

相关变量随机数序列产生方法

马续波 刘佳艺 徐佳意 鲁凡 陈义学

Generation of correlated pseudorandom variables

Ma Xu-Bo Liu Jia-Yi Xu Jia-Yi Lu Fan Chen Yi-Xue

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, **66**, 160201 (2017) DOI: 10.7498/aps.66.160201

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.66.160201>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2017/V66/I16>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

强激光场中原子单电离的半经典方法

Semiclassical methods for strong field ionization of atoms

物理学报.2016, 65(22): 220203 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.220203>

蒙特卡罗模拟中相关变量随机数序列的产生方法

Generation of correlated pseudorandom variables in Monte Carlo simulation

物理学报.2012, 61(22): 220204 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.220204>

大粒子数二维硬核玻色子系统的量子蒙特卡罗模拟

Simulation of two-dimensional many-particle hardcore bosons by using the quantum Monte Carlo method

物理学报.2012, 61(11): 110207 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.110207>

相关变量随机数序列产生方法*

马续波[†] 刘佳艺 徐佳意 鲁凡 陈义学

(华北电力大学核科学与工程学院, 北京 102206)

(2017年4月17日收到; 2017年5月16日收到修改稿)

当采用蒙特卡罗方法对很多问题进行研究时,有时需要对多维相关随机变量进行抽样. 之前的研究表明:在协方差矩阵满足正定条件时,可以采用 Cholesky 分解方法产生多维相关随机变量. 本文首先对产生多维相关随机变量的理论公式进行了推导,发现采用 Cholesky 分解并不是产生多维相关随机变量的唯一方法,其他的矩阵分解方法只要能满足协方差矩阵的分解条件,同样可以用来产生多维相关随机变量. 同时给出了采用协方差矩阵、相对协方差矩阵和相关系数矩阵产生多维随机变量的公式,以方便以后使用. 在此基础上,利用一个简单测试题和 Jacobi 矩阵分解方法对上述理论进行了验证. 通过对大亚湾中微子能谱进行抽样分析, Jacobi 矩阵分解和 Cholesky 矩阵分解结果一致. 针对核工程中的不确定性分析常用的 ^{238}U 辐射俘获截面协方差矩阵进行分解时,由于协方差矩阵的矩阵本征值有负值,导致很多矩阵分解方法无法使用,在引入置零修正以后发现,与 Cholesky 对角线置零修正相比, Jacobi 负本征值置零修正的误差更小.

关键词: 蒙特卡罗方法, 相关变量, 随机数产生方法, 抽样**PACS:** 02.50.Ng**DOI:** 10.7498/aps.66.160201

1 引言

蒙特卡罗方法在很多领域得到了广泛的应用^[1-7]. 由具有已知分布的随机变量进行抽样的方法在蒙特卡罗方法中占有重要的地位,并且已得到广泛的研究. 对于多维随机变量的蒙特卡罗模拟问题,通常假定各随机变量之间是相互独立的,由此可以根据每个变量的统计分布去独立产生多变量的样本. 但在某些学科,比如核工程中的不确定性分析,不仅同一反应类型每个能群与每个能群的多群截面是相关的,不同反应类型同一反应能群的截面也是相关的,故需要对多维具有相关性的随机变量进行模拟. 这就需要产生具有相关系数矩阵的多个随机数序列. 之前的研究表明,基于协方差矩阵的 Cholesky 因子分解的线性变换方法被认为是最好的一种方法^[8],但 Cholesky 因子分解的线性变换方法要求协方差矩阵必须是正定的,而对于很多

实际问题的协方差矩阵,正定条件并不一定能完全满足,这时如果还采用 Cholesky 因子分解并做近似处理可能出现较大误差. 针对这样的问题,本文提出了基于 Jacobi 矩阵分解法进行相关随机变量序列产生的方法,相比于 Cholesky 因子分解, Jacobi 矩阵分解法不要求矩阵正定,只要满足对称即可,这样就进一步扩展了相关随机变量序列的产生方法. 并且进一步发现,如果协方差矩阵本征值部分为负值时,采用不同的置零修正方法,误差有较大差别.

2 相关随机变量模拟理论

由于正态分布具有在线性变换下保持分布规律不变的独特性质,因此多维相关正态分布随机变量抽样序列可以通过方差矩阵进行分解,然后对独立正态分布抽样序列进行线性变换来产生^[8]. 之前研究较多的是采用 Cholesky 分解,下面证明:不仅

* 国家自然科学基金(批准号: 11390383)和中央高校基本科研业务费(批准号: 2015ZZD12)资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: maxb@ncepu.edu.cn

可以采用 Cholesky 分解, 其他的分解方式只要能满足把协方差矩阵 \mathbf{A} 分解成矩阵 $\mathbf{\Sigma}$ 和 $\mathbf{\Sigma}^T$ 的相乘的形式, 即

$$\mathbf{A} = \mathbf{\Sigma}\mathbf{\Sigma}^T, \quad (1)$$

则就可以利用矩阵 $\mathbf{\Sigma}$ 产生多维相关正态分布随机变量.

设 $\mathbf{X}_{m \times n} = (X_1, X_2, \dots, X_n)_m$ 为需要产生的 m 组 n 维相关正态分布随机变量序列, 其均值为 $\mathbf{u} = (u_1, u_2, \dots, u_n)$, 协方差矩阵为 \mathbf{A} , 表示如下:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} A_{11} & \dots & A_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{n1} & \dots & A_{nn} \end{pmatrix}. \quad (2)$$

对于核工程中截面的不确定性分析, $\mathbf{A}_{i,j}$ 为分群截面之间的协方差矩阵. 产生 n 维独立标准正态分布随机变量抽样序列 $\mathbf{Y}_{m \times n} = (Y_1, Y_2, \dots, Y_n)$, 每个变量抽样序列数 m , 并且 X_n, Y_n 和 $\mathbf{\Sigma}$ 满足公式:

$$\mathbf{X} = \mathbf{\Sigma}\mathbf{Y} + \mathbf{u}, \quad (3)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{E}[\mathbf{X}] &= \mathbf{E}[\mathbf{\Sigma}\mathbf{Y} + \mathbf{u}] = \mathbf{\Sigma}\mathbf{E}[\mathbf{Y}] + \mathbf{E}[\mathbf{u}] \\ &= \mathbf{\Sigma} \cdot \mathbf{0} + \mathbf{u} = \mathbf{u}, \end{aligned} \quad (4)$$

并且 \mathbf{X} 的协方差矩阵为

$$\begin{aligned} \mathbf{V}[\mathbf{X}] &= \mathbf{E}[(\mathbf{X} - \mathbf{E}(\mathbf{X}))(\mathbf{X} - \mathbf{E}(\mathbf{X}))^T] \\ &= \mathbf{E}[(\mathbf{\Sigma}\mathbf{Y} + \mathbf{u} - \mathbf{u})(\mathbf{\Sigma}\mathbf{Y} + \mathbf{u} - \mathbf{u})^T] \\ &= \mathbf{E}[(\mathbf{\Sigma}\mathbf{Y})(\mathbf{\Sigma}\mathbf{Y})^T] = \mathbf{E}[\mathbf{\Sigma}\mathbf{Y}\mathbf{Y}^T\mathbf{\Sigma}^T] \\ &= \mathbf{\Sigma}\mathbf{E}[\mathbf{Y}\mathbf{Y}^T]\mathbf{\Sigma}^T = \mathbf{\Sigma}\mathbf{V}(\mathbf{Y})\mathbf{\Sigma}^T \\ &= \mathbf{\Sigma}\mathbf{\Sigma}^T, \end{aligned} \quad (5)$$

其中矩阵 $\mathbf{\Sigma}$ 需要通过对方差矩阵 \mathbf{A} 分解得到,

$$\mathbf{V}[\mathbf{X}] = \mathbf{A} = \mathbf{\Sigma}\mathbf{\Sigma}^T. \quad (6)$$

由 (4), (5), (6) 式可知, 只要把协方差矩阵 \mathbf{A} 分解成矩阵 $\mathbf{\Sigma}$ 和 $\mathbf{\Sigma}^T$ 的相乘的形式, 就可以利用 (3) 式来产生多维相关正态分布随机变量序列.

如果问题给出的是相对协方差矩阵 \mathbf{A}^r , 而不是直接给出协方差矩阵 \mathbf{A} , 可以证明, 同样可以把相对协方差矩阵 \mathbf{A}^r 进行分解

$$\mathbf{A}^r = \mathbf{\Sigma}^r(\mathbf{\Sigma}^r)^T, \quad (7)$$

其中 $\mathbf{\Sigma}^r$ 由相对协方差矩阵 \mathbf{A}^r 分解得到. 由于相对协方差矩阵矩阵元 \mathbf{A}_{ij}^r 和协方差矩阵 \mathbf{A}_{ij} 满足关系

$$\mathbf{A}_{ij}^r = \mathbf{A}_{ij}/(u_i u_j), \quad (8)$$

则多维相关正态分布随机变量序列 X_i 的产生公式为

$$\mathbf{X} = (\mathbf{\Sigma}^r\mathbf{Y} + \mathbf{I}) \cdot \mathbf{u}, \quad (9)$$

其中 \mathbf{I} 表示单位矩阵.

通常情况下, 能群截面与能群截面之间的相关性处理采用协方差矩阵 \mathbf{A} 表示外, 有时还用相关系数矩阵表示, 这时用 σ_i 表示 X_i 的标准偏差, 计算公式如 (10) 式所示.

$$\sigma_i = \sqrt{\mathbf{A}_{ii}}, \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (10)$$

相关系数矩阵中的矩阵元系数

$$\mathbf{R}_{i,j} = \mathbf{A}_{i,j}/(\sigma_i \sigma_j), \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (11)$$

对相关系数矩阵进行分解得

$$\mathbf{R} = \mathbf{M}\mathbf{M}^T, \quad (12)$$

则多维相关正态分布随机变量序列 X_i 的产生公式为

$$\mathbf{X} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{M}\mathbf{Y} + \mathbf{u}. \quad (13)$$

(13) 式与文献 [8] 中给出的 (5) 式的形式是一致的, 不同的是文献 [8] 中给出的 (5) 式针对 Cholesky 分解是成立的, 并且也进行了验证, 但本文中的 (13) 式并没有要求一定是 Cholesky 分解, 只要相关系数矩阵 \mathbf{R} 能满足 (12) 式, 则就可以利用 (13) 式产生多维相关正态分布随机变量序列 X_i .

与 Cholesky 分解相比, Jacobi 矩阵分解并不要求协方差矩阵一定是正定的, 只要求其具有对称性即可. 另外 Jacobi 方法还可以用来求解奇异矩阵, 并且求解出的矩阵的奇异值拥有较高的相对精度, 奇异向量的正交性好、有较强的数值稳定性, 并且算法实现简单 [9]. Jacobi 方法用于求实对称阵的全部特征值、特征向量. 对于实对称矩阵 \mathbf{A} , 必有正交矩阵 \mathbf{U} , 使

$$\mathbf{A} = \mathbf{U}\mathbf{D}\mathbf{U}^T, \quad (14)$$

其中 \mathbf{D} 是对角阵, 其主对角线元是 \mathbf{A} 的特征值.

3 Jacobi 方法产生相关随机变量验证

3.1 相关随机变量的模拟抽样示例

采用文献 [8] 中的例子, 要求产生随机变量 X_1, X_2, X_3 , 其中 $X_1, X_2 \in [-1, 1]$, $X_3 \in [0, 4]$. 三

个随机变量具有如下相关系数矩阵 R ,

$$R_{X_1 X_2 X_3} = \begin{pmatrix} 1 & 0.8 & -0.8 \\ 0.8 & 1 & -0.375 \\ -0.8 & -0.375 & 1 \end{pmatrix}. \quad (15)$$

我们利用 Fortran2003 语言, 分别采用 Cholesky 分解和 Jacobi 分解法对矩阵 R 进行了计算, 结果如表 1 和图 1.

表 1 分别利用两种方法产生的样本计算的相关系数对比
Table 1. Comparing of two methods to produce correlation coefficients for sample calculating.

样本数	Jacobi 方法			Cholesky 方法
	2×10^4	2×10^5	2×10^6	2×10^4
R12	0.8016	0.8009	0.8003	0.7994
R13	-0.7974	-0.8001	-0.7998	-0.7998
R23	-0.3715	-0.3764	-0.3751	-0.3728

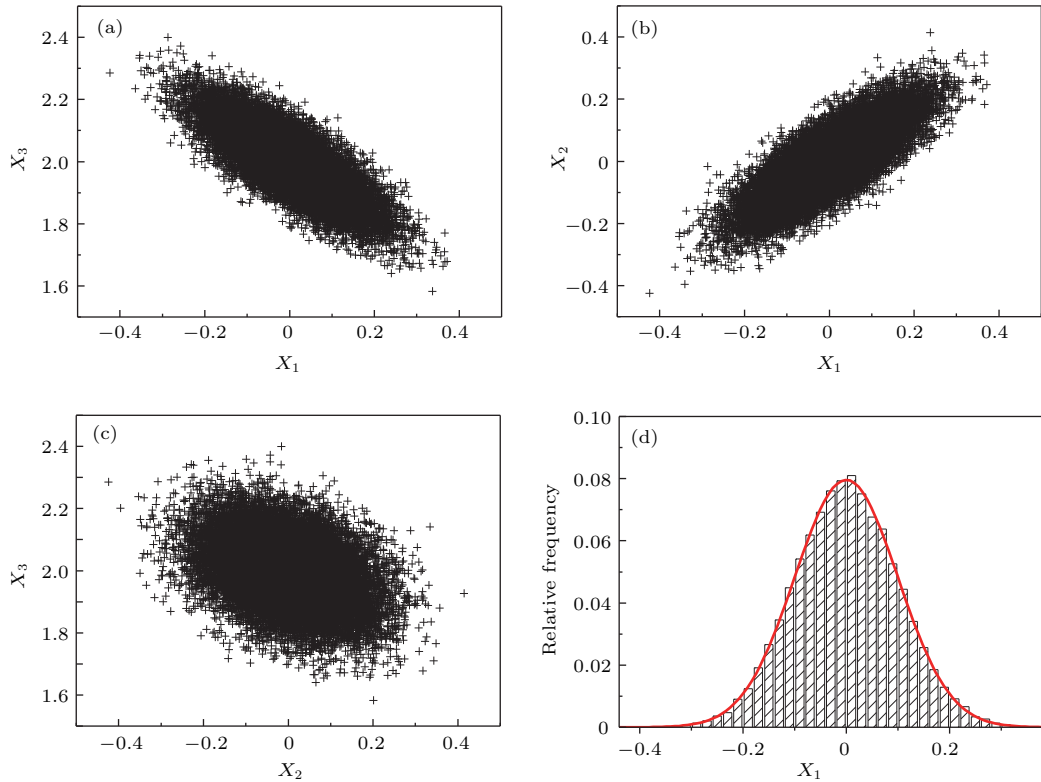


图 1 X_1, X_2 和 X_3 两两散点图 (a) X_1 和 X_3 之间的散点图; (b) X_1 和 X_2 之间的散点图; (c) X_3 和 X_2 之间的散点图; (d) 变量 X_1 的示例数满足高斯分布

Fig. 1. Scattergram of X_1, X_2 and X_3 : (a) X_1 and X_3 ; (b) X_1 and X_2 ; (c) X_1 and X_2 ; (d) variable X_1 satisfies the Gauss distribution.

3.2 大亚湾中微子能谱样本产生验证

江门中微子实验的物理目标是大约利用 6 年左右时间测量中微子的质量顺序. 反应堆中微子能谱是反应堆中微子实验重要的输入参数, 其抽样方法和误差计算方法也会对反应堆中微子实验产生重要影响. 文献 [10, 11] 利用世界上最大的中微子样本测量了最精确的中微子能谱以及中微子能谱的协方差矩阵, 如图 2 所示. 利用测量的中微子能谱和协方差矩阵, 分别采用 Cholesky 分解和 Jacobi 分解两种矩阵分解方法进行抽样, 样本总数为 500. 利用 Jacobi 方法产生的样本如图 3(a) 所示, 计算

得到每个能量区间的相对误差如图 3(b) 所示. 由图 3 可见, 两种计算方法计算得到的结果是一致的, 误差的最大不一致小于 5%.

3.3 69 群协方差数据库分解

核工程设计中, 通过对复杂核系统进行不确定性分析, 往往可以减小系统的近似程度, 提高系统的经济性, 近来收到国内外学者进行的大量研究 [6, 7, 12-19]. 由于利用蒙特卡罗抽样方法进行不确定性分析具有多种优点 (比如可以同时研究多个输出变量的不确定性, 可以考虑高阶不确定度影响等),

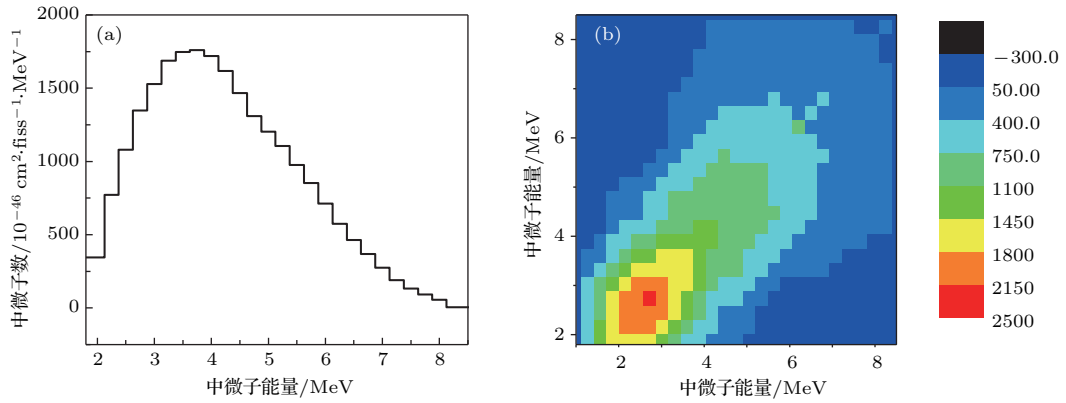


图2 (网刊彩色) 大亚湾中微子实验测量的中微子能谱 (a) 和协方差矩阵 (b)

Fig. 2. (color online) Neutrino spectrum (a) and covariance matrix (b) measured in Daya Bay neutrino experiment.

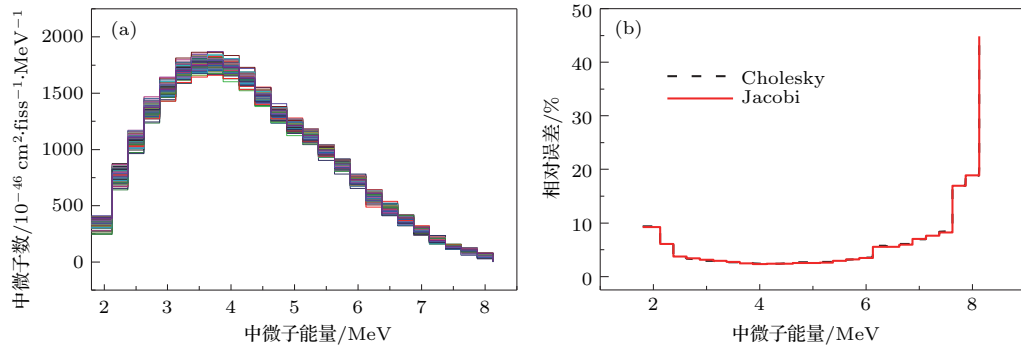


图3 (网刊彩色) 利用 Jacobi 矩阵分解方法抽得样本分布 (a), 分别利用 Cholesky 方法和 Jacobi 方法抽样 500 计算得到每个能量区间的相对误差 (b)

Fig. 3. (color online) Sample distribution extracted by Jacobi matrix decomposition method (a), the relative error of each energy interval calculated by Cholesky and Jacobi methods with 500 samples (b).

蒙特卡罗抽样方法越来越受到国内外学者的重视. 在利用蒙特卡罗抽样方法进行不确定性分析时, 其中关键的一步就是要对多群截面协方差数据进行矩阵分解. 多群截面的协方差矩阵一般由 NJOY 软件^[20]产生. 压水堆设计计算中, 通常采用 69 群或者 172 群的能群结构, 我们采用 NJOY 软件产生了 69 群的 ^{235}U 和 ^{238}U 辐射俘获截面的协方差矩阵, 如图 4 所示. ^{238}U 辐射俘获截面协方差矩阵的本征值如表 2 所列, 可以看到, 部分能群的本征值出现了负值. 为了解决这个问题, 国内外的通用做法是对负本征值置零处理. 本征值出现为负值的情况, 主要原因是利用 NJOY 产生协方差矩阵过程中采用了很多近似, 在多种近似的情况下, 最终导致协方差矩阵的本征值出现负值. 这种情况下, 无法再用 Cholesky 分解方法对矩阵进行分解, 因为 Cholesky 分解必须要求协方差矩阵的本征值为大于等于零的数值. 我们采用对本征值置零的方法

后得到的新的本征值矩阵为 D' , 然后利用新的本征值矩阵和已经得到的正交矩阵 U 求得新的矩阵 A' ,

$$A' = UD'U^T. \quad (16)$$

求得矩阵 A' 和矩阵 A 的相对误差分布如图 5 所示, ^{238}U 辐射俘获截面协方差矩阵分解过程中, 由于对本征值进行置零修正而导致的协方差矩阵的变化最大约为 1.2%.

如果还采用 Cholesky 分解,

$$A = LPL^T, \quad (17)$$

其中 L 为下三角矩阵, P 为只有对角线上有值的对角阵, 如果对矩阵 P 上的负值置零, 得到的新矩阵为 P' , 利用新矩阵求得的矩阵 A' 的相对误差分布如图 6 所示. 由图 6 可见, 得到的矩阵 A' 的相对误差的最大值为 153%, 误差要远大于采用本征值置零的方法.

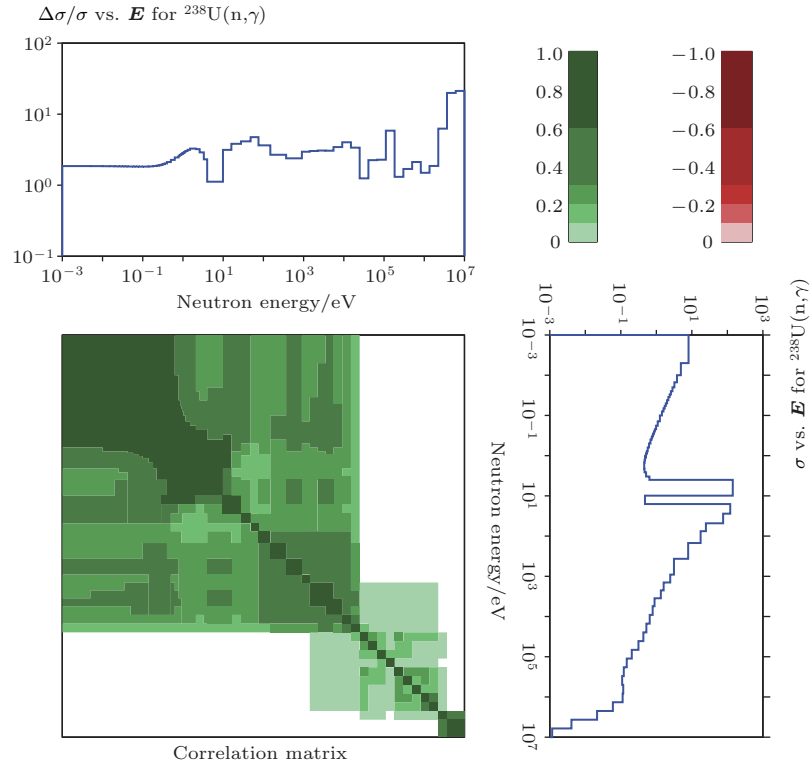


图4 (网刊彩色) $^{238}\text{U}(n, \gamma)$ 反应的协方差矩阵

Fig. 4. (color online) covariance matrix of $^{238}\text{U}(n, \gamma)$ reaction.

表2 ^{238}U 辐射俘获截面协方差矩阵的本征值

Table 2. Eigenvalue of ^{238}U radiative capture cross section covariance matrix.

能群号	本征值	能群号	本征值	能群号	本征值
1	3.35889×10^{-2}	24	-1.24000×10^{-9}	47	1.26811×10^0
2	1.24584×10^{-8}	25	-2.25009×10^{-10}	48	3.67915×10^{-1}
3	-1.75628×10^{-8}	26	1.64324×10^{-9}	49	4.13288×10^{-2}
4	1.54506×10^{-8}	27	-5.19624×10^{-10}	50	2.39742×10^{-3}
5	-3.56290×10^{-8}	28	-1.59229×10^{-9}	51	5.76066×10^{-3}
6	1.36831×10^{-8}	29	-1.77235×10^{-9}	52	1.51294×10^{-3}
7	-1.45126×10^{-8}	30	6.97487×10^{-10}	53	7.42816×10^{-4}
8	3.64564×10^{-9}	31	-4.93975×10^{-10}	54	2.20981×10^{-4}
9	-9.41504×10^{-9}	32	1.05594×10^{-9}	55	3.56767×10^{-4}
10	1.88768×10^{-8}	33	-6.17212×10^{-10}	56	4.99869×10^{-4}
11	3.34648×10^{-9}	34	-2.87462×10^{-11}	57	2.32874×10^{-4}
12	5.08554×10^{-9}	35	1.32285×10^{-9}	58	2.54414×10^{-5}
13	-3.00494×10^{-9}	36	6.80365×10^{-10}	59	5.26418×10^{-5}
14	1.94207×10^{-9}	37	-8.92543×10^{-10}	60	1.92264×10^{-5}
15	-6.01270×10^{-9}	38	1.63391×10^{-9}	61	7.42514×10^{-5}
16	3.83641×10^{-9}	39	2.08079×10^{-3}	62	1.91116×10^{-6}
17	-3.76512×10^{-9}	40	2.07075×10^{-10}	63	3.60870×10^{-6}
18	-1.94252×10^{-9}	41	8.81129×10^{-8}	64	6.52938×10^{-6}
19	2.72085×10^{-9}	42	1.59942×10^{-6}	65	2.50307×10^{-6}
20	-2.17971×10^{-9}	43	2.28341×10^0	66	1.02535×10^{-6}
21	2.44204×10^{-10}	44	8.20913×10^{-5}	67	2.12545×10^{-6}
22	6.37136×10^{-9}	45	2.27535×10^{01}	68	5.41245×10^{-7}
23	-1.58249×10^{-9}	46	8.75806×10^0	69	7.22125×10^{-9}

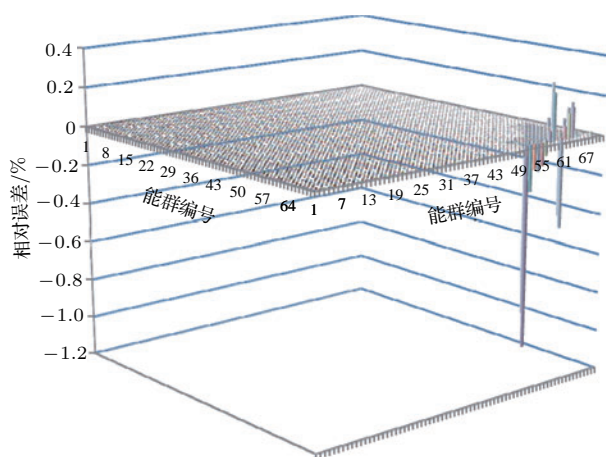


图5 ^{238}U 辐射俘获截面协方差矩阵采用 Jacobi 方法分解, 由于对本征值进行置零修正而导致的协方差矩阵的变化, 最大为 1.2%

Fig. 5. The covariance matrix of ^{238}U radiative capture cross section is decomposed by Jacobi method with zero correction of the eigenvalue, the maximum relative error is 1.2%.

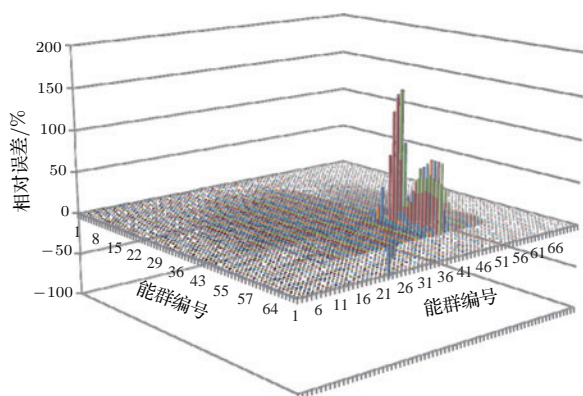


图6 (网刊彩色) ^{238}U 辐射俘获截面协方差矩阵采用 Cholesky 方法分解, 由于对本征值进行置零修正而导致的协方差矩阵的变化, 最大为 153%

Fig. 6. (color online) The covariance matrix of ^{238}U radiative capture cross section is decomposed by Cholesky method with zero correction of the eigenvalue, the maximum relative error is 153%.

4 结 论

通过对产生多维相关随机变量的理论公式进行推导, 发现采用 Cholesky 分解并不是产生多维相关随机变量的唯一方法, 其他的矩阵分解方法只要能满足协方差矩阵的分解条件, 同样可以用来产生多维相关随机变量. 同时给出了采用协方差矩阵、相对协方差矩阵和相关系数矩阵产生多维随机变量的公式. 在此基础上, 利用一个简单测试验证了 Jacobi 矩阵分解方法也同样适用于相关随机变

量的产生. 通过对大亚湾中微子能谱进行抽样分析, Jacobi 矩阵分解和 Cholesky 矩阵分解计算得到的每个能量区间的相对误差结果是一致的. 针对核工程中的不确定性分析常用的 ^{238}U 辐射俘获截面协方差矩阵进行分解时, 由于协方差矩阵的矩阵本征值有负值, 导致很多矩阵分解方法无法使用, 在引入置零修正以后发现, 与 Cholesky 对角线置零修正相比, Jacobi 负本征值置零修正的误差更小. 虽然 ^{238}U 辐射俘获截面协方差矩阵采用 Jacobi 负本征值置零修正更好, 但不能保证该结论适用于其他例子, 因此还需要对以上现象的理论做深入研究, 以便找到更好的修正方法.

参考文献

- [1] Pei L C 1989 *Computer Stochastic Simulation* (Changsha: Hunan Science and Technology Press) p1 (in Chinese) [裴鹿成 1989 计算机随机模拟 (长沙: 湖南科学出版社) 第 1 页]
- [2] Xu S Y 2006 *Monte Carlo Method and its Application in Nuclear Physics Experiment* (2nd Ed.) (Beijing: Atomic Energy Press) p1 (in Chinese) [许淑艳 2006 蒙特卡罗方法在实验核物理中的应用 (第二版) (北京: 原子能出版社) 第 1 页]
- [3] Zhu Y S 2016 *Statistic Analysis in High Energy Physics* (Beijing: Science Press) p1 (in Chinese) [朱永生 2016 高能物理实验统计分析 (北京: 科学出版社责任有限公司) 第 1 页]
- [4] Landau D P, Binder K 2000 *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics* (2nd Ed.) (New York: Cambridge University Press) p1
- [5] Ferguson D M, Siepmann J I, Truhlar D G 1999 *Monte Carlo Methods in Chemical Physics* (New York: John Wiley & Sons, Inc.) p1
- [6] Matthew R B 2011 *Ph. D. Dissertation* (Hamilton: McMaster university)
- [7] Hu Z H, Ye T, Liu X G, Wang J 2017 *Acta Phys. Sin.* **66** 012801 (in Chinese) [胡泽华, 叶涛, 刘雄国, 王佳 2017 物理学报 **66** 012801]
- [8] Wen D Z, Zhuo R H, Ding D J, Zheng H, Cheng J, Li Z H 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 220204 (in Chinese) [文德智, 卓仁鸿, 丁大杰, 郑慧, 成晶, 李正宏 2012 物理学报 **61** 220204]
- [9] Guo Q 2011 *M. S. Dissertation* (Jiangsu: Soochow University) (in Chinese) [郭强 2011 硕士学位论文 (江苏: 苏州大学)]
- [10] An F P, Balantekin A B, Band H R, et al. 2017 *Chin. Phys. C* **41** 013002
- [11] An F P, Balantekin A B, Band H R, et al. 2016 *Phys. Rev. Lett.* **116** 061801
- [12] Ivanov K, Avramova M, Kamerow S, Kodeli I, Sartori E, Ivanov E, Cabellos O 2013 *Benchmarks for Uncertainty*

- Analysis in Modelling (UAM) for the Design, Operation and Safety Analysis of LWRs, Volume I: Specification and Support Data for Neutronics Cases (Phase I)*, NEA/NSC/DOC (2013) 7 <https://www.oecd-neo.org/science/docs/2013/nsc-doc2013-7.pdf>
- [13] Yamamoto A, Kinoshita K, Watanabe T, Endo T, Kodama Y, Ohoka Y, Ushino T, Nagano H 2015 *Nucl. Sci. Engineer.* **181** 160
- [14] Park H J, Shim H J, Kim C H 2012 *Sci. Technol. Nucl. Install.* **2012** 247
- [15] Curtis E M 2013 *M. S. Dissertation* (Hamilton: McMaster University)
- [16] Dan G C, Mihaela I B 2004 *Nucl. Sci. Engineer.* **147** 204
- [17] Zvermann W, Aures A, Gallner L, et al. 2014 *Nucl. Engineer. Technol.* **46** 3
- [18] Wan C H, Cao L Z, Wu H C, Zu T J, Shen W 2015 *Atom. Energy Sci. Technol.* **49** 11 (in Chinese) [万承辉, 曹良志, 吴宏春, 祖铁军, 沈伟 2015 原子能科学技术 **49** 11]
- [19] Wang X Z, Yu H, Wang W M, Hu Y, Yang X Y 2014 *Atom. Energy Sci. Technol.* **48** 9 (in Chinese) [王新哲, 喻宏, 王文明, 胡赞, 杨晓燕 2014 原子能科学技术 **48** 9]
- [20] Macfarlane R, Kahler A 2010 *Nuclear Data Sheets* **111** 2739

Generation of correlated pseudorandom variables*

Ma Xu-Bo[†] Liu Jia-Yi Xu Jia-Yi Lu Fan Chen Yi-Xue

(School of Nuclear Science and Technology, North China Electric Power University, Beijing 102206, China)

(Received 17 April 2017; revised manuscript received 16 May 2017)

Abstract

When Monte Carlo method is used to study many problems, it is sometimes necessary to sample correlated pseudorandom variables. Previous studies have shown that the Cholesky decomposition method can be used to generate correlated pseudorandom variables when the covariance matrix satisfies the positive eigenvalue condition. However, some covariance matrices do not satisfy the condition. In this study, the theoretical formula for generating correlated pseudorandom variables is deduced, and it is found that Cholesky decomposition is not the only way to generate multidimensional correlated pseudorandom variables. The other matrix decomposition methods can be used to generate multidimensional relevant random variables if the positive eigenvalue condition is satisfied. At the same time, we give the formula for generating the multidimensional random variable by using the covariance matrix, the relative covariance matrix and the correlation coefficient matrix to facilitate the later use. In order to verify the above theory, a simple test example with 3×3 relative covariance matrix is used, and it is found that the correlation coefficient results obtained by Jacobi method are consistent with those from the Cholesky method. The correlation coefficients are more close to the real values with increasing the sampling number. After that, the antineutrino energy spectra of Daya Bay are generated by using Jacobi matrix decomposition and Cholesky matrix decomposition method, and their relative errors of each energy bin are in good agreement, and the differences are less than 5.0% in almost all the energy bins. The above two tests demonstrate that the theoretical formula for generating correlated pseudorandom variables is corrected. Generating correlated pseudorandom variables is used in nuclear energy to analyze the uncertainty of nuclear data library in reactor simulation, and many codes have been developed, such as one-, two- and three-dimensional TSUNAMI, SCALE-SS, XSUSA, and SUACL. However, when the method of generating correlated pseudorandom variables is used to decompose the ^{238}U radiation cross section covariance matrix, it is found that the negative eigenvalue appears and previous study method cannot be used. In order to deal with the ^{238}U radiation cross section covariance matrix and other similar matrices, the zero correction is proposed. When the zero correction is used in Cholesky diagonal correction and Jacobi eigenvalue zero correction, it is found that Jacobi negative eigenvalue zero correction error is smaller than that with Cholesky diagonal correction. In future, the theory about zero correction will be studied and it will focus on ascertaining which correction method is better for the negative eigenvalue matrix.

Keywords: Monte Carlo method, pseudorandom numbers, correlated random variables, sampling

PACS: 02.50.Ng

DOI: 10.7498/aps.66.160201

* Project supported by National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11390383) and Fundamental Research Funds for the Central Universities of China (Grant No. 2015ZZD12).

[†] Corresponding author. E-mail: maxb@ncepu.edu.cn