

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

P2-2000-16

В.С.Баращенков¹, Е.П.Жидков², А.Г.Соловьев³,
А.Н.Соснин⁴

ПОВЫШЕНИЕ ТОЧНОСТИ ОЦЕНКИ
ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СПЕКТРА НЕЙТРОНОВ
В МОДЕЛИРУЕМЫХ ЭЛЕКТРОЯДЕРНЫХ
УСТАНОВКАХ

Направлено в журнал «Nuclear Instruments and Methods»

¹E-mail: barashenkov@lcta30.jinr.ru

²E-mail: zhidkov@lcta41.jinr.ru

³E-mail: solovjev@decimal.jinr.ru

⁴E-mail: sosnin@decimal.jinr.ru

2000

ВВЕДЕНИЕ

При моделировании процессов взаимодействия высокозенергетических частиц с веществом часто необходимо делать оценки спектров (например, энергетических) вторичных частиц, рождающихся в этих процессах. Это, как правило, требует розыгрыша большого числа событий и, соответственно, значительных затрат счетного времени, которое резко возрастает по мере увеличения требуемой точности расчетов. Число разыгрываемых событий и счетное время могут быть существенно снижены, если воспользоваться методом, разработанным в [1] и кратко описанным ниже. С его помощью можно подобрать оптимальное число событий, при котором рассчитываемый спектр лежит в заданных доверительных границах. Как будет показано ниже, в некоторых практически важных случаях это число удается при этом снизить почти на порядок.

В настоящей работе¹ решается проблема оценки энергетического спектра нейтронов, генерируемых высокозенергетическим излучением в протяженной среде. Мы будем рассматривать мишень в виде цилиндрического квазибесконечного блока природного урана с радиусом 60 см и длиной 90 см (утечка нейтронов из такого блока незначительна — менее 5% от полного их числа), облучаемую пучком протонов с энергией 1 ГэВ, который вводится в мишень вдоль ее оси в щель глубиной 26 см. Такая мишень использовалась в ряде теоретических и экспериментальных работ (см., например, [2–4]). Мы построим энергетическое распределение нейтронов с энергиями $E < 10,5$ МэВ, рождающихся в упругих и неупругих адрон-ядерных столкновениях внутри этой мишени².

1. КРАТКОЕ ОПИСАНИЕ МЕТОДА

Математически задача оценки энергетического спектра нейтронов формулируется следующим образом. Действительная непрерывная случайная величина ξ (в данном случае — энергия нейтрона) имеет плотность распределения $f(x)$, которую требуется оценить на основе выборки

$$x_1, \quad x_2, \quad \dots, \quad x_n, \quad (1.1)$$

являющейся результатом n последовательных независимых наблюдений ξ в неизменных условиях. Эта задача изучалась в [1]. Приведем основные полученные там результаты.

¹Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (коды проектов 97 – 01 – 00746, 98 – 01 – 00190).

²При моделировании переноса частиц с энергиями выше и ниже 10,5 МэВ используются, соответственно, два различных комплекса программ. Для нейтронов с энергией $E > 10,5$ МэВ в процессе расчета межъядерного каскада неупругие взаимодействия с ядрами среды моделируются на основе испарительной и каскадно-испарительной моделей с учетом деления и вклада неравновесных предкомпаундных процессов. Характеристики упругих столкновений рассчитываются с помощью феноменологических соотношений. Взаимодействия нейтронов при $E < 10,5$ МэВ моделируются с помощью многогрупповых программ [5, 6]. Оцениваемый в данной работе энергетический спектр необходим как входная информация для программ низкоэнергетического каскада.

Пользуясь оценками Парзена—Розенблатта, будем строить эмпирическую плотность по выборке (1.1) следующим образом:

$$f_n(x) = \frac{1}{nh_n} \sum_{k=1}^n q\left(\frac{x - x_k}{h_n}\right), \quad (1.2)$$

где последовательность h_n такова, что $h_n \rightarrow 0$, $nh_n \rightarrow \infty$ при $n \rightarrow \infty$, а функция $q(x)$ — гладкая, ограниченная и интегрируемая на интервале $-\infty < x < \infty$, причем $\int_{-\infty}^{\infty} q(x)dx = 1$. Последовательность h_n определим следующим образом:

$$h_n = cn^{-\alpha}, \quad 0 < \alpha < 1, \quad (1.3)$$

где c — положительная постоянная, о выборе которой будет сказано ниже. Функцию $q(x)$ выберем в виде

$$q(x) = \begin{cases} (15/16)[1 - x^2]^2, & |x| \leq 1, \\ 0, & |x| > 1. \end{cases} \quad (1.4)$$

В [1] доказано, что если функция $f(x)$ имеет ограниченную четвертую производную, $f_n^{(1)}(x)$ и $f_n^{(2)}(x)$ — эмпирические плотности, построенные по формуле (1.2) с использованием независимых выборок:

$$x_1^{(1)}, \quad x_2^{(1)}, \quad \dots, \quad x_n^{(1)} \quad \text{и} \quad x_1^{(2)}, \quad x_2^{(2)}, \quad \dots, \quad x_n^{(2)},$$

соответственно, и, кроме того, $f_{2n}^{(1+2)}(x)$ — эмпирическая плотность, полученная аналогичным образом после объединения этих двух выборок в одну, то линейная комбинация

$$f_{2n}^{(*)}(x) = \left[2^{2\alpha} f_n^{(1+2)}(x) - (f_n^{(1)}(x) + f_n^{(2)}(x))/2 \right] / (2^{2\alpha} - 1) \quad (1.5)$$

приближает искомую плотность $f(x)$ с большей точностью, чем каждая из оценок $f_n^{(1)}(x)$, $f_n^{(2)}(x)$ и $f_{2n}^{(1+2)}(x)$ по отдельности.

В [1] показано также, что величину α в формуле (1.3) имеет смысл выбирать из интервала $1/9 \leq \alpha \leq 1/5$, погрешность оценки (1.5) при этом имеет порядок $O(n^{(\alpha-1)/2})$ при $n \rightarrow \infty$. Если, кроме того, $1/9 < \alpha \leq 1/5$, то можно построить доверительную область, с заданной вероятностью покрывающую график искомой плотности $f(x)$.

Этот вопрос решается следующим образом. Прежде всего по заданному коэффициенту доверия β ($0 < \beta < 1$) из уравнения

$$\frac{2}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{\lambda_\beta} e^{-t^2/2} dt = \beta$$

определяется величина λ_β . Затем вычисляется величина $t_\beta = \lambda_\beta r n^{(\alpha-1)/2}$, где

$$r = d\sqrt{2^{5\alpha} + 1 - 2^{1+2\alpha}} / \left[2\sqrt{c} (2^{2\alpha} - 1) \right].$$

В последнем выражении $d^2 = 5/7$. Отметим, что выбор функции $q(x)$ в виде (1.4) продиктован требованием минимизировать величину d^2 (см. [1]).

Далее, в [1] доказано, что при достаточно большом n график функции $f(x)$ на всем отрезке $[a, b]$, на котором $f(x) > 0$, не выходит из полосы, ограниченной следующими двумя кривыми:

$$y_1(x) = f_{2n}^{(*)}(x) + t_\beta^2/2 - t_\beta \sqrt{f_{2n}^{(*)}(x) + t_\beta^2/4},$$

$$y_2(x) = f_{2n}^{(*)}(x) + t_\beta^2/2 + t_\beta \sqrt{f_{2n}^{(*)}(x) + t_\beta^2/4},$$

с вероятностью, не меньшей β .

При выборе постоянной c в формуле (1.3) надо иметь в виду, что при малом значении c график эмпирической плотности $f_{2n}^{(*)}(x)$ имеет множество случайных максимумов и минимумов, а при большом c этот график получается чрезмерно слгаженным. Поэтому, построив эмпирические плотности $f_{2n}^{(*)}(x)$ для нескольких различных значений c , следует выбрать минимальное значение c , при котором на графике соответствующей эмпирической плотности отсутствуют случайные колебания.

Отметим, что получение оценок вида (1.2) легко реализуется на ЭВМ (в приложении приводятся тексты соответствующих подпрограмм на языке FORTRAN'77) и не требует много счетного времени (как правило, не больше, чем при гистограммировании). Преимущества же оценки неизвестной плотности с помощью (1.2) следующие. Во-первых, эти оценки обладают более высокой по сравнению с гистограммой скоростью сходимости (а значит, и большей точностью). Во-вторых, при использовании оценок (1.2), после того как подходящим образом выбрана постоянная c в формуле (1.3), задачи слгаживания и фиттирования эмпирической плотности оказываются решенными автоматически (при гистограммировании эти задачи приходится решать дополнительно).

Отметим также, что повышение точности оценки искомой плотности с помощью формулы (1.5) (программная реализация этой процедуры также приводится в приложении) практически не требует дополнительных затрат, поскольку подобные оценки, как правило, делаются по нескольким независимым выборкам, а при уточнении оценки по формуле (1.5) лишь используются уже имеющиеся эмпирические плотности.

2. О ПРЕОБРАЗОВАНИИ СЛУЧАЙНОЙ ВЕЛИЧИНЫ

Если искомая плотность $f(x)$ быстро изменяется при одних значениях x и медленно — при других, то выбор постоянной c в формуле (1.3) оказывается весьма затруднительным.

Для того чтобы обойти эту трудность, мы поступим следующим образом. Преобразуем исходную случайную величину ξ таким образом, чтобы изменения плотности полученной новой случайной величины были приблизительно одинаковыми при всех значениях x и для ее оценки был непосредственно применим

описанный выше подход. Затем, воспользовавшись обратным преобразованием, найдем оценку искомой плотности случайной величины ξ .

В рассматриваемой задаче оценки энергетического спектра распространяющихся в урановом блоке каскадных нейтронов удобной оказывается замена исходной случайной величины ξ (энергии нейтрона в единицах МэВ), заданной на интервале $0 \leq \xi < \infty$, новой случайной величиной η :

$$\eta = \ln(1 + \xi) . \quad (2.1)$$

Эта случайная величина изменяется в интервале $0 \leq \eta < \infty$ и имеет плотность распределения $g(t)$, где $t = \ln(1 + x)$. Связь функций $f(x)$ и $g(t)$ легко устанавливается элементарными рассуждениями. Действительно, по определению,

$$\mathbb{P}\{x < \xi < x + dx\} = f(x)dx ,$$

и, как нетрудно убедиться,

$$\mathbb{P}\{t < \eta < t + dt\} = f(\mathrm{e}^t - 1) \mathrm{e}^t dt .$$

Следовательно,

$$g(t) = f(\mathrm{e}^t - 1) \mathrm{e}^t .$$

Обратное преобразование, очевидно, имеет вид

$$f(x) = g[\ln(1 + x)] / (1 + x) . \quad (2.2)$$

Для того чтобы оценить теперь плотность $g(t)$ описанным выше методом, преобразуем имеющиеся выборки $\{x_k^{(1)}\}_{k=1}^n$ и $\{x_k^{(2)}\}_{k=1}^n$ по формуле (2.1), затем с использованием полученных выборок $\{t_k^{(1)}\}_{k=1}^n$ и $\{t_k^{(2)}\}_{k=1}^n$ построим по формуле (1.2) оценки $g_n^{(1)}(t)$, $g_n^{(2)}(t)$, $g_{2n}^{(1+2)}(t)$ и, наконец, составим из них линейную комбинацию (1.5). Результатом будет оценка $g_{2n}^{(*)}(t)$. Применяя к ней преобразование (2.2), получаем оценку искомой плотности $f(x)$:

$$f_{2n}^{(**)}(x) = g_{2n}^{(*)}[\ln(1 + x)] / (1 + x) . \quad (2.3)$$

Замечания. 1. Отметим, что аналогичным образом обычно поступают и при гистограммировании, выбирая для области быстрого изменения плотности более мелкий шаг. При оценке энергетического спектра нейтронов, например, часто используется логарифмический масштаб: шаг гистограммы при изменении энергии нейтрона E изменяется, как $\ln E$.

2. В каждом конкретном случае вопрос о выборе подходящего преобразования исходной случайной величины (иногда оно может и не потребоваться) должен решаться специально. После этого проделываются операции, аналогичные тем, что описаны выше для случая, когда используется преобразование (2.1).

3. ОЦЕНКА ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СПЕКТРА НЕЙТРОНОВ

Опишем сначала, как делались оценки энергетического спектра нейтронов до настоящего времени. Интервал $0,01 \text{ МэВ} < E < 10,5 \text{ МэВ}$ разбивался на 12 интервалов, причем таким образом, что интервал $\ln 0,01 < \ln E < \ln 10,5$ был разбит на отрезки приблизительно равной длины. Затем строилась гистограмма с использованием выборки из 1000 элементов (иногда и меньше³). Такая гистограмма приводится на рис. 1. Отметим, что если взять другую выборку того же объема или незначительно дополнить имеющуюся, то получаемая гистограмма будет заметно отличаться от приведенной на этом рисунке, особенно в области малых энергий. Это говорит о том, что объем используемой выборки недостаточный, и для удовлетворительной оценки спектра его следует увеличить. На рис. 2 представлена гистограмма, построенная по выборке большего объема (10000 элементов).

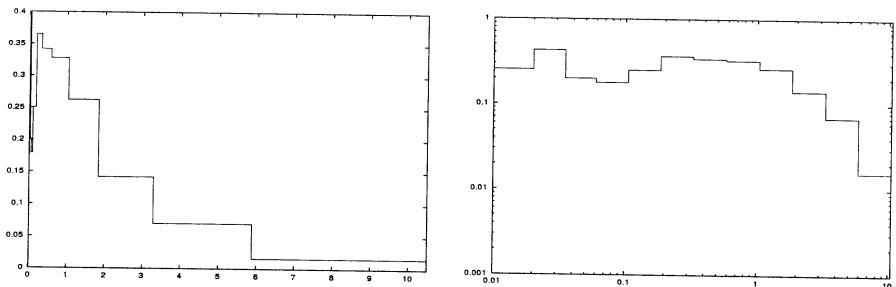


Рис. 1. Гистограмма, построенная по выборке из 1000 элементов, в линейном (слева) и в логарифмическом (справа) масштабах

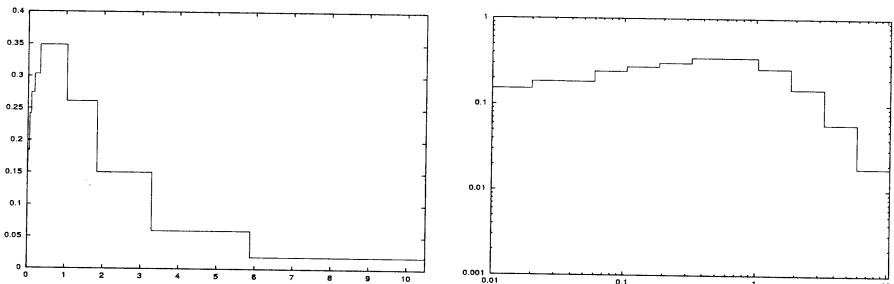


Рис. 2. Гистограмма, построенная по выборке из 10000 элементов

³ В ранних работах, где решалась эта задача, спектр нейтронов формировался каждой отдельной налетающей частицей (см. [7, 8]). Для рассматриваемой системы это означает, что для оценки спектра используется порядка 50 нейтронов. Как показано в настоящей работе, такой объем выборки недостаточен. Более разумным подходом представляется формирование спектра нейтронов путем накопления его от нескольких первичных частиц (см. [6]).

Применение метода, описанного в настоящей работе, позволяет существенно сократить объем выборки, требующийся для оценки спектра с заданной точностью. Этот факт наглядно иллюстрируется на рис. 3, где показаны гистограмма, представленная на рис. 2, и оценка $f_{2n}^{(**)}(x)$, построенная описанным выше способом с использованием двух выборок всего лишь по 100 элементов (при этом $\alpha = 1/7$ и $c = 2$). Очевидно, что при практически одинаковой точности наш метод значительно менее трудоемок.

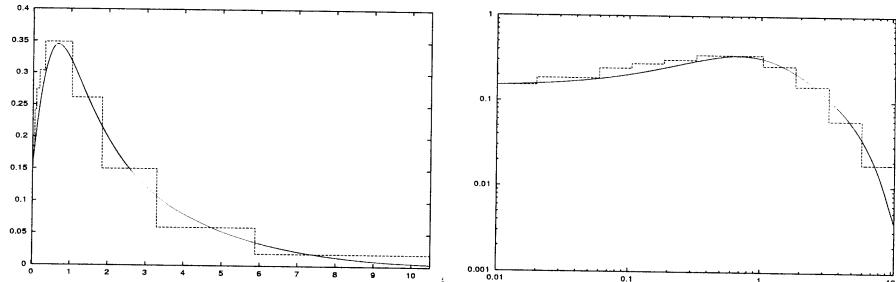


Рис. 3. Сравнение гистограммы, построенной по выборке из 10000 элементов, и оценки $f_{2n}^{(**)}(x)$, для построения которой использовались две выборки всего лишь по 100 элементов

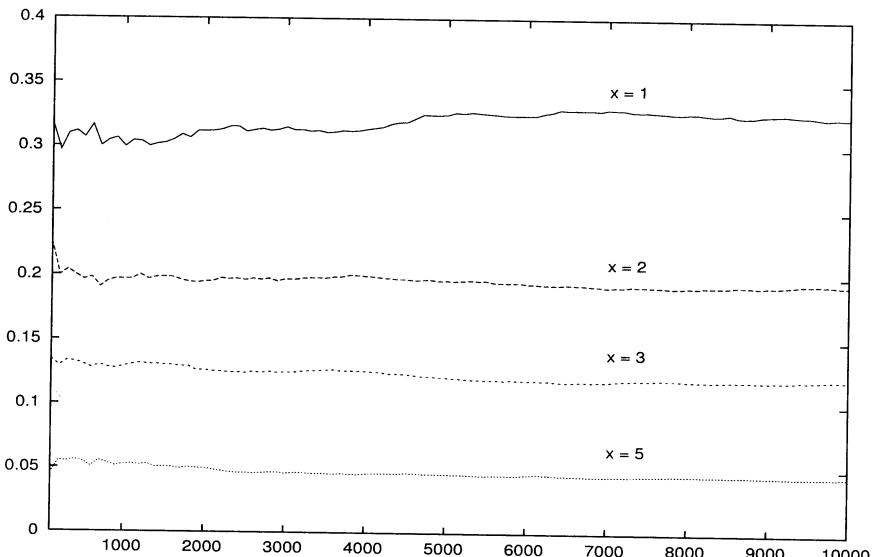


Рис. 4. Зависимость значений оценки $f_{2n}^{(**)}(x)$ в некоторых точках x от полного числа независимых наблюдений $2n$

На рис. 4 показана зависимость значений оценки $f_{2n}^{(**)}(x)$ в некоторых точках

x от полного числа независимых наблюдений $2n$, использующихся для ее построения. Из этого рисунка видно, выборками какого объема следует пользоваться для оценки искомого спектра с заданной точностью.

С учетом зависимостей, представленных на рис. 4, положим теперь $n = 1000$ (полное число независимых наблюдений при этом $2n = 2000$) и зададим коэффициент доверия $\beta \approx 0,95$. Отвечающая этим параметрам доверительная область показана на рис. 5.

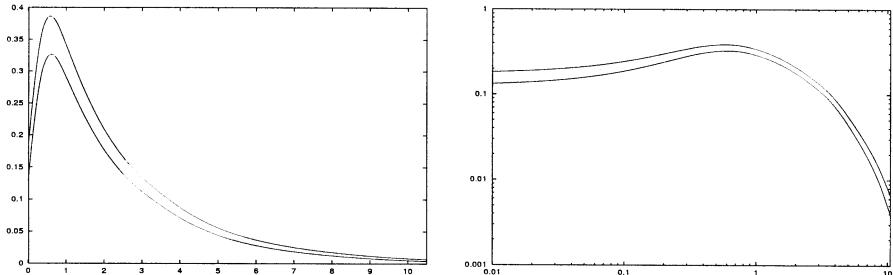


Рис. 5. Доверительная область, отвечающая коэффициенту доверия $\beta \approx 0,95$ и полному числу независимых наблюдений $2n = 2000$ (слева линейный масштаб, справа — логарифмический)

В заключение отметим, что представленные здесь расчеты показали высокую эффективность разработанного метода, что делает его весьма полезным при решении подобных задач.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Здесь приводятся тексты подпрограмм на языке FORTRAN'77, реализующие оценку неизвестной плотности распределения действительной непрерывной случайной величины по эмпирическим данным.

```
C=====
      SUBROUTINE E X T R A D E N
C-----
C   Input data :
      *(T,           ! Argument
      *X1,X2,N,     ! Samples
      *C,ALPHA,      ! Parameters
C   Output data :
      *F1,F2,F12,    ! Estimates
      *FEXT,Y1,Y2)   ! Refined Estimate and Confidence Interval
C-----
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      DIMENSION X1(N),X2(N)
C-----
      TWO2A=4.0D0**ALPHA
      TW05A=32.0D0**ALPHA
      TWOTW02A=2.0D0*TWO2A
C-----
      RN=DFLOAT(N)
      RN12=DFLOAT(N+N)
      HN=C*RN**(-ALPHA)
      HN12=C*RN12**(-ALPHA)
C-----
C   Parzen-Rosenblatt Estimates :
      F1=PARZEN(T,X1,N,HN)
      F2=PARZEN(T,X2,N,HN)
      F12=0.5D0*(PARZEN(T,X1,N,HN12)+PARZEN(T,X2,N,HN12))
*****
      GAMMA=-0.5D0/(TWO2A-1.0D0)
      GAMMA12=TWO2A/(TWO2A-1.0D0)
C   Extrapolation :
      FEXT=GAMMA*(F1+F2)+GAMMA12*F12
*****
      D=DSQRT(5.0D0/7.0D0)
      D=0.8451542547D0
      R=D*DSQRT(TW05A+1.0D0-TWOTW02A)/(TWOTW02A-2.0D0)
C -----
C   Confidence Level = 0.95 :
      RLCONF=2.0D0
C -----
```

```

TCONF=RLCONF*R/DSQRT(RN*HN)
ACONF=0.5D0*TCONF*TCONF
BCONF=0.5D0*ACONF
C Confidence Interval :
Y1=FEXT+ACONF-TCONF*DSQRT(FEXT+BCONF)
Y2=FEXT+ACONF+TCONF*DSQRT(FEXT+BCONF)
C -----
RETURN
END
C =====
REAL*8 FUNCTION PARZEN(T,X,N,HN)
C -----
C Parzen-Rozenblatt Estimation of Unknown Probability Pensity.
C -----
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
DIMENSION X(N)
C -----
PARZEN=0.0D0
DO 1 I=1,N,1
TT=(T-X(I))/HN
PARZEN=PARZEN+Q(TT)
1 CONTINUE
PARZEN=PARZEN/DFLOAT(N)/HN
C -----
RETURN
END
C =====
REAL*8 FUNCTION Q(X)
C -----
C Kernel for Parzen-Rozenblatt Estimation.
C -----
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
C -----
Q=0.0D0
IF(DABS(X).GT.1.0D0)RETURN
Q54=(1.0D0-X*X)
Q=0.9375D0*Q54*Q54
C -----
RETURN
END
C =====

```

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Жидков Е.П., Соловьев А.Г., Соснин А.Н. Повышение точности оценки неизвестной плотности распределения случайной величины по эмпирическим данным. Препринт ОИЯИ Р11-99-329. Дубна: ОИЯИ, 1999.
2. Васильков В.Г., Гольданский В.И., Джелепов В.П., Дмитриевский В.П. Электроядерный метод генерации нейтронов и производства расщепляющихся материалов. — Атомная энергия, 1970, т. 29, вып. 3, с. 151–158.
3. Барашенков В.С. Ядерно-физические аспекты электроядерного метода. — ЭЧАЯ, 1978, т. 9, с. 871.
4. Barashenkov V.S., Polanski A., Sosnin A.N., Filinova V.P. Neutron production in fissile targets under ion beam irradiation. — Kerntechnik, 1996, v. 61, no. 2–3, pp. 103–105.
5. Барашенков В.С., Соснин А.Н., Шмаков С.Ю., Големинов Н.Г., Поланский А. Математическое моделирование радиационных повреждений микроЭлектронных приборов. — ЭЧАЯ, 1993, т. 24, вып. 1, с. 246–284.
6. Barashenkov V.S., Polanski A., Sosnin A.N. Application of low-energy accelerators in electronuclear systems. — Kerntechnik, 1998, v. 63, no. 4, pp. 197–198.
7. Барашенков В.С., Левчук Л.Г., Мусульманбеков Ж.Ж., Соснин А.Н., Шмаков С.Ю. Выход нейтронов в высокоэнергетических дейtron-ядерных реакциях. — Атомная энергия, 1985, т. 58, вып. 2, с. 145–146.
8. Барашенков В.С., Левчук Л.Г., Мусульманбеков Ж.Ж., Соснин А.Н., Шмаков С.Ю. Рождение нейтронов под действием пучка высокоэнергетических ядер. — Атомная энергия, 1986, т. 61, вып. 1, с. 33–35.

Рукопись поступила в издательский отдел
4 февраля 2000 года.

Барашенков В.С. и др.

P2-2000-16

Повышение точности оценки энергетического спектра нейтронов
в моделируемых электроядерных установках

Предложен экономный метод построения распределений, использующий значительно меньшую выборку событий, чем гистограммирование. Эффективность метода иллюстрируется на примере построения энергетического спектра нейтронов ($E < 10.5$ МэВ), рождаемых высокоэнергетическими протонами в большом урановом блоке.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 2000

Перевод авторов

Barashenkov V.S. et al.

P2-2000-16

Improving the Accuracy of the Neutron Energy Spectrum Estimation
in Electronuclear Installations under Study

A time-saving method to build distributions which requires significantly lower volumes of the data samples than building a histogram is proposed. Effectiveness of the method is shown taking an example of the energy spectrum of the neutron source ($E < 10.5$ MeV) generated in the large uranium block irradiated with high energy protons.

The investigation has been performed at the Laboratory of Computing Techniques and Automation, JINR.

Редактор Е.Ю.Шаталова. Макет Н.А.Киселевой

Подписано в печать 14.02.2000
Формат 60 × 90/16. Офсетная печать. Уч.-изд. листов 1,17
Тираж 425. Заказ 51859. Цена 1 р. 41 к.

Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований
Дубна Московской области