бы оно было достаточно большим.

2.11 Результаты

Анализ литературы показал, что весовые методы в большинстве случаев предлагаются для вычисления среднего значения аддитивных по столкновениям функционалов, а в случае функционала, аддитивного лишь по траекториям, рассматриваются частные случаи. Универсальным подходом к вычислению аддитивных по траекториям функционалов является концепция супертреков. В настоящей главе концепция супертреков обоснована и обобщена на случай неаддитивных ни в одном из указанных смыслов функционалов.

Обоснование предлагаемого метода вычисления среднего значения неаддитивных функционалов проведено путём усреднения случайной величины по всем возможным траекториям. Доказана несмещённость предлагаемой оценки при применении метода разыгрывания со смещённой плотностью вероятности, метода расщепления, русской рулетки,

DXTRAN и комбинации рассмотренных методов. В рамках используемого подхода показано, что метод DXTRAN есть ни что иное, как метод расслоённой выборки.

Если выполняется свойство аддитивности по времени, предложенное в главе 1, то предложенный алгоритм вычисления среднего значения функционала может быть существенно ускорен.

Также при выполнении свойства аддитивности по времени оценка среднего значения функционала $q(S_1, S_2, \ldots, S_k)$ может быть проведена по единственной реализации кортежа ветвящихся траекторий $(S_1, S_2, \ldots, S_k)$. Именно так и поступают во многих работах, в которых проводится имитационное моделирование работы сложных приборов.

Глава 3

Реализация концепции восстановления супертреков

3.1 Транспортный код

3.1.1 Выбор транспортного кода

Транспортным кодом, согласно общепринятой терминологии (например, MCNP расшифровывается как Monte Carlo N-Particle Transport Code), называется код, отвечающей непосредственно за моделирование траекторий частиц. Разработка такого кода заново является очень трудоёмкой задачей и не оправдана, так как существует большое количество уже готовых программ.

На сегодняшний день активно развиваются несколько программных пакетов, имеющих в своем составе транспортный код. К ним относятся такие крупные проекты, как MCNP [66, 67], GEANT[53], FLUKA [50], TRAMO [34] и MCBEND [84]. Первые два, MCNP и GEANT, являются наиболее популярными в научном сообществе. Об этом говорит статистика использования этих пакетов участниками специализированных конференций [90].

Перечисленные программы для расчёта переноса излучения развивались главным образом для вычисления аддитивных функционалов от поля излучения, когда взаимная корреляция между траекториями частиц несущественна. Это привело к тому, что при моделировании ядерных реакций выходящие частицы моделируются независимо друг от друга. При моделировании схем совпадений корреляция между траекториями частиц может играть существенную роль. Если схема совпадений настроена на выявление определенного рода корреляций между параметрами частиц, то неучитывание этих корреляций в программном

транспортном коде делает его неприменимым к моделированию такой схемы совпадений.

В работе [45] указано на невозможность моделирования при помощи MCNP совпадений, вызванных гамма-квантами, соответствующими последовательным переходам возбуждённого ядра на основной уровень. Причиной этого является алгоритм программы MCNP, который не учитывает корреляцию энергий последовательно испущенных гамма-квантов, хотя вся необходимая информация о структуре ядра доступна из используемой библиотеки ENSDF. В настоящей работе при проверке предложенных алгоритмов и программ реакции такого рода являются несущественными.

Весовые методы, в том числе и DXTRAN, наиболее полно представлены в программе MCNP. В других программных пакетах метод DXTRAN отсутствует. К достоинствам MCNP по сравнению с GEANT стоит ещё отнести и компактность исходного кода. Эти и другие факты послужили в настоящей работе причинами выбора кода MCNP в качестве транспортного кода.

Автором настоящей работы проведено исследование статистических свойств различных генераторов псевдослучайных чисел [30]. Тестирование заключалось в проверке равномерности заполнения единичного гиперкуба точками со случайными координатами. Результаты тестирования показали, что линейный конгруэнтный генератор псевдослучайных чисел программы MCNP вполне может считаться равномерным при том способе его использования, который реализован в MCNP.

В силу высокой степени оптимизации кода MCNP для расчёта аддитивных функционалов определённого типа, возникли сложности с восстановлением информации о разыгрываемых супертреках, необходимой для вычисления неаддитивных функционалов. Исследованию возможностей, в каких случаях можно сравнительно просто восстановить информацию о супертреках, посвящён п. 3.2 настоящей главы.

3.1.2 Подключение транспортного кода MCNP

При вычислении функционала $q(S_1, S_2, \ldots, S_k)$ предполагается, что супертреки S_1, S_2, $\ldots$, S_k известны. Этот факт делает невозможным производить оценку функционала параллельно с моделированием траекторий по мере поступления необходимых данных о траекториях частиц, как это сделано в большинстве программ, вычисляющих функционал $q(S)$, зависящий только от одного супертрека, а в некоторых случаях, и вовсе только от отдельных участков траекторий частиц. В настоящей работе сначала моделируется распространение частиц с сохранением информации о них в промежуточном файле. Затем производится восстановление по сохранённым данным супертреков для вычисления функционала $q(S_1, S_2, \ldots, S_k)$. Аналогичный способ с использованием промежуточного файла применяется в работе [55], где в файле сохраняются события, соответствующие пересечению поверхности, окружающей гамма-телескоп, частицами широких атмосферных ливней.

В настоящей работе реализован следующий способ использования транспортного кода программы MCNP. В программном коде MCNP предусмотрена функция TallyX [66], тело которой разрабатывается пользователем для конкретной решаемой задачи, а условия, при которых она вызывается, указываются в файле входных данных. Эти условия могут быть настроены таким образом, чтобы функция TallyX получала управление каждый раз, когда моделируемая траектория пересекает одну из выбранных поверхностей. Задачей функции TallyX является сбор и запись в промежуточный файл данных о параметрах траектории частицы.

Выбранный способ не является единственным, альтернативным способом является, например, использование встроенного в MCNP механизма записи событий в файл (event log). К недостаткам такого способа относится запись огромного количества лишней информации. Кроме того, нет уверенности, что в результате возможно будет восстановить всю необходимую информацию о смоделированных супертреках. Вторым альтернативным способом является установка большого количества

“ловушек” в коде MCNP, при срабатывании которых накапливается информация о моделируемом супертреке. Этот способ сопряжен с редактированием кода MCNP, причём объём правок достаточно велик, и оценить его заранее очень сложно.

Итак, выбор способа взаимодействия с транспортным кодом MCNP сделан в пользу функции TallyX. В рамках настоящей работы функция TallyX реализована так, чтобы она записывала всю информацию о частицах, пересекающих поверхность выбранной пространственной ячейки, в файл.

Так как подобного рода реализация функции TallyX может представлять отдельную ценность для других разработчиков, листинг функции с развёрнутыми комментариями приведён в приложении B.

Пересечение одной из поверхностей, ограничивающих детектор, является лишь необходимым условием пересечения границы детектора. Например, поверхностями, ограничивающими куб, являются бесконечные плоскости, и пересечение плоскости может произойти сколь угодно далеко от куба. В теле функции TallyX происходит проверка, действительно ли частица летит внутрь детектора или наружу, путём сравнения номеров двух пространственных ячеек, показывающих откуда и куда летит частица, с номером ячейки детектора. Если хотя бы одна из этих ячеек совпадает с номером ячейки детектора, то формируется новая запись в файле.

Следующие глобальные переменные, доступные функции TallyX, выбраны в качестве данных, по которым можно (но не всегда) восстановить необходимую информацию о супертреке: номер истории, время пересечения, энергия частицы и направление движения частицы (внутрь детектора или наружу). Но для придания универсальности в файл промежуточных данных записывается вся доступная информация о частице, которая не ограничивается перечисленными величинами. Размер файла промежуточных данных в настоящей работе в случае моделирования комптоновского гамма-спектрометра составлял примерно 4 гигабайта.

3.2 Вычисление отклика детектора $q(S_1, S_2, \ldots, S_k)$ по данным транспортного кода MCNP

3.2.1 Условия, при которых возможно восстановление супертреков

Как уже отмечалось, код MCNP изначально разрабатывался для вычисления аддитивных по точкам взаимодействия функционалов. Вследствие этого не было нужды хранить в памяти ЭВМ всю историю частицы от момента рождения до момента поглощения вторичных частиц, в то время как в супертрек входит информация о всех точках столкновения частицы. Этот факт усложняет задачу моделирования супертреков при помощи программы MCNP.

Еще одной причиной, затрудняющей построение супертреков с использованием транспортного кода MCNP, является тот факт, что каждая частица в MCNP имеет свой вес, который в разных точках траектории частицы различен. В случае же использования концепции супертреков вес приписывается всему супертреку. Другими словами, все частицы, относящиеся к одному и тому же супертреку имеют один и тот же вес, который не меняется при переходе от одного столкновения к другому.

Рассмотрим способ вычисления веса супертрека, если для моделирования траекторий частиц используется транспортный код, оптимизированный для вычисления аддитивных по столкновениям функционалов. Оптимизация приводит к тому, что при каждом столкновении вес частицы может меняться. При этом вес супертрека S определяется по формуле

$$w = w_1 \cdot w_2 \cdot \ldots \cdot w_{k_n}, \tag{3.1}$$

где k_n – количество вершин в дереве супертрека, w_i – множитель, на который был умножен вес частицы при столкновении в точке с номером i.

В частном случае, когда среда является неразмножающей, вес супертрека равен весу частицы после последнего столкновения (поглощения). Корректное восстановление супертреков по данным, доступным внутри кода MCNP, в общем случае является технически очень сложной задачей. Один из путей решения этой задачи – установка по всему коду MCNP программных «ловушек» для отслеживания истории частицы, в частности, для отслеживания, родилась частица в результате применения метода расщепления или в результате моделирования реакции столкновения.

Альтернативным способом применения кода MCNP для расчётов с использованием формулы (2.2) является проработка частных случаев, в рамках которых не обязательно знание полной информации о супертреках, а достаточно ограничиться легко доступной информацией. Этот способ используется в настоящей работе.

Существенным недостатком используемого способа является невозможность получения информации о супертреке, если он не пересекал область детектора. В общем случае для использования формулы (2.2) необходимо знание информации о всех супертреках, даже о тех, которые в детектор не попадают (нужно знать хотя бы вес таких супертреков, так как он используется как множитель в этой формуле). В п. 3.2.2 и п. 3.2.3 исследованы два случая, когда информацию о супертреках, не попадающих в детектор, знать не обязательно. В этом пункте описывается, как восстановить информацию о супертреках, пересекающих область детектора, имея последовательность записей, сформированных функцией TallyX.

Предположим, что вне детектора среда является неразмножающей (количество выходящих из реакции частиц не превышает единицы). Предположим также, что вероятность того, что частица попадёт в детектор второй раз, пренебрежимо мала. Тогда можно утверждать, что все пересекающие поверхность детектора частицы, летящие внутрь детектора, относятся к разным альтернативам $S_{i,j}$ i-ого супертрека (не все супертреки могут быть отслежены).

Внутри детектора вполне допустимо размножение частиц, но при этом все весовые методы должны быть отключены. Тогда можно утверждать, что все частицы, выходящие из детектора, принадлежат одному и тому же супертреку.

Если внутри детектора среда является неразмножающей, как и снаружи, то внутри детектора возможно применение весовых методов. В этом случае можно утверждать, что все частицы, выходящие из детектора, принадлежат разным супертрекам.

Если частица вышла из детектора, то вероятность вторичного попадания её в детектор должна быть пренебрежимо мала. Тогда можно считать, что после выхода из детектора для разыгрывания траектории частицы весовые методы не используются, и вес супертрека равен весу частицы сразу после выхода из детектора. Это можно легко понять, заметив, что на значение функционала влияет только участки траекторий до вылета частицы из области детектора, и способ моделирования траектории частицы после вылета из детектора не играет никакой роли. Важно лишь правильно вычислить вес супертрека. В случае аналогового моделирования траекторий частиц после выхода из детектора все весовые множители w_i равны 1, и вес супертрека (3.1) определяется произведением весовых множителей, соответствующих столкновениям до выхода из детектора.

Обобщая, можно сказать, что требуется знание априорной информации о том, из-за чего расщепляются частицы внутри детектора и снаружи – из-за применения весовых методов, или из-за соответствующих реакций при столкновениях. В работе [37] выделяются соответственно этим случаям «математическое» и «физическое» расщепление. Другими словами, для сравнительно простого восстановления информации о супертреках необходимо знание информации о том, в каких областях происходит «математическое» расщепление, а в каких — «физическое».

Сформулированных выше предположений достаточно, чтобы восстановить необходимую информацию о супертреках, пересекающих область детектора, а именно определить все события A_i^+ и A_{ij}^- (см. п. 1.3.4.1 главы 1).

Предположение о том, что среда является неразмножающей, очень сильно сужает класс решаемых задач. Вместо него удобнее использовать предположение о том, что вероятность P попадания хотя бы одной вторичной частицы в детектор мала, то есть $P << 1$. Тогда вероятность попадания двух вторичных частиц в детектор имеет порядок малости P^2 и ей можно пренебречь. Этот факт позволяет не учитывать корреляцию фазовых координат продуктов реакций при разыгрывании траекторий частиц.

3.2.2 Вычисление функционалов вида $q(S)$

Примером функционала вида $q(S)$, зависящим только от одного супертрека, является оставленная частицей в некотором объёме энергия. Попытка использовать соответствующий счётчик (F8 tally) программы MCNP версии 4C для вычисления этой энергии совместно с весовыми методами приводит к сообщению об ошибке и чаще всего выдаёт неверный результат. В более поздних версиях эта проблема решена за счёт использования предложенного в работе [37] подхода развёртывания супертреков. Вычисление функционалов $q(S)$ является частным случаем приложения разрабатываемой в настоящей работе теории.

Существенной чертой, облегчающей вычисление таких функционалов, является тот факт, что если супертрек не проходит через чувствительную область детектора, то его можно не учитывать (функционал $q(S)$ от таких супертреков всё равно равен нулю). Это легко понять, записав формулу (2.2) для аддитивных по траекториям функционалов

$$Q^* = \sum_{i=1}^{k} \sum_{j=1}^{m_i} w_{ij} q(S_{ij}).$$

Если супертрек S_{ij} не проходит через детектор, то $q(S_{ij}) = 0$, и вес w_{ij} знать не обязательно для вычисления Q^*.

3.2.3 Вычисление функционалов вида $q(S_1, S_2, \ldots, S_k)$ в схемах совпадений

Наложим дополнительные ограничения на функционал вида $q(S_1, S_2, \ldots, S_k)$. Пусть он равен нулю, если хотя бы один из супертреков S_1, S_2, …, S_k не пересекает чувствительную область детектора.

Для вычисления таких функционалов по формуле (2.2) нет необходимости отслеживать все реализации супертреков. В сумме в правой части формулы (2.2) отличны от нуля только те слагаемые, супертреки у которых пересекают поверхность детектора. Все такие супертреки можно определить при помощи выбранных программных средств во время выполнения транспортного кода.

Частным случаем рассматриваемых функционалов при $k = 2$ является отклик прибора, работающего по схеме совпадений. Частным случаем при $k = 1$ является функционал $q(S_1)$, рассмотренный в п. 3.2.2.

3.2.4 Восстановление необходимых для вычисления значения случайной величины данных о супертреке в случае неразмножающей среды вне детектора

Рассмотрим случай, когда весовые методы применяются вне области, содержащей детектор (см. рис. 20), и в этой области среда является неразмножающей. Необходимо определить события A_i^+ и A_{ij}^-, соответствующие пересечнию поверхности β частицами, на основании информации из файла промежуточных данных.

Введём вспомогательную поверхность α, ограничивающую некоторую область в пространстве, содержащую в себе детектор. Внутри поверхности α среда является размножающей, а снаружи – неразмножающей. Весовые методы применяются только снаружи поверхности α. Обозначим поверхность, ограничивающую детектор, через β. Поверх-

ность β находится целиком внутри поверхности α. В отдельных задачах поверхности α и β могут совпадать.

Так как снаружи от поверхности α среда является неразмножающей, то можно утверждать, что все частицы, пересекающие поверхность α с внешней стороны относятся к разным супертрекам.

Пусть в файле промежуточных данных найдена запись, соответствующая пересечению частицей поверхности α снаружи внутрь. Тогда за найденной записью следует группа записей, соответствующая пересечению одной и той же реализации супертрека с интересующими поверхностями. Признаком того, что группа кончилась, является следующее пересечение какой-либо из частиц поверхности α снаружи внутрь. Это утверждение можно обосновать, приняв во внимание алгоритм, по которому программа MCNP моделирует ветвящиеся траектории. В каждый момент времени код MCNP моделирует движение только одной частицы. Если частица подвергается расщеплению, то новые частицы заносятся в стек, и код MCNP к ним возвращается только тогда, когда моделирование траектории исходной частицы будет завершено. В этом же порядке производится запись событий в промежуточный файл.

Согласно описанному правилу определения начала новой реализации супертрека разработан алгоритм разбиения непрерывного массива записей в промежуточном файле на блоки, относящиеся к разным супертрекам. По этим блокам можно однозначно определить события A_i^+ и A_{ij}^-.

Для наглядности разберём пример, показанный на рис. 20. После испускания частицы источником, частица подверглась весовому расщеплению в точке V. Вторая частица, возникшая в результате расщепления, заносится в стек. Первая частица пересекает поверхность α в точке 1, и испытывает столкновение в точке P_1, в результате которого появляется еще одна частица, которая заносится в стек. Продолжая разыгрывать траекторию первой частицы, получаются точки пересечения поверхностей в следующем порядке: 3, 6, 10. После чего моделирование траектории частицы заканчивается и MCNP возвращается к частицам в стеке. Извлекая последнюю сохранённую в нём частицу, и моделируя

её траекторию, получаются точки 4, 7, 11. В стеке есть еще одна частица, полученная в результате весового расщепления в точке M. При моделировании её траектории с учётом столкновения в P_2 получаются точки 2, 5, 8, 12, 9, 13 в указанном порядке. Итак, рассмотренному супертреку в файле промежуточных данных будут соответствовать 13 подряд идущих строк, описывающих пересечения его с поверхностями в точках 1, 3, 6, 10, 4, 7, 11, 2, 5, 8, 12, 9, 13. Точки 1 и 2, в которых происходит пересечение с поверхностью α, являются признаками того, что начинается новая реализация супертрека. Пересечения в точках 3, 6, 10, 4, 7, 11 относятся к одной реализации, в точках 5, 8, 12, 9, 13 — к другой.

События 3 и 4 соответствуют событиям $\left\{A_i^+\right\}$, события 6 и 7 следуют за ними и являются событиями из $\left\{A_{ij}^-\right\}$. За событием 5 из $\left\{A_i^+\right\}$ следуют два события 8 и 9 из $\left\{A_{ij}^-\right\}$.

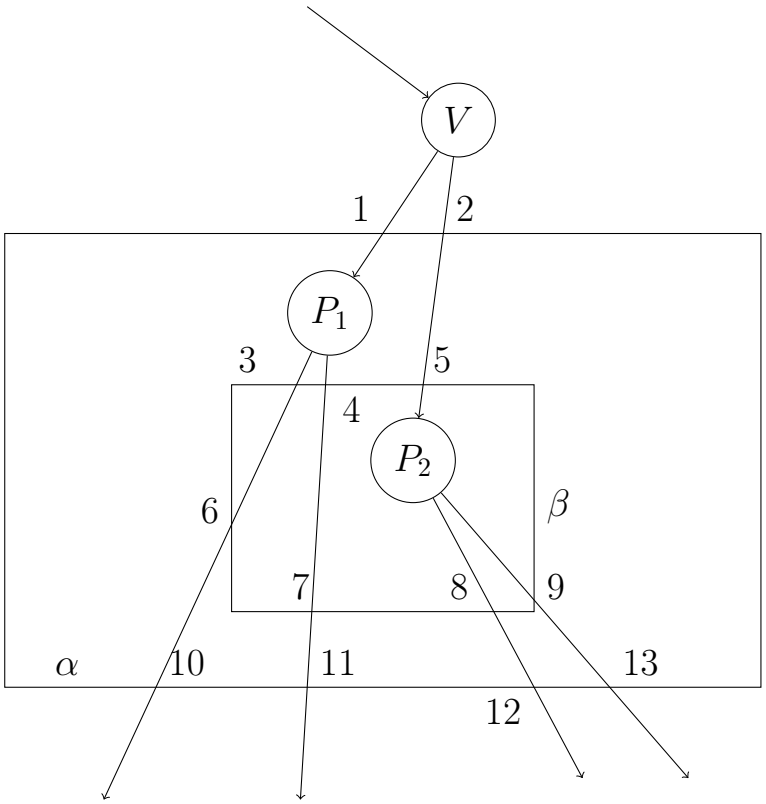

Рис. 20. Восстановление информации о супертреках.

3.2.5 Вспомогательные поверхности для сбора информации о супертреках с использованием расщепляющих методов

В отдельных задачах бывает удобно расщепление частицы в момент приближения её к детектору. В программе MCNP расщепление происходит при пересечении частицей поверхности, разделяющей ячейки с разной *важностью*, задаваемой во входном файле. Если частица прилетела из ячейки с меньшей важностью в ячейку с большей важностью, то она подвергается расщеплению. Если наоборот — то частица играет в русскую рулетку.

Если задать важность всех ячеек, находящихся внутри поверхности α (см. рис. 20), равной 10, а важность ячеек снаружи — единице, то при пересечении поверхности α частица будет расщепляться на 10 новых частиц. Однако в файле промежуточных данных будет только одна запись, соответствующая пересечению исходной нерасщеплённой частицей поверхности α. Информацию о том, на сколько новых частиц произошло расщепление, восстановить не удастся, так как не все новые частицы пересекут хотя бы по одному разу поверхность α.

Для использования метода расщепления в настоящей работе создаётся следующая конструкция (см. рис. 21). Поверхность α окружается поверхностью γ, отстоящей от нее на малое расстояние ε. Важность ячеек в задаче выбирается так, чтобы расщепление происходило на поверхности γ. В силу малости ε с высокой вероятностью все частицы, родившиеся в результате расщепления, пересекут поверхность α, то есть в файле промежуточных данных им будут соответствовать нужные записи. Сравнив суммарный вес частиц, пересекающих α, с единицей, можно удостовериться, что все частицы обнаружены (в методе расщепления суммарный вес сохраняется).

Для разбиения промежуточного файла на группы строк, относящихся к разным супертрекам, используется алгоритм, изложенный в п. 3.2.4, с дополнительной проверкой сохранения суммарного веса частиц. Если

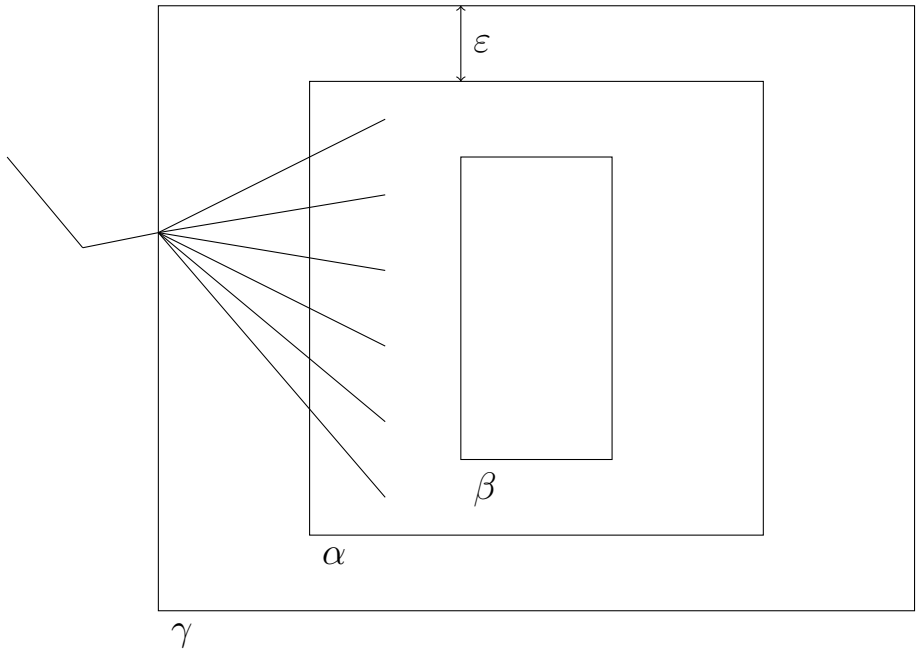

Рис. 21. Вспомогательные поверхности при использовании метода расщепления.

метод расщепления при пересечении поверхности γ является единственным используемым весовым методом, то есть возможность восстановить информацию о всех реализованных альтернативах супертреков, так как все они пересекают поверхность α.

3.3 Программная реализация

3.3.1 Структура комплекса программ

На рис. 22 представлена структура разработанного комплекса программ. В первую очередь исполняется транспортный код, результатом работы которого является файл промежуточных данных. Файл промежуточных данных содержит последовательность событий, соответствующих пересечению частицами выбранных поверхностей.

На втором этапе согласно изложенным в п. 3.2.4 из файла промежуточных данных выделяются события A_i^+ и A_{ij}^-. Если вычисления проводятся по формуле (2.39), то следующим шагом является разбиение множества событий A_i^+ и A_{ij}^- на группы согласно формуле (2.40). Для

каждой группы вычисляется сумма по всем возможным комбинациям согласно формуле (2.2).

При вычислении суммы по формуле (2.2) для каждой комбинации событий A_i^+ и A_{ij}^- вычисляется отклик схемы совпадений. Модель схемы совпадений вызывает модель сцинтилляционных детекторов, передавая ей текущую комбинацию событий и получая от нее последовательность отчётов детекторов. Выходными данными является усредненный отклик схемы совпадений Q^*. Вместо модели схемы совпадений может быть модель спектрометра.

Файл входных данных формируется специально разработанной утилитой из XML-файла, удобного для редактирования человеком. Эта же утилита формирует для модели схемы совпадений данные о номерах ячеек, заполненных чувствительным веществом сцинтилляционных детекторов(не показано на рисунке).

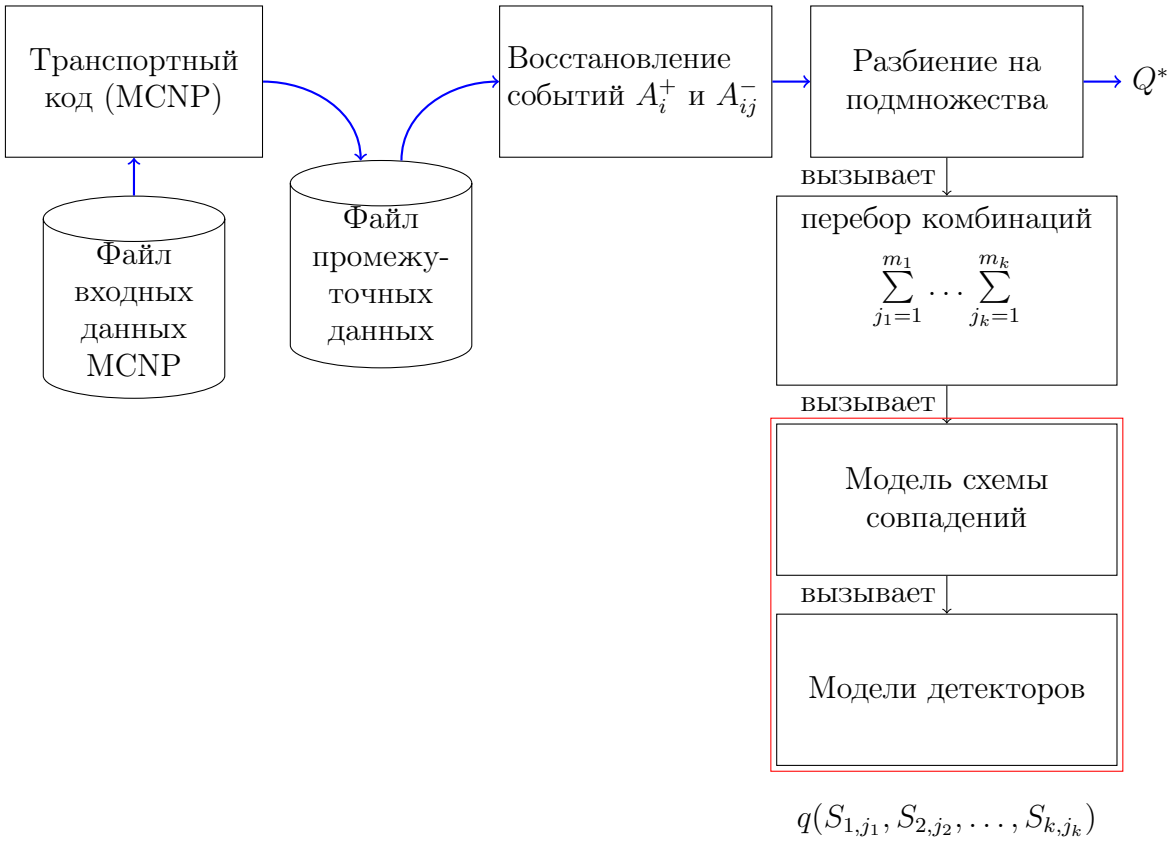

Рис. 22. Структура разработанного комплекса программ.

3.3.2 Организация вычислений

Практической задачей, решаемой в настоящей работе, является задача об оптимизации геометрических размеров комптоновского гамма-спектрометра. Весовые методы, существенно ускоряющие расчёты, позволяют решать эту задачу методом перебора различных наборов геометрических параметров. Для каждого такого набора вычисляется величина (1.11), значение которой необходимо максимизировать за счёт выбора нужного набора параметров. Очевидно, что расчёты величины (1.11) при разных наборах параметров проводятся независимо друг от друга. В настоящей работе оптимизация геометрической конфигурации комптоновского гамма-спектрометра проводилась на вычислительном кластере с использованием аналоговых методов, затем повторялась на рабочей станции с использованием весовых методов.

Особенностью поставленной задачи является возможность её распараллеливания на разных уровнях. Как уже упоминалось, возможно распараллеливание по входным данным. Так как для каждого набора входных разыгрывание траекторий частиц проводится методом Монте-Карло, то эта часть задачи тоже допускает простое распараллеливание. Во время обработки файла промежуточных данных при вычислении суммы по всем комбинациям реализаций супертреков, каждое слагаемое вычисляется независимо, что даёт возможность перебирать комбинации в параллельных вычислительных потоках. Вычисление каждого слагаемого $q(S_1, S_2, \ldots, S_k)$ простого способа распараллеливания не допускает, так как вклады отдельных супертреков в показания детектора влияют друг на друга.

Наиболее простым и эффективным способом распараллеливания является распараллеливание по входным данным, что и сделано в настоящей работе.

Для управления вычислительным процессом были разработаны специальные программы для оболочки bash (скрипты). Их задачами являются

- Разбиение всех различных наборов геометрических параметров на группы по одной группе для каждого вычислительного узла (разбиение задачи на подзадачи);
- Генерирование файла входных данных с нужными значениями переменных параметров (геометрические размеры, энергия гамма-квантов источника);
- Запуск программы MCNP в качестве транспортного кода;
- Запуск разработанной программы, имитирующей работу прибора;
- Сбор в общий файл результатов расчётов и представление их в виде таблицы (среднее значение Q^* в зависимости от параметров);

Также была разработана собственная система управления ресурсами, в некотором смысле повторяющая функциональность SLURM. Её задачей является обеспечение параллельного запуска программ в пределах одного вычислительного узла кластера или на рабочей станции. Запуск собственной системы управления ресурсами осуществляется вручную на рабочей станции или через SLURM на вычислительном кластере.

3.4 Результаты

В качестве транспортного кода выбран код MCNP в виду его популярности в научном сообществе, большого спектра возможностей и использовании наиболее полной библиотеки сечений ядерных реакций. Подключение транспортного кода MCNP проведено через задействование предусмотренной разработчиками MCNP специальной функции TallyX. В предлагаемой программной реализации функция TallyX получает управление каждый раз, когда моделируемая частица пересекает поверхность детектора. Задачей функции TallyX является отбор событий пересечения частицами поверхности детектора.

Недостатком выбранного способа получения информации о супертреках является невозможность получения информации о супертреках,

которые не пересекли границы детектора. Этот недостаток является существенным, так как для вычисления Q^* по формуле (2.2) необходимо знать хотя бы вес таких супертреков.

Выбранный способ допускает сравнительно простой способ восстановления информации о ветвящихся траекториях в двух частных случаях. В первом случае требуется, чтобы функционал $q(S_1, S_2, \ldots, S_k)$ был равен нулю, если хотя бы одна из траекторий S_1, S_2, $\ldots$, S_k не пересекает детектор (схема совпадений). Тогда нет необходимости восстановления информации о супертреках, не пересекающих границы детекторов. Под рассмотренный частный случай попадают аддитивные по траекториям функционалы $q(S)$, в частности, модель интроскопа, работающего по методу меченых нейтронов, с использованием весового метода DXTRAN.

Во втором случае весовые методы строятся так, чтобы была возможность отследить траектории всех частиц. Под этот случай попадает модель комптоновского гамма-спектрометра при использовании весового метода расщепления.

Сформулированные условия не являются принципиальными ограничениями предлагаемого общего алгоритма. Они введены только для того, чтобы можно было существенно упростить способ восстановления информации о ветвящихся траекториях по данным транспортного кода MCNP.

Изложенные в этой главе алгоритмы реализованы в виде универсального комплекса программ. Под универсальностью понимается возможность изменения геометрических конфигураций комптоновского гамма-спектрометра и интроскопа без перекомпиляции программ. Для организации вычислительного процесса разработаны собственные программные средства, за счёт которых выполнено распараллеливание по входным данным.

Глава 4

Тестирование разработанного алгоритма

4.1 Система тестов

В настоящей главе преследуются три цели: проверка правильности программной реализации предложенных численных методов и моделей, численная проверка несмещённости оценок (2.2) и (2.39) и демонстрация увеличения скорости сходимости среднего значения к математическому ожиданию при использовании весовых методов.

Проверка программной реализации разработанной функции TallyX, отслеживающей пересечения частицами выбранных поверхностей, производилась вручную путём сравнения записей в промежуточном файле с записями, формируемыми программой MCNP при включении отслеживания событий (event log).

Алгоритм, вычисляющий сумму по формуле (2.2) или (2.39), тестировался на задаче о бросании точек на отрезок (см. п. 4.2). Координаты точек имеют смысл моментов времени прихода событий, которые могут образовать совпадения. Для этой задачи известно теоретическое решение.

В п. 4.3 моделируется простейшая схема совпадений. В отсутствие преграды и других тел известна теоретическая оценка количества совпадений.

Модель сцинтилляционного детектора в случае вычисления функционала $Q = q(S)$ (см. п. 3.2.2 главы 3) проверялась путём сравнения полученных данных с данными, полученными стандартными средствами программы MCNP (счётчик F8). Неоднократные проверки, проведённые в работе автора [29], показали полное соответствие данных друг другу.

Модель интроскопа, работающего по методу меченых нейтронов, протестирована в п. 4.4. Более подробное изучение этой же реализации модели детектора (тех же самых подпрограмм) приведено в работе [29]. Приведено сравнение расчётного спектра углерода с экспериментальным, полученным методом меченых нейтронов. В приложении Д приведены расчетные спектры углерода, азота и кислорода.

Модель комптоновского гамма-спектрометра тестируется в п. 4.5. Приведён пример применения разработанных программ для оптимизации геометрических параметров прибора, работающего по схеме двойных совпадений. Все полученные при этом результаты имеют наглядную физическую трактовку.

Проведённых испытаний достаточно, чтобы эмпирически показать несмещённость оценок (2.2) и (2.39) и продемонстрировать существенное увеличение скорости сходимости среднего к математическому ожиданию при использовании весовых методов Монте-Карло.

Во всех тестах статистическая погрешность вычисленного среднего значения $\langle Q \rangle$ определяется по формуле [66]

$$S = \sqrt{\frac{\langle Q^2 \rangle - \langle Q \rangle^2}{N}}, \tag{4.1}$$

где N — количество статистических испытаний, $\langle Q \rangle$ — среднее значение величины Q, $\left\langle Q^2 \right\rangle$ — среднее значение квадрата величины Q. Средние значения определяются по формулам

$$\langle Q \rangle = \frac{\sum\limits_{i=1}^{N} Q_i}{N},$$
$$\left\langle Q^2 \right\rangle = \frac{\sum\limits_{i=1}^{N} Q_i^2}{N},$$

где Q_i — значение величины Q, полученное при i-ом испытании.

4.2 Бросание точек на единичный отрезок

4.2.1 Теоретическая оценка

Для проверки реализации алгоритма вычисления неаддитивных функционалов использовался следующий численный эксперимент. Точки в количестве k штук бросаются равномерно на интервал $(0,1)$. Их координаты x_1, x_2, $\ldots$, x_k в этом эксперименте являются аналогами супертреков в случае моделирования траекторий частиц. Функционал $q(x_1, x_2, \ldots, x_k)$ равен количеству пар соседних по отношению друг к другу точек (совпадений), расстояние между которыми меньше δ, и в которых обе точки принадлежат подынтервалу $(a,1)$, $0 < a < 1$, $0 < \delta < 1 - a$. Если в подынтервале $(a,1)$ точка только одна, или нет точек совсем, то $q(x) = 0$.

Для того, чтобы упростить выкладки для получения теоретической оценки среднего значения q, примем $k = 3$. Пусть каждая точка бросается на интервал $(0,1)$ с плотностью вероятности $p(x)$. Пронумеруем точки так, чтобы $x_1 \leqslant x_2 \leqslant x_3$. Каждой комбинации, удовлетворяющей приведённому неравенству, соответствует еще $3! - 1$ комбинаций, при которых это неравенство не выполняется, а значение функционала $q(x_1, x_2, x_3)$ то же самое. Это будет учтено на последнем этапе выкладок введением множителя $3!$.

Если $x_1 \leqslant x_2 \leqslant x_3$, то

$$q(x_1, x_2, x_3) = q(x_1, x_2) + q(x_2, x_3),$$

Вычислим математическое ожидание случайной величины $Q = q(x_1, x_2, x_3)$ $x_1 \leqslant x_2 \leqslant x_3$.

Первое слагаемое равно 1, если $x_1 > a$ и $x_2 < x_1 + \delta$. Математическое ожидание первого слагаемого при малых δ равно

$$MQ_1 = \int\limits_a^1 \int\limits_{x_1}^{x_1+\delta} \int\limits_{x2}^{1} dx_3 dx_2 dx_1.$$

Второе слагаемое равное единице, если $x_3 < x_2 + \delta$ и $x_2 > a$. Математическое ожидание второго слагаемого $Q_2 = q(x_2, x_3)$ при малых δ равно

$$MQ_2 = \int\limits_0^a \int\limits_a^1 \int\limits_{x_2}^{x_2+\delta} dx_3 dx_2 dx_1 + \int\limits_a^1 \int\limits_{x_1}^1 \int\limits_{x2}^{x_2+\delta} dx_3 dx_2 dx_1$$

После взятия интегралов с учётом неразличимости брошенных точек получаем теоретическую оценку

$$MQ = 3!\,(1-a)\left(\delta - \frac{\delta^2}{2}\right) \tag{4.2}$$

4.2.2 Вычисление методом Монте-Карло

Для вычисления математического ожидания случайной величины Q, рассмотренной в предыдущем пункте, написана программа, состоящая из трёх модулей.

Первый модуль реализует бросания k точек на интервал $(0, 1)$ с заданной плотностью вероятности и вычисляет веса точек. Второй модуль вычисляет значение функционала по разыгранным точкам. Третий модуль вычисляет значение функционала по формуле (2.2) или (2.39) с использованием реализованного в виде функций-шаблонов алгоритма для вычисления неаддитивных функционалов.

Если $x_2 - x_1 > \delta$, в случае использования формулы (2.39), то разбиение множества точек $\{x_1, x_2, x_3\}$ приводит к двум подмножествам $\{x_1\}$ и $\{x_2, x_3\}$. Если $x_3 - x_2 > \delta$, то отделяются вторая и третья точка. Нетрудно доказать, опираясь на свойства величины $q(x_1, x_2, \ldots, x_k)$, что формула (2.39) с указанными правилами разбиения на подмножества алгебраически тождественна формуле (2.2). Результаты вычисления по обеим формулам полностью соответствуют друг другу.

В случае использования весового моделирования положение точек разыгрывалось со смещенной плотностью вероятности

$$p'(x) = \begin{cases} c_1, 0 \leqslant x < a, \\ c_2, a \leqslant x < 1, \end{cases}$$

где коэффициенты c_1 и c_2 удовлетворяют условию нормировки $c_1 a + c_2(1-a) = 1$, а $c_1 = 0,2$. При такой плотности вероятности точки чаще попадают внутрь интервала $(a, 1)$.

При $a = 0,99$, $\delta = 10^{-4}$ теоретическая оценка (4.2) даёт $MQ = 6,00 \cdot 10^{-6}$. При разыгрывании точек с несмещённой плотностью вероятности вычисления методом Монте-Карло с количеством испытаний, равным 10^4, приводят к значению $MQ = 7,50 \cdot 10^{-6}$, статистическая погрешность равна $S = 2,6 \cdot 10^{-5}$. При использовании весовых методов при том же количестве испытаний оценка MQ равна $5,97 \cdot 10^{-6}$, статистическая погрешность равна $S = 6,1 \cdot 10^{-7}$.

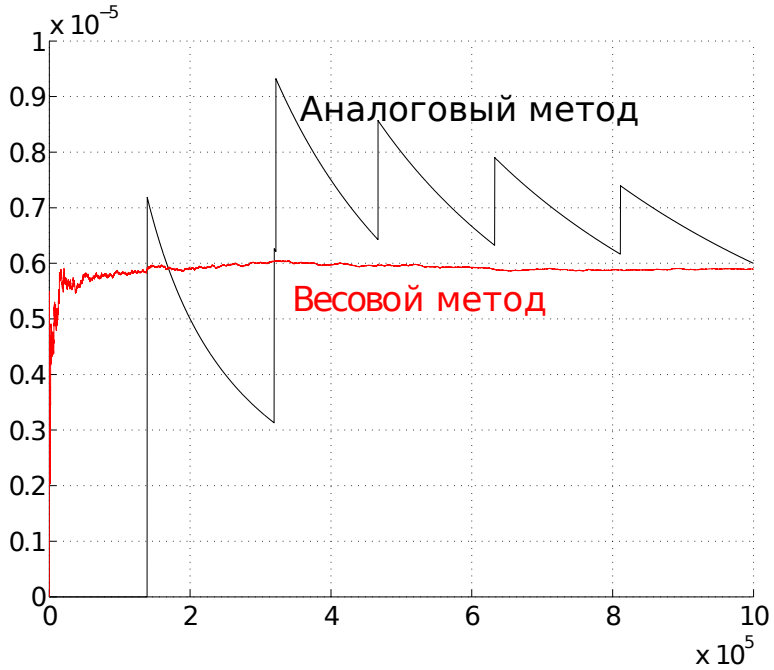

Рис. 23. Зависимость вычисленного среднего значения Q от количества статистических испытаний при весовом и аналоговом моделировании в задаче о бросании точек на отрезок.

Этот простой пример показал, что при правильной настройке весовых методов можно существенно снизить статистическую погрешность оценки среднего значения случайной величины.

4.3 Простейшая модель двойных совпадений

Два одинаковых детектора в форме прямоугольных параллелепипедов с основаниями размером 10×20 сантиметров и высотой 1 сантиметр расположены вплотную друг к другу так, что их основания перпендикулярны направлению на источник (см. рис. 24). Источник испускает равномерно в телесный угол 4π моноэнергетичные гамма-кванты с энергией 5 МэВ и расположен на расстоянии $L = 120$ см от ближайших к нему граней детекторов. Рассматривались два случая. В первом случае между детекторами и источником ничего нет. Во втором случае между источником и детекторами расположена преграда из углерода ^{12}C плотностью $2,2$ см^3 и толщиной 20 см (см. рис. 24). Расстояние между преградой и ближайшей плоскостью детекторов равно 60 см.

Детекторы идеальны, они поглощают целиком всё падающее на них излучение. Схема совпадений срабатывает, когда в оба детектора попадают два последовательно испущенных гамма-кванта. За статистическое испытание принимается испускание источником пары частиц и вычисление случайной величины $q(S_1, S_2)$, которая равна единице, когда супертреки пересекают оба детектора, и равна нулю в противном случае.

В задаче без преграды можно получить теоретическую оценку среднего количества совпадений. Вероятность попадания гамма-кванта в детектор равна

$$P = \frac{S}{4\pi L^2},$$

где S — площадь детектора, L — расстояние до источника. Вероятность того, что первая частица попадёт в первый детектор, а вторая — во второй, равна P^2. Если N — количество пар супертреков S_1 и S_2, то количество совпадений равно $2P^2N$ (коэффициент 2 появился из-за того, что номера супертреков можно переставлять). Математическое ожидание величины Q равно $MQ = 2 \cdot P^2$. Подставляя значения $S = 200$ см^2, $L = 120$ см, получаем $P = 1,1 \cdot 10^{-3}$, $MQ = 2,42 \cdot 10^{-6}$.

При аналоговом моделировании источник испускает частицы равномерно в телесный угол 4π, при этом количество попаданий в оба детектора очень мало. При весовом моделировании используется метод DXTRAN, в котором детекторы окружаются DXTRAN-сферой радиусом 40 см. При испускании частицы она сразу разделяется на две частицы — обычную частицу и DXTRAN-частицу. DXTRAN-частица переносится на DXTRAN-сферу и продолжает своё движение уже с неё. Обычная частица никогда внутрь DXTRAN-сферы не попадает. При каждом столкновении обычной частицы внутри преграды тоже создаётся и переносится на сферу DXTRAN-частица.

На рис. 25 и 26 представлены полученные зависимости среднего количества совпадений на одну пару испущенных частиц от количества испущенных источником пар частиц для задач без преграды и с преградой соответственно.

В задаче без преграды (рис. 25) горизонтальная линия показывает теоретическое значение среднего количества совпадений, к которому приближаются оценки, полученные весовым и аналоговым способом. При $N = 10^8$ пар частиц для аналогового способа среднее количество зарегистрированных совпадений равно $\langle Q \rangle = 2,58 \cdot 10^{-6}$, статистическая погрешность составляет $S = 1,6 \cdot 10^{-7}$. Для весового способа при $N = 10^7$ пар частиц получены значения $\langle Q \rangle = 2,42 \cdot 10^{-6}$, $S = 5,7 \cdot 10^{-9}$.

Для задачи с преградой (рис. 26) при $N = 5 \cdot 10^8$ для аналогового способа среднее количество зарегистрированных совпадений равно $\langle Q \rangle = 2,04 \cdot 10^{-6}$, статистическая погрешность $S = 6,4 \cdot 10^{-8}$. Для весового способа при $N = 5 \cdot 10^6$ среднее равно $\langle Q \rangle = 2,08 \cdot 10^{-6}$, статистическая погрешность равна $S = 3,2 \cdot 10^{-8}$.

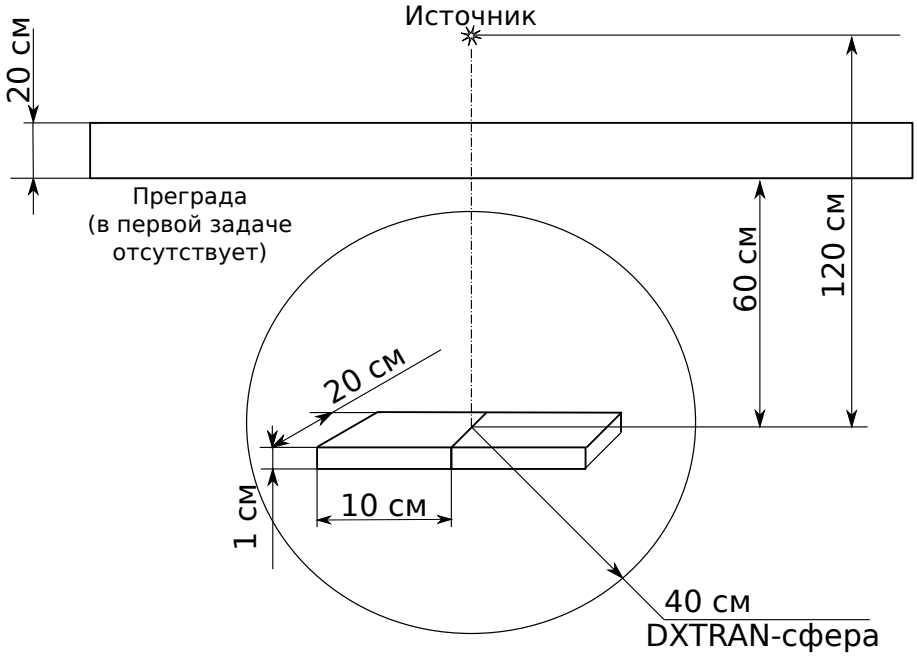

Рис. 24. Геометрическая конфигурация задачи на вычисление количества двойных совпадений.

4.4 Моделирование интроскопа, работающего по методу меченых нейтронов

4.4.1 Задача с преградой

Разработанные методы позволяют вычислять оставленную в детекторе энергию с использованием весового моделирования траекторий частиц. Если функционал $q(S_1, S_2, \ldots, S_k)$ является аддитивным по траекториям, то полученные результаты можно сравнивать с результатами аналогового моделирования, полученными только за счёт стандартных средств программы MCNP (счётчик F8). Эти проверки неоднократно проводились в работе автора [29] и показали полное соответствие друг другу результатов моделирования, полученных обоими способами. В случае аналогового моделирования траекторий используемый алгоритм вычисления потерянной энергии идентичен алгоритму, используемому программой MCNP, то есть оба алгоритма вычисляют потерянную энергию по алгебраически тождественным формулам.

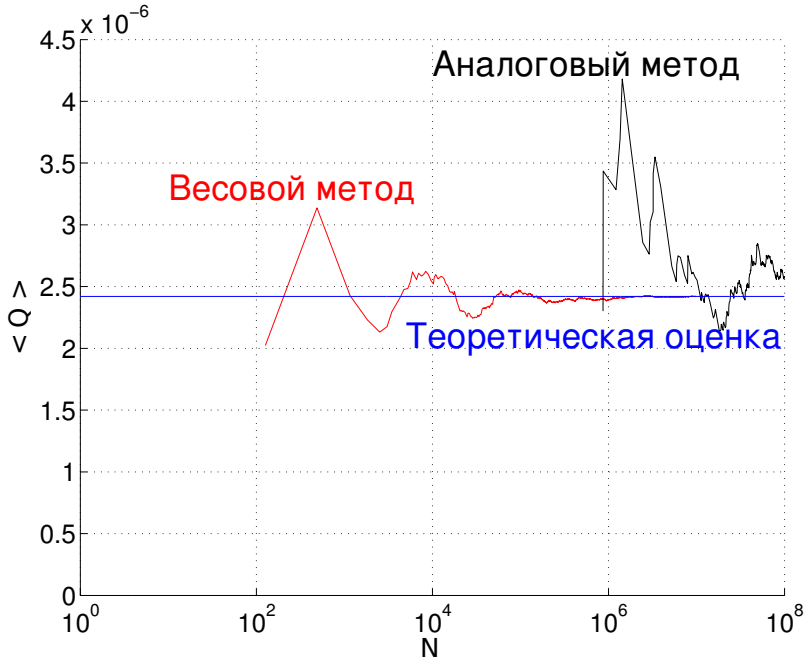

Рис. 25. Среднее количество совпадений на одну пару испущенных источником частиц в зависимости от количества испущенных пар частиц. Показаны зависимости для аналогового и весового моделирования. Горизонтальная линия — теоретическое значение.

Для более полной проверки разработанных методов проведено моделирование интроскопа, работающего по методу меченых нейтронов, принцип действия таких приборов описан, например, в [42]. На рис. 27 приведена геометрическая конфигурация решаемой задачи. Детектор из CsI плотностью $2,7\,\text{г/см}^3$ в форме прямоугольного параллелепипеда имеет размеры $10 \times 10 \times 10$ см. Образец, состоящий из ^{12}C с плотностью $2,0\,\text{г/см}^3$, имеет размеры $20 \times 20 \times 20$ см. Между детектором и образцом расположен алюминиевый экран толщиной 5 мм. Источник испускает нейтроны с энергией 14 МэВ в сторону образца равномерно внутрь конуса с углом при вершине примерно $50°$. Источник расположен по ту же сторону от экрана, что и детектор. Детектор улавливает вторичные гамма-кванты, вызванные попаданием нейтронов на образец.

Весовое моделирование в этой задаче включает в себя метод DXTRAN и расщепление частиц. Детектор вместе со вспомогательными поверхностями α и γ (п. 3.2.5 главы 3) заключён в DXTRAN-сферу. При

Рис. 26. Среднее количество совпадений на одну пару испущенных источником частиц в зависимости от количества испущенных пар частиц для задачи с преградой. Показаны зависимости для аналогового и весового моделирования. Горизонтальная линия — теоретическое значение.

пересечении поверхности γ частица расщепляется на 10 новых частиц. DXTRAN-сфера не охватывает источник.

В п. 3.2.2 главы 1 приведены условия, при выполнении которых удаётся восстановить необходимую информацию о супертреках. Из этих условий в рассматриваемой задаче нарушается требование того, что частица должна побывать в детекторе не более одного раза. По этой причине порядка одного процента смоделированных супетреков пришлось отбросить (если супертрек $S_{i,j}$ пересекает детектор дважды, то отбрасываются все супертреки с тем же самым индексом i). Сколько раз частица попадает в чувствительную область детектора удаётся отследить программными средствами во время обработки файла промежуточных данных. Вероятность попадания хотя бы одной вторичной частицы в детектор не превышает $0,03\%$ (из $2 \cdot 10^8$ траекторий, смоделированных аналоговым методом, в детектор попало 54605 частиц), следовательно,

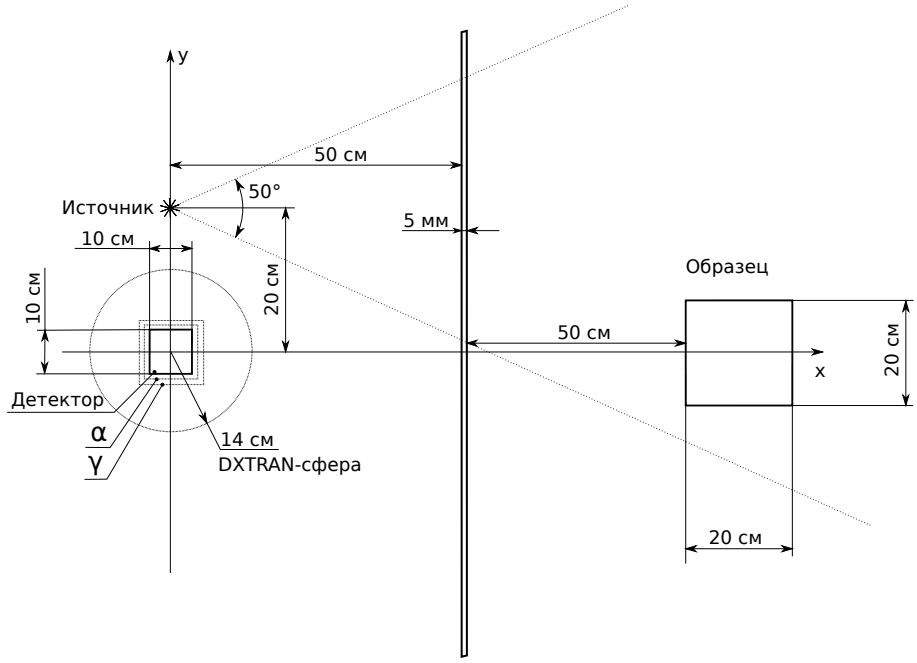

Рис. 27. Геометрическая конфигурация задачи на вычисление спектра скрытого вещества методом меченых нейтронов.

условие, ограничивающее вероятность попадания частиц в детектор, тоже выполняется ($P << 1$, см. п. 3.2.1 главы 3).

Мощность источника составляет 10^8 с$^{-1}$. Время, в течение которого схема совпадений ждёт второго события, выбрано равным $\tau_{per} = 200$ нс. Время интегрирования сигнала ФЭУ равно $\tau_{int} = 200$ нс. Мёртвое время детектора τ_{dead} и мёртвое время схемы совпадений τ_{par} равны нулю. Для вычисления среднего значения случайной величины Q при переборе комбинаций супертреков использовалась формула (2.39).

В рассматриваемой модели отбор событий по времени настроен так, чтобы учитывались только рассеянные в объёме образца гамма-кванты. На рис. 28 представлена зависимость относительного количества отчётов в канале спектрометра от номера канала. Для удобства по оси абсцисс вместо номеров каналов отложена соответствующая им энергия. На полученном спектре хорошо видны три линии углерода.

На рис. 29 представлена зависимость отношения количества отчётов в выбранном канале спектрометра, соответствующего энергии $4,44$ МэВ, к количеству испущенных источником частиц от самого количества

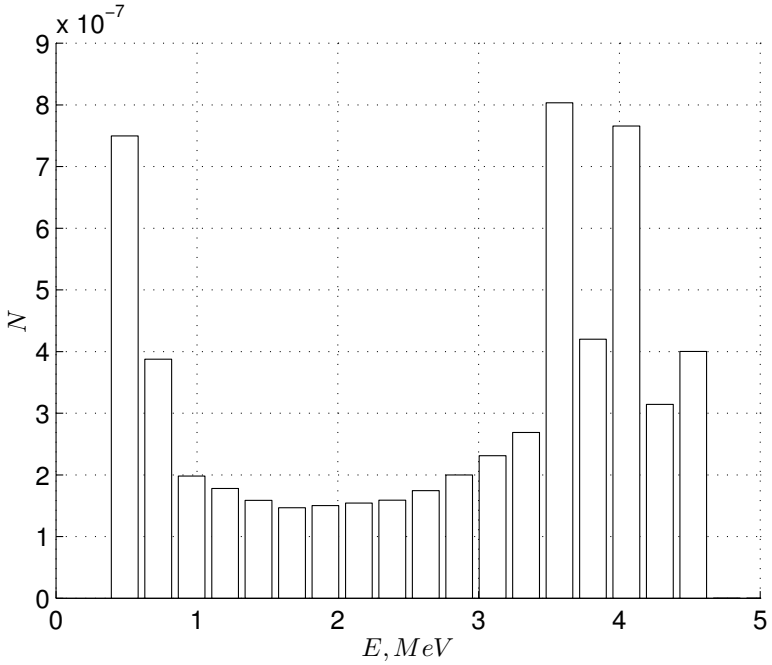

Рис. 28. Расчётный спектр экранированного образца из углерода.

частиц. Для аналогового метода при количестве частиц $N = 2 \cdot 10^8$ среднее значение равно $\langle Q \rangle = 7,60 \cdot 10^{-7}$, статистическая погрешность $6,2 \cdot 10^{-8}$. Для весового метода при количестве частиц $N = 2,5 \cdot 10^6$ среднее значение равно $\langle Q \rangle = 7,66 \cdot 10^{-7}$, статистическая погрешность $4,3 \cdot 10^{-9}$.

4.4.2 Задача без преграды и сравнение с экспериментом

При помощи предложенной модели интроскопа был получен рассчётный спектр углерода и сравнён с экспериментальным. Геометрическая конфигурация задачи показана на рис. 30. Образец в форме цилиндра состоит из углерода плотностью $2,3$ г/см^3. Цилиндрический сцинтилляционный детектор на основе BGO расположен под углом 45° с той же стороны от образца, что и источник нейтронов. Экспериментальные данные показывают, что энергетическое разрешение спектрометра на основе BGO составляет $7,5\%$ для энергии $1,33$ МэВ и изменяется по

Рис. 29. Зависимость вычисленного среднего количества отчётов в выбранном канале спектрометра от количества статистических испытаний при весовом и аналоговом моделировании.

закону

$$\Delta E \propto \frac{1}{\sqrt{E}}. \tag{4.3}$$

Полученный расчётный спектр был размыт при помощи свёртки с распределением Гаусса, полуширина которого на полувысоте задаётся приведённым выше законом. На рис. 31 представлены расчётный и экспериментальный спектры. Дрожание экспериментальной зависимости обусловлено статистической погрешностью, вызванной недостаточным количеством отчёто в каналах спектрометра. Отчётливо видно, что отношения высот пиков углерода для обоих спектров одинаковы.

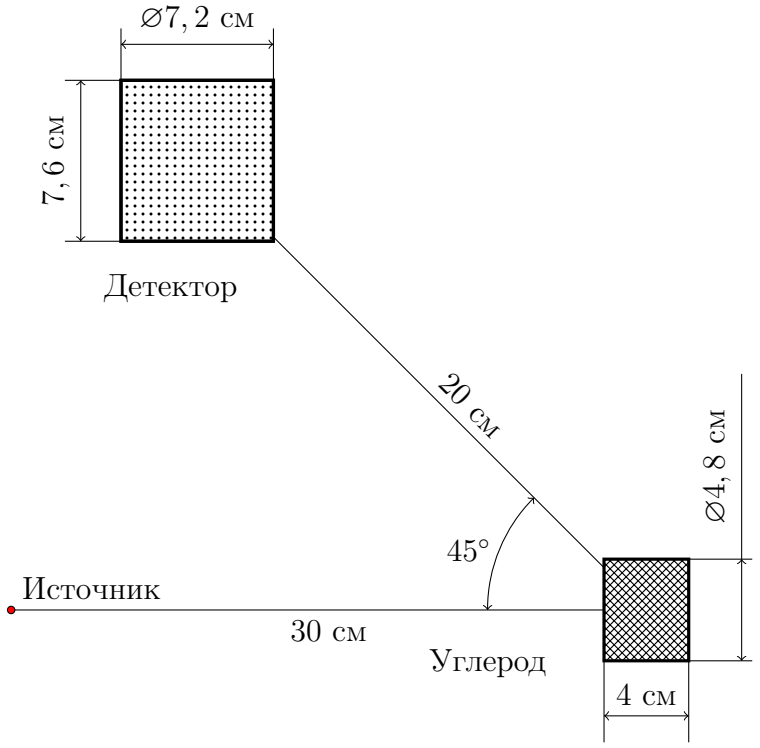

Рис. 30. Геометрическая конфигурация задачи на вычисление спектра.

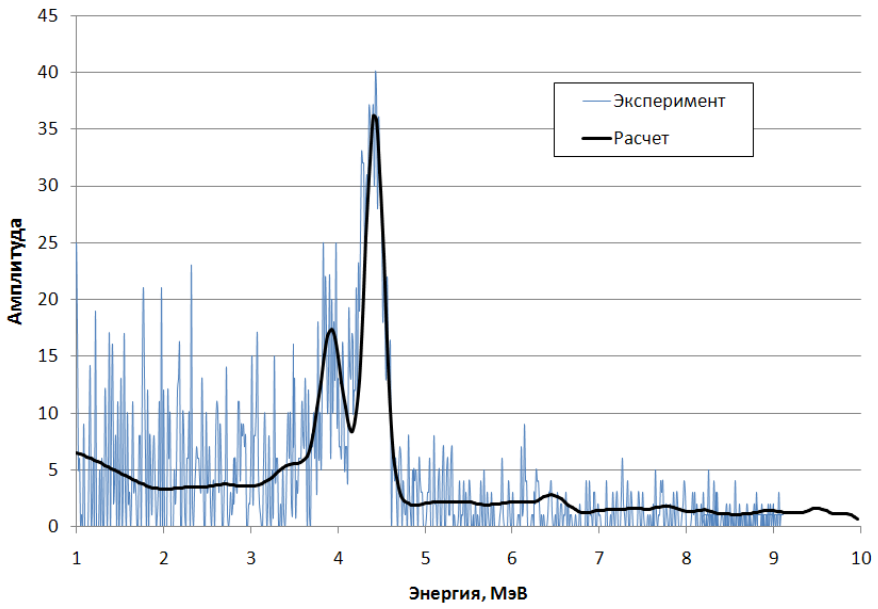

Рис. 31. Сравнение расчётного (толстая плавная линия) и экспериментального (тонкая ломаная линия) спектров углерода, полученных по методу меченых нейтронов.

4.5 Комптоновский гамма-спектрометр

4.5.1 Конфигурация моделируемого прибора

На рис. 32 приведена геометрическая конфигурация прибора, работающего по схеме двойных рассеяний, и предназначенного для определения направления на локализованный источник гамма-квантов.

Детекторы первого слоя состоят из полиэстера с плотностью $1,06\,\text{г/см}^3$, детекторы второго слоя состоят из CsI с плотностью $4,51\,\text{г/см}^3$. Детекторы первого слоя находятся в тонкой алюминиевой оболочке (не показана на рисунке). Источник излучает моноэнергетические гамма-кванты с энергией $E = 1$ МэВ. Мощность источника составляет $5 \cdot 10^6\ \text{с}^{-1}$. Время, в течение которого схема совпадений ждёт второго события, выбрано равным $\tau_{per} = 2000$ нс. Время интегрирования сигнала ФЭУ равно $\tau_{int} = 200$ нс. Мёртвое время детектора τ_{dead} и мёртвое время схемы совпадений τ_{par} равны нулю. Расстояние H между слоями равно 10 см.

При весовом моделировании детектор окружается двумя поверхностями α и γ, как это описано в п. 3.2.5 главы 3. При пересечении поверхности γ частица расщеплялась на 10 новых частиц. Для вычисления среднего значения случайной величины Q использовалась формула (2.39).

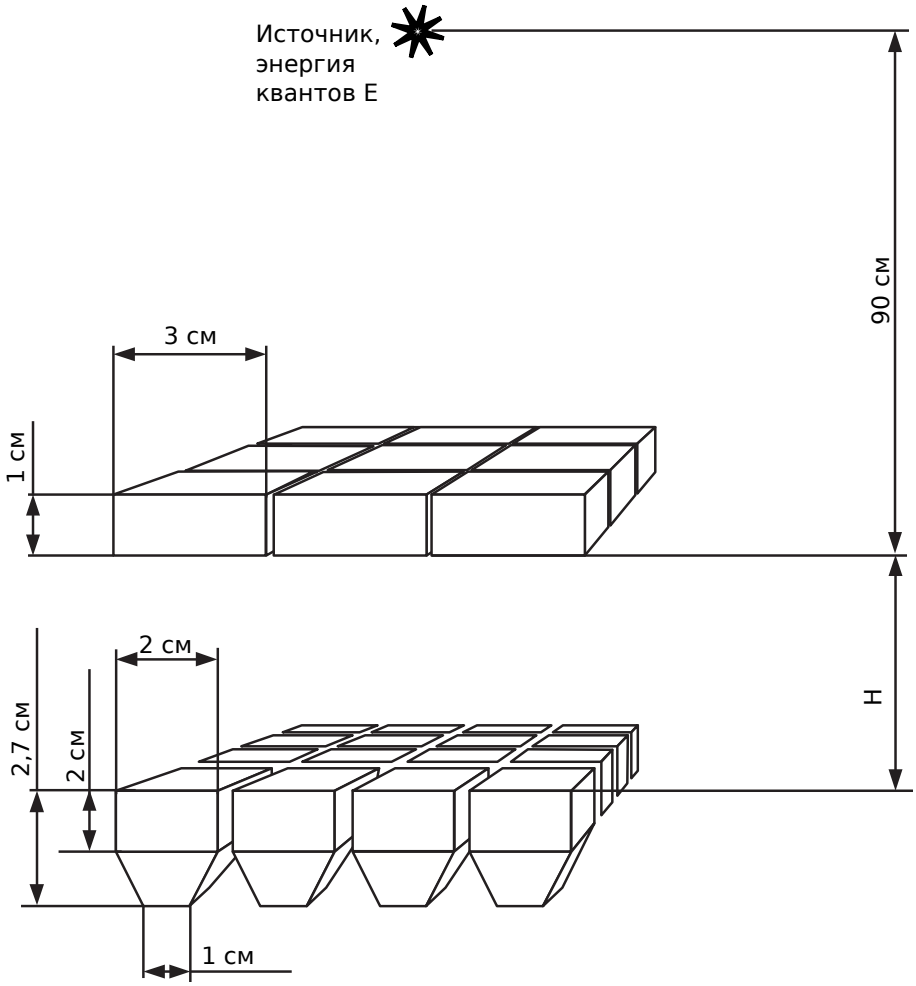

Рис. 32. Геометрическая конфигурация моделируемого комптоновского гамма-спектрометра

Зависимость количества зарегистрированных совпадений из расчёта на одну испущенную источником частицу от количества испущенных частиц представлена на рис. 33. Три графика соответствуют весовому моделированию, три — аналоговому. Весовое моделирование заканчивалось при количестве испущенных источником частиц 10^8, аналоговое — при $2 \cdot 10^9$.

Для оценки погрешности вычисления были проведены по 10 раз для весового и аналогового моделирования, в обоих случаях количество частиц, испущенных источником, равнялось 10^8. Для аналогового моделирования $\langle Q \rangle = 8,6 \cdot 10^{-7}$, статистическая погрешность равна $S = 5 \cdot 10^{-8}$. Для весового моделирования $\langle Q \rangle = 8,3 \cdot 10^{-7}$, статистическая

погрешность равна $S = 3 \cdot 10^{-8}$. Столь незначительное улучшение сходимости в случае применения весового метода расщепления объясняется тем, что при его использовании не происходит увеличения количества частиц, летящих в сторону детектора. Роль метода расщепления в рассматриваемой задаче заключается лишь в усреднении вклада в показания детектора частиц, достигающих детектора.

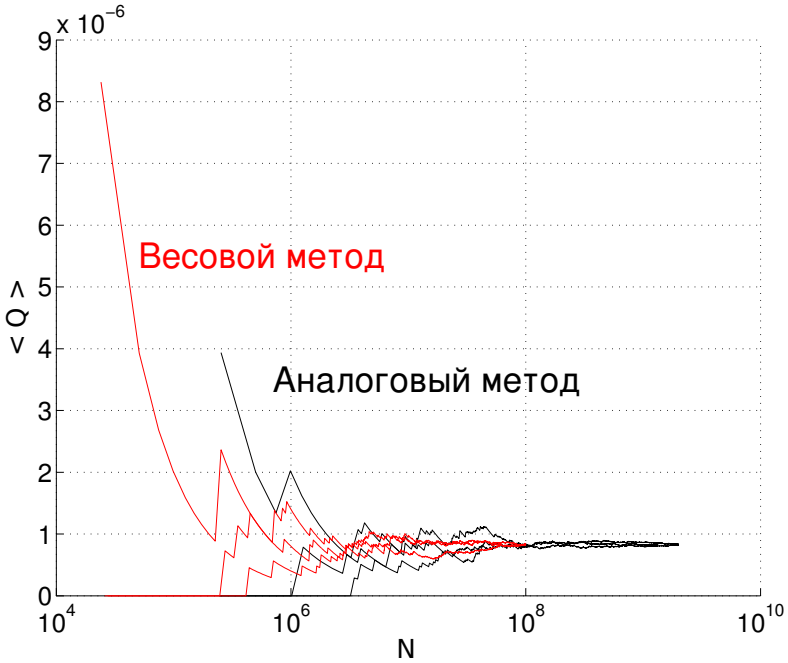

Рис. 33. Среднее количество зарегистрированных совпадений на одну испущенную источником частицу в зависимости от количества испущенных частиц (по три графика для весового моделирования и аналогового).

4.5.2 Оптимизация геометрической конфигурации комптоновского гамма-спектрометра

Предложенный алгоритм использовался для оптимизации геометрической конфигурации рассматриваемого прибора. Переменными параметрами являются расстояние H между слоями и энергия E гамма-квантов, испущенных источником. Расстояние H варьировалось от $0,1$ см до 20 см, энергия E от 250 кэВ до 2 МэВ.

Моделирование велось на вычислительном кластере при помощи аналоговых методов. Время, затрачиваемое на расчёт при фиксированных значениях энергии E и расстояния H, составляет 2—3 часа. Для некоторых пар значений E и H моделирование повторялось на бытовом компьютере с использованием весового метода расщепления. Данные, полученные весовым и аналоговым методами, соответствуют друг другу.

Расчётная зависимость величины η от расстояния H и энергии E показана на графике на рис. 34. На рис. 35 показано сечение этого графика плоскостью $H = 7$ см, а на рис. 36 – сечение плоскостью $E = 1.5$ МэВ. Из рис. 34 видно, что относительное количество истинных совпадений падает с ростом энергии E и с ростом расстояния H. Для того, чтобы объяснить причину этого, на рис. 35 и рис. 36 пунктирной линией показано относительное количество ложных совпадений, соответствующих одиночному эффекту Комптона в первом слое и частичному поглощению во втором (не выполнено только 5-ое условие в п. 1.7.3). Ложные совпадения других типов имеют суммарный вклад в общее количество совпадений меньше 15%. Таким образом, частичное поглощение во втором слое является главным фактором, влияющим на уменьшение коэффициента η. Одним из способов добиться полного поглощения гамма-квантов во втором слое является увеличение его толщины.

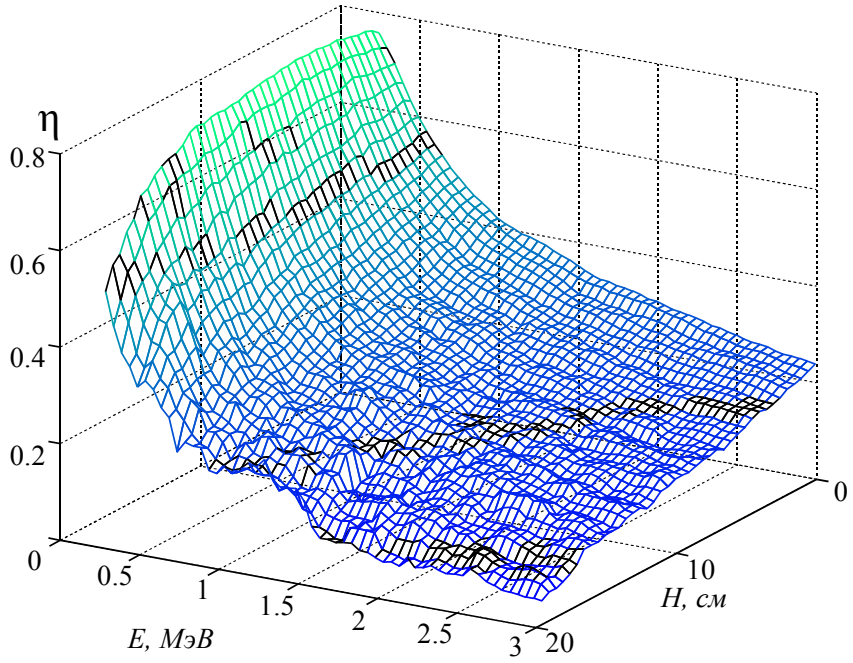

Рис. 34. Зависимость коэффициента η от энергии E и расстояния между слоями H.

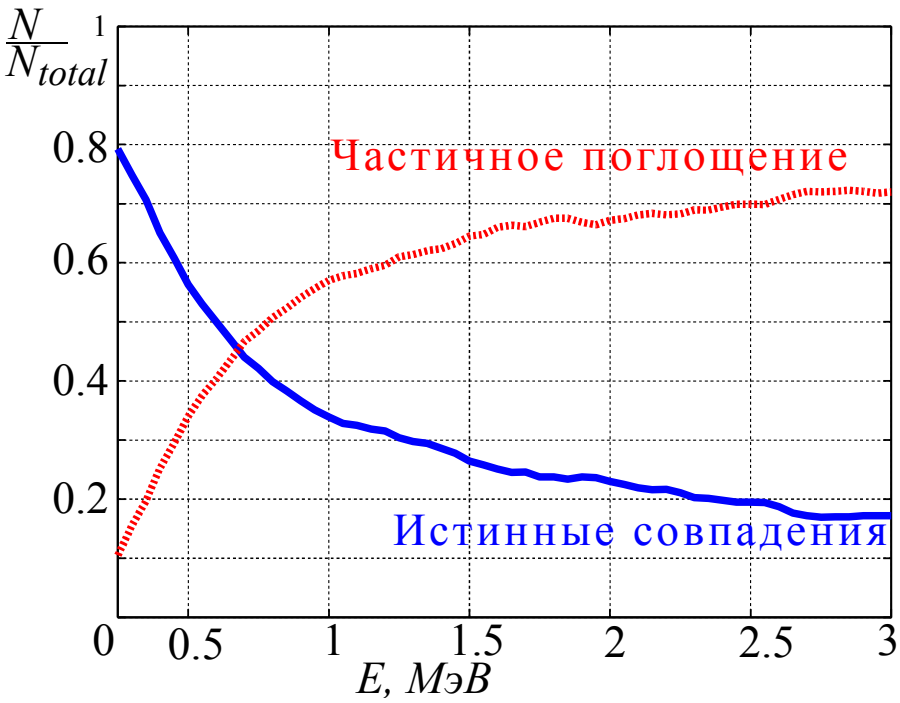

Рис. 35. Зависимость от энергии E относительного количества истинных совпадений и ложных совпадений, соответствующих частичному поглощению во втором слое, $H = 7$ см.

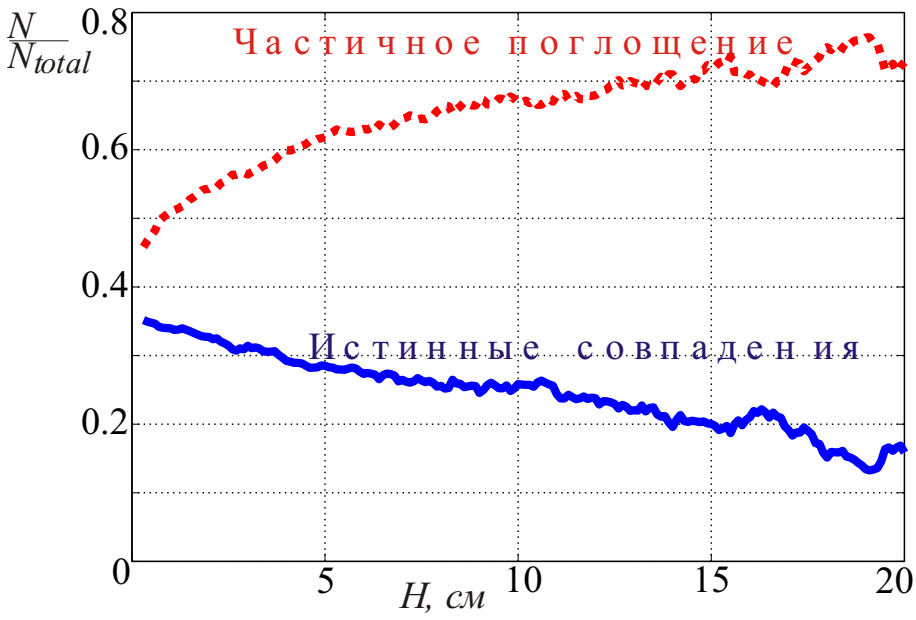

Рис. 36. Зависимость от расстояния H относительного количества истинных и ложных совпадений, соответствующих частичному поглощению во втором слое, $E = 1,5$ МэВ.

Физический смысл представленных результатов состоит в следующем. При увеличении энергии исходных гамма-квантов увеличивается средняя длина их пробега. Это приводит к увеличению вероятности выхода квантов из второго слоя (уменьшению вероятности поглощения во втором слое). При увеличении расстояния H между слоями совпадения могут формировать только те кванты, которые рассеялись на меньший угол при комптоновском взаимодействии в первом слое. Так как энергия рассеянного фотона монотонно убывает с ростом угла рассеяния, при увеличении расстояния H во второй слой будут попадать кванты в среднем с большей энергией. Это опять же приводит к увеличению вероятности выхода квантов из второго слоя.

Полное количество зарегистрированных совпадений N_{total} убывает как с ростом расстояния H, так и с ростом энергии E (уменьшается скорость счета прибора). Следовательно, наибольшее значение коэффициента η и скорости счета прибора достигается в левом конце рассматриваемого интервала энергий и при малых значениях расстояния H. При

выборе значений этих параметров надо учитывать их влияние на другие характеристики прибора, такие как поле зрения и угловое разрешение.

Представленные в этом пункте результаты изложены в работе автора [88].

4.6 Результаты

Тестирование предложенного алгоритма выполнено на нескольких задачах. Во всех случаях вычисляемые весовым и аналоговым способами средние значения совпадали с учётом статистической погрешности. При использовании весовых методов среднее значение статистической погрешности достигается при меньшем числе испытаний. В задачах, в которых известно теоретическое значение среднего, результаты численного моделирования находятся в полном соответствии с теоретической оценкой.

В последней части главы приведён пример использования разработанных весовых методов для оптимизации геометрической конфигурации комптоновского гамма-спектрометра. Полученные результаты имеют наглядную физическую трактовку.

Расчётный спектр углерода, полученный при помощи модели интроскопа, работающей по методу меченых нейтронов, совпадает с экспериментальным. В приложении Д приведены расчётные спектры углерода, азота и кислорода для различных геометрических конфигураций задачи.

Общие правила применения весовых методов не отличаются от случая вычисления среднего значения аддитивных функционалов. Их можно сформулировать следующим образом: необходимо как можно больше частиц рассеивать в сторону детектора (используются методы разыгрывания со смещенной плотностью вероятности и DXTRAN), при прохождении частицей критических областей применять метод расщепления, а при удалении частицы от интересуемой области применять метод русской рулетки.

Заключение

В настоящей работе математически строго обоснована и обобщена на случай неаддитивных по траекториям функционалов концепция супертреков, предложенная в работах [37, 38]. В ходе работы:

1. Модели сцинтилляционного детектора и комптоновского гамма-спектрометра расширены возможностью учёта типа реакций, что позволяет производить отдельный подсчёт истинных и ложных совпадений.

2. Разработана модель интроскопа, работающего по методу меченых нейтронов.

3. Предложена весовая оценка среднего значения неаддитивного по траекториям функционала, обобщающая концепцию супертреков. Обоснование несмещённости оценки ведётся через усреднение по всем ветвящимся траекториям. К рассмотренным весовым методам относятся метод разыгрывания со смещённой плотностью вероятности, расщепление, русская рулетка, DXTRAN и комбинация перечисленных весовых методов.

4. Разработан комплекс программ, вычисляющий среднее значение неаддитивных функционалов предложенными методами.

5. Исследована зависимость относительного количества истинных совпадений от геометрической конфигурации комптоновского гамма-спектрометра.

6. Рассчитаны базовые спектры углерода, азота и кислорода с использованием модели интроскопа, работающего по методу меченых нейтронов.

Применённая при доказательстве несмещённости оценки методика позволяет перенести на случай использования концепции супертреков

не только рассмотренные весовые методы, но и большинство других, например, поглощение уменьшением веса (implicit capture, [66]) и форсирование столкновений (forced collision, [66]). Численные расчёты показали, что весовые методы позволяют многократно ускорить расчёты при правильном их применении.

Список литературы

[1] *Борисов, Н. М.* Применение сопряжённых методов Монте-Карло в задачах переноса фотонов с учётом вторичного излучения. Диссертация на соискание учёной степени кандидата физико–математических наук: Кандидатская диссертация / МИФИ. — 1999.

[2] *Дынкин, Е. Б.* Основания теории марковских процессов / Е. Б. Дынкин. — М.: Физматгиз, 1959.

[3] *Ермаков, С. М.* Курс статистического моделирования / С. М. Ермаков, Г. А. Михайлов. — М.: Наука, 1982.

[4] *Ермаков, С. М.* Случайные процессы для решения классических уравнений математической физики / С. М. Ермаков, В. В. Некруткин, А. С. Сипин. — М.: Наука, Главная редакция физико-математической литературы, 1984.

[5] *Ермаков, С. М.* Метод Монте-Карло для итерации нелинейных операторов / С. М. Ермаков // *ДАН СССР.* — 1972. — Т. 204, №2. — С. 271–274.

[6] *Ермаков, С. М.* Об аналоге схемы Неймана-Улама в нелинейном случае / С. М. Ермаков // *Журнал вычислительной математики и математической физики.* — 1973. — Т. 13, №3. — С. 564–573.

[7] *Ермаков, С. М.* Метод Монте-Карло и смежные вопросы / С. М. Ермаков. — М.: Наука. Главная редакция физико-математической литературы, 1975.

[8] *Ермаков, С. М.* Метод Монте-Карло в вычислительной математике. Вводный курс / С. М. Ермаков. — СПб.: Невский диалект; М: Бином. Лаборатория знаний, 2009.

[9] Измерение выхода высокоэнергетичных γ-квантов, сопровождающих спонтанное деление ядер ^{252}Cf / Н. В. Еремин, С. С. Маркочев,

А. А. Пасхалов, Е. А. Цветков // *Известия РАН. Серия физическая.* — 2011. — Т. 75. — С. 580–582.

[10] *Колмогоров, А. Н.* Элементы теории функций и функционального анализа / А. Н. Колмогоров, С. В. Фомин. — М.: Физматлит, 2006.

[11] *Кольчужкин, А. М.* Введение в теорию прохождения частиц через вещество / А. М. Кольчужкин, В. В. Учайкин. — М.: Атомиздат, 1978.

[12] *Лаппа, А. В.* Новые флуктуационные весовые методы Монте-Карло и их применение к каскадным процессам переноса частиц сверхвысоких энергий / А. В. Лаппа, Д. С. Бурмистров // *Математическое моделирование.* — 1995. — Т. 7, № 5. — С. 100–114.

[13] *Лаппа, А. В.* Весовая оценка метода Монте-Карло для расчёта высших моментов аддитивных характеристик переноса частиц с размножением / А. В. Лаппа // *Журнал вычислительной математики и математической физики.* — 1990. — Т. 30. — С. 122–134.

[14] *Лаппа, А. В.* Вероятностные модели для двухшаговых алгоритмов расчёта флуктуационных характеристик переноса излучения. / А. В. Лаппа // Методы Монте-Карло в вычислительной математике и математической физике. Часть 2. — Новосибирск, 1991. — С. 73–76.

[15] Метод Монте-Карло в атмосферной оптике / Г. И. Марчук, Г. А. Михайлов, М. А. Назарлиев и др.; Под ред. Г. И. Марчука. — Новосибирск: Наука, Сибирское отделение, 1976.

[16] *Михайлов, Г. А.* Оптимизация весовых методов Монте-Карло / Г. А. Михайлов. — М.: Наука. Главная редакция физико–математической литературы, 1987.

[17] Нейтронно-радиационная система для обнаружения взрывчатых веществ в грузовых контейнерах / А. А. Ананьев, С. Г. Беличенко, Е. П. Боголюбов и др. // Научная сессия МИФИ-2008. — 2008. — С. 165–166.

[18] *Некруткин, В. В.* Вычисление интегралов по пространству деревьев методом Монте-Карло / В. В. Некруткин // *Методы Монте-Карло в вычислительной математике и математической физике (Сб.).* — 1974. — С. 94–102.

[19] *Некруткин, В. В.* Прямая и сопряженная схема Неймана-Улама для решения нелинейных интегральных уравнений / В. В. Некруткин // *Журнал вычислительной математики и математической физики.* — 1974. — Т. 14, №6. — С. 1409–1415.

[20] *Петров, Э. Е.* О применении билинейных функционалов для расчёта эффектов возмущения среды в задачах переноса излучения / Э. Е. Петров // *Препринт ФЭИ.* — 1989. — Т. 2026.

[21] Сборник материалов Международной научно-технической конференции «Портативные генераторы нейтронов и технологии на их основе» / ВНИИА им. Н. Л. Духова. — 2004. — 18—22 октября.

[22] Сборник материалов межотраслевой научно-технической конференции «Портативные генераторы нейтронов и технологии на их основе» / ВНИИА им. Н. Л. Духова. — 2003. — 26—30 мая.

[23] *Севастьянов, Б. А.* Ветвящиеся процессы / Б. А. Севастьянов; Под ред. В. П. Чистяков. — М.: Наука, Главная редакция физико-математической литературы, 1971.

[24] *Соболь, И. М.* Численные методы Монте-Карло / И. М. Соболь. — М.: Наука. Главная редакция физико–математической литературы, 1973.

[25] *Учайкин, В. В.* Стохастическая ценность / В. В. Учайкин, А. А. Лагутин. — М.: Энергоатомиздат, 1993.

[26] *Федорин, М. А.* Метод радиального зондирования и расчленения среды по составу при каротаже скважин на основе время пролётной спектрометрии гамма-излучения неупругого рассеяния нейтронов /

М. А. Федорин, Б. Г. Титов // *Геология и геофизика.* — 2010. — Т. 51 №12. — С. 1664–1674.

[27] *Халмош, П.* Теория меры / П. Халмош; Под ред. С. В. Фомин. — М.: Издательство иностранной литературы, 1953.

[28] *Цветков, Е. А.* Обоснование DXTRAN-модификации метода Монте-Карло на основе соотношений взаимности для различающихся систем / Е. А. Цветков, В. В. Шаховский // *Труды МФТИ.* — 2009. — Т. 1, №2. — С. 207–215.

[29] *Цветков, Е. А.* — Разработка методов математического моделирования регистрации ядерных излучений в схемах двойных совпадений. — Магистерская диссертация, Московский физико-технический институт (государственный университет), 2008.

[30] *Цветков, Е. А.* Эмпирическое исследование статистических свойств некоторых генераторов псевдослучайных чисел / Е. А. Цветков // *Математическое моделирование.* — 2011. — Т. 23. — С. 81–94.

[31] *Шаховский, В. В.* Соотношение взаимности для различающихся систем и эквивалентные краевые условия в методах сопряжения задач переноса излучений / В. В. Шаховский // Тезисы докладов на VII Российской научной конференции по защите от ионизирующих излучений ядерно-технических установок / ГНЦ РФ ФЭИ. — 1998. — С. 26–28.

[32] *Шаховский, В. В.* Формулы метода сопряжений для задач переноса излучений с краевыми условиями общего вида / В. В. Шаховский // Тезисы докладов на VIII Российской научной конференции «Радиационная защита и радиационная безопасность в ядерных технологиях» / ГНЦ РФ ФЭИ. — 2002.

[33] Эффективность подавления фона при наносекундном нейтронном анализе / М. Д. Каретников, К. Н. Козлов, Г. В. Яковлев и др. //

Сборник материалов межотраслевой научно-технической конференции «Портативные генераторы нейтронов и технологии на их основе» / ВНИИА им. Н. Л. Духова. — 2004. — 18—22 октября.

[34] *Barz, H.-U.* Monte-Carlo programm TRAMO – Möglichkeiten und Anleitung zur Nutzung / H.-U. Barz, J. Konheiser. — FZR Bericht-245,Rossendorf, 1998.

[35] Benefit of time-of-flight in PET: experimental and clinical results / J. S. Karp, S. Surti, M. Daube-Witherspoon, G. Muehllehner // *The Journal of Nuclear Medecine.* — 2008. — Vol. 49. — Pp. 462–470.

[36] *Binkley, D. M.* Optimization of scintillation-detector timing systems using Monte Carlo analysis / D. M. Binkley // *IEEE Transactions on Nuclear Science.* — 1994. — Vol. 41. — Pp. 386–393.

[37] *Booth, T.* Monte Carlo variance reduction approaches for non-Boltzmann tallies: Tech. Rep. LA–12433 / T. Booth: Los Alamos National Lab., NM (United States), 1992. — Dec.

[38] *Booth, T.* A Monte Carlo variance reduction approach for non-Boltzmann tallies / T. Booth // *Nuclear Science and Engineering.* — 1994. — Vol. 116. — Pp. 113–124.

[39] *Booth, T.* A supertrack importance generator for pulse height tallies: Tech. Rep. LA-UR–94-2488; CONF-941102–9 / T. Booth: Los Alamos National Lab., NM (United States), 1994.

[40] *Booth, T.* Pulse height tally variance reduction in MCNP 5: Tech. Rep. LA-13995 / T. Booth: Los Alamos National Laboratory, 2002. — June.

[41] *Borisov, N. M.* Adjoint Monte Carlo calculations of pulse-height-spectrum / N. M. Borisov, M. P. Panin // *Monte Carlo Methods and Applications.* — 1998. — Vol. 4, № 3. — Pp. 273–284.

[42] *Buffler, A.* Contraband detection with fast neutrons / A. Buffler // *Radiation Physics and Chemistry.* — 2004. — Vol. 71. — Pp. 853–861.

[43] *Choong, W.-S.* The timing resolution of scintillation-detector systems: Monte Carlo analysis / W.-S. Choong // *Physics in Medicine and Biology.* — 2009. — Vol. 54, no. 21. — P. 6495. `http://stacks.iop.org/0031-9155/54/i=21/a=004`.

[44] *Conti, M.* Effect of randoms on signal-to-noise ration in TOF PET / M. Conti // *IEEE Transactions on Nuclear Science.* — 2006. — Vol. 53. — Pp. 1188–1193.

[45] Development of Monte Carlo Code for coincidence prompt gamma neutron activation analysis / X. Han, R. Gardner, C. Mayo, W. Guo // The Monte Carlo Method: Versatility Unbounded In A Dynamic Computing World, Chattanooga, Tennessee, April 17–21, 2005, on CD-ROM, American Nuclear Society, LaGrange Park, IL (2005). — 2005.

[46] Development of the EURITRACK tagged neutron inspection system / B. Perot, C. Carasco, S. Bernard et al. // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B.* — 2007. — Vol. 261. — Pp. 295–298.

[47] *Estes, G.* Supertrack Monte Carlo variance reduction experience for non-Boltzmann tallies: Tech. rep. / G. Estes, T. Booth: Los Alamos National Laboratory, Los Alamos New Mexico 87545, 1995.

[48] Fast neutron interrogation systems for detection of hazardous materials / K. P. Hong, C. M. Sim, V. Em et al. // Proceedings of the International Symposium on Research Reactor and Neutron Science. — Daejeon, Korea: 2005. — April.

[49] *Ficaro, E.* KENO-NR: A Monte Carlo code simulating the ^{252}Cf-source-driven noise analysis experimental method for determining subcriticality: Ph.D. thesis / University of Michigan. — 1991.

[50] FLUKA: A multi-particle transport code: Tech. Rep. SLAC-R-773 / A. Ferrari, P. Sala, A. Fasso, J. Ranft: Stanford Linear Accelerator Center, Stanford University, Stanford, CA 94309, 2005.

[51] *Fredriksson, I.* Forced detection Monte Carlo algorithms for accelerated blood vessel image simulations / I. Fredriksson, M. Larsson, T. Stromberg // *Journal of Biophotonics.* — 2008. — Vol. 2. — Pp. 178–184.

[52] Front-end electronics and DAQ for the EURITRACK tagged neutron inspection system / M. Lunardon, C. Bottoso, D. Fabris et al. // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B.* — 2007. — Vol. 261. — Pp. 391–395.

[53] GEANT4 – a simulation toolkit / S. Agostinelli, J. Allison, K. Amako et al. // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment.* — 2003. — july. — Vol. 506, no. 3. — Pp. 250–303. `http://dx.doi.org/10.1016/S0168-9002(03)01368-8`.

[54] Geometry and surface treatment dependence of the light collection from LSO crystals / J. S. Huber, W. Moses, M. Andreaco et al. // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment.* — 1999. — Vol. 437. — Pp. 374–380.

[55] *Han, X.* CEARCPG: A Monte Carlo simulation code for normal and coincidence prompt gamma-ray neutron activation analysis (PGNAA) / X. Han, R. Gardner // *Transactions of the American Nuclear Society.* — 2006. — Vol. 95. — Pp. 521–522.

[56] *Han, X.* Development of Monte Carlo Code for coincidence prompt gamma neutron activation analysis: Ph.D. thesis / Graduate Faculty of North Carolina State University. — 2005.

[57] *Harris, T. E.* The theory of branching processes / T. E. Harris. — Die Grundlehren der Mathematischen Wissenschaften, Springer, Berlin, 1963.

[58] *Hendricks, J.* Pulse-height tallies with variance reduction / J. Hendricks, G. W. McKinney // Proceedings of Monte Carlo 2005, Chattanooga, Tennessee, USA, April 17-21. — 2005.

[59] *Hyman, L.* Time resolution of photomultiplier systems / L. Hyman // *Review of Scientific Instruments.* — 1965. — Vol. 36, no. 2. — Pp. 193–196. `http://link.aip.org/link/?RSI/36/193/1`.

[60] Identification of materials hidden inside a container by using the 14 MeV tagged neutron beam / D. Sudac, S. Pesente, G. Nebbia et al. // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B.* — 2007. — Vol. 261. — Pp. 321–325.

[61] Investigation of the high energy gamma-ray emission accompanying spontaneous fission of the ^{252}Cf nucleus / N. V. Eremin, A. A. Paskhalov, S. S. Markochev, E. A. Tsvetkov // Book of Abstracts 60 International Conference on Nuclear Physics «Nucleus 2010», Saint-Petersburg. — 2010. — P. 364.

[62] Investigation of time-of-flight benefit for fully 3-D PET / S. Surti, J. S. Karp, L. Popescu et al. // *IEEE Transactions on Medical Imaging.* — 2006. — Vol. 25. — Pp. 529–538.

[63] *Kim, N. Y.* Monte Carlo simulation study on medical imaging of a multiply stacked compton camera / N. Y. Kim, C. S. Lee // *Journal of Korean Physical Society.* — 2008. — Vol. 53, №2. — Pp. 1201–1204.

[64] *Knoll, G.* Radiation detection and measurement / G. Knoll. — 3 edition. — New York: Wiley, 2000.

[65] Large-volume $Si(Li)$ orthogonal-strip detectors for compton-effect-based instruments / D. Protic, E. L. Hull, T. Krings, K. Vetter // *IEEE Transactions on Nuclear Science.* — 2005. — Vol. 52. — Pp. 3181–3185.

[66] MCNP. A general Monte Carlo N-particle transport code. Version 4C: Manual LA-13709-M / Ed. by J. Briesmeister: Los Alamos National Lab., NM (United States), 2000. — April.

[67] MCNP(TM) version 5 / R. A. Forster, L. J. Cox, R. F. Barrett et al. // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms.* — 2004. — Vol. 213. — Pp. 82 – 86. — 5th Topical Meeting on Industrial Radiation and Radioisotope Measurement Applications. `http://www.sciencedirect.com/science/article/B6TJN-491YC85-7/2/5357e1dc9aaf2b7dc5017e0f8ea5decf`.

[68] Measuring high-energy *gamma*-ray emission accompanying the spontaneous fission of ^{252}Cf nuclei / N. V. Eremin, S. S. Markochev, A. A. Paskhalov, E. A. Tsvetkov // *Bulletin of the Russian Academy of Sciences. Physics.* — 2011. — Vol. 75. — Pp. 544–546.

[69] *Mori, T.* Development of the MVP Monte Carlo code at JAERI / T. Mori, K. Okumura, Y. Nagaya // *Transactions of the ANS.* — 2001. — Vol. 84. — Pp. 45–46.

[70] *Moses, W. W.* Time of flight in PET revisited / W. W. Moses // *IEEE Transactions on Nuclear Science.* — 2003. — Vol. 50. — Pp. 1325–1330.

[71] New experimental method of investigation the rare nuclear transformations accompanying atomic processes: bremsstrahlung emission in spontaneous fission of ^{252}Cf / N. V. Eremin, A. A. Paskhalov, S. S. Markochev et al. // *International Journal of Modern Physics E (IJMPE).* — 2010. — Vol. 19. — Pp. 1183–1188.

[72] Nonlinear response in the scintillation yield of $Lu_2SiO_5 : Ce^{3+}$ / P. Dorenbos, J. de Haas, C. van Eijk, J. Melcher, C.L and. Schweitzer // *IEEE Transactions on Nuclear Science.* — 1994. — Vol. 41. — Pp. 735–737.

[73] Optimal geometrical configuration of a double-scattering compton camera for maximum imaging resolution and sensitivity / H. Seo, S. H. Lee, C. H. Kim et al. // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment.* — 2008. — Vol. 591,

no. 1. — Pp. 80 – 83. — Radiation Imaging Detectors 2007 - Proceedings of the 9th International Workshop on Radiation Imaging Detectors. http://www.sciencedirect.com/science/article/B6TJM-4S3G3SC-8/2/b6b1ef8db52e4690c55a235687d9dfef.

[74] *Peterson, S. W.* Optimizing a three-stage Compton camera for measuring prompt gamma rays emitted during proton radiotherapy / S. W. Peterson, D. Robertson, J. Polf // *Physics in Medicine and Biology.* — 2010. — Vol. 55. — Pp. 6841–6856.

[75] *Post, R. F.* Statistical limitations on the resolving time of a scintillation counter / R. F. Post, L. I. Schiff // *Phys. Rev.* — 1950. — Dec. — Vol. 80, no. 6. — P. 1113.

[76] *Shao, Y.* A new timing model for calculating the intrinsic timing resolution of a scintillator detector / Y. Shao // *Physics in Medicine and Biology.* — 2007. — Vol. 52, no. 4. — P. 1103. http://stacks.iop.org/0031-9155/52/i=4/a=016.

[77] *Shuttleworth, E.* The pulse height distribution tally in MCBEND / E. Shuttleworth // Proceedings of International Conference on Radiation Schielding ICRS'9, Tsukuba, Japan, 17-22 October. — 1999.

[78] Signal to noise ratio in simulations of time-of-flight positron emission tomography / R. Harrison, A. Alessio, P. Kinahan, T. Lewellen // Nuclear Science Symposium Conference Record, 2004 IEEE. — 2004.

[79] Simulation of the BGO anti-coincidence shield for IBIS on INTEGRAL / G. de Cesare, L. Natalucci, J. Poulsen et al. // Exploring the gamma-ray universe. Proceedings of the Fourth INTEGRAL Workshop, 4-8 September 2000, Alicante, Spain. / Ed. by B. Battrick. — 2001.

[80] *Sood, A.* Verification of the pulse height tally in MCNP 5 / A. Sood, et al. // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B.* — 2004. — Vol. 213. — Pp. 167–171.

[81] *Spanoudaki, V.* Investigating the temporal resolution limits of scintillation detection from pixellated elements: comparison between experiment and simulation / V. Spanoudaki, C. Levin // *Phys. Med. Biol.* — 2011. — Vol. 56. — Pp. 735–756.

[82] *Szieberth, M.* Estimation of coincidence and correlation in non-analogous Monte Carlo particle transport / M. Szieberth, J. L. Kloosterman // PHYSOR 2010 – Advances in Reactor Physics to Power the Nuclear Renaissance, Pittsburgh, Pennsylvania, USA, May 9-14, 2010, on CD-ROM, American Nuclear Society, LaGrange Park, IL (2010). — 2010.

[83] *Szieberth, M.* New methods for the Monte Carlo simulation of neutron noise experiments / M. Szieberth, J. Kloosterman // Gatlinburg, Tennessee, April 6-11, 2003, on CD-ROM, American Nuclear Society, LaGrange Park, IL. — 2003.

[84] The launch of MCBEND 10 / P. Cowan, E. Shuttleworth, A. Bird, A. Cooper // Proc. 10th International Conference on Radiation Shielding (ICRS-10) and 13th Topical Meeting on Radiation Protection and Shielding (RPS-2004). — 2004.

[85] *Tickner, J.* PHOTON An optical Monte Carlo code for simulating scintillation detector responses / J. Tickner, G. Roach // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B.* — 2007. — Vol. 263. — Pp. 149–155.

[86] *Tomitani, T.* A maximum likelihood approach to timing in scintillation counters / T. Tomitani // Proc. of the IEEE Workshop on Time-on-Flight Tomography. — Vol. 1. — 1982. — Pp. 88–93.

[87] Towards design and optimization of scintillation-detector systems: a Monte-Carlo simulation framework / Y. Kong, G. Pausch, K. Romer et al. // Paper submitted for presentation at the IEEE Nuclear Science Symposium, Knoxville, Tennessee, October 30 – November 6, 2010. — 2010.

[88] *Tsvetkov, E. A.* Coincidence scheme performance estimator / E. A. Tsvetkov, V. Shahovsky // Abstracts of the 7th International Conference on Luminescence Detectors and Transformers of Ionizing Radiation. — 2009.

[89] *Valentine, T.* MCNP-DSP users manual: Tech. Rep. ORNL/TM-13334 / T. Valentine: Oak Ridge Nat. Lab., 1997.

[90] *Waters, L. S.* Summary of the 2006 hadronic shower simulation workshop / L. S. Waters // *AIP Conference Proceedings.* — 2007. — Vol. 896, no. 1. — Pp. 235–249. `http://link.aip.org/link/?APC/896/235/1`.

Приложения

A Построение вероятностного пространства

A.1 Построение полукольца в $\mathbb{S}$

В работах Ермакова[7] и Некруткина[18] строится вероятностное пространство на множестве всех ветвящихся траекторий. Однако, в указанных работах приведены весьма скромные сведения о построении алгебры событий и вероятностной меры на этой алгебре. В рамках настоящей работы целесообразно указать, каким образом при помощи функции $p(S)$ можно породить вероятностную меру.

Напомним (см. п. 2.4), что под фазовым пространством X понимается полуотрытый прямоугольник $A_i \leq x_i < B_i$, $i = 1, 2, \ldots, 7$, из пространства $\mathbb{R}^7$ (три координаты, два угла направления скорости, энергия и момент времени). Введём в пространстве X полукольцо $\mathcal{S}$, состоящее из пустого множества и из всех множеств вида $[a_1, b_1) \times [a_2, b_2) \times \ldots \times [a_7, b_7)$, где $A_i \leq a_i \leq b_i \leq B_i$.

Напомним также (см. п. 2.5.2.4), что под супертреком S понимается множество, состоящее из натурального числа n и набора точек x_0, x_1, $\ldots$, x_{k_n} из фазового пространства X. То есть по определению $S = \{n, (x_0, x_1, \ldots, x_{k_n})\}$. Множество супертреков $\mathbb{S}$ состоит из счётного количества подмножеств $\mathbb{S}_n$, $n = 1, 2, \ldots$, причём подмножество $\mathbb{S}_n$ определяется как множество всех супертреков с фиксированным числом n. Каждому супертреку $S = (n, z)$, $z \in X^{k_n+1}$, можно сопоставить в соответствие элемент z из пространства X^{k_n+1}. Таким образом, каждое из подмножеств $\mathbb{S}_n$ изоморфно пространству X^{k_n+1}.

Система множеств $\mathcal{S} \times \mathcal{S} \times \ldots \times \mathcal{S}$ образует в X^{k_n+1} полукольцо. Изоморфизм множеств $\mathbb{S}_n$ и X^{k_n+1} позволяет перенести это полукольцо на множество $\mathbb{S}_n$. Обозначим это полукольцо множеств через $\mathcal{I}_n$.

Предложение. Объединение всех множеств $\mathcal{I} = \bigcup\limits_{n=1}^{\infty} \mathcal{I}_n$ задаёт полукольцо на множестве всех супертреков $\mathbb{S}$.

Доказательство. Пустое множество принадлежит каждому из множеств $\mathcal{I}_n$, следовательно, оно принадлежит $\mathcal{I}$. Докажем замкнутость относительно операции пересечения. Пусть $A \in \mathcal{I}_{n_1}$ и $B \in \mathcal{I}_{n_2}$. Если $n_1 \neq n_2$, то $A \cap B = \emptyset \in \mathcal{I}$. Если $n_1 = n_2$, то $A \cap B \in \mathcal{I}_{n_1}$, следовательно, $A \cap B \in \mathcal{I}$. Пусть теперь $A \in \mathcal{I}$, $A_1 \subset A$. Так как A и A_1 являются элементами какого-то полукольца $\mathcal{I}_n$, то существуют такие элементы A_2, A_3, ..., A_r из $\mathcal{I}_n$, что $A = \bigcup\limits_{i=1}^{r} A_i$. Так как $\mathcal{I}_n \subset \mathcal{I}$, то $A_i \in \mathcal{I}$.

A.2 Построение меры на полукольце

На множестве супертреков $\mathbb{S}$ опредена функция $p(S)$, имеющая смысл плотности вероятности реализации супертрека S. Ограничением $p(S)$ на подмножество супертреков $\mathbb{S}_n$ является функция $p_n(x_0, x_1, \ldots, x_{k_n})$. Функции $p_n(x_0, x_1, \ldots, x_{k_n})$ являются неотрицательными, кусочно-непрерывными по каждому из своих аргументов, интегрируемыми по Риману во всем пространстве X^{k_n+1}, и подчиняющиеся условию нормировки

$$\sum_{n=1}^{\infty} \int\limits_{X^{k_n+1}} p_n(x_0, x_1, \ldots, x_{k_n}) dx_0 dx_1 \ldots dx_{k_n} = 1 \tag{4.4}$$

Построение меры на полукольце $\mathcal{I}_n$. Определим функцию $P'(A)$ на полукольце $\mathcal{I}_n$ следующим образом. Так как элементами полукольца $\mathcal{I}_n$ являются множества, состоящие из прямых произведений $Q = Q_1 \times Q_2 \times \ldots \times Q_{k_n}$ «полуоткрытых» прямоугольников в X, то примем за меру множества A следующий интеграл Лебега

$$P'(A) = \int\limits_{Q} p(n, x_0, x_1, \ldots, x_{k_n}) \lambda(dx_0 \times dx_1 \times \ldots \times dx_{k_n}),$$

где λ – мера Лебега в Q. Указанный интеграл будем вычислять как повторный интеграл Римана

$$P'(A) = \int\limits_{Q_0} \int\limits_{Q_1} \dots \int\limits_{Q_{k_n}} p(n, x_0, x_1, \dots, x_{k_n}) dx_0 dx_1 \dots dx_{k_n}$$

Интегрирование ведётся по замыканиям прямоугольников Q_i.

Построение меры на полукольце $\mathcal{I}$. Каждый элемент полукольца $\mathcal{I}$ является элементом только одного из полуколец $\mathcal{I}_n$. На них мера уже определена. Меру на $\mathcal{I}$ также будем обозначать P'.

Определение. Мера μ называется σ-аддитивной, если для любых $A, A_1, A_2, \dots$, принадлежащих её области определения и таких, что $A = \bigcup\limits_{n=1}^{\infty} A_n$, $A_i \cap A_j = \emptyset$ при $i \neq j$, выполняется $\mu(A) = \sum\limits_{n=1}^{\infty} \mu(A_n)$

Доказательство σ-аддитивности меры P' на полукольце $\mathcal{I}_n$. σ-аддитивность построенной меры следует из σ-аддитивности интеграла Лебега.

Доказательство σ-аддитивности меры P' на полукольце $\mathcal{I}$. Пусть некоторое множество $A \in \mathcal{I}$ представимо в виде $A = \bigcup\limits_{i=1}^{\infty} A_i$, где $A_i \in \mathcal{I}$ и $A_i \cap A_j = \emptyset$ при $i \neq j$. Полукольцо $\mathcal{I}$ состоит из всех прямоугольников, каждый из которых принадлежит целиком только одному из полуколец $\mathcal{I}_n$, то есть существует n такое, что $A \in \mathcal{I}_n$. Следовательно, выполняется $A_i \in \mathcal{I}_n$, то есть все множества A_i тоже являются элементами того же полукольца $\mathcal{I}_n$. Получаем, что множества A и A_i являются элементами одно и того же полукольца A_n. Так как введённая мера σ-аддитивна на каждом из полуколец $\mathcal{I}_n$, то она будет σ-аддитивна и на полукольце $\mathcal{I}$.

A.3 Продолжение меры на σ-алгебру

Построение меры на кольце $\mathcal{R}(\mathcal{I})$. Мера на кольце $\mathcal{R}(\mathcal{I})$, порождённом полукольцом $\mathcal{I}$, получается как продолжение меры с полукольца. Мера на кольце также будет σ-аддитивной. Это следует из теоремы, приведённой ниже.

Теорема [10]. Если мера μ, заданная на некотором полукольце, σ-аддитивна, то и мера μ', полученная продолжением меры на кольцо, порожденное полукольцом, будет σ-аддитивна.

Определение. Мера μ, определённая на кольце $\mathcal{F}$ некоторого множества G, называется σ-конечной, если всё множество G представимо в виде счётного объединения множеств из $\mathcal{F}$.

Введённая мера на кольце $\mathcal{R}(\mathcal{I})$ действительно будет σ-конечной, так как множество всех супертреков $\mathbb{S}$ представимо в виде счётного объединения $\mathbb{S} = \bigcup\limits_{n=1}^{\infty} \mathbb{S}_n$, а каждое множество $\mathbb{S}_n$ является элементом соответствующего кольца $\mathcal{I}_n$, а следовательно, на нём определена мера.

Продолжение меры с кольца на σ-кольцо, порождённое этим кольцом, можно построить, используя следующую теорему.

Теорема. [27] Если μ – σ-конечная мера [2], заданная на некотором кольце $\mathcal{R}$, то существует единственная мера $\overline{\mu}$, заданная на σ-кольце $\sigma(\mathcal{R})$, такая, что $\overline{\mu}(A) = \mu(A)$ для всех $A \in \mathcal{R}$; причём мера $\overline{\mu}$ σ-конечна.

Единица $\mathbb{S} = \mathbb{S}_1 \cup \mathbb{S}_2 \cup \ldots$ принадлежит $\sigma(\mathcal{R}(\mathcal{I}))$, так как для всех i выполняется $\mathbb{S}_i \in \mathcal{I}_i \subset \mathcal{I}$. Причем $\overline{\mu}(\mathbb{S}) = 1$ в силу условия нормировки (4.4).

Обозначим через $\mathcal{H}$ минимальную σ-алгебру, порождённую кольцом с единицей $\mathcal{R}(\mathcal{I})$, а вероятностную меру, существование которой утверждается теоремой, через P. В результате построено вероятностное пространство $(\mathbb{S}, \mathcal{H}, P)$.

Б Свойства операции усреднения

Б.1 Существование

Пусть функционал $q(S_1, S_2, \ldots, S_k)$ ограничен, то есть для любых супертреков S_1, S_2, $\ldots$, S_k выполняется неравенство

$$|q(S_1, S_2, \ldots, S_k)| \leqslant C, \tag{4.5}$$

[2] В [27] в определении меры требуется счётная аддитивность, потому можно считать, что и построенная мера на σ-кольце множеств в $\mathbb{S}$ обладает свойством счётной аддитивности.

где C, вообще говоря, зависит от k. Пусть для любого натурального n существует интеграл

$$\int\limits_{S_1 \in \mathbb{S}_n} q(S_1, S_2, \ldots, S_k).$$

Тогда ряд

$$\int q(S_1, S_2, \ldots, S_k) dS_1 = \sum_{n=1}^{\infty} \int\limits_{S_1 \in \mathbb{S}_n} q(S_1, S_2, \ldots, S_k) dS_1 \qquad (4.6)$$

мажорируется по модулю числовым рядом, то есть

$$\int\limits_{S_1 \in \mathbb{S}_n} q(S_1, S_2, \ldots, S_k) dS_1 \leqslant C \int\limits_{S_1 \in \mathbb{S}_n} dS.$$

Числовой ряд из членов, стоящих в правой части неравенства, сходится в силу условия нормировки (2.12). Следовательно, по признаку Вейерштрасса ряд (4.6) сходится абсолютно и равномерно по совокупности переменных S_2, S_3, $\ldots$, S_k. В настоящей работе в соответствии с физическим смыслом отклика детектора рассматриваются только положительные функционалы $q(S_1, S_2, \ldots, S_k)$, для которых понятия сходимости и абсолютной сходимости эквивалентны.

Частным случаем доказанного утверждения является сходимость ряда (2.11), члены которого зависят только от одного супертрека.

Б.2 Свойство линейности

Пусть существуют интегралы

$$\int q_1(S) dS, \int q_2(S) dS.$$

Тогда для любых действительных чисел a и b существует интеграл

$$\int \left(a q_1 \left(S \right) + b q_2 \left(S \right) \right) dS$$

и равен

$$\int \left(aq_1\left(S\right)+bq_2\left(S\right)\right)dS = a\int q_1\left(S\right)dS + b\int q_2\left(S\right)dS.$$

Доказательство опирается на теорему о сумме сходящихся рядов.

Б.3 Перемена порядка интегрирования в повторном интеграле

Перемену порядка интегрирования можно обосновать, сославшись на известную теорему Фубини. Далее возможность перемены порядка интегрирования обосновывается, используя сведения из теории функциональных рядов и интеграла Римана.

Рассмотрим повторный интеграл

$$\int\left(\int q(S_1,S_2)dS_2\right)dS_1 = \tag{4.7}$$
$$\sum_{n_1=1}^{\infty}\int\limits_{S_1\in\mathbb{S}_{n_1}}\left(\sum_{n_2=1}^{\infty}\int\limits_{S_2\in\mathbb{S}_{n_2}} q(S_1,S_2)dS_2.\right)dS_1,$$

который имеет смысл математического ожидания случайной величины $q(S_1,S_2)$. При $S\in\mathbb{S}_n$ интегралы понимаются как интегралы Римана по пространству X^{k_n+1}, где X – фазовое пространство для одной частицы. При выполнении условия (4.5) и в силу нормировки (2.12) можно записать, что

$$\int\limits_{S_1\in\mathbb{S}_{n_1}}\left(\sum_{n_2=1}^{\infty}\int\limits_{S_2\in\mathbb{S}_{n_2}} q(S_1,S_2)dS_2.\right)dS_1 \leqslant C\int\limits_{S_1\in\mathbb{S}_{n_1}} dS_1,$$

то есть члены ряда (4.7) мажорируются членами сходящегося числового ряда (2.12). Следовательно, ряд (4.7) сходится.

Ряд

$$\sum_{n_2=1}^{\infty} f_{n_2}(S_1), \quad f_{n_2}(S_1) = \int\limits_{S_2 \in \mathbb{S}_{n_2}} q(S_1, S_2) dS_2,$$

можно интегрировать почленно по $S_1 \in \mathbb{S}_{n_1}$, так как он сходится равномерно. Следовательно, в (4.7) знак суммы по n_2 и интеграла по S_1 можно переставлять местами, то есть справедлива запись

$$\int\int q(S_1, S_2) dS_2 dS_1 = \sum_{n_1=1}^{\infty} \sum_{n_2=1}^{\infty} \int\limits_{S_1 \in \mathbb{S}_{n_1}} \int\limits_{S_2 \in \mathbb{S}_{n_2}} q(S_1, S_2) dS_2 dS_1.$$

Аналогично можно доказать, что для любого k

$$\int\int \ldots \int q(S_1, S_2, \ldots, S_k) dS_k \ldots dS_2 dS_1 = \tag{4.8}$$

$$= \sum_{n_1=1}^{\infty} \sum_{n_2=1}^{\infty} \ldots \sum_{n_k=1}^{\infty} \int\limits_{S_1 \in \mathbb{S}_{n_1}} \int\limits_{S_2 \in \mathbb{S}_{n_2}} \ldots \int\limits_{S_k \in \mathbb{S}_{n_k}} q(S_1, S_2, \ldots, S_k) dS_k \ldots dS_2 dS_1. \tag{4.9}$$

Так как повторный ряд в правой части этого равенства сходится абсолютно, то порядок суммирования можно менять. Общий член ряда представляет собой обычный повторный интеграл Римана (после исключения направления скорости из фазовых координат), порядок интегрирования в котором также можно менять. Рассмотрим ещё интеграл

$$\int\int \ldots \int q(S_1, S_2, \ldots, S_k) dS_k \ldots dS_{n_2} \ldots dS_{n_1} \ldots dS_2 dS_1,$$

который отличается от интеграла в левой части (4.8) перестановкой порядка интегрирования по переменным S_{n_1} и S_{n_2}. Этот интеграл можно расписать в виде повторного ряда, а затем поменять порядки суммирования и интегрирования так, чтобы получился ряд (4.8). В итоге

доказано, что при выполнении условия (4.5) выполняется равенство

$$\int\int\ldots\int q(S_1,S_2,\ldots,S_k)dS_k\ldots dS_{n_1}\ldots dS_{n_2}\ldots dS_2dS_1 =$$
$$=\int\int\ldots\int q(S_1,S_2,\ldots,S_k)dS_k\ldots dS_{n_2}\ldots dS_{n_1}\ldots dS_2dS_1,$$

то есть порядок осреднения по супертрекам можно менять.

B Исходный код функции TallyX

Ниже приведён исходный код функции *TallyX* программы MCNP на языке FORTRAN-70. Комментарии даны на английском языке, чтобы не разрушать однообразие исходного кода всей программы MCNP.

Функция вызывается в момент пересечения частицей одной из поверхностей, ограничивающих объём детектора. Пересечение одной из ограничивающих поверхностей является лишь необходимым условием пересечения границы детектора. Необходимым и достаточным условием является переход из ячейки пространства, относящейся к детектору, в ячейку, не относящуюся к детектору, или наоборот. Единственной заботой разработанной функции является проверка сформулированного необходимого и достаточного условия и запись в файл информации о частице, если условие выполнилось.

Для удобства приведём развёрнутые комментарии на русском языке к этому коду. В локальную переменную `inward` записывается значение `ИСТИНА`, если частица летит внутрь детектора, в противном случае записывается `ЛОЖЬ`.

В переменную `k` записывается количество параметров карты `FU`, для которой сработал счётчик. Если $k = 0$, то выполнение функции завершается.

Если $k > 0$, то в цикле `do` перебираются все параметры карты `FU`. Параметр номер `index` хранится в ячейке `TDS(L+index)`, `L` — это номер, начиная с которого в массиве `TDS` хранятся параметры карты `FU`.

Для каждой ячейки определены два идентификатора — её номер в задаче (англ. problem number) и программный номер (англ. program number). Номер ячейки в задаче совпадает с номером, заданным в файле входных данных программы MCNP, нумерация в задаче не обязана начинаться с нуля или единицы и не обязана идти по порядку. Программный номер — это номер, который используется внутри программы MCNP, программные номера ячейкам присваиваются по порядку и без пропусков. Программный номер ячейки, откуда прилетела частица перед пересечением поверхности, хранится в глобальной переменной `ICL`, номер следующей ячейки — `IAP`. Соответствующие номера в задачах равны соответственно `NCL(ICL)` и `NCL(IAP)`. Для того, чтобы определить, летит частица внутрь или наружу детектора, сравниваются между собой номера ячеек, присвоенные им пользователем в задаче.

Если обнаружено, что частица действительно пересекает поверхность детектора и летит внутрь или наружу детектора, то производится запись всей доступной информации о частице в файл. Сама программа MCNP эту же информацию о частице записывает в стек частиц (называемый внутри программы и в руководстве к ней «банком») в случае ветвления траектории для того, чтобы потом вернуться и продолжить прерванную ветвь.

Запись в файл возможна в текстовом и двоичном формате. Запись производится в файл номер 7, уже открытый функциями инициализации MCNP для записи. Производить закрытие файла также не требуется, так как эту заботу на себя берут функции завершения программы MCNP.

```
subroutine tallyx(t,ib)
  ! dummy for user-supplied tallyx subroutine.
  ! t is the input and output tally score value.
  ! ib controls scoring.  see the user's manual.
  use mcnp_global
  use mcnp_debug

  implicit real(dknd) (a-h,o-z)
```

```
  CHARACTER*12 f
  LOGICAL*1 inward;

! FUn X1, X2, ..., Xk
! k - the number of parameters of FU card
   k = IPTAL(3,3,ITAL)-1
   if(k.eq.0)then
! FU card has no parameters, so far no printing will
!be done
      inward = .FALSE.
      go to 10
   else
! FU card has parameters
! L - base index for parameters subarray in TDS array
      L = IPTAL(3,1,ITAL)
      do index = 1,k
! enumeration of parameters
! if particle is flying to or flying out one of the
!detectors the record to the
!output file will be done
         if(NCL(ICL).eq.TDS(L+index))then
            inward = .FALSE.
            go to 10
         endif
         if(NCL(IAP).eq.TDS(L+index))then
            inward = .TRUE.
            go to 10
         endif
      end do
! Particle is not incedent with one of the detectors
      go to 20
   endif
```

```
! Here are two variants of making output
!   Write binary data
   10 inquire(7, form = f)
   if(f.eq.'UNFORMATTED')then
!          1st Variant - UNFORMATTED OUTPUT FILE
      WRITE(7) (GPBLCM(I),I=1,10), JPTAL(1,ITAL),NPA,
      NCL(ICL),NSFM(JSU),IPT,IEX,NODE,IDX,NCP,
      NCL(IAP),NPS, inward
   else
!          2nd Variant - FORMATTED OUTPUT FILE
      WRITE(7, '(10E14.6,␣10I6,␣1I15,␣L5)')
      (GPBLCM(I),I=1,10), JPTAL(1,ITAL),NPA,NCL(ICL),
      NSFM(JSU), IPT,IEX,NODE, IDX,NCP,NCL(IAP),
      NPS, inward
   endif
   20 return
end subroutine tallyx
```

Г Обоснование метода Монте-Карло

Г.1 Вероятностное пространство и случайная величина

Пусть $(\Omega, \mathcal{A}, \mu)$ – вероятностное пространство, $\mathbb{R}$ - множество действительных чисел, $\mathcal{B}(\mathbb{R})$ – борелевская σ-алгебра на $\mathbb{R}$. Элемент множества Ω будем обозначать γ.

Пусть $q : \Omega \to \mathbb{R}$ – неотрицательная и ограниченная $\mathcal{A}|\mathcal{B}(\mathbb{R})$ измеримая функция (случайная величина).

Так как функция $q(\gamma)$ измерима и ограничена, то существует математическое ожидание

$$Mq = \int\limits_{\Omega} q(\gamma)\mu(d\gamma). \tag{4.10}$$

Так как функция $q^2(\gamma)$ тоже измерима и ограничена, то существует математическое ожидание Mq^2. Следовательно, существует и дисперсия $Dq = Mq^2 - (Mq)^2$.

Г.2 Классический метод Монте-Карло

Классическая оценка Монте-Карло математического ожидания Mq записывается в виде

$$Q = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} q(\gamma_i),$$

где N – количество статистических испытаний, γ_i – исход $i-$ статистического испытания.

Сходимость почти наверное оценки Q к математическому ожиданию $MQ = Mq$ утверждается усиленным законом больших чисел (УЗБЧ).

Теорема (Усиленный закон больших чисел Колмогорова). Пусть случайные величины ξ_1, ξ_2, ... независимы и одинаково распределены. Для того, чтобы

$$\frac{\xi_1 + \xi_2 + \ldots + \xi_n}{n} \overset{\text{п.н.}}{\to} a,$$

необходимо и достаточно, чтобы существовало конечное $M\xi_i = a$.

Скорость сходимости обычно (например, в [7]) устанавливается при помощи оценки дисперсии и центральной предельной теоремы (ЦПТ).

Центральная предельная теорема. Если случайные величины ξ_1, ξ_2, ... независимы, одинаково распределены и имеют конечные $M\xi_i =$

a и $D\xi_i = \sigma^2 > 0$, то

$$\lim_{n\to\infty} P\left\{\frac{\xi_1+\xi_2+\ldots+\xi_n-na}{\sigma\sqrt{n}} \le x\right\} = \Phi(x),$$

где $\Phi(x)$ – функция нормального распределения

$$\Phi(x) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}\int\limits_{-\infty}^{x} e^{-\frac{u^2}{2}}du.$$

Событие $\left\{\frac{\xi_1+\xi_2+\ldots+\xi_n-na}{\sigma\sqrt{n}} \le x\right\}$ эквивалентно событию $\left\{\frac{\xi_1+\xi_2+\ldots+\xi_n}{n} - a \le x\frac{\sigma}{\sqrt{n}}\right\}$, что позволяет переписать утверждение ЦПТ в виде

$$\lim_{n\to\infty} P\left\{\frac{\xi_1+\xi_2+\ldots+\xi_n}{n} - a \le x\right\} = \Phi\left(\frac{x\sqrt{n}}{\sigma}\right),$$

то есть величина $Q - MQ$ имеет нормальное распределение $\mathcal{N}(0, \frac{\sigma}{\sqrt{n}})$. На этом утверждении базируется оценка статистической погрешности метода Монте-Карло как функции от количества проведённых статистических испытаний.

Сравнение разных методов Монте-Карло друг с другом. В практических приложениях важно не количество проведённых статистических испытаний для достижения нужного уровня погрешности, а количество затраченного на это машинного времени. Весовые методы Монте-Карло позволяют существенно сократить количество испытаний, но при этом возрастает время, затрачиваемое в среднем на одно испытание. В [66] для сравнения разных методов Монте-Карло предлагается использовать величину FOM (от англ. figure of merit), равную

$$FOM = \frac{1}{TR^2},$$

где T – затраченное машинное время, R – стандартное отлонение величины Q^* от среднего, делённое на среднее значение Q^*. Эта величина не зависит от количества проведённых статистических испытаний, так как $T \propto N$, $R \propto 1/\sqrt{N}$, то есть TR^2 постоянна.