

К обоснованию модификации метода максимального сечения

В. С. АНТЮФЕЕВ

*Институт вычислительной математики
и математической геофизики СО РАН, Новосибирск, Россия
e-mail: ant@osmf.sscs.ru*

Рассматривается метод максимального сечения, используемый при решении задач переноса излучения методом Монте-Карло в неоднородной среде. Кратко описаны стандартный и модифицированный способы моделирования длины пробега. Представлено вероятностное доказательство модификации этого метода.

Ключевые слова: метод Монте-Карло, моделирование, вероятностное распределение, длина свободного пробега, фиктивное рассеяние, скачкообразный процесс.

Введение

Расчет характеристик поля рассеянного излучения методом Монте-Карло связан с моделированием траекторий частиц, и это занимает основную часть времени расчета. Метод максимального сечения предназначен для ускорения моделирования траекторий.

Уравнение переноса излучения и его параметры рассмотрены в работах [1–3]. Приведем некоторые используемые ниже термины и обозначения. Траектория частицы — это ломаная линия, случайные точки r_k столкновения частицы с частицами среды — ее узлы. Плотность распределения случайной длины $\ell_k = |r_{k-1} - r_k|$ пробега частицы

$$f_\sigma(t) = \sigma(r_{k-1} + t\omega_k) \exp \left[- \int_0^t \sigma(r_{k-1} + u\omega_k) du \right], \quad t \geq 0, \quad (1)$$

где ω — единичный вектор направления пробега, $\sigma(r) \geq 0$ — переменное сечение ослабления среды. Величина $\ell = \ell_k$ моделируется за два шага.

Сначала моделируется оптическая длина свободного пробега $\tau = \tau(r_{k-1}, r_k)$:

$$\tau = \int_0^\ell \sigma(r_{k-1} + t\omega_k) dt. \quad (2)$$

Здесь τ имеет экспоненциальное распределение, ее моделируют по формуле $\tau = -\ln(\alpha)$ [1–4] (α — случайная величина, равномерно распределенная на $[0, 1]$). Затем (2) рассматривается как уравнение относительно ℓ и вычисляется ℓ .

Для удобства моделирования траекторий $\sigma(r)$ приближают кусочно-постоянной функцией. Область разбивается на подобласти S_1, S_2, \dots , в каждой из которых значения $\sigma(r)$ считаются постоянными: $\sigma(r) = \sigma_k$ при $r \in S_k$. Тогда (2) принимает вид

$$\tau = \sum_{k=1}^m \sigma_k d_k, \quad (3)$$

и искомая длина $\ell = d_1 + \dots + d_m$.

Первый шаг — моделирование τ — не вызывает затруднений. Однако последующее вычисление ℓ из предыдущей формулы и из (3) представляет собой трудоемкую процедуру: необходимо заранее вычислить точки пересечения луча $\{r = r_k + t \omega_{k+1}\}$ с границами областей S_k и длины отрезков d_k , что значительно увеличивают трудоемкость моделирования.

1. Метод максимального сечения и его модификация

В работе [4] предложен метод максимального сечения моделирования длины пробега ℓ в средах с переменным сечением $\sigma(r)$. Зададим постоянную мажоранту $\Sigma : \Sigma \geq \sigma(r)$ для $\sigma(r)$. Следующий алгоритм задает моделирование ℓ :

- 1) полагаем $\ell = 0$;
- 2) моделируем случайную величину $\Delta\ell$ с экспоненциальной плотностью распределения

$$f_{\Sigma}(t) = \Sigma \exp(-\Sigma t), \quad t \geq 0 \quad (4)$$

($\Delta\ell$ — длина свободного пробега в среде с постоянным сечением Σ);

- 3) увеличиваем длину ℓ : $\ell \rightarrow \ell + \Delta\ell$;
- 4) моделируем $\alpha \in [0, 1]$ и проверяем, выполняется ли неравенство

$$\alpha \leq \sigma(r + (\ell + \Delta\ell)\omega) / \Sigma :$$

если последнее не выполняется, возвращаемся к п. 2, если выполняется — заканчиваем моделирование.

Таким образом, ℓ представляется в виде суммы

$$\ell = \Delta\ell_1 + \Delta\ell_2 + \dots + \Delta\ell_{\mu}. \quad (5)$$

Здесь количество μ случайных слагаемых $\Delta\ell$ также случайное:

$$\mu = \min \left\{ n : \alpha \leq \Sigma \left(r + \sum_{k=1}^n \Delta\ell_k \omega_k \right) / \Sigma \right\}.$$

Обычно точки

$$s_n = r + \sum_{k=1}^n \Delta\ell_k \omega_k, \quad n = 1, \dots, (\mu - 1),$$

интерпретируют как точки “фиктивного рассеяния” (последняя μ -я точка — точка “истинного рассеяния”). Моделирование слагаемых $\Delta\ell_k$ в среде с постоянным сечением не является трудоемким, если число фиктивных точек рассеяния невелико. В данном случае не надо вычислять точки пересечения луча пробега с границами областей S_k и числа d_k . В этом преимущество метода максимального сечения перед стандартным методом моделирования. Доказано [4], что моделирование длины пробега методом максимального сечения не изменяет ее вероятностное распределение.

В ряде задач значения функции $\sigma(r)$ сильно варьируют, и постоянная мажоранта Σ в некоторых областях значительно превышает функцию $\sigma(r)$. В результате количество фиктивных столкновений и слагаемых $\Delta\ell_k$ в сумме (5) оказывается очень большим, что снижает эффективность метода максимального сечения. В этом случае для увеличения

эффективности лучше использовать не постоянную, а кусочно-постоянную мажоранту сечения ослабления, которая лучше аппроксимирует функцию $\sigma(r)$.

В [5] предложена соответствующая модификация метода максимального сечения. Здесь слагаемые $\Delta\ell_k$ являются зависимыми случайными величинами, и их вероятностные распределения различны. Пусть уже смоделированы слагаемые $\Delta\ell_1, \Delta\ell_2, \dots, \Delta\ell_{k-1}$ и вычислена очередная точка фиктивного рассеяния r_{k-1} ; тогда плотность следующей длины $\Delta\ell_k$

$$f_{\Sigma}(t) = \Sigma(r_{k-1} + t\omega_k) \exp \left[- \int_0^t \Sigma(r_{k-1} + u\omega_k) du \right], \quad t \geq 0. \quad (6)$$

Краткое обоснование этой модификации состоит в преобразовании уравнения переноса излучения. Точнее говоря, в [5] доказано, что моделирование длины пробега ℓ методом максимального сечения для $\Sigma(t) \neq \text{const}$ не изменяет функцию потока излучения, которая является решением уравнения переноса излучения.

В работе [8] приводится доказательство данного факта, не опирающееся на уравнение физического процесса. В следующем разделе дано еще одно доказательство, основанное на использовании уравнения Колмогорова — Феллера для функции распределения чисто разрывного процесса.

2. Вычисление вероятностной плотности распределения длины пробега

В области, где происходит перенос частиц, зафиксируем точку столкновения $r = r_{k-1}$, направление пробега $\omega = \omega_k$ после столкновения в r и выделим луч $\{r + t\omega : t \geq 0\}$. Последующие выкладки относятся к этому лучу. Нас будут интересовать лишь одномерные вероятностные распределения. Вместо точек $(r + t\omega) \in R^3$ рассмотрим точки t на луче и соответственно функции одной переменной t .

Итак, пусть на луче $\{t \geq 0\}$ заданы функция сечения $\sigma(t)$ и ее мажоранта $\Sigma(t)$. Отметим на данном луче последовательность случайных точек

$$s_1, s_2, \dots, s_{\mu}, \quad s_k = \sum_{i=1}^k \Delta\ell_i. \quad (7)$$

соответствующих точкам рассеяния частицы на одном звене траектории: точки s_{μ} — истинному рассеянию, остальные точки — фиктивному рассеянию (рис. 1).

Теорема. Вероятностная плотность случайной величины s_{μ} имеет вид

$$f_{\sigma}(t) = \sigma(t) \exp \left[- \int_0^t \sigma(u) du \right], \quad t \geq 0.$$

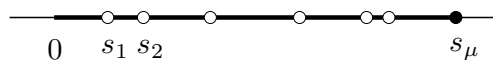


Рис. 1. Звено траектории: точки истинного (●) и фиктивного (○) рассеяния

Доказательство. Запишем уравнение Колмогорова — Феллера [6, 7] для функции распределения чисто разрывного случайного процесса $\xi(t)$, следуя обозначениям [6]:

$$\frac{\partial F(t, x; \tau, y)}{\partial \tau} = - \int_{-\infty}^y p(\tau, z) d_z F(t, x; \tau, y) + \int_{-\infty}^{\infty} p(\tau, z) G(\tau, z, y) d_z F(t, x; \tau, z). \quad (8)$$

Здесь

1 — t_k — моменты скачков процесса, x, y, z — значения выборочных функций;

2 — $F(t, x; \tau, y)$ (функция распределения процесса $\xi(t)$) задает вероятность события $\{\xi(\tau) \leq y \mid \xi(t) = x\}$, $t < \tau$; $d_z F(t, x; \tau, y)$ — вероятностная мера Стильтеса;

3 — $G(t, x, y) \equiv G(t, x \rightarrow z \leq y)$ — условная функция распределения величины $\xi(\tau)$ после скачка при условии, что в момент t произошел скачок, а непосредственно перед скачком $\xi(t-0) = x$;

4 — $p(t, x) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\text{вероятность скачка в промежутке } (t, t + \Delta t)}{\Delta t}$; $\xi(\tau) = x$ до скачка.

Ниже (см. пункты 1–3) определим функциональные характеристики процесса $\xi(t)$ таким образом, чтобы вероятностные распределения соответствующих членов последовательностей $\{t_1, t_2, \dots\}$ и $\{s_1, s_2, \dots\}$ совпали. Кроме того, фиксируем значения некоторых переменных в (8). Это позволит свести исходную задачу к решению обыкновенного дифференциального уравнения.

1. Пусть каждая выборочная функция рассматриваемого процесса (рис. 2) принимает лишь значения 0 и 1. В таком случае траекторию процесса можно записать в следующем виде:

$$\xi(t) = \begin{cases} 1, & 0 \leq t \leq t_\nu, \\ 0, & t > t_\nu. \end{cases}$$

Эта функция испытывает скачок (разрыв) лишь в точке t_ν . Однако данный процесс испытывает (фиктивные) скачки в точках слева и справа от t_ν .

Итак, траектории процесса $\xi(t)$ удовлетворяют двум условиям:

— начальная точка процесса $\xi(t)$ фиксирована: $t = 0$, $\xi(0) = 1$ (отсюда следует, что все рассматриваемые далее значения τ положительны);

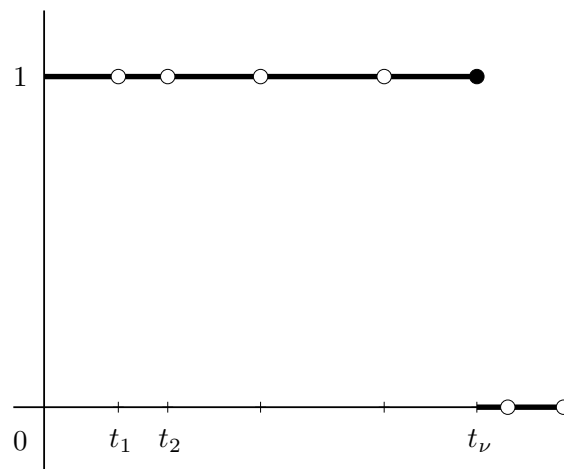


Рис. 2. Траектория чисто разрывного процесса $\xi(t)$: \bullet — точка истинного скачка, \circ — точки фиктивных скачков

— процесс имеет лишь один истинный скачок; нас интересует вероятностное распределение момента t_ν этого скачка; после него процесс примет нулевое значение, что эквивалентно утверждению $\{\xi(t) \leq 0 \text{ при } t > t_\nu\}$.

Данные условия позволяют упростить вид уравнения (8). Фиксируем значения переменных t, x, y в соответствующих частях (8) и перепишем его в виде

$$\frac{\partial F}{\partial \tau}(0, 1; \tau, 0) = - \int_{-\infty}^0 p(\tau, z) d_z F(0, 1; \tau, z) + \int_{-\infty}^{\infty} p(\tau, z) G(\tau, z, 0) d_z F(0, 1; \tau, z).$$

Множество значений процесса состоит из точек 0 и 1. Следовательно, при фиксированном $\tau > 0$ вероятностная мера $d_z F(0, 1; \tau, z)$ сосредоточена на множестве $\{z = 0, 1\}$. В силу этого оба интеграла по мере $d_z F(\cdot)$ можно переписать в виде сумм, причем первая сумма содержит лишь одно слагаемое. Обозначим как $m(\tau, z)$ вероятностную меру точек $\{z\}$, ($z = 0, 1$). Теперь уравнение (8) принимает вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial \tau}(0, 1; \tau, 0) = & - [p(\tau, 0) \cdot m(\tau, 0)] + \\ & + [p(\tau, 1) G(\tau, 1, 0) \cdot m(\tau, 1) + p(\tau, 0) G(\tau, 0, 0) \cdot m(\tau, 0)]. \end{aligned} \quad (9)$$

Таким образом, уравнение (8) относительно функции четырех переменных преобразовано в уравнение относительно функции одной переменной τ . Здесь следует также правильно задать функции $p(\cdot), G(\cdot)$ в соответствии с целью, поставленной выше, и вычислить значения меры $m(\cdot)$ через значения функции F .

2. Зададим функцию $p(\tau, z)$, $z = 1, 0$, отвечающую за распределение случайных промежутков времени $(t_k - t_{k-1})$ между моментами скачков процесса $\xi(t)$ (фиктивных или истинных). Определим функцию $p(\cdot)$ так, чтобы распределения разностей $(t_k - t_{k-1})$ совпадали с распределениями соответствующих разностей $s_k - s_{k-1} \equiv \Delta \ell_k$.

Согласно [6], обозначим через $p_n(t, x, \tau)$ вероятность того, что, отправляясь из состояния x в момент t , до момента τ процесс n раз изменит свое состояние. В работе [6] приведены формулы для всех $n \geq 0$. В частности, вероятность того, что от момента $t = t_k$ до момента τ процесс не совершит ни одного скачка ($n = 0$), равна

$$p_0(t, x, \tau) = \exp \left[- \int_t^\tau p(u, x) du \right],$$

а вероятность хотя бы одного скачка в промежутке (t, τ)

$$P_\xi(\tau) = 1 - \exp \left[- \int_t^\tau p(u, x) du \right].$$

Последнее утверждение, очевидно, эквивалентно следующему: вероятность того, что после момента t скачок произойдет раньше момента τ , равна $P_\xi(\tau)$. Другими словами, $P_\xi(\tau)$ представляет собой функцию распределения первого (после момента t) скачка.

С другой стороны, известно [1–4], что функция распределения случайной длины пробега $\Delta \ell$ для частицы, стартовавшей в точке t , имеет вид

$$P_\Sigma(\tau) = 1 - \exp \left[- \int_t^\tau \Sigma(u) du \right].$$

Отличие этой формулы от предыдущей в том, что лишь под знаком интеграла стоит другая функция. Напомним, что мы хотим задать функцию $p(t, u)$ так, чтобы распределения соответствующих случайных величин $(t_k - t_{k-1})$ и $(s_k - s_{k-1})$ совпадали. Поэтому пусть

$$p(t, u) \equiv \Sigma(u), \quad u = 0, 1. \quad (10)$$

В данном случае функции распределения P_ξ и P_Σ совпадают. Следовательно, для всех k распределение величины t_k совпадает с распределением величины s_k . Итак, функция $p(u, x)$ выбрана так, что условие 2 выполнено.

3. Для каждого скачка процесса функция $G(\tau, z, y)$, $z = 1, 0$, определяет вероятность события, будет ли этот скачок истинным. Определим $G(\cdot)$ так, чтобы распределение момента истинного скачка t_ν совпало с распределением длины истинного пробега частицы s_μ . Напомним, что согласно определению $G(\tau, z, y)$ — это (условная) вероятность того, что после скачка процесс перейдет в состояние $\{\leq y\}$. Нас интересует лишь переход процесса в состояние 0, поэтому значение последнего аргумента в левой части (8) равно 0. Перепишем соответственно выражение для $G(\tau, z, y)$ (здесь $z = 0$ или 1):

$$G(\tau, z, y) = G(\tau, z \rightarrow 0) \equiv G(\tau, z, 0).$$

Вероятность перехода $(0 \rightarrow 0)$ равна 1, так как процесс, попав в 0, остается там навсегда. В то же время скачок $(1 \rightarrow 0)$ соответствует истинному рассеянию частицы. Однако акт истинного рассеяния происходит с вероятностью $\sigma(t)/\Sigma(t) \leq 1$ (см. п. 4 алгоритма моделирования длины $\Delta\ell$). Поэтому следует определить значение $G(\cdot)$ следующим образом:

$$G(\tau, z, 0) = \begin{cases} 1, & z = 0, \\ \frac{\sigma(t)}{\Sigma(t)}, & z = 1. \end{cases} \quad (11)$$

Тогда распределение величины t_ν совпадает с распределением s_μ . Таким образом, функция $G(\tau, z, 0)$ выбрана так, что условие 3 выполнено.

Учитывая п. 3 и 4 для p , G , перепишем уравнение (9) в виде

$$\frac{\partial F}{\partial \tau}(0, 1; \tau, 0) = -[\Sigma(\tau) \cdot m(\tau, 0)] + \left[\Sigma(\tau) \cdot \frac{\sigma(\tau)}{\Sigma(\tau)} \cdot m(\tau, 1) + \Sigma(\tau) \cdot 1 \cdot m(\tau, 0) \right],$$

или

$$\frac{\partial F}{\partial \tau}(0, 1; \tau, 0) = -[\Sigma(\tau) \cdot m(\tau, 0)] + [\sigma(\tau) \cdot m(\tau, 1) + \Sigma(\tau) \cdot m(\tau, 0)],$$

или

$$\frac{\partial F}{\partial \tau}(0, 1; \tau, 0) = \sigma(\tau) \cdot m(\tau, 1). \quad (12)$$

Согласно определению, $F(0, 1; \tau, 0) = P(t_\nu < \tau)$, т.е. $F(0, 1; \tau, 0)$ — искомая функция распределения величины t_ν . Обозначим ее $\Phi(\tau)$: $\Phi(\tau) \equiv F(0, 1; \tau, 0)$. Мера $m(\tau, z)$ сосредоточена на множестве $\{z = 0, 1\}$ и является вероятностной. В силу этого

$$m(\tau, 0) + m(\tau, 1) = 1, \quad \text{или} \quad m(\tau, 1) = 1 - m(\tau, 0). \quad (13)$$

По определению меры Стильеса,

$$m(\tau, 0) = \lim_{\Delta z \rightarrow 0} (F(0, 1; \tau, 0) - F(0, 1; \tau, 0 - \Delta z)) \equiv \lim_{\Delta z \rightarrow 0} (\Phi(\tau) - 0) = \Phi(\tau). \quad (14)$$

Пользуясь формулами (13), (14), перепишем уравнение (12):

$$\frac{d}{d\tau}\Phi(\tau) = \sigma(\tau)(1 - \Phi(\tau)). \quad (15)$$

Согласно определению процесса $\xi(t)$,

$$\Phi(0) = 0.$$

Проинтегрировав обыкновенное дифференциальное уравнение (15) с этим начальным условием, находим:

$$\Phi(\tau) = 1 - \exp \left[- \int_0^{\tau} \sigma(u) du \right].$$

Отсюда искомая плотность распределения случайной величины t_ν имеет вид

$$f_\sigma(t) = \frac{d}{dt}\Phi(t) = \sigma(t) \exp \left[- \int_0^t \sigma(u) du \right],$$

т.е. совпадает с естественной плотностью распределения длины пробега, что и требовалось доказать.

Список литературы

- [1] SPANIER J., GELBARD E.M. Monte Carlo principles and Neutron Transport. Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1969.
- [2] ЕРМАКОВ С.М., МИХАЙЛОВ Г.А. Курс статистического моделирования. М.: Наука, 1976.
- [3] МАРЧУК Г.И., МИХАЙЛОВ Г.А., НАЗАРАЛИЕВ М.А. и др. Метод Монте-Карло в атмосферной оптике. Новосибирск: Наука, 1976.
- [4] COLEMAN W.A. Mathematical verification of a certain Monte Carlo sampling technique to radiation transport problems // Nucl. Sci. Eng. 1968. Vol. 32, No. 1. P. 76–81.
- [5] МИХАЙЛОВ Г.А. Метод моделирования длины свободного пробега частицы // Атомная энергия. 1970. Т. 28, вып. 2. С. 175.
- [6] ГНЕДЕНКО Б.В. Курс теории вероятностей. М.: Наука, 1965.
- [7] FELLER W. An introduction to probability theory and its applications. John Wiley & Sons. New York-Chichester-Brisbane-Toronto, 1970.
- [8] АВЕРИНА Т. А., МИХАЙЛОВ Г. А. Алгоритмы точного и приближенного статистического моделирования пуассоновских ансамблей // Журн. вычисл. математики и матем. физики. 2010. Т. 50. С. 1005–1016.

*Поступила в редакцию 8 августа 2011 г.,
с доработки — 26 декабря 2011 г.*

ЖБТ. 2012. Т. 17, № 2. С. 13–19.

On verification of the maximum cross-section technique

Antyufeev V.S.

The maximum cross-section technique and the Monte Carlo method is used for solving problems of radiation transport in inhomogeneous media. The standard and modified techniques for the free path length modelling are briefly described. A probabilistic proof for variation of this technique is proposed.

Keywords: Monte Carlo method, modelling, probability distribution, free path length, fictitious scattering, jump process.