ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ СИСТЕМЫ
1968 г. Выпуск 30

УДК.518.5 + 539.121.7

МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕУПРУГОГО РАССЕЯНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

Ю.Г. Косарев

При исследовании методом Монте-Карло процессов взаимодействия электронов с тонкими слоями вещества приходится учитывать изменение энергии электрона в результате неупругих соударений [1]. Это намного усложняет расчет актов взаимодействия по сравнению с аналогичными задачами для нейтронов[2,3] и требует эффективных мер по сокращению времени счета.

В данной работе в качестве одной из таких мер предлагается применение табличных методов [4], которые могут быть реализованы на вычислительных машинах с достаточно большими объемами оперативных памятей (ОП) либо на вычислительных системах. Описывается общая схема решения данной задачи на ЭВМ "Минск-22" и системе "Минск-222" [5].

I. Метод решения.[x)] Моделируется следующий процесс[6]. Электрон входит в прямоугольную пластину вещества толщиной $0 \leq d \leq 1$ в точке $z_0 = 0$ под углом θ_0 к оси z, нормальной к поверхности пластины. Заданы параметры вещества A_0 и t_0, начальная энергия электрона, характеризуемая параметром Q. Предполагается, что величина относительной потери энергии электрона в момент n-го столкновения однозначно определяется длиной пути S_n, отсчитываемой вдоль его траектории. Для экономии времени одновременно считаются B толщин, т.е. в пластине выделяется B слоев с границами $d_0 = 0,\ d_1, d_2, \ldots, d_B = d$.

При моделировании взаимодействия электрона с веществом нужно зафиксировать его параметры в момент наступления одного из

x) Данный раздел написан при участии Н.Г. Находкина, А.А. Остроухова и В.А. Романовского.

трех событий: отражения ($z<0$); прохождения ($z>d_k$); поглощения ($S \geq S_{np}$, когда энергия электрона становится равной энергии электронов вещества). В первых двух случаях фиксируются текущие параметры $S_{n-1}, M_{n-1} = \cos\theta_{n-1}$ и $E_{n-1} = \cos\varphi_{n-1}$, где θ_{n-1} – угол наклона отрезка электрона к оси z, φ_{n-1} – азимутальный угол рассеяния, отсчитываемый от плоскости падения электрона на пластину. В третьем – глубина поглощения z_n. Кроме того, во всех трех случаях фиксируется наименьшая граница d_k (или её номер k), которую электрон еще не пересек.

Процесс разыгрывается с помощью случайных чисел γ_1, γ_2 и γ_3, равномерно распределенных в интервале [0,1]. Схема решения может быть представлена в виде следующих этапов.

Этап 0. Присвоение начальных значений $S_0 = 0, M_0 = \cos\theta_0$, $E_0 = 1$, $z_0 = 0$, $k = 1$.

Этап 1. Определение длины свободного пробега и общего пути S_n. Для заданных параметров вещества и начальной энергии:

$$\Delta S_n = f_1(S_{n-1}, \gamma_1), \tag{1}$$

$$S_n = S_{n-1} + \Delta S_n. \tag{2}$$

Этап 2. Определение z_n – проекции на ось z положения электрона в момент n-го столкновения:

$$z_n = z_{n-1} + \Delta S_n \cdot M_{n-1} \tag{3}$$

Этап 3. Проверка условия поглощения:

$$S_n \geq S_{np} \tag{4}$$

При поглощении запоминаем z_n, k и переходим к этапу 7.

Проверка условия отражения:

$$z_n < 0. \tag{5}$$

При отражении запоминаем S_{n-1}, M_{n-1}, E_n, k и переходим к этапу 7.

Проверка условия прохождения:

$$z_n > d_k. \tag{6}$$

При прохождении через границу d_k фиксируем S_{n-1}, M_{n-1}, E_n и k. Если $k < B$, то $k := k+1$, и снова проверяем условие (6). При $k = B$ этап 7. Если ни одно из условий (4), (5) или (6) не выполнено, то этап 4.

Этап 4. Определение $P_n = \cos\vartheta_n$ (ϑ_n – полярный угол рассеяния, который отсчитывается от оси, совпадающей с предыдущим отрезком траектории электрона). При заданных параметрах вещества и начальной энергии

$$P_n = f_2(S_n, \gamma_2). \tag{7}$$

Э т а п 5. Определение азимутального угла рассеяния:

$$E_n = \cos 2\pi \gamma_3 . \tag{8}$$

Э т а п 6. Определение M_n :

$$M_n = M_{n-1} P_n + \sqrt{1-M_{n-1}^2} \cdot \sqrt{1-P_n^2} \cdot E_n . \tag{9}$$

Переход к этапу I.

Э т а п 7. Проверяем, все ли испытания выполнены? Если нет, то переходим к этапу 0, иначе конец.

Функции (I) и (7) в явном виде получить трудно. Первоначальное уравнение для определения ΔS_n следующее:

$$\int_{S_{n-1}}^{S_{n-1}+\Delta S_n} \Sigma_1 (S)\, dS = -\ln \gamma_1 , \tag{10}$$

где

$$\Sigma_1 (S) = A_0 \frac{a_1 e^{2Q}}{Q} \left[\frac{1}{1+u} + \frac{a_1}{1+a_2 u} \right] \tag{11}$$

Здесь

$$u = q_3 \sqrt{1-q_1 S + q_2 S^2} , \; q_1 = \frac{a_3}{Q} + a_4 ; \; q_2 = q_1 + e^{-2Q} - 1 ; \; q_3 = t_0 e^{Q} ; \tag{12}$$

a_1 , a_2 , a_3 , a_4 – константы.

Взяв интеграл с помощью постановки Эйлера, получим:

$$v = \sqrt{(S - q_1/q_2) S + 1/q_2} + S , \tag{13}$$

$$F(S_{n-1} + \Delta S_n) - F(S_{n-1}) = -\ln \gamma_1 , \tag{14}$$

где

$$F(S) = q_{11} \ln |v - q_5/2q_2| + q_{12} \cdot \ln \left| \frac{v-q_7}{v-q_9} \right| + q_{13} \cdot \ln \left| \frac{v-q_8}{v-q_{10}} \right| . \tag{15}$$

Здесь

$$q_0 = \frac{A_0 e^{Q} q_1}{t_0 Q \sqrt{q_2}} ; \qquad q_4 = a_2 q_3 ;$$

$$q_5 = 1/\sqrt{q_3 (q_1^2/4q_2 - 1) + 1} ; \quad q_6 = 1/\sqrt{q_4 (q_1^2/4q_2 - 1) + 1} ;$$

$$q_7 = \frac{1}{2} (1 - q_2^{1/2} (1 + 1/q_5)/q_3 q_1) ; \; q_8 = \frac{1}{2} (1 - q_2^{1/2} (1 + 1/q_6)/q_4 q_1) ; \tag{16}$$

$$q_9 = \frac{1}{2} (1 - q_2^{1/2} (1 - 1/q_5)/q_3 q_1) ; \; q_{10} = \frac{1}{2} (1 - q_2^{1/2} (1 - 1/q_6) \; q_4 q_1) ;$$

$$q_{11} = q_0 (a_5 + 1) ; \quad q_{12} = q_0 q_5 ; \quad q_{13} = a_5 q_0 q_6$$

a_5 – константа.

Первоначальное уравнение для P_n

$$\int_{-1}^{P_n} \Sigma_2 (S_n , P)\, dP = \gamma_2 , \tag{17}$$

где

$$\Sigma_2 (S, P) = \frac{1}{2} \left[\frac{1}{1+u} + \frac{a_1}{1+a_2 u} \right]^{-1} \cdot \left[\frac{1}{(1+u \cdot 0{,}5(1-P))^2} + \frac{a_1}{(1+a_2 u \cdot 0{,}5(1-P))^2} \right] . \tag{18}$$

Этот интеграл также берется, после чего P_n вычисляется как корень квадратного уравнения

$$P_n = (B - \sqrt{B^2 + AC})/A , \tag{19}$$

где

$$A = (((a_{10} u + a_9) \gamma_2 + a_8) u + a_7) u , \tag{20}$$

$$B = (a_7 u + a_6)((a_2 u + a_{11}) u \; \gamma_2 + 1) ; \tag{21}$$

$$C = -((a_8 u + a_{14}) u + a_{13}) + ((a_2 u + a_{12}) u + 4) \gamma_2 (a_7 u + a_6) \tag{22}$$

a_i – константы.

Оценим время счета одного варианта задачи (значения параметров $A_0 , t_0 , Q , \theta_0 , B$ фиксированы).

Для достижения 1%-й точности необходимо, чтобы число испытаний было порядка I0.000. Среднее число столкновений на одно испытание из приближенных подсчетов получилось около I000. Исходя из этого, время счета одного варианта на машине "Минск-22" с быстродействием 5 000 операций/сек составит

$$t_c = \frac{10^4 \cdot 10^3 \cdot h}{5 \cdot 10^3 \cdot 3{,}6 \cdot 10^3} = 0{,}56 \cdot h \text{ часов} , \tag{23}$$

где h –среднее число операций при расчете одного акта столкновения.

Нетрудно видеть, что при непосредственном счете по формулам (I) – (22) время решения будет составлять сотни суток, поэтому меры по сокращению величины h должны быть радикальными.

2. Пути сокращения времени счета.

а) Основное время счета затрачивается на вычисление ΔS_n и P_n. Для определения функций $f_1 (S, \gamma)$ и $f_2 (S, \gamma)$ достаточна точность два-три десятичных знака, что позволяет представить их в виде таблиц [4]. Для достижения нужной точности размеры таблиц приходится брать порядка 10^5 чисел каждая. Ввод этих таблиц с магнитных лент (МЛ) в данной задаче не занимает много времени, так как один из аргументов таблиц (S) монотонно увеличивается в процессе счета. Благодаря этому можно применить следующую простую схему работы. Предварительно разделим все испытания на G групп по R испытаний в каждой . Таблицы для ΔS и P_n разобьем на L частей, которыми они будут вводиться в ОП. В m -ых частях обеих таблиц $S_{m-1} < S \leq S_m$ где S_m – наибольшее значение S в данной части. Последовательно вводим части таблиц. Для каждой части m таблиц проводим последовательно все R испытаний. Если для данного испытания оказалось, что $S > S_m$, то запоминаем его параметры S_n , M_n , z_n , K и переходим к следующему испытанию. Результаты по мере их возникновения заносим в таблицы результатов. Время ввода таблиц общим объемом w чисел будет

$$t_T' = \frac{440 \cdot w \cdot G}{10^6 \cdot 3{,}6 \cdot 10^3} = 1{,}22 \cdot 10^{-7} \cdot w \cdot G \text{ час.}, \qquad (24)$$

где 440 – время ввода в ОП одного числа в мксек. На запоминание и восстановление текущих параметров затрачивается

$$t_T'' = \frac{q \cdot 10^4 \cdot L}{2 \cdot 5 \cdot 10^3 \cdot 3{,}6 \cdot 10^3} = 2{,}78 \cdot 10^{-4}\, q \cdot L \text{ час.}, \qquad (25)$$

где q – число операций, требуемое для смены текущих параметров; коэффициент 2 – учитывает, что часть испытаний завершится ранее, чем будут введены все L частей таблиц.

Величины G и L зависят от объема ОП и его распределения. Если под массив промежуточных параметров отвести 1336 ячеек (табл. I), что соответствует R = 334 и G = 30, а под части таблиц ΔS и P_n по 1024 ячеек, что при $w = 2^{18}$ соответствуют L = 128, то при q = 15

$$t_T = t_T' + t_T'' = 0{,}96 + 0{,}53 \approx 1{,}5 \text{ часа}. \qquad (26)$$

Таблица I

Распределение памяти

0001 – 0477	программа	
00500 – 04501	таблицы результатов	
04502 – 05307	константы, контрольные суммы частей таблиц	
05310 – 07777	массив промежуточных параметров	
10000 – 11777	таблица	$y = \cos 2\pi x$
12000 – 13777	–"–	$y = +\sqrt{1-x^2}$
14000 – 15777	–"–	$\Delta S = f_1(S, \gamma)$
16000 – 17777	–"–	$P = f_2(S, \gamma)$

Для создания этих таблиц по программам, составленным В.В. Кулемзиной и Т.И. Антиповой, потребовалось около 13 часов. Так как эти таблицы пригодны для всех вариантов с различными значениями Θ_0, то удельное время на вариант составляет около 2,5 часов.

Выборка числа из таблиц занимает в данном случае всего 1-2 операции. Нетрудно видеть, что затраты на обращение к таблице, их ввод в ОП, смену испытаний и создание таблиц на много меньше, чем при непосредственном счете по формулам (14) – (16) и (19) – (22).

б) Для уменьшения времени счета по формулам (8) и (9) были использованы таблицы функций $y = \cos 2\pi x$ и $y = \sqrt{1-x^2}$. Обе таблицы по 1024 числа. Формирование обращения к первой таблице автоматически получалось при выработке случайного числа γ_3, а ко второй – потребовало 2 операции, что, естественно, на много меньше, чем при использовании соответствующих стандартных программ. Эти таблицы невелики и насчитываются один раз для всех вариантов, поэтому временем на их получение можно пренебречь.

в) Для получения случайных чисел $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ был использован датчик, образующий псевдослучайное число всего за три команды [7]. Более того, с помощью тех же трех команд можно получать псевдослучайное число в разрядах адреса, что существенно упрощает формирование обращения к таблицам.

В результате всех этих мер величину h удалось свести всего к 29 операциям, т.е. согласно (23)

$$t_c \approx 16{,}5 \text{ часа}. \qquad (27)$$

С учетом (26) общее время счета варианта t = 18 часам, а с учетом удельного времени создание таблиц заняло около 20,5 часов. Таким образом, время счета одного варианта стало хотя и близким к предельно допустимому, но вполне реальным.

Для его дальнейшего уменьшения нужно перейти к более быстродействующей машине, либо к системе "Минск-222". Рассмотрим последнее.

3. Схема параллельной программы. Наиболее простая схема параллельной программы получается, если каждая из ℓ машин системы считает G/ℓ групп испытаний. В этом случае в каждой машине системы выполняется та же программа, что и в одиночной машине. Единственное отличие состоит в объединении (перед печатью) таблиц результатов, полученных в разных машинах.

При всех реальных значениях ℓ временем на пересылку и объединение таблиц можно пренебречь. Поэтому время счета на системе

$$t_\ell \approx t/\ell \ . \qquad (29)$$

Уже при ℓ = 2 $t_2 \approx$ 8,5 часам, что примерно соответствует времени работы одной смены. В данной схеме программы была эффективно использована только объединенная мощность вычислителей. Можно также предложить и другие схемы, использующие другие возможности системы. Например, можно рассредоточить таблицы результатов и массив констант между ОП машин и за счет освободившегося места увеличить размеры групп испытаний R, либо размеры частей таблиц, т.е. уменьшить G или L.

Можно также применить следующий прием для уменьшения времени ввода таблиц ΔS и M_n. Пусть каждая машина хранить на МЛ и вводит в ОП только $1/\ell$ объема таблиц. Разобьем все частицы таблиц на ℓ подчастей, и пусть каждая машина вводит в ОП только свою подчасть, которую затем передает в ОП всех остальных машин. Время ввода сокращается при этом в $\frac{440 \cdot W}{440 \cdot W/\ell + 50\,W} \approx$ $\approx \frac{\ell}{1+0{,}1\cdot\ell}$ раз, где 440 и 50 – время ввода одного кода с МЛ и из другой машины системы. Это соответствует сокращению времени t'_T при $\ell = 2$ в I,7, а при $\ell = 3$ в 2,3 раза.

В действительности выигрыш получается меньше из-за необходимости синхронизировать работу машин перед вводом таблиц и из-за затраты времени на пересылку результатов и констант в ходе счета.

Все эти приемы уменьшают только время t_T, которое в данном случае и так невелико (менее 10% от общего времени). Поэтому применять их имеет смысл лишь при больших объемах таблиц.

Литература

1. Н.Г. Находкин, А.А. Остроухов, В.А. Романовский. Неупругое рассеяние электронов в тонких пленках. Физ.тв.тела, т. 4, вып. 6, 1514-24, 1962.
2. Г.И. Марчук. Методы расчета ядерных реакторов. Госатомиздат, 1961.
3. Н.П. Бусленко, Д.И. Голенко, И.М. Соболь, В.Г. Срагович, Ю.А. Шрейдер. Метод статистических испытаний. М., Физматгиз, 1962.
4. Ю.Г. Косарев. Примеры использования таблиц для сокращения времени счета. – Данный сборник. стр. 46-54
5. Э.В. Евреинов, Г.П. Лопато. Универсальная вычислительная система "Минск-222" – Вычислительные системы, Новосибирск, Изд-во "Наука", Сиб.отд., 1966, вып. 23, стр. 13-20.
6. А.А. Остроухов, Н.Г. Находкин. Приближенное аналитическое выражение для пробега частиц, тормозящихся по закону Бете. – Радиотехника и электроника, т. X, вып. 3, 522-29, 1964.
7. М.В. Антипов, Ф.М. Израйлев, Б.В. Чириков. Статистическая проверка датчика псевдослучайных чисел. – Данный сборник, стр. 77-85.

Поступила в редакцию
20.VI.1967 г.