

УДК 518.5:539.121.72

О МЕТОДИКЕ ПРЯМОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ СЛУЧАЙНЫХ ПРОЦЕССОВ

Л.В.Головашкина

Статистическое моделирование (метод Монте-Карло) широко используется для исследования сложных стохастических процессов. При решении задач анализа методы статистического моделирования позволяют проверять, уточнять, а также заменять дорогостоящий или трудноосуществимый эксперимент, получать сведения о свойствах объекта, недоступных прямому наблюдению, проводить исследование в условиях отсутствия помех и полной определенности начальных состояний. При решении задач синтеза эти методы могут служить гибким инструментом, позволяющим проследить влияние тех или иных исходных предположений на характеристики исследуемого процесса.

При статистическом моделировании случайных процессов реализуется некоторая совокупность траекторий ("историй"), которые состоят из последовательности шагов. Каждый шаг, в свою очередь, состоит из элементарных актов, разыгрываемых с помощью случайных чисел в соответствии с заданными законами распределений.

Простейшая вычислительная схема при этом заключается в следующем. Вычисляется K независимых реализаций случайной величины и оценивается ее математическое ожидание с помощью среднего арифметического этих реализаций (среди линейных несмещенных оценок среднее арифметическое имеет наименьшую дисперсию).

Каждой вычислительной схеме (алгоритму) может быть поставлена в соответствие некоторая вычислительная процедура P , сложность которой $G(P)$ оценивается числом выполняемых при ее реализации операций (в пересчете на типовые). Для многих реальных случайных

процессов при непосредственной реализации схемы статистического моделирования сложность $G(P)$ на несколько порядков превышает предельное число типовых операций $c_M(\bar{t}_P)$, которое может быть выполнено имеющимся в распоряжении вычислительным средством M за предельно допустимое для данной задачи время $\bar{t}_P$.

Математическое содержание задачи статистического моделирования заключается в преобразовании вычислительной процедуры P , ведущей к уменьшению величины $G(P)$, по крайней мере, до размеров

$$G(P) \leq c_M(\bar{t}_P). \quad (I)$$

§ 1. Оптимизация вычислительных процедур статистического моделирования

Сложность процедуры, реализующей описанную выше схему, определяется тремя основными величинами:

$$G(P) = K \cdot \bar{N} \cdot g(P_0), \quad (2)$$

где K — число моделируемых траекторий, $\bar{N}$ — среднее число шагов траектории, $g(P_0)$ — средняя сложность реализации одного шага траектории. В соответствии с этим существуют различные направления оптимизации вычислительных процедур типа Монте-Карло.

Сокращение числа моделируемых траекторий K . К этому направлению оптимизации относятся все методы уменьшения дисперсии, поскольку при фиксированных точности δ и уровне доверия $1-\alpha$

$$K \approx \beta^2(\alpha) \cdot \delta^{-2} \cdot D\xi, \quad (3)$$

где $\beta(\alpha)$ — константа, зависящая от уровня доверия, $D\xi$ — дисперсия случайной величины.

Ряд методов уменьшения дисперсии [1] основан на использовании аналитических решений (когда они возможны) для некоторых ответвлений случайного процесса.

Суть "весовых" методов [2] уменьшения дисперсии состоит в построении фиктивного процесса, при котором увеличивается частота ("вес") появления интересующих исследователя событий.

Эффективность применения этих и других методов уменьшения дисперсии [3] зависит от специфических особенностей задачи. Применение их требует специальных исследований и обоснований. Как

правило, эти методы удобны для исследования отдельных частных характеристик процесса и весьма сложны, когда необходимо получить достаточно полный набор характеристик процесса в целом.

Сокращение среднего числа шагов $\tilde{N}$. Методами этого направления описание реального случайного процесса огрубляется "укрупнением" шагов, ведущим к значительному уменьшению $\tilde{N}$. При этом возможно некоторое увеличение $g(P_0)$, связанное с учетом более сложных распределений для переходных вероятностей "укрупненного" процесса.

Различные схемы "укрупненных" соударений получили широкое распространение при моделировании процессов переноса излучения [4]. Схемы "укрупненных" шагов — удобное средство расчета интегральных характеристик процесса, однако погрешность, вносимая в описание реального явления "укрупнением" шагов, ограничивает возможности получения дифференциальных характеристик.

Оба рассмотренных направления оптимизации вычислительных процедур статистического моделирования допускают те или иные отступления от прямой схемы моделирования, что приводит к потере простоты реализации метода Монте-Карло и ограничивает возможности получения полного спектра интегральных и дифференциальных характеристик случайного процесса.

Сокращение числа операций $g(P_0)$. Это направление оптимизации наиболее слабо представлено в литературе, хотя именно оно дает возможность сохранить прямое моделирование, применяя чисто вычислительные эффективные приемы сокращения числа операций процедуры P_0 , не искажающие существа моделируемого процесса. Естественно, что добиться эффективного уменьшения сложности $G(P)$ таким путем можно лишь в том случае, когда $g(P_0)$ велико. Это имеет место, например, когда шаг траектории случайного процесса рассчитывается с помощью сложных формул для вероятностей перехода, зависящих как от параметров среды, так и от координат траектории.

Рассмотрению методов существенного уменьшения величины $g(P_0)$ и посвящена данная работа, которая представляет собой развитие идеи, высказанной в [5]. Предлагаемая методика прямого моделирования случайных процессов основана на детальной разработке основного вычислительного цикла. При этом существенную роль играют табличные методы ускорения счета и прежде всего использование

близких к оптимальным по времени (рациональных) таблиц [6] сложных функций, определяющих основные характеристики процесса.

Как известно, при отсутствии ограничений на объем памяти, таблицей может быть представлена любая вычислимая функция. Если шаг изменения аргумента постоянен, то получение адреса табличного значения занимает 1–3 операции [7]. Для сложных функций F небольшого числа переменных практически удается построить рациональные таблицы $T_s, \tilde{t}_{min}, \tilde{V}(F)$, для которых при заданных реальных ограничениях на точность (ε) и объем ($\tilde{V}$), среднее время выборки табличного значения $\tilde{t}_r \leq \tilde{t}_{min}$, где $\tilde{t}_{min}$ — ограничение на время выборки, зависящее от параметров реализуемой процедуры.

Тщательная разработка основного вычислительного цикла включает также использование таблиц с быстрой выборкой для стандартных функций, вычисляемых в основном цикле; групповую обработку траекторий относительно данных значений функций распределения; применение экономного датчика случайных чисел и использование его для образования случайного адреса.

Рассмотрим особенности применения данной методики на примере решения достаточно сложной задачи прямого моделирования процессов взаимодействия электронного излучения с твердым телом. Выбор этой задачи для проверки эффективности методики объясняется теми особенностями ее, которые делают реализацию соответствующей вычислительной процедуры практически неосуществимой с помощью современных вычислительных средств.

§ 2. Прямое моделирование рассеяния электронов средних энергий

Большинство работ по исследованию рассеяния электронов относится к области высоких энергий ($E_0 > 4000 \text{ эв}$, где Z — атомный номер материала мишени). Для этой области обоснованно применяется модель непрерывных потерь, справедливость которой подтверждена многочисленными экспериментами и машинным моделированием. Весьма важная практически и интересная теоретически область средних энергий ($220 \text{ эв} \leq E_0 \leq 4000 \text{ эв}$)* пока мало изучена. Для этой области нет теоретически обоснованной общеприня-

* Достаточно сказать, что именно эта область энергий используется во вторично-эмиссионных приборах, приборах для записи информации, электронном микроанализе, телевидении и др.

той модели физического процесса, сложны прямые физические эксперименты (особенно при исследовании прозрачности) и встречаются вычислительные трудности методов математического моделирования.

В [8] было высказано предположение, что при соответствующем подборе (аппроксимации) коэффициентов в формулах для сечений, модель непрерывных потерь может быть распространена и на область средних энергий. Для проверки данного предположения, а также уточнения коэффициентов аппроксимации необходимо получить возможно более полный набор интегральных и дифференциальных характеристик процесса.

Существенная особенность данной задачи - большой объем вычислений. Требуется многократный счет большого числа вариантов для проверки и уточнения физической модели. На каждом варианте нужно промоделировать большое число траекторий, которые, в свою очередь, состоят из многих шагов. На каждом шаге приходится разыгрывать акты взаимодействия по весьма сложным формулам, которые зависят не только от параметров среды, но и от пройденного пути. Все это делает данную задачу удобным объектом для проверки возможностей методики прямого моделирования.

Моделируется следующий процесс. Электрон входит в прямоугольную пластину вещества толщиной $0 < d \leq 1$ в точке $z_0 = 0$ под углом θ_0 к оси Oz , нормальной к поверхности пластины. Заданы параметры вещества A_0 и t_0 , начальная энергия электрона, характеризующая параметром Q_0 . Предполагается, что величина относительной потери энергии электрона в момент n -го столкновения однозначно определяется длиной пути s_n , отсчитываемой вдоль его траектории. Траектория электрона идеализируется как зигзагообразный путь, состоящий из свободных пробегов, прерываемых внезапными столкновениями, в которых изменяется энергия и направление частицы. Для экономии времени одновременно считаются m толщин, то есть в пластине выделяется m слоев с границами $d_0 = 0, d_1, d_2, \dots, d_m = 1$.

При моделировании фиксируются параметры электрона в момент наступления одного из трех событий: отражения ($z < 0$); прохождения ($z = d_i$); поглощения ($z \geq s_{np}$, когда энергия электрона становится равной энергии электронов вещества).

В соответствии с алгоритмом [5] процесс разыгрывается с помощью случайных чисел γ , равномерно распределенных в $[0, 1]$. За-

даются начальные координаты $(z_0, z_0', k_0, X_0, Y_0)$ электрона и на n -м шаге ($n = 1, 2, \dots, N$) вычисляется пять координат: s_n - длина общего пути, z_n - проекция s_n на ось Ox , k_n - номер слоя мишени, X_n - угол между вектором скорости и осью Oz , Y_n - угол между плоскостью падения и плоскостью выхода электрона.

Конечные координаты $(z_N, z_N', k_N, X_N, Y_N)$ отраженных, прошедших и поглощенных мишенью электронов запоминаются, что дает возможность получать затем любые распределения, определяемые комбинацией z, z', k, X, Y .

Процедура P_0^* для розыгрыша одного шага траектории в данной задаче реализуется на машине "Минск-22" за $g(P_0^*) \approx 3000$ операций (по 200 мксек каждая). Если учесть, что в среднем траектория электрона в веществе состоит из 600-700 шагов, то при $K = 10000$

$$G(P^*) \approx 10000 \cdot 700 \cdot 3000 \approx 2 \cdot 10^{10}.$$

Это примерно на два порядка больше числа операций, которое может быть реализовано на данной машине за 10 часов. Таким образом, нужны эффективные средства уменьшения величины $G(P^*)$.

Главным из этих средств явилось табличное представление функций. Для табулирования основных функций - длины свободного пробега - $\Delta z(z, \gamma)$ и косинуса угла рассеяния - $P(z, \gamma)$ была использована методика построения рациональных таблиц [6]. При этом существенно использовалась особенность задач на рассеяние частиц, заключающаяся в монотонном увеличении величины z в ходе моделирования траектории. Это позволило использовать таблицы большого объема, размещенные на магнитных лентах (МЛ). При одновременной обработке с помощью введенной порции табличных значений достаточно большой группы траекторий электронов время ввода таблиц составило 2-3% общего времени счета. Для каждого участка значений z в соответствии с [6] построены рациональные таблицы, позволяющие выбирать значения функций $\Delta z(z, \gamma)$, $P(z, \gamma)$ за ≈ 900 мксек вместо 0,5 сек для $\Delta z(z, \gamma)$ и 30 мсек для $P(z, \gamma)$ при счете по соответствующим формулам. (Благодаря упорядочению табличных значений функции $\Delta z(z, \gamma)$ по z и γ время получения одного табличного значения в 1,5 - 2 раза меньше времени, которое необходимо для вычисления $\Delta z(z, \gamma)$ при случайных значениях z, γ . Так как каждая таблица строится при фиксированных значениях параметров вещества и начальной энергии для многократного использования в различных вариантах расчета, добавка времени счета таблиц к общему времени решения задачи составляет 10-20%).

Дальнейшее сокращение $g(P_0^*)$ достигалось заменой стандартных программ (СП) для вычисления функций $\sqrt{1-x^2}$, $\cos x$ таблицами с постоянным шагом, хранимых в оперативной памяти (ОП) машины. Это позволило реализовать вычисление каждой элементарной функции за 300 мксек (вместо 6000 мксек при работе СП).

При организации быстрой выборки из таблиц используется прием, позволяющий образовывать случайный адрес из некоторых разрядов случайного значения аргумента. Использование такой возможности основано на проверке статистических свойств группы разрядов псевдослучайного числа, выполненной для целей наших исследований в [9].

Широкое использование таблиц и тщательное ручное программирование процедуры P_0^* позволило добиться сокращения числа операций $g(P_0^*)$ приблизительно в 10^3 раз и сделать реальным решение задачи прямого моделирования рассеяния электронов.

Погрешность реализации моделирования включает в себя погрешность статистических испытаний σ , приближенно равную $K^{-1/2}$, и, в нашем случае, погрешность, связанную с широким использованием таблиц. Поскольку все сложные вычисления, требующие высокой точности, связаны с вычислением функций $\Delta s(z, \gamma)$, $P(z, \gamma)$, построение таблиц для этих функций позволяет реализовать всю процедуру моделирования по простейшим формулам. Анализ этих формул показывает, что предельно допустимая (абсолютная) погрешность вычисления основных параметров может быть $\approx 0,01$. Оптимальные значения ε , ε_1 для таблиц $T_{\varepsilon, \tilde{\varepsilon}_{min}, \tilde{\nu}}(\Delta s)$, $T_{\varepsilon, \tilde{\varepsilon}_{min}, \tilde{\nu}}(P)$ подбирались путем экспериментальных просчетов с таблицами разной структуры.

§3. Результаты моделирования, уточнение физической модели

Работа по отладке вычислительной процедуры и уточнению модели проводилась в три этапа.

На первом этапе проводилась грубая проверка модели, отладка методики прямого моделирования и оценка точности таблиц на основе сопоставления интегральных характеристик для отраженных, прошедших и поглощенных электронов с известными (экспериментальными и расчетными) данными других авторов.

На втором этапе продолжалось уточнение модели и методики моделирования по дифференциальным характеристикам, для которых имеются надежные экспериментальные или расчетные данные. На этом же этапе окончательно устанавливалась требуемая точность таблиц.

На третьем этапе проводился сам машинный эксперимент по моделированию исследуемых процессов.

Результаты моделирования, реализованного для трех веществ — Be, Al, Pb — при различных значениях начальной энергии и угла падения θ_0 , представленные в [10, 11], обнаружили достаточно хорошее совпадение расчетных характеристик с экспериментальными для отражения электронов в исследуемой области энергий. Полученные по прохождению характеристики качественно совпадают с аналогичными экспериментальными данными для больших энергий. Это свидетельствует о допустимости распространения модели непрерывных потерь на область средних энергий и позволяет с определенным доверием отнестись к тем характеристикам (по прохождению и поглощению), для которых нет прямых экспериментальных данных. Для некоторых дифференциальных характеристик (энергетическое распределение прошедших электронов при различных α , толщинные зависимости $R(\alpha)$ для отражения и др.) обнаружены расхождения с соответствующими экспериментальными характеристиками. Наблюдаемое несоответствие предположительно связано с тем, что в модели непрерывных потерь не учитываются флуктуации в потерях энергии отдельными электронами. Уточнение физической модели, заключающееся в допущении, что первичные электроны имеют различные пробеги, распределенные по закону Гаусса с некоторой дисперсией, позволило добиться лучшего совпадения с экспериментом для ряда характеристик, хотя в этом направлении получены лишь предварительные результаты.

Работы по прямому моделированию в рассматриваемой области энергий интенсивно ведутся японскими исследователями. Несмотря на различие сечений и алгоритмов расчета, многие характеристики рассеяния, полученные в наших расчетах, совпадают с аналогичными данными, опубликованными в [12, 13].

Методика нашего расчета позволяет получать большое количество разнообразных характеристик рассеяния, многие из которых (распределения по числу упругих соударений, пространственные распределения прошедших и поглощенных электронов, энергетические спектры в фиксированных областях пространства и др.) получены впервые.

Предлагаемая методика прямого моделирования рассеяния электронов в многослойных мишенях, состоящих из одного вещества, позволяет перейти к дальнейшему развитию и усложнению задачи, связанному с расчетом характеристик рассеяния электронов в многослойных мишенях, слои которых состоят из различных веществ, к расчету характеристик рассеяния в сплавах, сложных соединениях и др. без существенных изменений в самой методике, однако в этом случае потребуются более мощные технические средства.

На примере моделирования сложных процессов рассеяния электронов показано, что предлагаемая методика прямого моделирования может успешно применяться для решения задач анализа и синтеза. Использование таблиц для основных функций позволяет локализовать изменения и практически не менять основную процедуру при экспериментальном подборе формул для сечений взаимодействия.

Реализация задачи прямого моделирования рассеяния электронов средних энергий на "Минске-22" связана с потреблением предельно допустимого времени, и дальнейшее усложнение ее потребует перехода к более мощным вычислительным средствам, хотя методика моделирования сохранит при этом свои основные особенности.

При переходе к машинам с большим быстродействием следует учитывать, что основной выигрыш во времени при реализации процедуры был достигнут благодаря тому, что при задании аргумента в виде числа с плавающей запятой адрес соответствующего ему табличного значения функции получался за 1-2 команды. Операции адресного обращения занимают около 1/5 части от общего числа операций основного цикла, и возможность быстрой их реализации на машине "Минск-22 (32)" играет существенную роль в сокращении общего числа операций. Для некоторых машин ("БЭСМ-6" и др.), имеющих определенный уровень совмещения операций, образование адреса из разрядов аргумента может существенно (на порядок и более) увеличивать время счета.

В этом смысле более эффективными и удобными могут оказаться однородные вычислительные системы [14], состоящие из машин, которые подобно "Минску-22" эффективно реализуют операции адресного обращения. Особенности задач на рассеяние позволяют легко построить параллельный алгоритм с почти идентичными программами во всех машинах системы [15]. Наиболее простая схема параллельной

программы получается, если каждая из ℓ машин системы считает B/ℓ групп испытаний, где B — общее число 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 $t_c \approx t/\ell$, где t — общее время реализации процедуры P . 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 ℓ машин и за счет освободившегося места увеличить размеры групп испытаний либо размеры вводимых частей таблиц, что приведет к сокращению t_c .

Созданная и проверенная на примере решения сложной задачи моделирования взаимодействия электронов с веществом методика прямого статистического моделирования позволяет получать интересные для практики результаты даже с помощью машин с небольшим быстродействием. Предварительная оценка показывает, что переход на более быстродействующую машину, например "Минск-32", заметно расширит круг решаемых задач. В частности, вполне реальным становится расчет многослойных и многокомпонентных мишеней и др.

Л и т е р а т у р а

1. ЕРМАКОВ С.М. Метод Монте-Карло и смежные вопросы. М., 1971.
2. БУСЛЕНКО Н.Л., ГОЛЕНКО Д.И., СОВОЛЬ И.М., СРАГОВИЧ В.Г., ШРЕЙДЕР Д.А. Метод статистических испытаний (метод Монте-Карло). М., 1962.
3. Метод Монте-Карло в проблеме переноса излучения. Сборник статей под ред. Марчука Г.И. М., 1967.
4. BERGER M.J. Monte-Carlo calculation of the penetration and diffusion of fast charged particles. — "Methods in Computational Physics", 1963, vol. 1, p. 135-215.
5. КОСАРЕВ Ю.Г. Моделирование неупругого рассеяния электронов методом Монте-Карло. — "Вычислительные системы", Новосибирск, 1968, вып. 30, с. 34-40.
6. ГОЛОВЯКИНА Л.В., КОСАРЕВ Ю.Г. О построении таблиц с быстрой выборкой. Настоящий сборник, с. 125-137.

7. КОСАРЕВ Ю.Г. Примеры использования таблиц для сокращения времени счета. "Вычислительные системы", Новосибирск, 1968, вып. 30, с. 46-54.

8. НАХОДКИН Н.Г., ОСТРОВУХОВ А.А., РОМАНОВСКИЙ В.А. Неупругое рассеяние электронов в тонких пленках. - ФТТ, 1962, т. 4, с. 1514-1524; 1963, т. 5, с. 41-47; 1965, т. 7 с. 1256-1259.

9. АНТИПОВ М.В., ИЗРАЙЛЕВ Ф.М., ЧИРИКОВ Б.В. Статистическая проверка датчика псевдослучайных чисел. - "Вычислительные системы", Новосибирск, 1968, вып. 30, с. 77-85.

10. ГОЛОВЯШКИНА Л.В., НАХОДКИН Н.Г. Прямое моделирование неупругого рассеяния электронов. - "Вычислительные системы", Новосибирск, 1972, вып. 52, с. 5-20.

11. ГОЛОВЯШКИНА Л.В., НАХОДКИН Н.Г., КОСАРЕВ Ю.Г. Пространственное распределение отраженных и поглощенных электронов. "Вычислительные системы", Новосибирск, 1973, вып. 56, с. 130-135.

12. MURATA K., MATSUKAWA T., SHIMIZU R. Monte-Carlo calculations on electron scattering in solid target. - "Japanese J. of Applied Physics", 1971, vol. 10, p. 678-686.

13. SHIMIZU R., IKUTA T., MURATA K. The Monte-Carlo technique as applied to the fundamentals of EPMA and SEM. - "Journal of Applied Physics", 1972, vol. 43, p. 4233-4249.

14. БЕРЕИНОВ Э.В., КОСАРЕВ Ю.Г. Однородные универсальные вычислительные системы высокой производительности. Новосибирск, Изд-во "Наука" СО, 1966.

15. КОСАРЕВ Ю.Г., НАУМОВ В.А., РОЗИН С.Г., ЯРОШЕВИЧ А.А. Решение задач о рассеянии энергии ионизирующего излучения методом Монте-Карло на системе "Минск-222". "Вычислительные системы", Новосибирск, 1968, вып. 30, с. 41-45.

Поступила в ред.-изд.отд.
27 июля 1973 года