

На правах рукописи

Цветков Егор Александрович

МЕТОДЫ РАСЧЕТА НЕАДДИТИВНЫХ
ФУНКЦИОНАЛОВ В ПРИКЛАДНЫХ ЗАДАЧАХ
РАДИАЦИОННОЙ ФИЗИКИ

Специальность: 05.13.18 – математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Москва – 2013

Работа выполнена в Федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего профессионального образования «Московский физико-технический институт (государственный университет)»

Научный руководитель:

кандидат технических наук, заместитель начальника НИЦ нанотехнологий ФГУП «ЦНИИХМ» по научной работе
Шаховский Валентин Владимирович,

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук, профессор кафедры «Физика» МГТУ «Станкин»
Кольчужкин Анатолий Михайлович,

доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой статистического моделирования математико-механического факультета СПбГУ
Ермаков Сергей Михайлович,

Ведущая организация:

Институт прикладной математики имени М. В. Келдыша Российской академии наук.

Защита состоится 29 марта 2013 года в 10 часов на заседании диссертационного совета Д 201.003.01 при ГНЦ РФ – ФЭИ имени А. И. Лейпунского по адресу: 249033, Калужская обл., г. Обнинск, пл. Бондаренко, д. 1.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ГНЦ РФ – ФЭИ имени А. И. Лейпунского.

Автореферат разослан « _____ » _____ 2013 года.

Ученый секретарь
диссертационного совета

Верещагина Т. Н.

Общая характеристика работы

Актуальность

В настоящее время интерес к разработке приборов, регистрирующих ядерное излучение, постоянно растёт. Успехи в области создания новых сцинтилляционных материалов позволяют улучшить такие характеристики приборов, работающих по схемам совпадений, как отношение сигнал-шум и пространственное разрешение. Области человеческой деятельности, в которых используются схемы совпадений, являются гамма-астрономия, обеспечение безопасности (досмотр грузов и контейнеров, экологическая безопасность), медицина и другие.

В сфере обеспечения безопасности особенно важным направлением является разработка технических средств, позволяющих производить досмотр грузов, не вскрывая контейнеры. При разработке подобных технических средств выбор принципа их работы всё чаще производится в пользу метода меченых нейтронов (ММН). В ММН инспектируемый объём облучается нейтронами с энергиями около 14 МэВ, неупругое рассеяние которых порождает вторичное гамма-излучение. По измерениям его амплитудно-временного спектра можно идентифицировать вещество, находящееся в инспектируемом объёме, путём сравнения спектра гамма-излучения с базовыми спектрами известных веществ. Интроскопы, работающие по методу меченых нейтронов, разрабатываются, например, в Радиовом институте им. Хлопина (г. Санкт-Петербург) и в НПЦ «Аспект» (г. Дубна). Проект стран Евросоюза EURITRACK является ещё одним примером реализации метода меченых нейтронов.

Комптоновский гамма-спектрометр позволяет определять направление прилёта и энергию гамма-квантов. Ярким примером такого прибора является гамма-телескоп COMPTEL, работающий по схеме двойных рассеяний. Приборы на основе комптоновских гамма-спектрометров позволяют получить трёхмерную картину распределения источников гамма-излучения с энергиями от 10 кэВ до 10 МэВ в некотором объёме, что делает их применение интересным в медицинской томографии и в сфере экологической безопасности. Параметры и условия работы прибора должны быть выбраны так, чтобы минимизировать количество ложных совпадений, регистрируемых прибором.

Разработка новых приборов, как правило, включает в себя этап расчётно-теоретического обоснования их параметров и характеристик. Для этого обычно применяется метод Монте-Карло, в котором вычисляется среднее значение некоторого функционала на множестве ветвящихся траекторий. В зависимости от поставленной задачи функционал

может выражать ту или иную характеристику поля излучения (например, ток или поток частиц через поверхность, количество столкновений в элементе объёма) или описывать отклик моделируемого прибора.

Основными преимуществами метода Монте-Карло являются возможность работы со сложными геометрическими конфигурациями расположения объектов в задаче, возможность работы с наиболее полными моделями переноса частиц и имитационными моделями приборов.

В методе Монте-Карло моделируются траектории частиц с учётом их рассеяния, размножения и поглощения. Если при моделировании траекторий частиц используется физическая плотность вероятности переходов в моделируемом процессе распространения частиц, 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. Это послужило причиной разработки весовых методов Монте-Карло, в которых моделирование траекторий частиц проводится с использованием модельной плотности вероятности, отличной от физической. Модельная плотность вероятности выбирается так, чтобы увеличить количество попаданий частиц в область детекторов.

Весовые методы хорошо проработаны для вычисления значения величин, описываемых так называемыми больцмановскими функционалами. Под больцмановским функционалом понимается функционал, который может быть вычислен при известной одночастичной плотности распределения, являющейся решением интегрального уравнения переноса частиц. Если физическая величина зависит от совместного влияния нескольких частиц, то она не может быть представлена в виде больцмановского функционала. 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 в фазовом пространстве.

Современной тенденцией является построение сложных имитационных моделей приборов, учитывающих многие физические явления (например, распространение сцинтилляционных фотонов, рождение и распространение электронов в фотоэлектронном умножителе, нелинейность электронных усилителей сигналов), часть из которых задаётся эмпирическими зависимостями. Как правило, такие модели описываются небольцмановскими функционалами и при расчётах требуют больших затрат машинного времени, измеряемых месяцами.

Проблема ускорения расчётов, связанных с вычислением методом Монте-Карло небольшие функционалов, является актуальной научной проблемой.

Современное состояние проблемы

В классической литературе весовые методы предлагаются для вычисления аддитивных по столкновениям больцмановских величин, равных среднему значению некоторого функционала, определённого на множестве реализаций случайного процесса переноса излучения. Значение такого функционала $q(S)$ равно сумме вкладов от отдельных столкновений, то есть

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

где S — случайная траектория частицы, x_i — точки соударения частицы, движущейся по этой траектории, $i = 1, 2, \dots, k$. Примером такого функционала является количество столкновений в выделенном объёме.

Ещё одним важным частным случаем больцмановских величин являются величины, представимые в виде среднего значения функционала, аддитивного в смысле

$$q(S) = \sum_{i=1}^{k-1} q(x_i \rightarrow x_{i+1}). \quad (2)$$

Подобным функционалом выражается, например, количество пересечений частицами выбранной поверхности.

Наиболее известными весовыми методами, применяемыми при вычислении среднего значения аддитивных в смысле (1) или (2) функционалов, являются метод существенной выборки, расщепление и русская рулетка. Весовой метод DXTRAN [4] является не столь известным, но в задачах с локализованным в небольшой области детектором является особенно полезным.

В большей части литературы построение универсальных методов для вычисления больцмановских величин ограничивается аналоговой схемой, а весовые методы строятся для различных частных случаев. 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 трудах 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). В работах В. В. Учайкина и А. В. Лаппы рассмотрены функционалы «столкновительно-трекового» класса, обобщающего классы (1) и (2). В работах А. В. Лаппы построены неимитационные методы, вычисляющие любой момент от аддитивного по траекториям функционала. В работах Н. М. Борисова построены методы вычисления оставленной в детекторе энергии для случая неразмножающей среды.

Предложенная в 1992 году американским учёным Т. Бутом концепция супертрекков является основополагающим универсальным подходом к вычислению небольших величин весовыми методами. В ней предлагается приписывать статистический вес всей ветвящейся траектории целиком, а не каждой частице в отдельности, как это делается в схеме Неймана-Улама при вычислении средних аддитивных по столкновениям функционалов. В рамках концепции супертрекков её автором сформулированы весовые методы существенной выборки, расщепления, русской рулетки и DXTRAN.

Концепция супертрекков реализована во многих известных программах для расчёта различных функционалов от характеристик поля излучения, например, в MCNPX и MCBEND. Однако автор этой концепции ограничился обоснованием предложенных им весовых методов Монте-Карло на физическом уровне строгости.

При использовании концепции супертрекков предполагается, что частицы, относящиеся к разным ветвящимся траекториям, делают независимые вклады в значение функционала. Другими словами, отклик детектора на траектории S_1, S_2, \dots, S_k можно представить в виде

$$q(S_1, S_2, \dots, S_k) = q(S_1) + q(S_2) + \dots + q(S_k). \quad (3)$$

Такие функционалы в настоящей работе предложено называть аддитивными по траекториям. Не все функционалы обладают этим свойством, например, иногда важно учитывать совпадения, вызванные фоновым излучением или отражёнными от удаленных предметов частицами. Необходимость вычисления среднего неаддитивных по траекториям функционалов возникает при моделировании приборов в условиях большой загрузки или в условиях сильного фонового излучения.

В настоящей работе концепция супертрекков обоснована и обобщена на случай вычисления неаддитивных по траекториям функционалов.

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 супертрекков обобщена на случай вычисления функционалов, учитывающих совпадения между частицами, принадлежащими разным ветвящимся траекториям.
2. Впервые получено доказательство несмещённости весовых оценок в рамках концепции супертрекков 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 $q(S_1, S_2, \dots, S_k)$, описывающие работу физических приборов. Впервые доказано, что для оценки среднего значения таких функционалов достаточно единственной реализации кортежа (S_1, S_2, \dots, 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 теоретических результатов является многократное ускорение расчётов в прикладных задачах радиационной физики.

Разработан универсальный программный комплекс, позволяющий оптимизировать геометрические параметры приборов, работающих по схемам совпадений. Разработанные программы использовались для теоретической оценки количества совпадений в работах [1, 2].

Показано, что для комптоновского гамма-спектрометра в интервале энергий 0,1—3 МэВ наиболее эффективной 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.

В ходе исследований эмпирически проверены статистические свойства некоторых популярных в настоящее время программных генераторов псевдослучайных чисел при помощи теста на равномерное заполнение единичного гиперкуба [3]. Тесты позволили обнаружить ошибку в реализации одного из генераторов библиотеки CLHEP, предназначенной для расчётов в задачах физики высоких энергий. Для остальных генераторов найдены участки генерируемых ими последовательностей с хорошими и плохими статистическими свойствами.

Достоверность

Достоверность полученных 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 сцинтиляционного 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 соискателя

Личный вклад соискателя заключается в обосновании и обобщении концепции супертреков, разработке способов применения весовых методов Монте-Карло для вычисления неаддитивных функционалов, разработке моделей комптоновского гамма-спектрометра и прибора, 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 семинарах и конференциях:

- 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;

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.

Объём работы

Диссертация состоит из списка условных обозначений, введения, 4 глав, заключения, списка использованных источников из 90 наименований и 5 приложений, изложенных на 180 страницах, содержит 45 рисунков.

1 Основное содержание работы

Во **введении** обоснована актуальность выбранной задачи, рассмотрено современное состояние проблемы, определены цели работы, методы достижения этих целей, а также показана практическая значимость получаемых результатов.

Первая глава посвящена разработке имитационных моделей физических приборов, учитывающих случайные совпадения. К рассмотренным физическим приборам относятся спектрометр на основе сцинтилляционного детектора, комптоновский гамма-спектрометр и интроскоп, работающий по методу меченых нейтронов.

В первой главе показано, что функционалы, описывающие отклик детектора, могут быть аддитивными по столкновениям, аддитивными по траекториям или могут не быть аддитивными ни в одном из этих смыслов. Выполнение того или иного свойства аддитивности связано с тем, события каких типов должны быть учтены в математической модели прибора. Если прибор работает в условиях, когда вероятность одновременного прихода двух частиц мала, то выполняется свойство аддитивности по траекториям (3). Если прибор работает в условиях большой загрузки, когда на события, вызванные прохождением одной частицы, накладываются события, вызванные другой частицей, то функционал уже не будет аддитивным в смысле (3).

Неаддитивный функционал имеет самый общий вид

$$q(S_1, S_2, \dots, S_k),$$

где S_1, S_2, \dots, S_k — случайные ветвящиеся траектории. Примером неаддитивного функционала является отклик прибора, работающего по схеме совпадений, когда важно учитывать случайные совпадения между частицами, относящимися к разным ветвящимся траекториям. Неаддитивным функционалом также представляется отклик сцинтилляционного детектора, если важно учесть возможность одновременного попадания нескольких частиц в детектор.

Если наложение событий от разных частиц является достаточно редким явлением, то неаддитивные функционалы $q(S_1, S_2, \dots, S_k)$, описывающие модели физических приборов, всё же можно разбить на сумму слагаемых

$$q(S_1, S_2, \dots, S_k) = q(S_1, S_2, \dots, S_{k_1}) + q(S_{k_1+1}, S_{k_1+2}, \dots, S_{k_2}) + \dots + q(S_{k_{l-1}+1}, S_{k_{l-1}+2}, \dots, S_{k_l}), \quad (4)$$

где $k_1 < k_2 < \dots < k_l = k$ — некоторые числа. Значения величин k_1, k_2, \dots, k_{l-1} определяются уже после того, как разыграны все траектории и, вообще говоря, являются случайными. Траектории, относящиеся к разным слагаемым, разделены между собой некоторым минимальным интервалом времени, достаточным для того, чтобы модель прибора при отсутствии частиц успела вернуться в исходное состояние. Такое свойство аддитивности названо аддитивностью по времени.

Показано, что все слагаемые в правой части (4) кроме последнего независимы в совокупности и одинаково распределены.

В качестве отклика сцинтилляционного детектора выбрана существующая модель, согласно которой отклик детектора принимается пропорциональным энергии, оставленной частицей в объёме сцинтилляционного детектора. Точности такой модели вполне достаточно для проводимых исследований. Выбранная модель обобщена на случай неаддитивного функционала, когда за время измерения энергии сцинтилляционной вспышки может произойти вторая вспышка от другой частицы.

Модель сцинтилляционного детектора расширена возможностью учёта типа реакций. Учёт типа реакций производится подсчётом количества входящих и выходящих частиц, а также количества столкновений за время интегрирования одного импульса ФЭУ. Пусть моделируется распространение гамма-квантов, и гамма-кванты подвержены только двум типам реакций — комптоновское рассеяние и фотопоглощение

(третий важный тип реакций — рождение электрон-позитронных пар — не играет значительной роли при энергиях гамма-квантов до 10 МэВ). В таком приближении определение типа реакций, произошедших внутри чувствительного объёма детектора, основывается на следующих двух утверждениях:

1. Если частица, попавшая в детектор, так из него и не вышла, то при последнем столкновении произошло фотопоглощение, а при остальных соударениях произошло комптоновское рассеяние.
2. Если частица всё же вышла из детектора, то внутри детектора происходило только комптоновское рассеяние.

Такой способ определения типа реакций показался автору наименее трудоёмким в реализации с использованием кода программы MCNP.

На основе модели сцинтилляционного детектора построена модель спектрометра. Выходными данными является количество отчётов детектора, попадающих в каждый из заранее указанных интервалов энергий.

Отдельно рассмотрена модель электронной схемы совпадений. Из всех параметров схемы совпадений учитываются только разрешающее время и мёртвое время схемы совпадений, в остальном схема совпадений считается идеальной.

Модель комптоновского гамма-спектрометра, геометрическая конфигурация которого представлена на рис. 1, состоит из модели сцинтилляционных детекторов и модели электронной схемы совпадений. Совпадения, вызванные одиночным комптоновским рассеянием в детекторе первого слоя и полным поглощением в детекторе второго слоя, считаются истинными. Все остальные совпадения считаются ложными. В разработанной модели ведётся отдельный подсчёт истинных и различного типа ложных совпадений.

Подсчитав число истинных совпадений, можно вычислить коэффициент η , равный

$$\eta = \frac{N_{true}}{N_{total}}, \quad (5)$$

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.

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, а

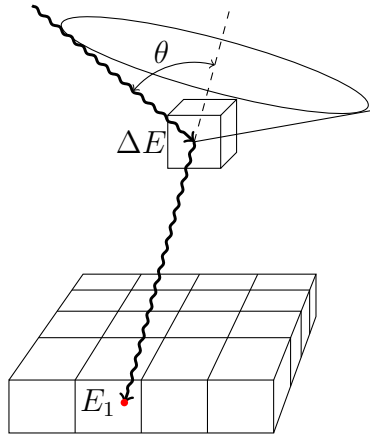


Рис. 1. Схема комptonовского гамма-спектрометра

траектории альфа-частиц не разыгрываются. Модель интроскопа, работающего по методу меченых нейтронов, строится на основе модели сцинтилляционного детектора добавлением стробирования сигналов детектора по времени. Момент открытия временного окна и его ширина выбираются так, чтобы зарегистрировать индуцированное излучение, приходящее из интересующей области пространства.

Предполагается, что функционал, описывающий отклик интроскопа, аддитивен по траекториям. При этом выбрасываются из рассмотрения случайные совпадения, которые возникали бы в реальном приборе при неправильном сопоставлении альфа-частицы и испущенного нейтрона. Это предположение оправдывается тем, что эксплуатация прибора в условиях, когда указанные случайные совпадения будут играть существенную роль, не предполагается. В случае необходимости количество таких совпадений может быть оценено аналитически.

Все разработанные модели приведены к одному формату входных данных и могут быть описаны функционалами вида $q(S_1, S_2, \dots, S_k)$. Это позволяет абстрагироваться от особенностей конкретной модели и построить общие универсальные весовые методы для вычисления среднего отклика детектора.

Вторая глава посвящена построению весовых методов Монте-Карло для вычисления среднего значения неаддитивных функционалов. В начале главы сформулирована суть весовых методов в концепции супертреков. Супертрек — это ветвящаяся траектория, рассматриваемая как неделимая совокупность неветвящихся участков (треков). Супертреку приписывается статистический вес. Показано, что концепция супертреков получается естественным образом при применении классических весовых методов Монте-Карло к вычислению среднего значения функционала $q(S)$ по множеству всех ветвящихся траекторий.

Концепция супертреков обобщена на случай функционала вида $q(S_1, S_2, \dots, S_k)$. Пусть при весовом моделировании i -ого супертрека он расщепился на m_i супертреков S_{ij} с весами w_{ij} , $i = 1, 2, \dots, k$, $j = 1, 2, \dots, m_i$. Тогда весовая оценка

$$Q^* = \sum_{j_1=1}^{m_1} \sum_{j_2=1}^{m_2} \dots \sum_{j_k=1}^{m_k} q(S_{1j_1}, S_{2j_2}, \dots, S_{kj_k}) \cdot w_{1j_1} w_{2j_2} \dots w_{kj_k} \quad (6)$$

среднего значения функционала $q(S_1, S_2, \dots, S_k)$ будет несмещённой. В частном случае при $k = 1$ указанная формула совпадает с весовой оценкой, предложенной в рамках концепции супертреков.

Ветвящаяся траектория задана деревом (теория графов), каждой вершине которого ставится в соответствие точка из фазового пространства, задающая координаты частицы до столкновения. При ограничении максимального числа ветвей у каждой вершины множество всех деревьев будет счётным, то есть структура дерева может быть задана натуральным числом n . Итак, ветвящаяся траектория – это пара

$$(n, (x_0, x_1, \dots, x_{k_n})),$$

где k_n – номер последней вершины дерева со структурой, заданной числом n , x_i – элементы фазового пространства (координаты, скорость). В нестационарном случае описание траектории дополняется моментом времени рождения первичной частицы. Вершины дерева соответствуют точкам столкновения частиц, а рёбра – свободному перемещению частиц без столкновений. Корень дерева соответствует точке рождения первичной частицы. К фазовым координатам частицы относятся координаты в физическом пространстве, скорость и энергия. В нестационарном случае точке рождения первичной частицы (вершине дерева) приписывается время.

Для усреднения по супертрекам множество всех возможных супертреков \mathbb{S} разбито на подмножества \mathbb{S}_n , количество которых счётно. В множество \mathbb{S}_n входят все супертреки со структурой, задаваемой значением n . Пусть k_n – количество вершин без учета корня у деревьев в подмножестве \mathbb{S}_n , x_0 – точка рождения частицы, а x_1, x_2, \dots, x_{k_n} – точки, соответствующие последующим столкновениям. Нумерация вершин произведена таким образом, что из условия $i < j$ следует, что вершина с номером j принадлежит тому же поколению частиц, что и вершина номер i , или более позднему (см. рис. 2).

Сформулированное свойство позволило записать дифференциальную по x_0, x_1, \dots, x_{k_n} плотность вероятности (в физическом смысле)

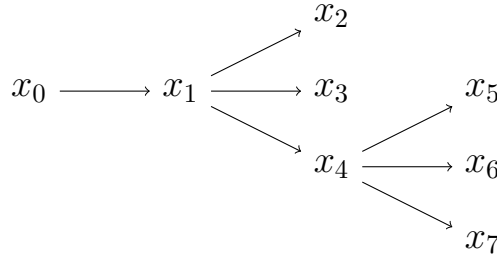


Рис. 2. Нумерация вершин в ветвящейся траектории (нумерация по поколениям).

реализации ветвящейся траектории S из множества \mathbb{S}_n в унифицированном (не зависящем от структуры ветвящейся траектории) виде

$$p(S) = p(x_0) \prod_{i=1}^{k_n} p_n(x_i | x_0, x_1, \dots, x_{i-1}), \quad (7)$$

где $p(x_0)$ – плотность источников, $p_n(x_i | x_0, x_1, \dots, x_{i-1})$ – условная плотность вероятности того, что вершина номер i будет иметь координаты x_i , и в этой вершине произойдет реакция с нужным количеством выходящих частиц при условии, что все предыдущие координаты равны x_0, x_1, \dots, x_{i-1} . Количество выходящих частиц определяется по известному номеру подмножества n и номеру вершины i .

Далее на множестве всех супертреков \mathbb{S} строится σ -алгебра. При помощи функции (7) на σ -алгебре порождается вероятностная мера P таким образом, что функция (7) действительно будет являться для неё плотностью вероятности.

Доказательство несмещённости оценки (6), то есть равенство математических ожиданий весовой оценки Q^* и аналоговой оценки $Q = q(S)$, проводится сначала при $k = 1$.

Обоснование метода существенной выборки, весового метода расщепления и русской рулетки проведено путём переноса классического доказательства несмещённости весовых оценок для этих методов для аддитивных по столкновениям функционалов и неветвящихся траекторий на случай супертреков. Показано, что при использовании метода существенной выборки и метода расщепления может быть достигнута меньшая дисперсия, чем при аналоговом моделировании. При использовании метода русской рулетки дисперсия возрастает, но в этом случае об эффективности метода надо судить по общему времени, потраченному на вычисления.

Проведённое в работе доказательство несмещённости весовой оценки для метода DXTRAN позволяет отнести этот нетривиальный метод к методам расслоённой выборки. Показано, что при использовании DXTRAN всё множество траекторий разбивается на счётное количество подмножеств. Далее вычисляется среднее значение функционала по каждому из подмножеств. Среднее значение по всему множеству определяется как взвешенная сумма средних значений по каждому из подмножеств.

Отдельно рассмотрен случай использования следующей комбинации весовых методов. В результате применения метода DXTRAN образуется один обычный супертрек и некоторое (вообще говоря, случайное) количество DXTRAN-супертреков. К каждому из DXTRAN-супертреков применяется весовой метод расщепления. Наконец, к любому из получившихся супертреков применяется метод русской рулетки. Доказательство для случая использования рассмотренной комбинации весовых методов по структуре похоже на доказательство для метода DXTRAN и опирается на основные шаги, сделанные для каждого весового метода в отдельности.

При $k > 1$ рассматривается вероятностное пространство на $\mathbb{S} \times \mathbb{S} \times \dots \times \mathbb{S}$ (k раз), на котором задана случайная величина $q(S_1, S_2, \dots, S_k)$, а усреднение производится последовательно по всем k аргументам.

Количество слагаемых в (6) выражается огромным числом, и расчёт по этой формуле может быть проблематичен даже на современных компьютерах. Если выполняется свойство аддитивности (4), и используются весовые методы, сохраняющие сумму весов частиц, то есть для любого v выполняется $\sum_{j_v=1}^{m_v} w_{v,j_v} = 1$, то выражение (6) может быть записано в виде

$$Q^* = Q_1^* + Q_2^* + \dots + Q_l^*. \quad (8)$$

Величины Q_v^* , $v = 1, 2, \dots, l$ вычисляются по формуле (6), в которой вместо исходного набора супертреков $\{S_{ij}\}$ используется только его часть при $i = k_{v-1} + 1, k_{v-1} + 2, \dots, k_v$. В работе указан алгоритм выбора индексов $0 = k_0 < k_1 < \dots < k_l = k$. При использовании формулы (8) существенно сокращается количество рассматриваемых комбинаций при вычислении Q^* по формуле (6). Доказательство заключается в применении свойства аддитивности по времени и приведении подобных членов.

Вторая глава заканчивается обоснованием того, что вместо вычисления среднего значения функционала методом Монте-Карло по формуле

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

в случае выполнения свойства (4) можно использовать формулу

$$Q' = \frac{1}{kN} q(S_1, S_2, \dots, S_{kN}), \quad (9)$$

что и делается во многих работах. Для обоснования этого показано, что если детектор удовлетворяет свойству аддитивности по времени, то

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

где C для рассматриваемых приборов порядка единицы. К этому же результату можно прийти, заметив, что формула (9) при выполнении (4) уже представляет собой сумму большого количества независимых реализаций одной и той же случайной величины.

Третья глава посвящена программной реализации моделей и методов, предложенных в первой и второй главах. В качестве транспортного кода выбран код MCNP ввиду 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 (6) необходимо знать хотя бы вес таких супертреков, но выбранный способ допускает сравнительно простой метод восстановления информации о ветвящихся траекториях в двух частных случаях.

В первом случае требуется, чтобы функционал $q(S_1, S_2, \dots, S_k)$ был равен нулю, если хотя бы одна из траекторий S_1, S_2, \dots, S_k не пересекает детектор (схема совпадений). Тогда нет необходимости

восстановления информации о супертреках, не пересекающих границы детекторов. Под этот 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 настраиваются так, чтобы была возможность отследить траектории всех частиц. Под этот случай попадает модель комптоновского гамма-спектрометра при использовании весового метода расщепления, когда расщепление происходит непосредственно перед попаданием частицы в детектор.

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 комплекса программ. Для организации вычислительного процесса разработаны собственные программные средства, за счёт которых выполнено распараллеливание по входным данным.

Четвёртая глава посвящена тестированию разработанного программного обеспечения. Основными целями главы являются проверка правильности программной реализации предложенных моделей и численных методов, численная проверка несмещённости оценок (6) и (8).

Численная проверка несмещённости оценок (6) и (8) проведена сравнением вычисленных аналоговым и весовым способами средних значений одних и тех же величин для серии задач. В тех задачах, где возможно сравнительно простое получение теоретической оценки среднего значения случайной величины Q , результаты расчётов находятся в полном соответствии с теоретической оценкой. Во всех случаях демонстрируется, что в случае использования весовых методов требуемое значение статистической погрешности достигается при меньшем числе разыгрываемых траекторий, чем в случае использования аналоговых методов (см. рис. 3). При использовании весовых методов возможно сокращение требуемого числа разыгрываемых траекторий в 10-1000 раз.

Для модели интроскопа, работающего по методу меченых нейтронов, проведено сравнение расчётного спектра углерода с экспериментальным (см. рис. 4). При сравнении спектров существенным является сохранение положений пиков и их относительных амплитуд. Дрожание экспериментального спектра в областях низких амплитуд обусловлено недостаточным временем сбора статистики.

В последней части главы приведён пример применения разработанных программ для оптимизации геометрических параметров прибо-

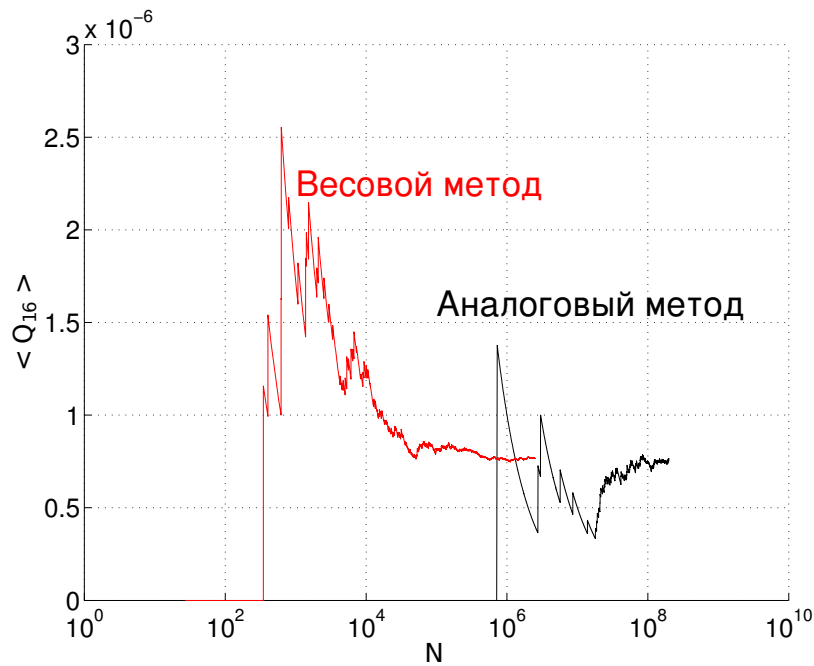


Рис. 3. Зависимость вычисленного среднего количества отчётов в выбранном канале спектрометра от количества статистических испытаний при весовом и аналоговом моделировании.

ра, работающего по схеме двойных рассеяний (комптоновского гамма-спектрометра). Зависимость отношения числа истинных совпадений к общему числу совпадений (5) от расстояния между слоями детекторов H и энергии испускаемых источником гамма-квантов E приведена на рис. 5. На графике видно, что коэффициент (5) увеличивается с уменьшением расстояния H во всём рассмотренном интервале энергий E .

Полученные результаты имеют наглядную физическую интерпретацию. При уменьшении расстояния H между слоями детекторов увеличивается количество зарегистрированных гамма-квантов, рассеянных в первом слое на больший угол, а значит, имеющих меньшую энергию. Вероятность поглощения во втором слое возрастает при уменьшении энергии. Увеличение относительного количества истинных совпадений происходит за счёт уменьшения количества гамма-квантов, не испытавших полного поглощения во втором слое детекторов. Этот же эффект достигается при переходе к более низким энергиям E исходных гамма-квантов. Приведённые рассуждения подтверждаются численным определением количества ложных совпадений, вызванных такими гамма-квантами.

В **заключении** сформулированы основные результаты диссертации. В настоящей работе концепция супертрекков математически строго

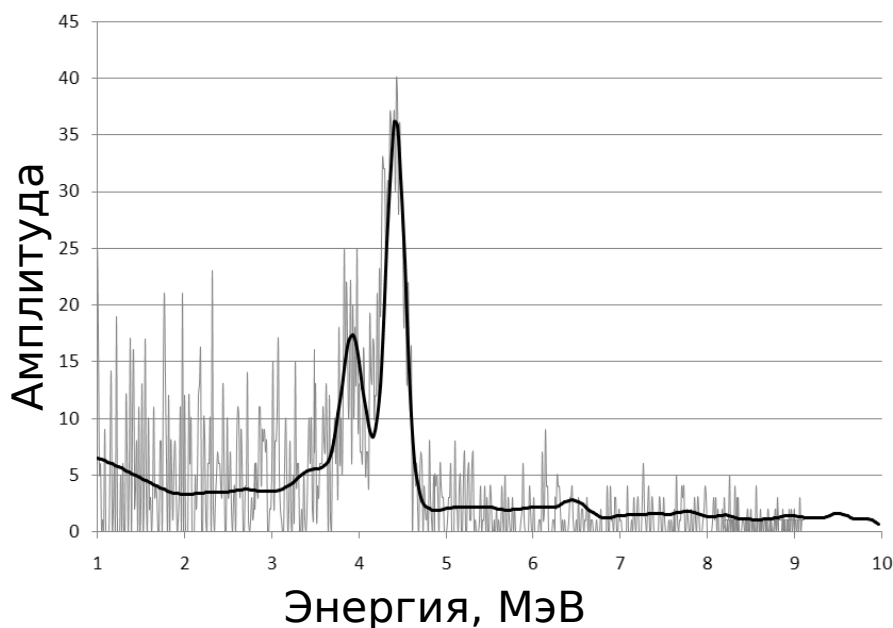


Рис. 4. Сравнение экспериментального (серая ломаная линия) и расчётного (плавная линия) спектров углерода для метода меченых нейтронов.

обоснована и обобщена на случай неаддитивных по траекториям функционалов. 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. Модели спектрометра на основе сцинтилляционного детектора, комптоновского гамма-спектрометра и интроскопа, работающего по методу меченых нейтронов, описаны неаддитивными по траекториям функционалами.
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.

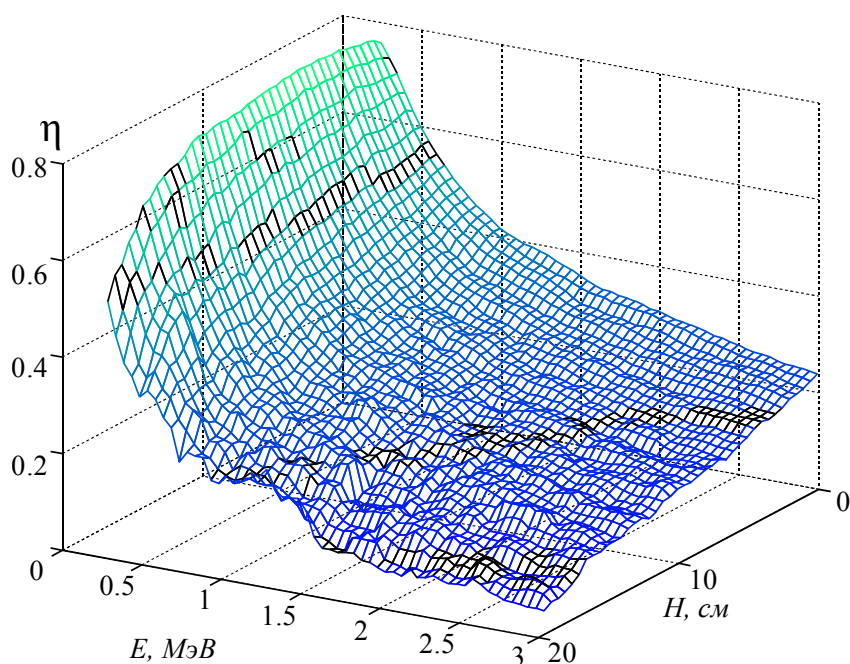


Рис. 5. Зависимость коэффициента η от энергии E и расстояния между слоями H .

5. Исследована зависимость относительного количества истинных совпадений от геометрической конфигурации комптоновского гамма-спектрометра.
6. Рассчитаны базовые спектры углерода, азота и кислорода с использованием модели прибора, работающего по методу меченых нейтронов.

Применённая при доказательстве несмещённости весовой оценки методика позволяет перенести на случай использования концепции супертреков не только рассмотренные весовые методы, но и большинство других, например, поглощение уменьшением веса (*implicit capture*) и форсирование столкновений (*forced collision*). Весовые методы, предлагаемые в работе, позволяют многократно ускорить расчёты при правильном их применении.

В **Приложении А** приведен способ строгого построения вероятностного пространства на множестве ветвящихся траекторий в виду явного недостатка информации в общедоступной литературе по этой теме.

В **Приложении Б** содержатся 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.

В **Приложении В** содержится описание способа подключения транспортного кода программы MCNP и изменённый исходный код подпрограммы TallyX из пакета MCNP с подробными комментариями.

В **Приложении Г** для справки приведено математическое обоснование метода Монте-Карло.

В **Приложении Д** приведены результаты расчёта базовых амплитудно-временных спектров углерода, азота и кислорода для метода меченых нейтронов при помощи разработанной модели интроскопа.

Публикации по теме проводимых исследований

В изданиях из списка ВАК

1. N. V. Eremin, A. A. Paskhalov, S. S. Markochev, E. A. Tsvetkov et al. New experimental method of investigation the rare nuclear transformations accompanying atomic processes: bremsstrahlung emission in spontaneous fission of ^{252}Cf // International Journal of Modern Physics E (IJMPE). — 2010. — V. 19, Issues: 5-6(2010). — Pp. 1183-1188.
2. Еремин Н.В., Маркочев С.С., Пасхалов А.А., Цветков Е.А. Измерение выхода высокоэнергетичных γ -квантов, сопровождающих спонтанное деление ядер ^{252}Cf // Известия РАН. Серия физическая. — 2011. — Т. 75, №4. — С. 576-578.
3. Цветков Е.А. Эмпирическое исследование статистических свойств некоторых генераторов псевдослучайных чисел // Математическое моделирование. — 2011. — Т. 23, №5. — С. 81 — 94.

В других изданиях

4. Цветков Е.А., Шаховский В.В. Обоснование DXTRAN модификации метода Монте-Карло на основе соотношений взаимности для различающихся систем // Труды МФТИ. — 2009. — Т. 1, № 2. — С. 207 — 215.
5. E. Tsvetkov, V. Shahovsky, Coincidence schemes performance estimator // Abstracts of the 7th International Conference on Luminescence Detectors and Transformers of Ionizing Radiation (LUMDETR-2009), Krakow (Poland), 2009. — Pp. 309.

6. Цветков Е.А., Шаховский В.В. Вычисление нелинейных функционалов поля излучения в методах Монте-Карло // Труды 51-й научной конференции МФТИ «Современные проблемы фундаментальных и прикладных наук». — 2008. — Ч. 3. — С. 53–54.
7. Цветков Е.А., Шаховский В.В. Обзор методов моделирования схем совпадений // Труды Пятой всероссийской конференции «Проблемы обеспечения взрывобезопасности и противодействия терроризму», Санкт-Петербург, 20-21 апреля 2010 г.
8. Цветков Е.А. Вычисление неаддитивных функционалов с использованием весовых методов Монте-Карло для разыгрывания траекторий частиц // Труды 53-й научной конференции МФТИ «Современные проблемы фундаментальных и прикладных наук». Часть VII. Управление и прикладная математика. Том 1. — М.: МФТИ, 2010. — С. 35 — 37.
9. Tsvetkov E.A. Empirical Tests for Statistical Properties of Some Pseudorandom Number Generators // Mathematical Models and Computer Simulations. — 2011. — Vol. 3, No. 6. — Pp. 727–735. (C) Pleiades Publishing, Ltd., 2011. Original Russian Text © E.A. Tsvetkov, 2011, published in Matematicheskoe Modelirovanie. — 2011. — Vol. 23, №. 5. — Pp. 81–94.
10. Обоснование концепции супертреков для расчета неБольцмановских функционалов весовыми методами в прикладных задачах радиационной физики / Цветков Е.А.; МФТИ (ГУ). — М., 2011. — 14 с.: ил. — Библиогр.: 12 назв. — Рус. — Деп. в ВИНТИ 23.09.2011 №410-B2011.