

УДК 519.6

DOI: 10.53403/9785951505309_2022_27_1_452

Условие выбора мажоранты в методе «максимального сечения»

Н. В. Иванов

При решении уравнений переноса частиц методом Монте-Карло для упрощения моделирования пробегов частиц широко используется метод «максимального сечения». На численном примере показано, что этот метод приводит к правильному распределению пробегов частиц только при соблюдении одного условия: соответствующая максимальному сечению плотность распределения пробегов должна быть нормирована.

Введение

Решение задач переноса методом Монте-Карло находится путем построения траекторий частиц. Столкновения частицы с атомами среды делят траекторию на отрезки случайной длины. На каждом отрезке движение частицы описывается уравнением $\vec{r}(t) = \vec{r}_0 + \vec{\Omega}t$, где \vec{r}_0 , $\vec{\Omega}$ – положение и направление полета в начале отрезка, t – пройденный путь. Для постоянной интенсивности столкновений σ длина отрезка (пробега) разыгрывается из экспоненциального распределения с плотностью $p(t) = \sigma \exp(-\sigma t)$. В неоднородной среде интенсивность является функцией пути: $\sigma(t) = \sigma(\vec{r}(t))$. В этом случае пробег находится из обобщенного экспоненциального распределения с плотностью

$$p(t, \sigma) = \sigma(t) \exp(-T(t)), \quad t > 0, \quad T(t) = \int_0^t \sigma(u) du, \quad (1)$$

где $T(t)$ – оптическая толщина отрезка пути t . Стандартный алгоритм розыгрыша пробега τ сводится к решению уравнения

$$T(\tau) = -\ln(1 - \xi), \quad (2)$$

где ξ – случайное число, равномерно распределенное в интервале (0, 1). В некоторых случаях плотность (1) может быть ненормированной на единицу, тогда пробеги находятся из уравнения

$$T(\tau) = -\ln(1 - C\xi), \quad (3)$$

где $C = 1 - \exp(-T(\infty))$ – нормировка плотности $p(t, \sigma)$.

Для произвольной интенсивности решение уравнений (2), (3) может потребовать больших вычислительных затрат. В этом случае используется метод *максимального сечения*. Он основан на выборе мажорантной интенсивности $\sigma_m(t) \geq \sigma(t)$ и определении пробега с плотностью $p(t, \sigma)$ с помощью следующего алгоритма.

Шагами строится последовательность случайных величин S_k :

$$S_0 = 0, \quad S_k = S_{k-1} + t_k, \quad k = 1, 2, \dots,$$

где t_k – случайные пробеги, распределенные с условными плотностями

$$f_m(t, S_{k-1}) = \sigma_m(S_{k-1} + t) \exp(T_m(S_{k-1}) - T_m(S_{k-1} + t)), \quad T_m(s) = \int_0^s \sigma_m(s') ds'.$$

Последовательность S_k обрывается с вероятностью $\sigma(S_k)/\sigma_m(S_k)$ и пробег с плотностью $p(t, \sigma)$ полагается равным $\tau = S_k$. Розыгрыш вероятности обрыва сводится к проверке на каждом шаге условия $\xi_k \leq \sigma(S_k)/\sigma_m(S_k)$, где ξ_k – независимые случайные числа. Значения t_k находятся из уравнения

$$\int_0^{t_k} \sigma_m(S_{k-1} + t) dt = -\ln(1 - C_{k-1}\xi), \quad C_{k-1} = \int_0^{\infty} f(t, S_{k-1}) dt = 1 - \exp(T_m(S_{k-1}) - T_m(\infty)),$$

где C_{k-1} – нормировка плотности $f(t, S_{k-1})$.

В задачах переноса частиц шаг алгоритма заканчивается столкновением. Последнему шагу соответствует реальное столкновение, а остальные столкновения называются фиктивными. Эффективность метода определяется средним числом столкновений, затраченных на моделирование одного реального столкновения. Обоснованию метода посвящен ряд статей [1–3], и он широко используется при решении задач переноса частиц [3, 4]. Отметим, что в этих работах выбор мажоранты ограничивается только эффективностью метода.

Покажем на простом примере, что мажоранта должны удовлетворять некоторому условию.

Пусть интенсивность столкновений имеет вид $\sigma(t) = \sigma_0 \exp(-\alpha t)$. Тогда нормированная плотность распределения пробегов равна

$$p(t) = \frac{\sigma(t)e^{-T(t)}}{C}, \quad T(t) = \sigma_0(1 - e^{-\alpha t}), \quad C = 1 - e^{-\sigma_0/\alpha}.$$

Для моделирования этой плотности рассмотрим две мажоранты:

$$\sigma_1(t) = \sigma_0 \exp(-\hat{\alpha}t), \quad \hat{\alpha} \leq \alpha \quad \text{и} \quad \sigma_2(t) = \frac{\sigma_0}{1 + \alpha t}.$$

Соответствующие нормированные плотности пробегов равны

$$p_1(t) = \frac{\sigma_1(t)e^{-T_1(t)}}{C_1}, \quad T_1(t) = \frac{\sigma_0(1 - e^{-\hat{\alpha}t})}{\hat{\alpha}}, \quad C_1 = 1 - e^{-\sigma_0/\hat{\alpha}},$$

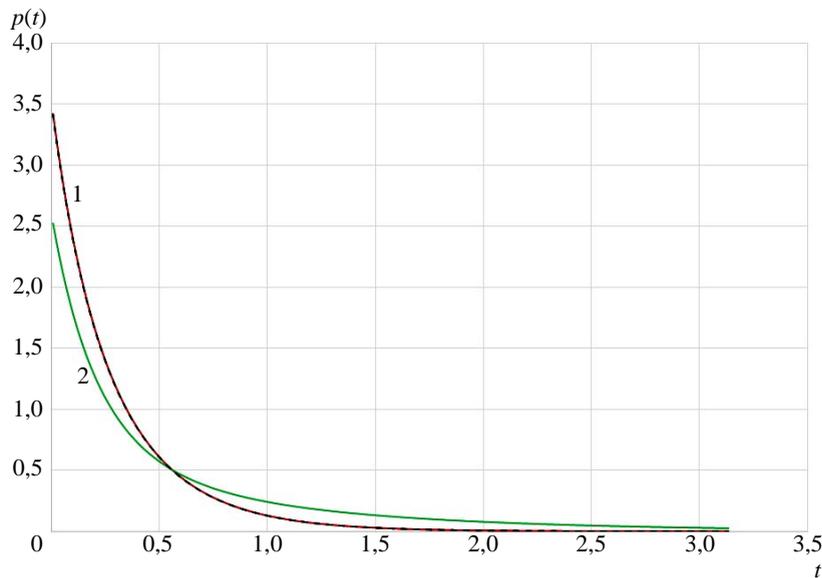
$$p_2(t) = \frac{\sigma_2(t)e^{-T_2(t)}}{C_2}, \quad T_2(t) = \frac{\sigma_0 \ln(1 + \alpha t)}{\alpha}, \quad C_2 = 1.$$

Для этих мажорант, описанный алгоритм легко реализуется. На k -м шаге пробеги t_{ik} из плотностей $p_i(t)$ разыгрываются по формулам

$$t_{1k} = -\frac{1}{\hat{\alpha}} \ln \left(1 + \frac{\hat{\alpha} \ln(1 - \xi C_1)}{\sigma_1(S_{k-1})} \right), \quad S_k = \sum_{n=1}^k t_{1n},$$

$$t_{2k} = \frac{(\exp(-\alpha \ln(1 - \xi C_2)/\sigma_0))}{\alpha \sigma_2(S_{k-1})}, \quad S_k = \sum_{n=1}^k t_{2n}.$$

Для сравнения мажорант были выполнены расчеты плотности пробегов $p(t)$ для $\alpha = 3$ путем моделирования 10^{10} траекторий. Значения плотности в точках t_k оценивались как интегральные средние по окрестности $(t_k - h/2, t_k + h/2)$, $h = \pi/200$. Относительная точность расчетов составляет не менее 0,01 %. Результаты расчетов приведены на рисунке.



Расчеты плотности $p(t)$ с помощью мажорант $\sigma_1(t)$ и $\sigma_2(t)$: 1 – аналитическое решение, 2 – расчет с первой мажорантой ($\hat{\alpha} = 2$), ---- – расчет со второй мажорантой

Видно, что расчет плотности пробегов со второй мажорантой ($\sigma_2(t)$) совпадает с аналитическим решением. В то же время расчет с первой мажорантой ($\sigma_1(t)$) заметно отличается.

Причина несовпадения становится понятной из следующих рассуждений. На малом интервале Δt вероятность более одного столкновения является величиной порядка $o(\Delta t)$. Следовательно, вероятность $P\{\tau \in \Delta t\}$ пробега τ из интервала Δt с точностью до бесконечно малых более высокого порядка равна $\sigma(t)\Delta t$. Обозначим через $P\{\tau_m \in \Delta t\}$ вероятность пробега из интервала Δt для мажорантной интенсивности. Тогда, используя теорему умножения вероятностей, получаем, что в методе максимального сечения

$$P\{\tau \in \Delta t\} = \frac{\sigma(t)}{\sigma_m(t)} P\{\tau_m \in \Delta t\} = \frac{\sigma(t)}{\sigma_m(t)} \int_t^{t+\Delta t} f_m(t', s_0) dt' = \frac{\sigma(t)}{\sigma_m(t)} \frac{\sigma_m(t)}{C_0} \Delta t + o(\Delta t).$$

Следовательно, этот метод приводит к правильному результату только при условии $C_0 = 1$, которое эквивалентно требованию

$$T_m(t) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \infty. \quad (4)$$

Условию (4) удовлетворяет только вторая мажоранта. В практических расчетах обычно используются постоянные мажоранты, которые всегда удовлетворяют условию (4). Однако в экспоненциальной атмосфере более эффективным может быть метод максимального сечения с мажорантой, зависящей от толщины атмосферы. Докажем, что при выполнении условия (4) алгоритм метода максимального сечения приводит к правильному обобщенному экспоненциальному распределению.

Для постоянной мажоранты доказательство приведено в работе [4]. Для переменной мажоранты оно проводится аналогичным образом. Пусть для проверки неравенств $\xi_k \leq \sigma(S_k)/\sigma_m(S_k)$ используется последовательность ξ_1, ξ_2, \dots независимых равномерно распределенных величин на $(0, 1)$. Согласно алгоритму, если k_0 – первое из значений k , для которого выполняется это неравенство, то S_{k_0} является реализацией случайной величины с плотностью распределения $p(t, \sigma)$. Действительно, функция распределения величины S_{k_0} определяется равенством

$$P\{S_{k_0} < x\} = \sum_{n=1}^{\infty} P(E_n), \quad (5)$$

где E_n есть событие, что реальным столкновением закончится n -й шаг и $S_n < x$:

$$E_n = \{\xi_1 > g(S_1), \xi_2 > g(S_2), \dots, \xi_{n-1} > g(S_{n-1}), \xi_n \leq g(S_n), S_n < x\}, \quad g(x) < \sigma(x)/\sigma_m(x).$$

При фиксированных значениях t_n : $t_1 = x_1, t_2 = x_2, \dots, t_n = x_n$ и, следовательно, фиксированных $S_k = \sum_{i=1}^{k-1} x_i$ получаем

$$P\{E_n | \xi_i = x_i (i=1, \dots, n)\} = \prod_{k=1}^{n-1} P\left\{\xi_k > g\left(\sum_{i=1}^k t_i\right) \middle| \xi_i = x_i (i=1, \dots, k)\right\} P\left\{\xi_n \leq g\left(\sum_{i=1}^n t_i\right) \middle| \xi_i = x_i (i=1, \dots, n)\right\} = g\left(\sum_{i=1}^n x_i\right) \prod_{k=1}^{n-1} q\left(\sum_{i=1}^k x_i\right),$$

где $q(x) = 1 - g(x)$.

Поскольку все случайные величины t_k независимы и имеют нормированные плотности $f(t, S_{k-1}) = f_m(t, S_{k-1})/C_{k-1}$, то

$$P\{E_n\} = \int_0^x dx_1 f(x_1, S_0) \int_0^{x-x_1} dx_2 f(x_2, S_1) \int_0^{x-x_1-x_2} \dots \int_0^{x-x_1-\dots-x_{n-1}} dx_n \times \\ \times f(x_n, S_{n-1}) q(x_1) q(x_1+x_2) \dots q(x_1+\dots+x_{n-1}) g(x_1+\dots+x_n). \quad (6)$$

Положим $y_j = \sum_{i=1}^j x_i$ и учтем, что при выполнении условия (4) все $C_k = 1$. Тогда

$$f(x_k, S_{k-1}) = \sigma_m(y_k) \exp(T_m(y_{k-1}) - T_m(y_k)).$$

Подставляя эти выражения в (6), получаем

$$P\{E_n\} = \int_0^x dx_1 \sigma_m(y_1) \int_0^{x-y_1} dx_2 \sigma_m(y_2) \int_0^{x-y_2} dx_3 \dots \int_0^{x-y_{n-1}} dx_n \sigma_m(y_n) e^{-T_m(y_n)} q(y_1) q(y_2) \dots q(y_{n-1}) g(y_n).$$

Так как x_i ($i = 1, 2, \dots, n$) меняются в пределах $0 \leq x_i \leq x - \sum_{k=1}^{i-1} x_k$, то y_j изменяются в пределах $y_{j-1} \leq y_j \leq x$. Поэтому, делая замену переменных в (6) и меняя порядок интегрирования, получаем

$$P\{E_n\} = \int_0^x dy_n \int_0^{y_n} dy_{n-1} \dots \int_0^{y_2} dy_1 \sigma_m(y_1) \sigma_m(y_2) \dots \sigma_m(y_n) e^{-T_m(y_n)} q(y_1) q(y_2) \dots q(y_{n-1}) g(y_n).$$

Воспользуемся равенством из [3]:

$$\int_0^{y_n} \sigma_m(y_{n-1}) q(y_{n-2}) dy_{n-1} \dots \int_0^{y_2} \sigma_m(y_1) q(y_1) dy_1 = \frac{1}{(n-1)!} \left(\int_0^{y_n} \sigma_m(u) q(u) du \right)^{n-1}.$$

Учитывая его, имеем

$$P\{E_n\} = \frac{1}{(n-1)!} \int_0^x dy_n e^{-T_m(y_n)} \sigma_m(y_n) g(y_n) \left(\int_0^{y_n} \sigma_m(u) q(u) du \right)^{n-1}.$$

Подставляя это выражение в (5), получаем

$$P\{S_{k_0} < x\} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(n-1)!} \int_0^x e^{-T_m(y_n)} \sigma_m(y_n) g(y_n) \left(\int_0^{y_n} \sigma_m(u) q(u) du \right)^{n-1} dy_n =$$

$$= \int_0^x e^{-T_m(y) + \int_0^y \sigma_m(u) q(u) du} \sigma_m(y) g(y) dy = \int_0^x e^{-\int_0^y \sigma_m(u) g(u) du} \sigma_m(y) g(y) dy = 1 - e^{-\int_0^x \sigma_m(u) g(u) du}.$$

Следовательно, при условии (4) метод максимального сечения приводит к обобщенному экспоненциальному распределению.

Список литературы

1. Михайлов Г. А., Аверина Т. А. Алгоритм максимального сечения в методе Монте-Карло // Докл. Академии наук. 2009. Т. 428, № 2. С. 163–165.
2. Аверина Т. А. Методы статистического моделирования неоднородного пуассоновского ансамбля // Сибирский журнал вычисл. математики. 2009. Т. 12, № 4. С. 361–368.

3. Михайлов Г. А., Рагузинский С. В. Модифицированный метод мажорантной частоты для численного моделирования обобщенного экспоненциального распределения // Докл. Академии наук. 2012. Т. 444, № 4. С. 28–30.
4. Ермаков С. М. Метод Монте-Карло и смежные вопросы. – М.: Наука, 1971.
5. Соболев И. М. Численные методы Монте-Карло. – М.: Наука, 1973.

Choice Condition for the Majorant in «Maximum Cross-Section» Method

N. V. Ivanov

When solving particle transfer equations using Monte-Carlo method to simplify the simulation of paths of particles the method of maximum cross-section is widely used. Using a numerical example we show that this method results into the correct distribution of paths of particles if only one condition is observed: the path distribution density that corresponds to the respective maximum cross-section should be normalized.