

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ
ИНСТИТУТ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ
И МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ГЕОФИЗИКИ

Г.А. Михайлов

Ответственный редактор
доктор физико-математических наук
Б.А. Каргин

НОВОСИБИРСК
ИЗДАТЕЛЬСТВО СИБИРСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

2003

УДК 519.6; 519.2

ББК В 19; В 17

М 69

Михайлов Г.А. Весовые алгоритмы статистического моделирования. – Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2003. – 248 с.

В монографии излагаются последние достижения автора и группы его учеников в области теории весовых алгоритмов статистического моделирования для решения задач математической физики.

Монография предназначена для специалистов в области прикладной математики и вычислительной физики, для студентов и аспирантов физико-математических специальностей.

Mikhailov G.A. Weight Algorithms of Statistical Modelling. – Novosibirsk: SB RAS Publ., 2003. – 248 p.

In the monograph the recent results of the author and his pupils in the theory of weight algorithms of statistical modelling for solving the mathematical physics problems are presented. For specialists in applied mathematics and physics, for the corresponding students and postgraduates

Монография подготовлена при финансовой поддержке РФФИ (грант 03–01–00040), Интеграционного гранта СО РАН 2003–№ 2, фонда "Университеты России – фундаментальные исследования" (проект УР. 04.01.34).

Рецензенты:

доктор физико-математических наук Ю.Н. Григорьев
доктор физико-математических наук С.С. Артемьев
доктор физико-математических наук А.В. Войтишек

Утверждено к печати

Институтом Вычислительной математики и
математической геофизики

ISBN 5-7692-0314-5

© Г.А. Михайлов, 2003

© ИВМиМГ (ВЦ) СО РАН, 2003

Тематический план выпуска изданий СО РАН
на 2003 г., поз. № 1

Научное издание

Геннадий Алексеевич Михайлов

Ответственный редактор
доктор физико-математических наук
Б.А. Каргин

Оформлено в системе \LaTeX , макрос NCC

Редактор Л.И. Бессильных
Технический редактор Л.И. Бессильных
Обложка художника Е.А. Хоперской

Лицензия ЛР 020909 от 01.09.1999 г.

Подписано в печать 11.05.2003 г.

Формат бумаги $60 \times 84^{1/16}$ Объем 15,6 п. л., 14,7 уч.-изд. л.

Тираж 300 экз.

Заказ № 16

Издательство Сибирского отделения РАН.

630090, Новосибирск, Морской пр. 2

Отпечатано в ООО "Омега Принт".

Новосибирск-90, пр. Лаврентьева, 6

Разработка алгоритмов численного статистического моделирования в настоящее время имеет особое значение в связи с возможностью их идеального распараллеливания путем распределения численных статистических испытаний по отдельным процессорам. Необходимые для этого длиннопериодные, параллельно реализуемые генераторы псевдослучайных чисел рассмотрены в дополнении А.

Практически статистическое моделирование наиболее часто используется для решения задач физики и техники, в основе которых лежат вероятностные модели, связанные с некоторыми цепями Маркова. В принципе, такие задачи можно решать непосредственно численно моделируя траектории этих цепей. На основе исходного “феноменологического” описания проблемы можно даже строить весовые модификации алгоритма, домножая вспомогательный “вес” после каждого элементарного перехода на отношения соответствующих (может быть обобщенных) плотностей исходного и моделируемого распределений. Однако, для детального изучения и построения различных модификаций весовых алгоритмов необходимо использовать интегральные уравнения второго рода, ядра которых совпадают с плотностями перехода базовых цепей Маркова. В частности, на основе таких уравнений можно разрабатывать “ценностные” алгоритмы с малыми вероятностными погрешностями, что особенно важно для оценок малых вероятностей (см. гл. 1). С помощью интегральных уравнений и представлений разработаны теория и алгоритмы оценки параметрических производных и градиентов решений рассматриваемых задач (см. главы 1, 3, 4). В последнее время было выяснено, что для построения весовых модификаций может быть особенно эффективным увеличение размерности фазового пространства путем включения в число фазовых координат моделируемых вспомогательных

случайных величин. Соответствующая факторизация ядра базового интегрального уравнения и вспомогательной плотности перехода иногда дает требуемую весовую модификацию (см. главы 1 и 4).

Оглавление достаточно хорошо показывает содержание монографии. Она является прямым продолжением предыдущей монографии автора “Весовые методы Монте-Карло”, Новосибирск, изд-во СО РАН, 2000, из которой, по необходимости, здесь использован материал, составляющий не более 20% текста.

Значительную часть монографии составили работы автора, выполненные совместно с руководимыми им сотрудниками отдела статистического моделирования в физике Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, а также с аспирантами этого института и Новосибирского государственного университета (см. литературу). Особой благодарности автора в связи с этим заслуживают кандидаты физ.-мат. наук Г.З. Лотова, М.А. Марченко, С.В. Рогазинский и А.В. Бурмистров.

Глава 1

1.1. Вводная информация

Математическая модель ряда задач физики и техники строится на основе рассмотрения соответствующего скачкообразного, обрывающегося с вероятностью единица однородного марковского процесса (см., например, [14]). При этом траектория процесса вполне определяется ее состояниями в моменты скачков, то-есть фактически можно рассматривать обрывающуюся однородную цепь Маркова с заданной переходной функцией $p(x, S)$, где $x \in X$, X – многомерное евклидово пространство, $S \subset X$ – измеримое множество. Для построения весовых алгоритмов моделирования целесообразно рассматривать соответствующую условной мере $P(x', S)$ обобщенную плотность перехода $k(x', x)$. Предполагается, что вероятность необрыва

$$\int k(x', x) dx = q(x') \leq 1 - \delta,$$

то-есть цепь обрывается с вероятностью единица и среднее число состояний конечно.

Итак, рассматривается однородная обрывающаяся цепь Маркова x_0, x_1, \dots, x_N , определяемая плотностью $f(x)$ распределения начального состояния x_0 и субстохастической обобщенной плотностью перехода $k(x', x)$. Полная плотность распределения фазовых состояний цепи

$$\varphi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \varphi_n(x),$$

где $\varphi_n(x)$ – плотность распределения состояний номера n , представляет собой ряд Неймана для следующего интегрального уравнения 2 - го рода:

$$\varphi(x) = \int_X k(x', x)\varphi(x') dx' + f(x), \quad (1.1)$$

или $\varphi = K\varphi + f$. Это уравнение будем рассматривать в пространстве $N_1(X)$ обобщенных плотностей мер ограниченной вариации, и, соответственно, сопряженное к нему уравнение $\varphi^* = K^*\varphi^* + h$ – в пространстве

$$C_1(X) = C_+(X) \cup C_0(X),$$

где $C_+(X), C_0(X)$ – соответственно множества неотрицательных и ограниченных на X непрерывных функций.

Отметим, что здесь не требуется, чтобы X было компактом. Оператор K^* – это интегральный оператор с транспонированным ядром, а функция φ^* определяется соотношением:

$$\varphi^* = \sum_{n=0}^{\infty} K^{*n}h = \sum_{n=0}^{\infty} (K^n \delta, h),$$

где $\delta(\cdot)$ – обобщенная плотность локализованного в соответствующей точке источника.

Методы Монте-Карло обычно используются для оценки линейных функционалов вида

$$I_h = (\varphi, h) = \int_X \varphi(x)h(x) dx = \sum_{n=0}^{\infty} (K^n f, h), \quad h \in C_1(X).$$

Если реализуется прямое моделирование исходной цепи Маркова, то

$$I_h = \mathbb{E} \left[\sum_{n=0}^N h(x_n) \right].$$

Однако можно моделировать и другую, вспомогательную, цепь Маркова с плотностью перехода $p(x', x)$, взаимно регулярной с $k(x', x)$, и начальной плотностью $\pi(x)$, взаимно регулярной с $f(x)$; кроме того,

предполагается, что $p(x', x) \neq 0$ и $\pi(x) \neq 0$ на носителях функций $k(x', x)$ и $f(x)$ соответственно. При выполнении этих “общих условий несмещенности” отношения $k(x', x)/p(x', x)$ и $f(x)/\pi(x)$ имеют смысл и определяются отношениями измеримых сомножителей рассматриваемых функций. Это позволяет ввести вспомогательные веса по формулам:

$$Q_0(x_0) = \frac{f(x_0)}{\pi(x_0)}, \quad Q_n = Q_{n-1} \frac{k(x_{n-1}, x_n)}{p(x_{n-1}, x_n)}. \quad (1.2)$$

Полагая

$$\xi = \sum_{n=0}^N Q_n h(x_n),$$

имеем $J_h = E\xi$ (см., например, [14]). Величина ξ представляет собой весовую “оценку по столкновениям”. Кроме того, если $\rho(K_p) < 1$, где K_p – оператор с ядром $k^2(x', x)/p(x', x)$ и $f^2/\pi \in N_1(X)$, то $D\xi < +\infty$ [14]. Известно также, что, если $h(x) \geq 0$ и

$$p(x', x) = \frac{k(x', x)\varphi^*(x)}{[K^*\varphi^*](x')}, \quad \pi(x) = \frac{f(x)\varphi^*(x)}{(f, \varphi^*)},$$

то $D\xi = 0$. Если вместо $\varphi^*(x)$ здесь использовать функцию

$$g(x) = C\varphi^*(x)[1 + \epsilon(x)], \quad |\epsilon(x)| \leq \epsilon,$$

то при малом ϵ величина $D\xi$ мала [24]. Соответствующие алгоритмы объединяются под названием “моделирование по ценности” [14, 24]. Функцию $\varphi^*(\cdot)$ в теории весовых методов Монте-Карло принято называть “функцией ценности” в связи с ее вероятностным представлением:

$$\varphi^*(x) = h(x) + E \sum_{n=1}^N Q_n h(x_n) \quad \text{при} \quad x_0 \equiv x. \quad (1.3)$$

Заметим, что класс вычисляемых функционалов можно расширить, включив в рассмотрение такие кусочно-непрерывные функции $h(\cdot)$, для которых определены интегралы $(K^n f, h)$, $n = 0, 1, 2, \dots$

1.2. Модификация фазового пространства и весовой оценки

Как правило, переход $x' \rightarrow x$ осуществляется в результате выбора совокупности значений вспомогательных случайных величин (может быть векторных): $\mathbf{t} = (t_1, \dots, t_m) \in T$, то-есть справедливо представление:

$$k(x', x) = \int_T k_1(x', t_1) k_2((x', t_1), t_2) \dots k_m((x', t_1, \dots, t_{m-1}), t_m) \times \\ \times \delta(x - x(x', \mathbf{t})) d\mathbf{t}$$

При этом, как правило, построение весов непосредственно по формулам (1.2) для решения достаточно сложных задач оказывается практически невозможным. Для преодоления этого затруднения целесообразно перейти к модифицированному фазовому пространству $T \times X$, точками которого являются совокупности (\mathbf{t}, x) . Соответствующее субстохастическое ядро имеет вид:

$$\mathbf{k}((\mathbf{t}', x'), (\mathbf{t}, x)) = \delta(x - x(x', \mathbf{t})) \prod_{i=1}^m k_i((x', t_1, \dots, t_{i-1}), t_i) \quad (1.4)$$

причем $(x', t_1, t_0) \equiv x'$. Введем обозначения: \mathbf{K} – интегральный оператор с ядром (1.4); $\mathbf{f}(\mathbf{t}, x) = f_0(\mathbf{t}) \cdot f(x)$, где $f_0(\mathbf{t})$ – некоторая плотность вероятностей в T ;

$$\varphi_t = \mathbf{K}\varphi_t + \mathbf{f}; \quad \mathbf{I}_h = (\varphi_t, h); \quad \varphi_t^* = \mathbf{K}^*\varphi_t^* + h.$$

Теорема 1.1. *Справедливы следующие равенства:*

$$\varphi(x) = \int_T \varphi_t(\mathbf{t}, x) d\mathbf{t}, \quad \mathbf{I}_h = I_h, \quad \varphi_t^*(\mathbf{t}, x) \equiv \varphi^*(x).$$

Доказательство. Первое равенство получается почленным интегрированием модифицированного интегрального уравнения по \mathbf{t} , второе – частичным интегрированием по \mathbf{t} в интеграле (φ_t, h) , а третье

вытекает из вероятностного представления функции ценности (1.3).

Для построения модифицированной оценки по столкновениям ξ_t определяется вспомогательная переходная плотность $\mathbf{p}(\cdot, \cdot)$ вида (1.4), начальная плотность $\pi_t(\mathbf{t}, x) = f_0(\mathbf{t})\pi(x)$ и соответствующие веса $\{\mathbf{Q}_n\}$, которые получают домножением на весовые множители после каждого элементарного перехода. При выполнении указанных в разделе 1 общих условий несмещенности (для каждого элементарного перехода) имеем:

$$I_h = \mathbf{E}\xi_t, \quad \text{где} \quad \xi_t = \sum_{n=0}^N \mathbf{Q}_n h(x_n),$$

причем $D\xi_t < +\infty$, если $\rho(\mathbf{K}_p) < 1$, где \mathbf{K}_p - интегральный оператор с ядром $\mathbf{k}^2(\cdot, \cdot)/\mathbf{p}(\cdot, \cdot)$.

Введем для $i = 1, \dots, m$ вспомогательные функции ценности

$$\begin{aligned} \varphi_i^*(x', t_1, \dots, t_i) &= \underbrace{\int \dots \int}_{m-i+1} \delta(x - x(x', \mathbf{t})) \times \\ &\times \left[\prod_{j=i+1}^m k_j((x', t_1, \dots, t_{j-1}), t_j) \right] \varphi^*(x) dt_{i+1} \dots dt_m dx, \end{aligned} \quad (1.5)$$

полагая $\prod_{m+1}^m \equiv 1$. Нетрудно заметить, что $\varphi_i^*(x', t_1, \dots, t_{i-1}, t_i)$ представляет собой условное математическое ожидание величины ξ_t при условии, что траектория цепи начинается во вспомогательной точке (x', t_1, \dots, t_i) .

Теорема 1.2. Пусть $h(\cdot) \geq 0$. Если для $i = 2, \dots, m$

$$p_i((x', t_1, \dots, t_{i-1}), t_i) = \frac{k_i((x', t_1, \dots, t_{i-1}), t_i) \varphi^*(x', t_1, \dots, t_{i-1}, t_i)}{\varphi^*(x', t_1, \dots, t_{i-2}, t_{i-1})},$$

$$p_1(x', t_1) = \frac{k_1(x', t_1) \varphi^*(x', t_1)}{\varphi^*(x') - h(x')} \quad \text{и} \quad \pi(x) = \frac{f(x) \varphi^*(x)}{I_h},$$

то $D\xi_t = 0$.

Доказательство. Нормированность условных плотностей $p_i(\cdot, \cdot)$ здесь следует на основе (1.5) из вероятностного смысла функций ценности $\varphi_i^*(\cdot)$. Подставляя указанные плотности в выражение для $\mathbf{p}(\cdot, \cdot)$, убеждаемся, что теорема является частным случаем приведенного в разделе 1 общего утверждения об оценке по столкновениям с нулевой дисперсией.

Отметим, что меняя порядок выбора величин t_1, \dots, t_m , то-есть способ факторизации субстохастического ядра, можно строить различные интегральные уравнения и на их основе весовые оценки заданного функционала I_h . В частности, можно осуществлять сдвиг вдоль цепочки элементарных переходов, то-есть фиксировать фазовое состояние после выбора t_i , $i < m$. Иногда это упрощает выражение вспомогательного веса и параметрический анализ результатов.

Обычным способом мажорирования с использованием модулей функций [14, 24] полученные здесь результаты распространяются на знакопеременный и векторный случаи.

1.3. Векторные оценки для треугольных систем интегральных уравнений

1.3.1. Рассмотрим в L_∞ систему вида

$$\varphi_i = h_i + \sum_{j=1}^i K_{ij}\varphi_j, \quad i = 1, \dots, m, \quad (1.6)$$

где K_{ij} - интегральный оператор с ядром $k_{ij}(x, y)$:

$$[K_{ij}\varphi](x) = \int_X k_{ij}(x, y)\varphi(y)dy.$$

В операторной форме система (1.6) есть $\Phi = H + \mathbf{K}\Phi$. Здесь

$$\|\Phi\|_{L_\infty} = \operatorname{vrai\,sup}_{i,x} |\varphi_i(x)|.$$

Теорема 1.3. *Если K_{ij} – ограниченные операторы, то*

$$\rho(\mathbf{K}) \leq \max_i \rho(K_{ii}) = \rho_0.$$

Если же $k_{ij}(x, y) \geq 0$, то $\rho(\mathbf{K}) = \rho_0$.

Доказательство. Рассмотрим систему

$$\varphi_i = h_i + \lambda \sum_{j=1}^i K_{ij} \varphi_j, \quad i = 1, \dots, m,$$

Эта система однозначно разрешима, если $0 < \lambda < \rho_0^{-1}$. Следовательно, $\rho(\mathbf{K}) < \rho_0$ (см., например [11]). Если $k_{ij}(x, y) \geq 0$, то $\sup \|K_{ii}^n\| < \|\mathbf{K}^n\|$ и $\rho_0 \leq \rho(\mathbf{K})$. Это завершает доказательство.

Заметим, что первое утверждение теоремы 1.3 выполняется для произвольного линейного оператора.

1.3.2. Для построения векторной оценки решения системы интегральных уравнений $\Phi = \mathbf{K}\Phi + H$ определяется обрывающаяся цепь Маркова $x = x_0, x_1, \dots, x_N$ с переходной плотностью $p(x, y)$, отличной от нуля на носителе матричного ядра $K(x, y)$, т. е. на объединении носителей ядер $k_{ij}(x, y)$.

Вводится также случайный матричный вес

$$\tilde{Q}_0 = \{\delta_{ij}\}, \quad \tilde{Q}_n = \tilde{Q}_{n-1}K(x_{n-1}, x_n)/p(x_{n-1}, x_n), \quad n = 1, 2, \dots,$$

где δ_{ij} – символ Кронекера. При дополнительном условии $\rho(\mathbf{K}_1) < 1$ (где \mathbf{K}_1 – оператор, получаемый из \mathbf{K} заменой ядер k_{ij} на их модули) имеем

$$\mathbb{E} \xi_x = \Phi(x), \quad \xi_x = \sum_{n=0}^N \tilde{Q}_n H(x_n).$$

Для ковариационной матрицы $\Psi(x) = \mathbf{E} [\xi_x, \xi'_x]$ матрично-интегральное уравнение

$$\Psi(x) = [H\Psi' + \Psi H' - HH']_x + \int \frac{K(x, y)\Psi(y)K'(x, y)}{p(x, y)} dy, \quad (1.7)$$

или $\Psi = \mu + \mathbf{K}_p\Psi$ было получено в [1] при условии, что сходится ряд Неймана для уравнения $\Psi = \mu_1 + \mathbf{K}_{p,1}\Psi$, где матрично-интегральный оператор $\mathbf{K}_{p,1}$ и функция μ_1 соответствует задаче с модулями функциональных характеристик.

Обозначим через $K_{p,ij}$ интегральный оператор с ядром $k_{ij}^2(x, y)/p(x, y)$.

Теорема 1.4. *Если $K_{p,ii}$ – ограниченные операторы, то для системы (1.6)*

$$\rho(\mathbf{K}_p) \leq \max_i \rho(K_{p,ii}) = \rho_0^{(p)}.$$

Если, дополнительно, $k_{ij} \geq 0$, то $\rho(\mathbf{K}_p) = \rho_0^{(p)}$.

Доказательство. Путем перенумерации элементов матрицы $\Psi(x)$ можно представить (1.7) как треугольную систему с операторами $K_{p,ii}$ на диагонали. Кроме того, неравенство

$$\|K_{p,ij}\|^2 \leq \|K_{p,ii}\| \|K_{p,jj}\|$$

имеет место.

Метод Монте–Карло обычно используется для оценки функционалов вида

$$I = (F, \Phi) = \int F'(x)\Phi(x)dx,$$

где $F'(x) = (f_1(x), \dots, f_m(x))$, причем

$$\|F\|_{L_1} = \sum_j \int |f_j(x)| dx < +\infty.$$

Пусть точка x_0 распределена с плотностью $\pi(x)$ такой, что $\pi(x) \neq 0$, если $F'(x)\Phi(x) \neq 0$. Тогда, очевидно,

$$I = \mathbb{E} \left[\frac{F'(x_0)}{\pi(x_0)} \xi_{x_0} \right] = \mathbb{E} \sum_{n=0}^N \frac{F'(x_0)}{\pi(x_0)} Q_n H(x_n) = \mathbb{E} \sum_{n=0}^N H'(x_n) Q_n' \frac{F(x_0)}{\pi(x_0)}.$$

Случайный векторный вес

$$Q_n^{(l)} = Q_n' F(x_0) / \pi(x_0)$$

вычисляется на основе формулы

$$Q_n^{(l)} = [K'(x_{n-1}, x_n) / p(x_{n-1}, x_n)] Q_{n-1}^{(l)}.$$

Полагая $\zeta = F'(x_0) \xi_{x_0} / \pi(x_0)$, имеем

$$\mathbb{E} \zeta^2 = \mathbb{E} \left[F'(x_0) \xi_{x_0} \xi_{x_0}'(x_0) F(x_0) / \pi^2(x_0) \right].$$

Следовательно, дисперсия ζ определяется матричной функцией $\Psi(x) = \mathbb{E} [\xi_x \xi_x']$, о которой речь шла выше. Вследствие соотношения

$$\mathbb{E} \left[F'(x_0) \Psi(x_0) F(x_0) / \pi^2(x_0) \right] \leq \|\Psi\|_{L_\infty} \int_X \left[\left(\sum_{i=1}^m |f_i(x)| \right)^2 / \pi(x) \right] dx$$

для конечности $\mathbb{E} \zeta^2$, в дополнение к условию теоремы 1.4, необходимо предположить, что

$$\int_X \left[\left(\sum_{i=1}^m |f_i(x)| \right)^2 / \pi(x) \right] dx < +\infty.$$

1.3.3. Если номер компоненты вектор-функции рассмотреть, как вспомогательную координату фазового пространства (см. п. 1.2), то исходная система становится одним интегро-алгебраическим уравнением. Это позволяет использовать “моделирование по ценности” (см. п. 1.1) и упрощает построение оценок параметрических производных. С другой стороны, если используется плотность перехода, не зависящая от вспомогательной координаты, то дисперсия скалярной оценки больше дисперсии векторной оценки, которая может быть получена условным осреднением скалярной оценки для фиксированной траектории x_0, x_1, \dots, x_N .

1.4. Вычисление параметрических производных и собственных чисел

1.4.1. Рассмотрим в $L_\infty(X)$ интегральное уравнение с ядром, зависящим от параметра λ :

$$\varphi(x, \lambda) = \int_X k(x, y, \lambda) \varphi(y, \lambda) dy + h(x, \lambda). \quad (1.8)$$

Перепишем (1.8) в операторной форме:

$$\varphi = K\varphi + h.$$

Хотя интегральный оператор в (1.8) имеет сопряженный вид, он обозначается символом K (для простоты).

В уравнении (1.8) X – n -мерное Евклидово пространство. Рассмотрим задачу вычисления производных

$$\varphi^{(n)}(x, \lambda) = \frac{\partial^n \varphi(x, \lambda)}{\partial \lambda^n}.$$

Введем следующее обозначение: $K^{(n)}$ – интегральный оператор с ядром $k^{(n)}(x, y, \lambda)$; $\rho(K)$ – спектральный радиус оператора K . Предполагается, что функции $k^{(n)}$ и $h^{(n)}$ измеримы по x . Путем формального дифференцирования уравнения (1.8) n раз по λ получаем треугольную систему интегральных уравнений

$$\varphi^{(n)} = \sum_{i=0}^n C_n^i K^{(n-i)} \varphi^{(i)} + h^{(n)}, \quad n = 0, 1, \dots, m, \quad (1.9)$$

или, в операторной форме, $\Phi = \mathbf{K}\Phi + H$.

Далее дается обоснование использования (1.9) для вычисления производных $\varphi^{(n)}$.

Введем обозначение: $F_m(f)$ – вектор-столбец, состоящий из производных функций $f(\lambda)$ по λ , т. е.

$$F_m(f) = (f, f^{(1)}, \dots, f^{(m)})^T,$$

$D_m(f) = d_{ni}$ – нижняя треугольная $(m + 1)$ -мерная матрица с элементами

$$d_{ni} = C_n^{n-i} f^{(n-i)}, \quad i = 0, 1, \dots, n, \quad n = 0, \dots, m.$$

Используя формулу Лейбница для m -кратной производной от произведения двух функций, получаем утверждение

Лемма 1.1. *Следующее соотношение имеет место:*

$$F_m \left(\prod_{i=0}^k f_i \right) = D_m(f_k) \cdots D_m(f_1) F_m(f_0).$$

Теорема 1.5. *Предположим, что неравенства*

$$|k^{(n)}(x, y; \lambda')| \leq k_n(x, y), \quad |h^{(n)}(x, \lambda)| \leq h_0(x), \quad h_0 \in L_\infty,$$

выполняются при $\lambda - \varepsilon \leq \lambda' \leq \lambda + \varepsilon$ для некоторого $\varepsilon > 0$, интегральные операторы K_n с ядрами $k_n(x, y)$ ограничены, $n = 0, \dots, m$, и $\rho(K_0) < 1$. Тогда $\rho(\mathbf{K}) < 1$ и функции $\varphi^{(n)}$, $n = 0, 1, \dots, m$, удовлетворяют системе (1.9).

Доказательство. Вследствие теоремы 1.3 соотношение $\rho(\mathbf{K}) \leq \rho(K_0) = \rho_0 < 1$ выполняется в интервале $(\lambda - \varepsilon, \lambda + \varepsilon)$. По лемме 1.1 ряд Неймана, соответствующий системе уравнений (1.9), совпадает с рядом, получаемым формальным дифференцированием ряда Неймана для уравнения (1.8). В условиях теоремы этот ряд равномерно мажорируется в $(\lambda - \varepsilon, \lambda + \varepsilon)$, причем мажорирующий ряд конечен.

Лемма 1.1 и теорема 1.5 очевидным образом распространяются на случай векторного параметра $\lambda = (\lambda_1, \dots, \lambda_k)$.

Рассмотрим теперь методы Монте–Карло для решения построенных треугольных систем интегральных уравнений и для непосредственного вычисления производных. Теорема 1.4 показывает, что дисперсии векторных алгоритмов конечны, если спектральный радиус

оператора с ядром $k^2(x, y, \lambda)/p(x, y)$ меньше единицы ($n = 1, \dots, m$), т. е. если выполняется стандартное условие конечности скалярных оценок метода Монте-Карло для уравнения (1.8).

Пусть $\xi_x(\lambda)$ – стандартная оценка по столкновениям (см. п. 1.1) для уравнения (1.8), причем выполняются “общие условия несмещенности” (см. п. 1.1).

Теорема 1.6. *В условиях теоремы 1.5 выполняются следующие утверждения:*

- 1) $E \xi_x^{(m)}(\lambda) = E \sum_{n=0}^N [Q_n(\lambda)h(x_n, \lambda)]^m = \varphi^{(m)}(x, \lambda)$;
- 2) *если все функции в (1.8) и их необходимые производные неотрицательны, то можно использовать $\varepsilon = 0$ в условиях теоремы 1.5;*
- 3) *если $\rho(K_p) < 1$, то $D\xi^{(m)} < +\infty$, $m = 0, 1, 2, \dots$.*

Доказательство. Согласно лемме 1.1 ряд, получаемый дифференцированием оценки $\xi_x(\lambda)$, численно совпадает со стандартной векторной оценкой для системы (1.9). Поэтому утверждения 1 и 3 следуют из теорем 1.4 и 1.5. При дополнительном условии из утверждения 2 перестановка дифференцирования и осреднения заведомо допустима, а утверждение 1 имеет место для $\varepsilon = 0$.

Теорема 1.6 легко распространяется на функционалы (см. п. 1.3.2):

$$(f, \varphi_\lambda) = E [(f(x_0)/\pi(x_0))\xi_{x_0}(\lambda)], \quad \varphi_\lambda \equiv \varphi(x, \lambda).$$

В частности, если $\rho(K_p) < 1$ и $f^2/\pi \in L_1$, то

$$D[(f(x_0)/\pi(x_0))\xi_{x_0}^{(m)}(x)] < +\infty.$$

Равенство

$$\mathbf{E} [(f(x_0)/\pi(x_0))\xi_{x_0}(\lambda)] = (f, \mathbf{E} \xi^{(m)}(\lambda)) = (f, \varphi_\lambda^{(m)})$$

является следствием теоремы Фубини, так как $f \in L_1$, $\varphi^{(m)} \in L_\infty$, а равенство

$$(f, \varphi_\lambda)^{(m)} = (f, \varphi_\lambda^{(m)})$$

выполняется вследствие соотношения $\|\varphi_{\lambda'}^{(m)}\| < c < +\infty$ для $\lambda' \in [\lambda - \varepsilon, \lambda + \varepsilon]$. В условиях утверждения 2 из теоремы 1.6 значение $\varepsilon = 0$ допустимо и здесь.

1.4.2. Теперь применим рассматриваемую методику для оценки итераций резольвенты. С этой целью в $L_\infty(X)$ рассмотрим уравнение (1.8) вида

$$\varphi(x, \lambda) = \lambda^{-1} \int_X k(x, y) \varphi(x, \lambda) dy + \lambda^{-1} h(x)$$

при $|\lambda| > \rho(K)$. Имеем:

$$\begin{aligned} \varphi_\lambda &= [\lambda - K]^{-1} h, \\ \varphi_\lambda^{(m)} &= \frac{d^m \varphi_\lambda}{d\lambda^m} = (-1)^m m! [\lambda - K]^{-(m+1)} h. \end{aligned}$$

С другой стороны,

$$\varphi_\lambda^{(m)} = \mathbf{E} \zeta_x^{(m)}, \quad \zeta_x^{(m)} = \sum_{n=0}^N (-1)^m \frac{(n+m)!}{n!} \lambda^{-(n+1+m)} Q_n h(x_n).$$

Несмещенность оценки $\zeta_x^{(m)}$ и соотношение $D\zeta_x^{(m)} < +\infty$ очевидным образом следуют из теоремы 1.6. Окончательно получаем

$$\begin{aligned} [\lambda - K]^{-(m+1)} h &= (-1)^m \varphi_\lambda^{(m)} / m! = \mathbf{E} \xi_x^{(m)}, \\ \xi_x^{(m)} &= \sum_{n=0}^N C_{n+m}^m Q_n h(x_n) \lambda^{-(n+1+m)}. \end{aligned}$$

При достаточно общих условиях (см., например, [8]) имеем

$$\frac{([\lambda - K]^{-(m+1)}h, f)}{([\lambda - K]^{-m}h, f)} \rightarrow \frac{1}{\lambda - \lambda^*},$$

где λ^* – собственное число оператора K , ближайшее к λ . Если $f(x)$ – плотность вероятностей, то

$$([\lambda - K]^{-(m+1)}h, f) = \mathbf{E} \xi_x^{(m)},$$

где x – случайная точка, распределенная с плотностью f .

Заметим, что аналогичный алгоритм для оценки собственных чисел предложен в [22], где $1/\lambda$ использовалось вместо λ , а вопрос о конечности дисперсии не обсуждался (см. также [98]).

Теперь рассмотрим задачу оценки главного собственного числа оператора K_p с ядром $k^2(x, y)/p(x, y)$, который определяет значения $\mathbf{E} \xi_x^2$ (см. например, [61]). Ясно, что рассмотренные соотношения позволяют решить эту задачу после подстановки $Q_n^2 h^2(x_n)$ вместо $Q_n h(x_n)$. Здесь требуется дополнительное условие $\rho(K_{p,2}) < 1$, где $K_{p,2}$ – оператор с ядром $\lambda^{-4} k^4(\cdot, \cdot)/p^3(\cdot, \cdot)$.

Для оценки главного собственного значения матрично-интегрального оператора \mathbf{K} (см. п. 1.3.1) можно использовать соотношение

$$(F', [\lambda - \mathbf{K}]^{-(m-1)}H) = \sum_{n=0}^N C_{n+m}^m \lambda^{-(n+1+m)} R_n,$$

где $R_n = F'(x_0) \tilde{Q}_n H(x_n)/\pi(x_0)$. Интересно, что это же соотношение после подстановки R_n^2 вместо R_n можно использовать в случае оператора \mathbf{K}_p (см. п. 1.3.2) вследствие равенства

$$\mathbf{E} \sum_{n=0}^N C_{n+m}^m \lambda^{-(n+1+m)} R_n^2 = \left(\frac{F'}{\pi}, [\lambda - \mathbf{K}_p]^{-(m-1)}(HH')F \right),$$

поскольку

$$R_n^2 = \frac{F'(x_0)}{\pi(x_0)} \tilde{Q}_n H(x_n) H'(x_n) \tilde{Q}_n' \frac{f(x_0)}{\pi(x_0)}.$$

1.5. Оптимизация моделирования по части переменных

1.5.1. Здесь будут использованы две, вообще говоря, векторные вспомогательные случайные величины t_1, t_2 , т.е. ядро имеет вид

$$\mathbf{k}((\mathbf{t}, x), (\mathbf{t}', x')) = \delta(x' - x'(x, \mathbf{t}'))k_1(x, t'_1)k_2((x, t'_1), t'_2).$$

В дальнейшем вспомогательные переменные будут рассматриваться всегда, поэтому будут использоваться более простые обозначения, принятые в теории весовых оценок (см. [14]): $\xi, \varphi, \varphi^*, J_h, K, K_p$ и т.д. Выполняются соотношения (см. п. 1.1):

$$\begin{aligned} \xi &= \frac{f(x_0)}{\pi(x_0)}\xi_{x_0}, & \xi_x &= h(x) + \sum_{n=1}^N Q_n h(x_n), \\ f &\in N_1(X), & h &\in C_b(X) = C_0(X) \cap C_+(X), \\ E\xi_x &= \varphi^*(x), & E\xi_x^2 &= \int_X \frac{f^2(x)}{\pi(x)} E\xi_x^2 dx. \end{aligned}$$

Поэтому целесообразно рассмотреть задачу равномерной относительно $x \in X$ минимизации величины $E\xi_x^2$. Согласно теореме 1.2, использование “ценностных” плотностей для всех элементарных переходов дает абсолютный минимум: $E\xi_x^2 = (\varphi^*(x))^2 \forall x \in X$. Практически такая глобальная оптимизация моделирования весьма затруднительна, поэтому важно рассмотреть возможность уменьшения величины $E\xi_x^2$ путем оптимального подбора плотности распределения части вспомогательных случайных величин, например, t_1 .

Рассмотрим цепь Маркова с субстохастической плотностью перехода

$$\mathbf{p}((\mathbf{t}, x), (\mathbf{t}', x')) = \delta(x' - x'(x, \mathbf{t}'))p_1(x, t'_1)p_2((x, t'_1), t'_2).$$

Пусть дополнительно

$$\int_{T_1} k_1(x, t'_1) dt'_1 \equiv \int_{T_1} p_1(x, t'_1) dt'_1 \equiv 1,$$

$$\int_{T_2} \frac{k_2^2((x, t'_1), t'_2)}{p_2((x, t'_1), t'_2)} dt'_2 \leq q < 1. \quad (1.10)$$

Функция $E\xi_x^2$ выражается рядом Неймана для уравнения [24]

$$\chi = h(2\varphi^* - h) + K_p \chi.$$

Поскольку выполнено соотношение

$$\int_X \delta(x' - x'(x, t')) E\xi_{x'}^2 dx' = E\xi_{x'(x, t')}^2 = E\xi_x^2,$$

то

$$E\xi_x^2 = h(x)[2\varphi^*(x) - h(x)] +$$

$$+ \int_{T_1} \frac{k_1^2(x, t'_1)}{p_1(x, t'_1)} \left[\int_{T_2} \frac{k_2^2((x, t'_1), t'_2)}{p_2((x, t'_1), t'_2)} E\xi_{x'}^2 dt'_2 \right] dt'_1. \quad (1.11)$$

Рассмотрим следующую задачу :

для фиксированной плотности $p_2((x, t'_1), t'_2)$ определить плотность $p_1(x, t'_1)$ таким образом, чтобы функция $E\xi_x^2 \forall x \in X$ была минимальной при выполнении общих условий несмещенности. Такую плотность $p_1(x, t'_1)$ будем называть равномерно наилучшей.

Согласно принципа выборки по важности [14, 24], интеграл в правой части (1.11) минимален и равен

$$\left\{ \int_{T_1} k_1(x, t'_1) \left[\int_{T_2} \frac{k_2^2((x, t'_1), t'_2)}{p_2((x, t'_1), t'_2)} E\xi_{x'}^2 dt'_2 \right]^{1/2} dt'_1 \right\}^2,$$

при

$$p_1(x, t_1) = \frac{k_1(x, t'_1) \left[\int_{T_2} \frac{k_2^2((x, t'_1), t'_2)}{p_2((x, t'_1), t'_2)} E\xi_{x'}^2 dt'_2 \right]^{1/2}}{\int_{T_1} k_1(x, t'_1) \left[\int_{T_2} \frac{k_2^2((x, t'_1), t'_2)}{p_2((x, t'_1), t'_2)} E\xi_{x'}^2 dt'_2 \right]^{1/2} dt'_1}.$$

Таким образом, выполняется соотношение

$$\begin{aligned}
g(x) &= h(x)[2\varphi^*(x) - h(x)] + \\
&+ \left\{ \int_{T_1} k_1(x, t'_1) \left[\int_{T_2} \frac{k_2^2((x, t'_1), t'_2)}{p_2((x, t'_1), t'_2)} \mathbf{E} \xi_{x'}^2 dt'_2 \right]^{1/2} dt'_1 \right\}^2 \leq \quad (1.12) \\
&\leq g_0(x) = \mathbf{E} \xi_x^2 .
\end{aligned}$$

Заметим, что общие условия несмещенности не нарушаются, так как

$$\mathbf{E} \xi_x^2 \geq (\mathbf{E} \xi_x)^2 = (\varphi^*(x))^2 .$$

В операторном виде соотношение (1.12) запишем в виде : $g_1 = G(g_0) \leq g_0$. Подставив сюда g_1 вместо g_0 , получим :

$$g_2 = G(G(g_0)) = G(g_1) \leq g_0 .$$

Заметим, что такая подстановка имеет смысл оптимизации плотности распределения второго перехода $x' \rightarrow x''$ с вытекающей отсюда повторной оптимизацией первого перехода.

Далее имеем

$$g_n(x) = [G^n(g_0)](x) \downarrow g(x) \quad \forall x ,$$

причем $g(x) \geq (\varphi^*(x))^2$ и

$$\begin{aligned}
g(x) &= h(x)[2\varphi^*(x) - h(x)] + \\
&+ \left\{ \int_{T_1} \frac{k_1^2(x, t'_1)}{p_1(x, t'_1)} \left[\int_{T_2} \frac{k_2^2((x, t'_1), t'_2)}{p_2((x, t'_1), t'_2)} g(x') dt'_2 \right]^{1/2} dt'_1 \right\}^2 . \quad (1.13)
\end{aligned}$$

Лемма 1.2. Если $g \in C_b(X)$ - решение уравнения (1.13), то для цепи Маркова с

$$p_1(x, t_1) = \frac{k_1(x, t'_1) \left[\int_{T_2} \frac{k_2^2((x, t'_1), t'_2)}{p_2((x, t'_1), t'_2)} g(x') dt'_2 \right]^{1/2}}{\int_{T_1} k_1(x, t'_1) \left[\int_{T_2} \frac{k_2^2((x, t'_1), t'_2)}{p_2((x, t'_1), t'_2)} g(x') dt'_2 \right]^{1/2} dt'_1} \quad (1.14)$$

имеем $\mathbf{E} \xi_x^2 = g(x)$.

Доказательство. Обозначим через K_g - интегральный оператор (1.12) при выполнении (1.14), т. е.

$$[K_g f](x) = \int_{T_1} \left\{ \int_{T_1} k_1(x, t'_1) \left[\int_{T_2} \frac{k_2^2((x, t'_1), t'_2)}{p_2((x, t'_1), t'_2)} g(x') dt'_2 \right]^{1/2} dt'_1 \right\} \times \\ \times \int_{T_2} k_1(x, t'_1) \frac{k_2^2((x, t'_1), t'_2) f(x')}{p_2((x, t'_1), t'_2) \left[\int_{T_2} \frac{k_2^2((x, t'_1), t'_2)}{p_2((x, t'_1), t'_2)} g(x') dt'_2 \right]^{1/2}} dt'_2 dt'_1.$$

При этом, очевидно, из (1.13) следует равенство $g = h(2\varphi - h) + K_g g$. Строя итерации этого уравнения, начиная с $g_0 = g$, получаем

$$g = \sum_{n=0}^{\infty} K_g^n [h(2\varphi^* - h)] + \lim_{n \rightarrow \infty} K_g^n g.$$

Рассмотрим функцию $K_g^2 g$. По определению,

$$[K_g^2 g](x) = \int_{T_1} \int_{T_1} \left\{ \int_{T_1} k_1(x, t'_1) \left[\int_{T_2} \frac{k_2^2((x, t'_1), t'_2)}{p_2((x, t'_1), t'_2)} g(x') dt'_2 \right]^{1/2} dt'_1 \right\} \times \\ \times \int_{T_2} k_1(x, t'_1) \frac{k_2^2((x, t'_1), t'_2)}{p_2((x, t'_1), t'_2) \left[\int_{T_2} \frac{k_2^2((x, t'_1), t'_2)}{p_2((x, t'_1), t'_2)} g(x') dt'_2 \right]^{1/2}} \times \\ \times \left\{ \int_{T_1} k_1(x', t''_1) \left[\int_{T_2} \frac{k_2^2((x', t''_1), t''_2)}{p_2((x', t''_1), t''_2)} g(x'') dt''_2 \right]^{1/2} dt''_1 \right\} \times \\ \times \int_{T_2} k_1(x', t''_1) \frac{k_2^2((x', t''_1), t''_2) g(x'')}{p_2((x', t''_1), t''_2) \left[\int_{T_2} \frac{k_2^2((x', t''_1), t''_2)}{p_2((x', t''_1), t''_2)} g(x'') dt''_2 \right]^{1/2}} \times \\ \times dt''_2 dt''_1 dt'_2 dt'_1.$$

Из уравнения (1.13) следует, что

$$\left\{ \int_{T_1} k_1(x', t''_1) \left[\int_{T_2} \frac{k_2^2((x', t''_1), t''_2)}{p_2((x', t''_1), t''_2)} g(x'') dt''_2 \right]^{1/2} dt''_1 \right\} \leq g^{1/2}(x').$$

Следовательно,

$$\int_{T_2} \frac{k_2^2((x, t_1), t_2) \left\{ \int_{T_1} k_1(x', t_1'') \left[\int_{T_2} \frac{k_2^2((x', t_1'), t_2'')}{p_2((x', t_1'), t_2'')} g(x'') dt_2'' \right]^{1/2} dt_1'' \right\}}{p_2((x, t_1), t_2) \left[\int_{T_2} \frac{k_2^2((x, t_1), t_2')}{p_2((x, t_1), t_2')} g(x') dt_2' \right]^{1/2}} dt_2' \leq$$

$$\leq \int_{T_2} \frac{k_2^2((x, t_1), t_2) g^{1/2}(x')}{p_2((x, t_1), t_2) \left[\int_{T_2} \frac{k_2^2((x, t_1), t_2')}{p_2((x, t_1), t_2')} g(x') dt_2' \right]^{1/2}} dt_2' \leq q^{1/2},$$

так как

$$\int_{T_2} \frac{k_2^2((x, t_1), t_2)}{p_2((x, t_1), t_2)} dt_2' = \tilde{q}(x, t_1) \leq q$$

и

$$\int_{T_2} \frac{k_2^2((x, t_1), t_2)}{p_2((x, t_1), t_2)} g^{1/2}(x') dt_2' =$$

$$= \tilde{q}(x, t_1) \int_{T_2} \frac{k_2^2((x, t_1), t_2)}{\tilde{q}(x, t_1) p_2((x, t_1), t_2)} g^{1/2}(x') dt_2' \equiv$$

$$\equiv \tilde{q}(x, t_1) \mathbf{E}' g^{1/2} \leq \tilde{q}(x, t_1) (\mathbf{E}' g)^{1/2} =$$

$$= \tilde{q}^{1/2}(x, t_1) \left[\int_{T_2} \frac{k_2^2((x, t_1), t_2')}{p_2((x, t_1), t_2')} g(x') dt_2' \right]^{1/2} \leq$$

$$\leq q^{1/2} \left[\int_{T_2} \frac{k_2^2((x, t_1), t_2')}{p_2((x, t_1), t_2')} g(x') dt_2' \right]^{1/2}.$$

Кроме того,

$$\int_{T_2} \frac{k_2^2((x, t_1), t_2)}{p_2((x, t_1), t_2)} g(x') dt_2' \leq q \|g\|.$$

Поэтому $K_g^2 g \leq q^{1/2} q \|g\|$. Нетрудно аналогично получить неравенство $K_g^n g \leq q^{(n-1)/2} q \|g\|$. Таким образом, функция g равна ряду Неймана для уравнения (1.11) при выполнении (1.14). Лемма 1.2 доказана

Теорема 1.7. Пусть $h \in C_b(x)$ и выполнены соотношения (1.10). Тогда решение g^* уравнения (1.13) в $C_b(X)$ существует и единственно.

Доказательство. Уравнение (1.13) можно записать в виде

$$g(x) = h(x)[2\varphi^*(x) - h(x)] + (K_g)^2$$

или

$$u = \sqrt{h(x)[2\varphi^*(x) - h(x)] + (Ku^2)^2} = \tilde{G}(u).$$

Здесь $u = g^{1/2}$, а K - интегральный оператор вида

$$\begin{aligned} [Kf](x) &= \int_{T_1} k_1(x, t'_1) \times \\ &\times \int_{T_2} \frac{k_2^2((x, t'_1), t'_2) f(x')}{p_2((x, t'_1), t'_2) \left[\int_{T_2} \frac{k_2^2((x, t'_1), t'_2)}{p_2((x, t'_1), t'_2)} g(x') dt'_2 \right]^{1/2}} dt'_2 dt'_1. \end{aligned}$$

Заметим, что

$$\begin{aligned} Ku^2(x) &= \int_{T_1} k_1(x, t'_1) \left[\int_{T_2} \frac{k_2^2((x, t'_1), t'_2)}{p_2((x, t'_1), t'_2)} u^2(x') dt'_2 \right]^{1/2} dt'_1 = \\ &= \int_{T_1} k_1(x, t'_1) \| \tilde{u} \|_{L_2(X)} dt'_1, \end{aligned}$$

где

$$\tilde{u} \equiv u(x') k_2((x, t'_1), t'_2) / \sqrt{p_2((x, t'_1), t'_2)}.$$

Поэтому, учитывая неотрицательность функции $h(2\varphi^* - h)$, получаем

$$\begin{aligned} &| \tilde{G}(\tilde{u}_1) - \tilde{G}(\tilde{u}_2) | \leq | K\tilde{u}_1^2 - K\tilde{u}_2^2 | = \\ &= \left| \int_{T_1} k_1(x, t'_1) \| \tilde{u}_1 \|_{L_2(X)} dt'_1 - \int_{T_1} k_1(x, t'_1) \| \tilde{u}_2 \|_{L_2(X)} dt'_1 \right| \leq \\ &\leq \left| \int_{T_1} k_1(x, t'_1) \left| \| \tilde{u}_1 \|_{L_2(X)} - \| \tilde{u}_2 \|_{L_2(X)} \right| dt'_1 \right| \leq \\ &\leq \int_{T_1} k_1(x, t'_1) \left[\int_{T_2} \frac{k_2^2((x, t'_1), t'_2)}{p_2((x, t'_1), t'_2)} (u_1(x') - u_2(x'))^2 dt'_2 \right]^{1/2} dt'_1 \leq \\ &\leq q^{1/2} \| u_1 - u_2 \| . \end{aligned}$$

Таким образом, \tilde{G} - оператор сжатия в $C_b(X)$, что обеспечивает существование и единственность решения g^* . При этом $g^* \geq 0$, так как $G(u) \geq 0 \forall u \in C_0(X)$. Теорема 1.7 доказана.

Заметим, что плотность (1.14) дает равномерно наименьшее значение $E\xi_x^2 \in C_b(X)$, так как $G_n(E\xi_x^2) \downarrow g(x)$ для любого $E\xi_x^2 \in C_b(X)$.

1.5.2. В качестве примера рассмотрим задачу об оценке вероятности вылета частиц из полупространства $\infty < z \leq H$. Будем считать, что вне этого полупространства находится абсолютный поглотитель, причем средний свободный пробег $\sigma^{-1} = 1$ во всем пространстве. Рассеяние частицы в точке столкновения описывается симметричной нормированной плотностью $w(\mu, \mu')$, где μ - косинус угла между направлением пробега и осью z . Вероятность выживания при столкновении в точке $z < H$ равна $q < 1$. Здесь $x = (z, \mu)$; $h(x) = \exp(-(H - z)/\mu)$ при $z < H$ и $\mu > 0$, и $h \equiv 0$ иначе. Величина $E\xi_x = \varphi^*(x)$ равна искомой вероятности вылета частицы, стартовавшей в точке x (см. [24], раздел 2.4).

Рассмотрим оптимизацию распределения длины свободного пробега, физическая плотность распределения которой равна e^{-l} . При этом в уравнении (1.13) имеем $\mathbf{t} = (l, \mu)$, $z' = z + \mu l$ и

$$k_1(x, t'_1) = e^{-l}, \quad k_2((x, t'_1), t'_2) = qw(\mu, \mu')I\{z' < H\},$$

где $I\{S\}$ - индикатор множества S . Запишем следующее асимптотическое приближение (при $H \mapsto \infty$) уравнения (1.13) в виде:

$$g(z, \mu) = \left(\int_0^\infty \left(\int_{-1}^1 qw(\mu, \mu')g(z'(z, \mu, l), \mu')d\mu' \right)^{1/2} dl \right)^2.$$

Будем искать решение этого уравнения в виде $g(z, \mu) = a(\mu)e^{2cz}$. Простые выкладки приводят к уравнению

$$a(\mu) = \frac{q}{(1 - c\mu)^2} \int_{-1}^1 w(\mu, \mu') a(\mu') d\mu'. \quad (1.15)$$

Для его решения используем транспортное приближение [68]

$$w(\mu, \mu') = \mu_0 \delta(\mu' - \mu) + (1 - \mu_0)/2,$$

где μ_0 — средний косинус угла рассеяния. В силу однородности (1.15) можно предположить, что $\int_{-1}^1 a(\mu) d\mu = 1$. Подставив в (1.15) транспортное приближение для $w(\mu, \mu')$, получим

$$a(\mu) = \frac{\frac{q}{2}(1 - \mu_0)}{(1 - c\mu)^2 - q\mu_0}$$

Учитывая, что $\int_{-1}^1 a(\mu) d\mu = 1$, приходим к следующему уравнению для критического значения c^* :

$$\ln \frac{1 - (c - (q\mu_0)^{1/2})^2}{1 - (c + (q\mu_0)^{1/2})^2} = c \frac{4}{1 - \mu_0} \left(\frac{\mu_0}{q} \right)^2.$$

В случае изотропного рассеяния из (1.15) имеем $c = (1 - q)^{1/2}$.

1.5.3. Известно, что использование функции $g(z, \mu) = a(\mu)e^{cz}$ в (1.14) приводит к модификации распределения длины пробега, состоящей в замене $\sigma' = \sigma - c\mu$, т.е. к так называемому экспоненциальному преобразованию (см. [14]). При этом

$$\frac{k((x, \mathbf{t}), (x', \mathbf{t}'))}{p((x, \mathbf{t}), (x', \mathbf{t}'))} = \frac{q\sigma e^{-lc\mu}}{(1 - p)(\sigma - c\mu)},$$

где q — физическая вероятность выживания частицы при столкновении, а p — моделируемая вероятность обрыва траектории; в пункте 1.5.2 рассматривалось $p = 1 - q$. Функция $a(\mu)$ здесь роли не играет, так как сокращается в (1.14).

Для оптимизации экспоненциального преобразования можно пытаться использовать характеристическое уравнение переноса, определяющее параметр $-c^* = -1/L$ пространственной экспоненциальной асимптотики плотности потока частиц [68]; величина L называется диффузионной длиной. Соответствующая асимптотика (при $H \mapsto \infty$) функции ценности имеет вид $Se^{xp}(z/L)$. Однако численные эксперименты с экспоненциальным преобразованием показали, что при значениях параметра c , близких к решению характеристического уравнения переноса, как правило, имеет место занижение результата, т. е., по-видимому, соответствующая дисперсия существенно превосходит дисперсию оценок прямого моделирования. Из сказанного можно сделать вывод о неэффективности частичного “ценностного” моделирования, в котором функция ценности используется для модификации распределения только одной из вспомогательных случайных величин, в данном случае, длины свободного пробега.

С другой стороны, ясно, что использование экспоненциального преобразования с параметром c_0 , определяемым уравнением (1.15), дает существенное уменьшение величины $E\xi_x^2$ сравнительно с прямым моделированием, причем асимптотику этого уменьшения по величине H можно оценить непосредственно на основе леммы 1.2. Величина $E\xi_x^2$ при $z = H$, т.е. при нулевом расстоянии от источника до приемника, во всех вариантах моделирования несущественно отличается от единицы. Для оптимальной “частичной” модификации имеем

$$E\xi_x^2 = g(x) = O(e^{-2c_0(H-z)}),$$

а для прямого моделирования

$$E\xi_x^2 = \varphi^*(z, \mu)[1 - \varphi^*(z, \mu)] = O(e^{-\frac{H-z}{L}}).$$

Следовательно, асимптотика уменьшения дисперсии определяется величиной $O(\exp\{-(H-z)(2c_0 - 1/L)\})$. Например, в случае изотропного

рассеяния при $q = 0,7$ имеем $1/L = 0,829$, а $2c_0 = 2\sqrt{0.3} \approx 1.095$, т.е. $2c_0 - 1/L \approx 0.266$.

1.5.4. Поскольку $J_h = \mathbf{E}\left(\frac{f(x_0)}{\pi(x_0)}, \xi_{x_0}\right)$, и

$$\mathbf{E}\xi^2 = \mathbf{E}\xi^2(\pi) = \int \frac{f^2(x)}{\pi(x)} \mathbf{E}\xi_0^2 dx,$$

то минимум величины $D\xi$, определяющий среднеквадратичной погрешность оценок линейного функционального J_h , достигается при

$$\pi(x) = \frac{f(x)(\mathbf{E}\xi_x^2)^{1/2}}{\int_X f(x)(\mathbf{E}\xi_x^2)^{1/2} dx}.$$

Практически интересен вопрос об эффективности более простой, с точки зрения возможности приближенной оценки, начальной плотности

$$\pi(x) = f(x)\varphi^*(x)/J_h.$$

Следующий пример показывает, что такая плотность может быть малоэффективна.

Предположим, что величина ξ_x является “бернуллиевой”, т.е.

$$P(\xi_x = 1) = p(x), \quad P(\xi_x = 0) = 1 - p(x), \quad 0 < p(x) < 1.$$

В этом случае

$$\mathbf{E}\xi_x^2 = p(x) = \varphi^*(x), \quad \mathbf{E}\xi^2(\pi^*) = \mathbf{E}\xi^2(f) = J_h.$$

Таким образом, “ценностное” моделирование начальной точки траектории для “бернуллиевого” варианта ξ_x , например, когда просто подсчитывается число поглощенных частиц, не уменьшает дисперсию сравнительно с прямым моделированием.

Глава 2

2.1. Вводная информация

4.1.1. Рассмотрим здесь многоскоростной процесс переноса излучения в ограниченной среде. Вероятностной моделью такого процесса (см. например, [20]) является однородная обрывающаяся цепь Маркова x_0, \dots, x_N в фазовом шестимерном пространстве $X = R \times V$ координат и скоростей, т. е. $x_n = (\mathbf{r}_n, \mathbf{v}_n)$, где \mathbf{r}_n – точка n -го “столкновения” частицы (кванта излучения), а \mathbf{v}_n – ее скорость непосредственно перед столкновением, т. е. взаимодействием с элементом среды, которое приводит к изменению скорости. Задается коэффициент ослабления (иначе – сечение взаимодействия) $\sigma(x) = \sigma(\mathbf{r}, v)$, где $v = |\mathbf{v}|$, причем

$$\sigma(x) = \sigma_c(x) + \sum_i \sigma_s^{(i)},$$

где $\sigma_c(x)$ – коэффициент поглощения, а $\sigma_s^{(i)}(x)$ – коэффициент рассеяния с заданной индикатрисой $w_i(\mathbf{v}' \rightarrow \mathbf{v}; \mathbf{r})$. Переход $x' \rightarrow x$ осуществляется следующим образом [14, 20]:

1) реализуется поглощение с вероятностью $\sigma_c(x)/\sigma(x)$ или номер ν типа рассеяния, причем $P(\nu = i) = \sigma_s^{(i)}(x)/\sigma(x)$;

2) выбирается новая скорость \mathbf{v} соответственно индикатрисе w_i ;

3) определяется длина χ свободного пробега в направлении $\omega = \mathbf{v}/v$ соответственно субстохастической плотности

$$p_\chi(l; \mathbf{r}', \mathbf{v}) = \sigma(\mathbf{r}' + \omega l, v) \exp(-\tau_{op}(l; \mathbf{r}', \mathbf{v})), \quad l \leq l^*(\mathbf{r}', \omega),$$

где

$$\tau_{op}(l; \mathbf{r}, \mathbf{v}) = \int_0^l \sigma(\mathbf{r}' + s\omega, v) ds$$

– оптическая длина отрезка $[\mathbf{r}', \mathbf{r}' + l\boldsymbol{\omega}]$, $l^*(\mathbf{r}', \boldsymbol{\omega})$ – расстояние от точки \mathbf{r}' вдоль направления $\boldsymbol{\omega}$ до границы среды, которую можно считать выпуклой; здесь возможен обрыв траектории вследствие вылета частицы из среды;

4) определяется новая точка столкновения по формуле $\mathbf{r} = \mathbf{r}' + \chi\boldsymbol{\omega}$.

Заметим, что обобщенная субстохастическая плотность вероятностей величины ν равна

$$p_\nu(z; x) = \sum_i \delta(z - i) \sigma_s^{(i)}(x) / \sigma(x).$$

В данном случае $\mathbf{t} = (i, l)$ и

$$\mathbf{k}((\mathbf{t}', x'), (\mathbf{t}, x)) = p_\nu(i, x') w_i(\mathbf{v}' \rightarrow \mathbf{v}, \mathbf{r}') p_\chi(l; \mathbf{r}', \mathbf{v}) \times \delta(\mathbf{r} - (\mathbf{r}' + l\boldsymbol{\omega})). \quad (2.1)$$

Это новый вид ядра интегрального уравнения переноса, соответствующий обычному, указанному выше, способу построения перехода от столкновения к столкновению, Соотношение $q(x') \leq 1 - \delta$ здесь выполняется и при $\sigma_c \equiv 0$ вследствие ограниченности среды. Если необходимо учесть зависимость от времени τ , то ядро (4.1) домножается на $\delta(\tau - \tau' - l/v)$.

Если заменить интегрирование по значениям ν соответствующим суммированием, то в выражении (4.1) $p_\nu(i, x)$ заменяется на $\sigma_s^{(i)}(x) / \sigma(x)$. Заметим, что обычно используется ядро интегрального уравнения в виде [14, 20]:

$$k_0(x', x) = \frac{\sigma_s(\mathbf{r}', v)}{\sigma(\mathbf{r}', v)} \frac{w_s(\mathbf{v}' \rightarrow \mathbf{v}; \mathbf{r}') p_\chi(l; \mathbf{r}', \mathbf{v})}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2} \delta\left(\boldsymbol{\omega} - \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}\right),$$

где

$$\sigma_s(\cdot) = \sum_i \sigma_s^{(i)}(\cdot) \quad \text{и} \quad w_s(\cdot) = \sum_i \sigma_s^{(i)}(\cdot) w_i(\cdot) / \sigma_s(\cdot).$$

Введем обозначение: $k_1(x', x) = \int_T \mathbf{k}((\mathbf{t}', x'), \mathbf{t}, x) dt$.

Теорема 2.1. *Определяемая соотношением (4.1) обобщенная функция $k_1(x', x)$ совпадает с $k_0(x', x)$.*

Доказательство. Утверждение теоремы следует из того, что, как нетрудно показать, справедливо равенство

$$\int_X k_1(x', x)h(x)dx = \int_X k_0(x', x)h(x) dx \quad \forall \quad x' \in X, \quad h \in C_1(X).$$

Для построения весовой оценки вводится вспомогательная переходная плотность типа (4.1) таким образом, что выполняются указанные в п. 1.1 условия несмещенности и весовые множители имеют смысл для каждого элементарного перехода. Особенно важно, что в число координат включается номер типа рассеяния, т.к. во многих задачах теории переноса индикатрисы для разных типов рассеяния содержат сингулярности разных типов. Именно с помощью такого включения в [66] были построены весовые алгоритмы статистического моделирования эволюции ансамблей взаимодействующих частиц для приближенного решения нелинейного уравнения Больцмана. Точнее говоря, в [66] было предложено включить в число координат фазового пространства ансамбля частиц номер пары частиц, взаимодействующих в очередной, случайно выбранный момент времени. Отметим, что для построения таких алгоритмов в пространственно-неоднородном случае целесообразно использовать субстохастическое ядро вида (4.1), рассматривая в качестве X фазовое пространство координат и скоростей всех взаимодействующих частиц.

Полезность возможности сдвига фиксирования фазовой точки вдоль цепочки элементарных переходов показывает следующий пример. Пусть вспомогательная, т.е. моделируемая цепь Маркова получается из исходной занулением коэффициента σ_c , т.е. $\sigma(\cdot)$ заменяется на $\sigma_s(\cdot)$. Нетрудно показать, что при этом (см., например, [14])

$$\mathbf{Q}_n = \exp(-\tau_c^{(n)})\sigma(\mathbf{r}_n, v_n)/\sigma_s(\mathbf{r}_n, v_n), \quad (2.2)$$

где $\tau_c^{(n)}$ – оптическая, относительно $\sigma_c(\cdot)$, длина пробега частицы от \mathbf{r}_0 до \mathbf{r}_n :

$$\tau_c^{(n)} = \sum_{k=1}^n \int_0^{\chi_k} \sigma_c(\mathbf{r}_{n-1} + s\omega_n, v) ds.$$

Если же фиксировать фазовую точку после выбора номера типа рассеяния, то, очевидно, $\mathbf{Q}_n = \exp(-\tau_c^{(n)})$. Такой вес позволяет легко вычислять производные $\partial^m \xi_t / \partial \sigma_c^m$ при $\sigma_c(\cdot) \equiv \sigma_c$, т. е. когда $\tau_c^{(n)} = \sigma_c L_n$, где L_n – длина пробега от \mathbf{r}_0 до \mathbf{r}_n . Если $\rho(\mathbf{K}_p) < 1$, то случайные величины $\partial^m \xi_t / \partial \sigma_c^m$ являются несмещенными оценками величин $\partial^m J_h / \partial \sigma_c^m$ с конечными дисперсиями (см., например, [26]).

Рассматриваемый сдвиг может быть полезным также для повышения эффективности оценки некоторых функционалов от интенсивности излучения (потока частиц) $\Phi(\mathbf{r}, \mathbf{v})$, которая связана с плотностью столкновений соотношением [20]:

$$\varphi(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = \sigma(\mathbf{r}, v) \Phi(\mathbf{r}, \mathbf{v})$$

В частности, среднее число частиц, пересекающих некоторую поверхность S , равно следующему поверхностному интегралу

$$\int_S ds \int_V \Phi(\mathbf{r}(s), \mathbf{v}) |(\omega, \mathbf{n}_s) d\mathbf{v}, \quad (2.3)$$

где \mathbf{n}_s – орт нормали к поверхности S в точке $\mathbf{r}(s)$. Согласно “метода условных математических ожиданий” [14, 20] несмещенную оценку интеграла (4.3) можно получить, суммируя вычисляемую после каждого “физического” рассеяния величину

$$h_S(\mathbf{r}', \mathbf{v}) = \exp(-\tau_{op}(l'_S, \mathbf{r}', \mathbf{v})) \Delta_S(\mathbf{r}', \omega),$$

которая равна вероятности того, что рассеянная частица пересекает поверхность S . Здесь $\Delta_S(\mathbf{r}', \omega)$ – индикатор пересечения поверхности

S лучем $\mathbf{r}(l) = \mathbf{r}' + l\omega$, а l'_S – расстояние вдоль этого луча до точки пересечения. Ясно, что построение и исследование соответствующей вековой оценки упрощается, если фазовое состояние фиксировать сразу после выбора значения \mathbf{v} , т.е. использовать схему моделирования “по рассеяниям”. Отметим, что связь между функциями ценности рассеяний и столкновений дает соотношение (1.5).

4.1.2. Рассматривается сопряженная система интегральных уравнений переноса с учетом поляризации [20]:

$$\varphi_i(x) = \int \sum_{j=1}^4 k_{ji}(x, x') \varphi_j(x') dx' + h_i(x), \quad i = 1, \dots, 4.$$

Используются обозначения: $H(x)$ – вектор-столбец функций $h_1(x), \dots, h_4(x)$; $K(x, x')$ – матрица ядер системы. Здесь $x = (\mathbf{r}, \omega)$, где \mathbf{r} – точка физического пространства R , а $\omega \in \Omega$ – единичный вектор направления скорости кванта в точке столкновения. Функция

$$\Phi(x) = (\varphi_1(x), \varphi_2(x), \varphi_3(x), \varphi_4(x))^T$$

представляет собой векторную ценность столкновений. Сравнительно с [20] система является сопряженной, поэтому

$$\mathbf{K}(x, y) = qp_\chi(l; \mathbf{r}, \omega') P^T(\mu) \delta(\omega' - \omega'(\omega, \mu, \varphi)) \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r} - \omega'l),$$

где $y = (\mathbf{t}', x') = (\mu, \varphi, l, x')$,

$$P^T(\mu, \varphi) = L(i_1) R^T(\mu) L(-\pi + i_2) / 2\pi, \quad \mu = (\omega, \omega'),$$

$$R(\mu) = \begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} & 0 & 0 \\ r_{21} & r_{22} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & r_{33} & r_{34} \\ 0 & 0 & -r_{43} & r_{44} \end{pmatrix}, \quad L(i) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos 2i & \sin 2i & 0 \\ 0 & -\sin 2i & \cos 2i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

где [20]

$$i_k = i_k(\omega, \mu, \varphi), \quad k = 1, 2, \quad \varphi \in U(0, 2\pi)$$

$$r_{ij} = r_{ij}(\mu), \quad r_{11} \geq 0, \quad \int_{-1}^{+1} r_{11}(\mu) d\mu = 1.$$

Предполагается, что среда изотропна и P не зависит от \mathbf{r} .

Для оценки решения методом Монте–Карло строится векторная случайная величина ξ_x , такая, что $E \xi_x = \Phi(x)$ [20]. Если почленное осреднение ряда для $\xi_x \xi_x^T$ допустимо, то ковариационная матрица $E(\xi_x \xi_x^T) = \psi(x)$ удовлетворяет матрично-интегральному уравнению [61]

$$\psi(x) = A(x) + \int \frac{\mathbf{K}(x, y) \psi(y) \mathbf{K}^T(x, y)}{p(x, y)} dy,$$

где $A = H\Phi^T + \Phi H^T - HH^T$, а $p(x, y)$ – переходная плотность моделируемой цепи Маркова:

$$p(x, y) = q_1 p_\chi^{(1)}(l; \mathbf{r}, \omega') p_2(\mu) \delta(\omega' - \omega'(\omega, \mu, \varphi)) \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r} - \omega' l) / 2\pi.$$

Уравнение для ψ рассматривается в пространстве $E(R \times \Omega)$ матричнозначных функций, непрерывных на $R \times \Omega$, с нормой $\|\psi\| = \sup_{i,j,x} |\psi_{ij}(x)|$. Обозначим матрично-интегральный оператор из этого уравнения через \mathbf{K}_p . Если спектральный радиус $\rho(\mathbf{K}_p) < 1$, то указанное выше осреднение матрицы $\xi_x \xi_x^T$ при $H^T \equiv (1, 0, 0, 0)$ допустимо, так как в силу свойств функции Стокса [20] здесь

$$\xi_{x,1} \geq 0, \quad E \xi_{x,1}^2 < +\infty, \quad |\xi_{x,i}| \leq c \xi_{x,1}.$$

Последнее неравенство сохраняется, если в нем слева рассматривать величины, соответствующие произвольной ограниченной H .

Нетрудно показать, что при выполнении условия

$$r_{ij}(\mu) [p_2(\mu)]^{-1/2} \in C[-1, +1], \quad i, j = 1, 2, 3, 4,$$

оператор S_p , получаемый из K_p подстановкой $x \rightarrow \omega$, $y \rightarrow \omega'$, $p \rightarrow p_2/2\pi$, $K \rightarrow P^T$, вполне непрерывен (S_p соответствует “чистому” рассеянию).

Для вывода неравенства

$$\rho(\mathbf{K}_p) \leq q_0 \rho(S_p), \quad q_0 = \sup_{\mathbf{r}, \omega} \int_0^\infty \frac{q^2 p_\chi^2(l; \mathbf{r}, \omega)}{q_1 p_\chi^{(1)}(l; \mathbf{r}, \omega)} dl,$$

в интеграле, выражающем первую компоненту n -й итерации оператора \mathbf{K}_p , последовательно оценим интегралы по длинам первого, второго и т. д. переходов с помощью величины q_0 . Пользуясь свойствами вектора Стокса, далее получаем оценку

$$\|\mathbf{K}_p^n\|^{1/n} \leq c^{-1/n} q_0 \|S_p^n\|^{1/n}.$$

Таким образом, если $q_0 < 1/\rho(S_p)$, то обычно используемые оценки вида $F^T \xi_x$ имеют конечную дисперсию.

Далее будем искать собственную матрицу $\psi^{(0)}(\omega)$ оператора S_p в виде диагональной матрицы с неотрицательными элементами $(1, a_1, a_1, a_2)$ на диагонали. Прямые выкладки показывают, что матрица $S_p \psi^{(0)}$ диагональна; при этом зависимость от i_2 исчезает, а $i_1 \in U(0, 2\pi)$. Приравнивая элементы матрицы $S_p \psi^{(0)}$ соответствующим элементам матрицы $\lambda_0 \psi^{(0)}$, получаем систему уравнений

$$\begin{aligned} c_{11} + c_{21}a_1 &= \lambda_0, \\ c_{12} + (c_{22} + c_{33})a_1 + c_{43}a_2 &= 2\lambda_0 a_1, \\ c_{34}a_1 + c_{44}a_2 &= \lambda_0 a_2, \end{aligned}$$

где $c_{ij} = \int [r_{ij}^2(\mu)/p_2(\mu)] d\mu$.

Утверждение. Если существует решение последней системы с положительными компонентами λ_0, a_1 и a_2 , то $\rho(S_p) = \lambda_0$.

Доказательство. Вполне непрерывный оператор S_p оставляет инвариантным воспроизводящий конус $T_p \subset E(\Omega)$

неотрицательно-определенных матриц-функций. Поскольку $\psi^{(0)}$ – внутренний элемент конуса, то $\lambda_0 = \rho(S_p)$ [8]

Для $\zeta = F^T \xi_x$ имеем $\mathbf{E}\zeta = (F, \Phi)$ и $\mathbf{E}\zeta^2 = \mathbf{E}[F^T \psi(x) F / \pi^2(x)]$.

Для релеевского рассеяния было получено [24]: $\rho(S_p) = 1 + (3\pi - 8)/8 \approx 1.178$.

Если $q_0\rho(S_p) \geq 1$, то целесообразно после рассеяния некоторого заданного порядка переходить к моделированию процесса переноса без поляризации.

2.2. Весовая “оценка по пробегу”

Хорошо известно [14, 20], что выполняется равенство

$$\int_{D_i} \int_V \Phi(\mathbf{r}, \mathbf{v}) d\mathbf{r} d\mathbf{v} = I_{D_i} = \mathbf{E}(L_i), \quad (2.4)$$

где L_i – длина той части траектории, которая лежит в области D_i . В отличие от изложенного, например, в [26], весовая модификация основанной на (4.4) “оценки по пробегу” при использовании дополнительных фазовых координат является вариантом стандартной оценки по столкновениям:

$$\xi_t^{(i)} = \sum_{n=0}^N \mathbf{Q}_n \chi_n^{(i)}, \quad (2.5)$$

где $\chi_n^{(i)}$ – длина той части отрезка $[\mathbf{r}_{n-1}, \mathbf{r}_n]$, которая лежит в D_i . Отметим, что значение χ_n вполне определяется точкой (\mathbf{t}_n, x_n) . Заметим также, что с целью обоснования соотношения (4.4) нетрудно проверить, что величина $\mathbf{E}(\chi_n | x_{n-1})$ равна соответствующему значению интеграла из (4.4).

При выполнении указанных в разделе 1.2 общих условий несмещенности выполняется равенство

$$\mathbf{E}\xi_t^{(i)} = I_{D_i}.$$

Если область D_i ограничена, то $\mathbf{D}\xi_t^{(i)} < +\infty$ при $\rho(\mathbf{K}_p) < 1$, т.е., в частности, при использовании прямого моделирования, для которого $\mathbf{K}_p \equiv \mathbf{K}$.

Покажем, что последнее утверждение выполняется и для неограниченной области D_i если, соответственно сказанному во введении, вероятность выживания частицы при столкновении $q(\cdot) \leq 1 - \delta$ и, следовательно, для источника частиц, сосредоточенного в точке (\mathbf{r}, \mathbf{v}) , имеем

$$I_{D_i} \equiv I_{D_i}(\mathbf{r}, \mathbf{v}) < +\infty, \quad \forall \quad \mathbf{r}, \mathbf{v} \in R \times V.$$

Введем обозначение:

$$\varphi_i^*(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = I_{D_i}(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = I_{D_i}(x).$$

Перейдем далее к схеме моделирования “по рассеяниям”, в которой вспомогательные случайные величины выбираются в следующем порядке: χ, ν, \mathbf{v} , то-есть $(\mathbf{t}, x) = (l, i, x)$, причем x_0 выбирается из источника частиц. Кроме того, будем полагать, что свободная часть пространства, вне некоторой выпуклой оболочки среды, заполнена фиктивной средой с $\sigma(\cdot) \equiv \sigma_c(\cdot)$. Ясно, что в результате весовая “оценка по пробегу” принимает вид

$$\xi_t^{(i)} = \sum_{n=1}^N \mathbf{Q}_n \mathbf{h}_i(\mathbf{t}_n, x_n),$$

где $\mathbf{h}_i(\mathbf{t}_n, x_n) \equiv \chi_n^{(i)}$, причем $\chi_0^{(i)} \equiv 0$. По определению

$$\varphi_i^* = \mathbf{E} \xi_t^{(i)}(x) < C < +\infty \quad \forall \quad x \in R \times V,$$

где $\xi_t^{(i)}(x) \equiv \xi_t^{(i)}$ при условии, что источник частиц сосредоточен в точке $x = (\mathbf{r}, \mathbf{v})$.

Теорема 2.2. *Если выполняются общие условия несмещенности, $\rho(\mathbf{K}_p) < 1$, а также*

$$\mathbf{K}^* \mathbf{h}_i^2 \in C_1, \quad \mathbf{f}^2 / \pi \in N_1,$$

то $D \xi_t^{(i)} < +\infty$.

Доказательство. Возведя сумму, выражающую величину $\xi_t^{(i)}(x)$, в квадрат и проведя стандартное частичное осреднение суммы произведений неодинаковых слагаемых (см. [14], стр. 153), получаем равенство

$$\mathbb{E}[\xi_t^{(i)}(x)]^2 = \mathbb{E} \sum_{n=1}^N \mathbf{Q}_n^2 [\mathbf{h}_i^2(\mathbf{t}_n, x_n) + 2\mathbf{h}_i(\mathbf{t}_n, x_n)\varphi_i^*(x_n)].$$

Вес \mathbf{Q}_n^2 соответствует оператору \mathbf{K}_p [14, 20]. Следовательно,

$$H(x) = \mathbb{E}[\xi_t^{(i)}(x)]^2 < C_0 \sum_{n=1}^{\infty} [\mathbf{K}_p^{*n} \mathbf{h}_i^2](x) < C < +\infty \quad \forall x \in R \times V.$$

Окончательно имеем

$$\mathbb{E}[\xi_t^{(i)}]^2 = (H, \mathbf{f}^2/\pi) < +\infty.$$

Соотношение $\mathbf{K}^* \mathbf{h}_i^2 \in C_1$ имеет место, например, для прямого моделирования вследствие экспоненциальности распределения длины свободного пробега. Отметим, что утверждение типа теоремы и было получено в [26] лишь для ограниченной области D_i .

Полученные в этом разделе результаты автоматически обобщаются на случай, когда вместо интеграла из (4.4) необходимо оценивать интеграл

$$\int g(x)\Phi(x)dx,$$

где $g(x)$ – ограниченная, кусочно-постоянная неотрицательная функция. При этом вместо $\chi_n^{(i)}$ в (4.5) рассматривается [26] величина

$$\int_0^{\chi_n} g(\mathbf{r}_{n-1} + l\omega_{n-1}, \mathbf{v}_{n-1})dl.$$

Отметим, что при

$$h(x) = \Delta_{D_i}(\mathbf{r})/v$$

модифицированное соответствующим образом выражение (4.5) определяет весовую “оценку по времени”, среднее значение которой равно интегралу от концентрации траекторий процесса переноса частиц по области D_i . Интересно отметить, что оценки такого типа построены также для диффузионных и, вообще говоря, непрерывных процессов [28].

В заключение заметим, что в работе [67] был рассмотрен более сложный весовой вариант “оценки по пробегу” без исследования условия конечности дисперсии.

2.3. Оценка временных зависимостей в процессе переноса излучения

Построены новые весовые параметрические алгоритмы метода Монте-Карло для решения нестационарных задач теории переноса излучения на основе использования функций Грина и сопряженных решений. Эти алгоритмы позволяют вычислять производные от функционалов и на этой основе оценивать константу временной экспоненциальной асимптотики процесса переноса. Рассматриваются приложения в теории критичности и для расчетов помехи обратного рассеяния.

4.3.1. Рассматривается нестационарный процесс переноса частиц — “квантов” излучения, причем в качестве математической модели процесса используется однородная обрывающаяся с вероятностью единица цепь Маркова, состояниями которой являются фазовые точки последовательных “столкновений частицы с элементами вещества”, т.е. точки, в которых происходят мгновенные изменения скорости частицы. Эта цепь Маркова x_0, x_1, \dots, x_N рассматривается в фазовом пространстве $X = R \times V \times T$ координат, скоростей и времени, т.е. $x_n = (\mathbf{r}_n, \mathbf{v}_n, t_n)$, где \mathbf{r}_n — точка n -го столкновения, \mathbf{v}_n — скорость, а $t_n = t_{n-1} + |\mathbf{r}_{n-1} - \mathbf{r}_n|/v_{n-1}$ — время “жизни” сталкивающейся ча-

стицы. Цепь Маркова определяется плотностью $f(x)$ распределения начального столкновения x_0 и плотностью $k(x', x)$ перехода из состояния x' в x , причем предполагается, что

$$\int_X k(x', x) dx = q(x') \leq 1 - \delta, \quad \delta > 0, \quad (2.6)$$

т.е. цепь рано или поздно обрывается с вероятностью единица и среднее число переходов конечно. Условие (4.6) выполняется, например, для ограниченной системы [14]. Ядро $k(x', x)$ получается достаточно просто (см., п. 4.1) из следующей характеристики процесса переноса. Задается коэффициент ослабления (иначе — сечение взаимодействия) $\sigma(x) = \sigma(\mathbf{r}, v)$, причем

$$\sigma(x) = \sigma_s(x) + \sigma_f(x) + \sigma_c(x),$$

где $\sigma_s(x)$ и $\sigma_f(x)$ — коэффициенты рассеяния и деления с заданными интегрируемыми индикатрисами $w_s(\mathbf{v}' \rightarrow \mathbf{v}; \mathbf{r})$ и $w_f(\mathbf{v}' \rightarrow \mathbf{v}; \mathbf{r})$, а $\sigma_c(x)$ — коэффициент поглощения. Эти функциональные параметры ограничены и кусочно-непрерывны по (\mathbf{r}, \mathbf{v}) для заданного конечного разбиения пространства $(R \times V)$, а также предполагается, что

$$\int_V w_s(\mathbf{v}' \rightarrow \mathbf{v}; r) dv \equiv 1, \quad \int_V w_f(\mathbf{v}' \rightarrow \mathbf{v}; r) dv \equiv \nu(v', r) \geq 1,$$

где $\nu(v', \mathbf{r})$ — среднее число вторичных частиц на один акт деления в точке $(\mathbf{v}', \mathbf{r})$. Отношения

$$\sigma_s(x)/\sigma(x), \quad \sigma_f(x)/\sigma(x) \quad \text{и} \quad \sigma_c(x)/\sigma(x)$$

равны вероятностям рассеяния, деления и поглощения непосредственно после столкновения в фазовой точке x . Нетрудно видеть, что плотность столкновений

$$\varphi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \varphi_n(x),$$

где $\varphi_n(x)$ — плотность распределения столкновений номера n , представляет собой ряд Неймана для интегрального уравнения 2-го рода $\varphi = K\varphi + f$. Здесь K — интегральный оператор с ядром $k(\cdot, \cdot)$. Как указано, например, в [14], оператор K можно рассматривать действующим из $L_1(X)$ в $L_1(X)$, тем более, что в рассматриваемой задаче все функции неотрицательны. При выполнении условия (4.6) имеем $\|K\|_{L_1} < 1$, и, следовательно, спектральный радиус рассматриваемого оператора $\rho(K) < 1$.

Используемая обычно в теории переноса интенсивность излучения $\Phi(x)$ связана с плотностью столкновений соотношением $\varphi(x) = \sigma(x)\Phi(x)$. Методы Монте-Карло обычно используются для оценки линейных функционалов вида

$$J_h = (\varphi, h) = (\sigma\Phi, h), \quad h \in L_\infty.$$

Для построения весовых алгоритмов метода Монте-Карло используется цепь Маркова с начальной плотностью $\pi(x)$ и плотностью перехода $p(x', x)$, как правило, цепь столкновений для других значений параметров $\sigma, \sigma_s, \sigma_f, \sigma_c$. При этом вводятся вспомогательные веса по формулам

$$Q_0(x_0) = \frac{f(x_0)}{\pi(x_0)}, \quad Q_n = Q_{n-1} \frac{k(x_{n-1}, x_n)}{p(x_{n-1}, x_n)}.$$

Если

$$\text{supp } \pi(\cdot) \supset \text{supp } f(\cdot) \quad \text{и} \quad \text{supp } p(\cdot, \cdot) \supset \text{supp } k(\cdot, \cdot),$$

то (см., например, [14, 20])

$$J_h = \mathbf{E}\xi, \quad \xi = \sum_{n=0}^N Q_n h(x_n).$$

Если, кроме того, $\rho(K_p) < 1$, где K_p — оператор с ядром $k^2(x', x)/p(x', x)$, то $\mathbf{D}\xi < +\infty$. Случайная величина ξ называется “оценкой по столкновениям” для функционала J_h .

Отметим, что новая скорость \mathbf{v} согласно полной индикатрисе

$$\frac{\sigma_s(x')w_s(\mathbf{v}' \rightarrow \mathbf{v}; \mathbf{r}') + \sigma_f(x')w_f(\mathbf{v}' \rightarrow \mathbf{v}; \mathbf{r}')}{\sigma(x')}$$

обычно моделируется методом рандомизации, то есть с вероятностью $\sigma_s(x')/\sigma(x')$ – согласно $w_s(\mathbf{v}' \rightarrow \mathbf{v}; \mathbf{r}')$, а с вероятностью $\sigma_f(x')/\sigma(x')$ – согласно $w_f(\mathbf{v}' \rightarrow \mathbf{v}; \mathbf{r}')$. Если при этом необходимо пересчитывать веса для каждого из указанных вариантов отдельно, то целесообразно ввести в число координат фазового пространства номер типа столкновения k , выбирая его в последнюю очередь. В частности, для такой модели веса, компенсирующие искусственное уменьшение величины σ_c , оказываются точно экспоненциальными (см. п. 4.1).

Наряду с исходным уравнением рассматривается в $L_\infty(X)$ сопряженное уравнение $\varphi^* = K^*\varphi^* + h$, решение которого можно оценить методом Монте-Карло на основе соотношения

$$\varphi^*(x_0) = \mathbf{E}[h(x_0) + \sum_{n=1}^N Q_n h(x_n)] = \mathbf{E}\zeta_{x_0},$$

причем $\mathbf{D}\zeta_{x_0} < +\infty$ для почти всех x_0 при $\rho(K_p) < 1$.

Заметим также, что используемое основное интегральное уравнение можно рассматривать в пространстве $N_1(X)$ обобщенных плотностей ограниченной вариации, и, соответственно, сопряженное к нему – в $C_1(X)$ (см. п. 1.1).

4.3.2. Далее построена весовая оценка, связанная с сопряженным решением. Ясно, что функцию

$$J(t) = \int_R \int_V \varphi(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) h(\mathbf{r}, \mathbf{v}) d\mathbf{r} d\mathbf{v}, \quad h \in L_\infty(R \times V),$$

можно представить в виде:

$$J(t) = \int_R \int_V \int_0^t f(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, \tau) F(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, t - \tau) d\mathbf{r}_0 d\mathbf{v}_0 d\tau. \quad (2.7)$$

Здесь

$$F(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, t) = \int_R \int_V \varphi_0(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t; \mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0) h(\mathbf{r}, \mathbf{v}) d\mathbf{r} d\mathbf{v},$$

где $\varphi_0(x; \mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0)$ — плотность столкновений (по аргументу x) от одного столкновения в точке $(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, 0)$, т.е. для

$$f(x) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \delta(\mathbf{v} - \mathbf{v}_0) \delta(t).$$

Функция φ_0 является функцией Грина для рассматриваемой “столкновительной” модели процесса переноса и характеризуется соотношением:

$$\varphi(x) = \int_R \int_V \int_0^t f(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, \tau) \varphi_0(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t - \tau; \mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0) d\mathbf{r}_0 d\mathbf{v}_0 d\tau,$$

$$\forall f \in L_1(X).$$

Далее будем полагать, что $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, -t) \equiv 0$.

Лемма 2.1. Пусть $f \in L_1(X)$. Тогда

$$J(t) = \int_R \int_V \int_0^\infty f(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, t - \tau) F(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, \tau) d\mathbf{r}_0 d\mathbf{v}_0 d\tau. \quad (2.8)$$

Доказательство. Замена переменных $\tau \rightarrow t - \tau$ в (4.7) дает равенство

$$J(t) = - \int_R \int_V \int_t^0 f(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, t - \tau) F(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, \tau) d\mathbf{r}_0 d\mathbf{v}_0 d\tau.$$

Изменив направление интегрирования по τ с учетом соотношения $F(\mathbf{r}, \mathbf{v}, -t) \equiv 0$ при $t > 0$, откуда получаем (4.8).

Обозначим через $\eta(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0)$ оценку по столкновениям для функционала

$$J_h^{(0)}(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0) = \int_R \int_V \int_0^\infty \varphi_0(\mathbf{r}, \mathbf{v}, \tau; \mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0) |h(\mathbf{r}, \mathbf{v})| d\mathbf{r} d\mathbf{v} d\tau,$$

который, очевидно, представляет собой решение задачи, сопряженной к рассматриваемой, в точке $(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, 0)$, при $h \equiv |h(\mathbf{r}, \mathbf{v})|$, то есть

$$\mathbf{E}\eta(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0) = \varphi^*(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, 0) \quad \text{для} \quad h \equiv |h(\mathbf{r}, \mathbf{v})|.$$

Известно, что $\mathbf{E}\eta^2(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0) < +\infty$, если $\rho(K_p) < 1$ (см. п. 4.3.1).

Отметим, что функцию Грина $\varphi_0(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t; \mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0)$ можно формально рассматривать как сопряженное решение $\varphi^*(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, 0)$ при $h(\mathbf{r}', \mathbf{v}', t') = \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r})\delta(\mathbf{v}' - \mathbf{v})\delta(t' - t)$.

Теорема 2.3. Пусть точка $(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0)$ распределена для $t_0 \equiv 0$ с плотностью $f_1(\mathbf{r}, \mathbf{v})$, причем

$$|f(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, t)/f_1(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0)| < C < +\infty, \quad \text{и} \quad f_1\mathbf{E}\eta^2 \in L_1(R \times V).$$

Тогда в условиях леммы 4.1 выполняется соотношение $J(t) = \mathbf{E}\xi_t$, где

$$\xi_t = \sum_{n=0}^N Q_n h(\mathbf{r}_n, \mathbf{v}_n) f(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, t - t_n) / f_1(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0), \quad Q_0 \equiv 1, \quad (2.9)$$

причем $\mathbf{D}\xi_t < +\infty$.

Доказательство. Используя теорему Фубини, получаем:

$$\begin{aligned} J(t) &= \int_R \int_V f_1(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0) \times \\ &\times \left\{ \int_R \int_V \int_0^\infty \varphi_0(\mathbf{r}, \mathbf{v}, \tau; \mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0) \left[\frac{f(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, t - \tau)}{f_1(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0)} h(\mathbf{r}, \mathbf{v}) d\mathbf{r} d\mathbf{v} d\tau \right] \right\} \times \\ &\times d\mathbf{r}_0 d\mathbf{v}_0 = \int_R \int_V f_1(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0) J_1(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, t) d\mathbf{r}_0 d\mathbf{v}_0 = \\ &= \mathbf{E}_{f_1} J_1(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, t) = \mathbf{E}_{f_1} \varphi_t^*(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, 0), \end{aligned}$$

причем $\varphi_t^*(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, 0)$ является сопряженным решением для

$$h \equiv h_1(\mathbf{r}, \mathbf{v}, \tau) = \frac{f(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, t - \tau)}{f_1(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0)} h(\mathbf{r}, \mathbf{v}).$$

Рандомизация полученного выражения величины $J(t)$ с использованием оценки по столкновениям для сопряженного решения (см. п. 4.3.1) и дает (4.9). Соотношение $E\xi_t^2(t) < +\infty$ выполняется вследствие условия $f_1 E\eta^2 \in L_1(R \times V)$ и равномерной ограниченности величины $|f/f_1|$.

Лемма 2.2. Пусть функция $f_t^{(n-1)}(x)$ абсолютно непрерывна по t во всяком конечном временном интервале $\forall(\mathbf{r}, \mathbf{v}) \in R \times V$, $|f_t^{(m)}| \leq C f_1(\mathbf{r}, \mathbf{v})$ для почти всех x , причем $f_1 F \in L_1(X)$, $m = 0, 1, \dots, n$, и $F(x) < C < +\infty$. Тогда

$$J_t^{(m)}(t) = \int_R \int_V \int_0^\infty f_t^{(m)}(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, t - \tau) F(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, \tau) d\mathbf{r}_0 d\mathbf{v}_0 d\tau, \quad (2.10)$$

причем $J_t^{(m)} \in L_1(-\infty, +\infty)$, $m = 0, 1, \dots, n$.

Доказательство. В выражении (4.8) интеграл по времени имеет, очевидно, переменный верхний предел t . Производные по этому пределу имеют нулевые значения, так как в условиях леммы $f_t^{(m-1)}(0) = 0$, $m = 0, 1, \dots, n - 1$, и в силу ограниченности $F(x)$ соответствующие подинтегральные функции для $\tau = t$ непрерывны. С другой стороны, внесение производной под знак интеграла здесь допустимо вследствие известной теоремы о параметрическом дифференцировании интеграла Лебега. Последнее утверждение леммы доказывается путем замены $\tau \rightarrow t - \tau$ и последующего интегрирования по t в (4.10).

Путем использования соотношения (4.10) вместо (4.8) получается следующее утверждение.

Теорема 2.4. В условиях теоремы 4.3 с заменой $f \rightarrow f_t^{(n)}$ при выполнении условий леммы 4.2 выполняется соотношение $J^{(n)}(t) = E\xi_t^{(n)}$, причем $D\xi_t^{(n)} < +\infty$.

4.3.3. Рассмотрим теперь оценку параметра экспоненциальной временной асимптотики. Известно, что при выполнении довольно общих условий имеет место асимптотическое соотношение [68]

$$F(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \sim C(\mathbf{r}, \mathbf{v})e^{\lambda t}, \quad t \rightarrow +\infty, \quad (2.11)$$

где λ — ведущее характеристическое число соответствующего однородного стационарного уравнения переноса с заменой $\sigma_c \rightarrow \sigma_c + \lambda/|v|$. Эти условия, в частности, имеют место для односкоростного процесса переноса в ограниченной среде с функцией источника, достаточно быстро убывающей по времени.

В настоящем разделе мы предполагаем, что, если

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \exp(-\lambda t) \xrightarrow{t \rightarrow +\infty} 0 \quad \forall(\mathbf{r}, \mathbf{v}),$$

то выполняются соотношения (4.11) и

$$J(t) = Ce^{\lambda t}[1 + \varepsilon(t)], \quad \varepsilon(t) \xrightarrow{t \rightarrow +\infty} 0. \quad (2.12)$$

Вследствие (4.10) функция $J'(t)$ обладает тем же свойством, то есть

$$J'(t) = C_1 e^{\lambda t}[1 + \varepsilon_1(t)], \quad \text{если } f'(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \exp(-\lambda t) \xrightarrow{t \rightarrow +\infty} 0 \quad \forall(\mathbf{r}, \mathbf{v}).$$

В этом случае для $\lambda < 0$ интегрирование функции $J'(t)$ в пределах $(\tau, +\infty)$ при $\tau \rightarrow +\infty$ показывает, что

$$J'(t) = C\lambda e^{\lambda t}[1 + \varepsilon_1(t)], \quad \varepsilon_1(t) \xrightarrow{t \rightarrow +\infty} 0. \quad (2.13)$$

Действительно, для $\lambda < 0$ имеем

$$\begin{aligned} J(\tau) &= Ce^{\lambda\tau}[1 + \varepsilon(\tau)] = - \int_{\tau}^{+\infty} J'(t) dt = C_1 \lambda^{-1} e^{\lambda\tau} - \\ &- C_1 \int_{\tau}^{\infty} e^{\lambda t} \varepsilon_1(t) dt = C_1 \lambda^{-1} e^{\lambda\tau} [1 + \varepsilon_2(\tau)], \end{aligned}$$

то есть $C_1 = C\lambda$.

Пусть теперь $\lambda \geq 0$. Введя дополнительное поглощение с коэффициентом $\sigma_c^{(0)} > \lambda$, получаем (см., например, [20])

$$J_0(t) = \exp(-\sigma_c^{(0)}t)J(t) = C \exp((\lambda - \sigma_c^{(0)})t)[1 + \varepsilon(t)],$$

причем

$$J'_0 = C \exp((\lambda - \sigma_c^{(0)})t)[1 + \varepsilon_1(t)].$$

Используя последние равенства после дифференцирования соотношения $J(t) = \exp(\sigma_c^{(0)}t)J_0(t)$, получаем (4.13) и в случае $\lambda \geq 0$.

Вследствие соотношений (4.12) и (4.13), величина $J'(t)/J(t)$ для достаточно большого значения t дает оценку временной константы λ . Отметим, что соответствующую, определяемую теоремами 1 и 2, оценку метода Монте-Карло, можно рандомизировать (см. [29]) с целью определения флуктуаций временной константы процесса переноса частиц в случайной среде.

Для численной иллюстрации был рассмотрен односкоростной процесс переноса частиц с изотропным рассеянием в шаре радиуса $R = 7.72043$ с константами

$$\sigma = 1, \quad \sigma_s = 0.97, \quad \sigma_f = 0.03, \quad \sigma_c = 0.046, \quad v = 1 \text{ и } \nu = 2.5.$$

Здесь ν — среднее число вторичных частиц на один акт деления. Известно, что для данной модели среды $\lambda = -0.046$, поскольку при $\sigma_c = 0$ она с большой степенью точности критична [29]. Плотность распределения первых столкновений была взята в виде

$$f(r, t) = t \exp(-t), \quad r < R,$$

т.е. начальное распределение было равномерным по объему шара.

Для конечности дисперсии $\mathbf{D}\xi$ достаточно выполнения условия $\|K_p\| < 1$, которое для данной задачи обеспечивается неравенством: $\sigma_s/\sigma + \nu^2\sigma_f/\sigma < 1$ [29]. Тем самым на константы модели накладывается ограничение. Его можно ослабить, моделируя среду с новыми значениями σ_f и ν согласно замене: $\sigma_f \rightarrow \sigma_f + \sigma_c$, $\nu \rightarrow \nu\sigma_f/(\sigma_f + \sigma_c)$ [29].

В численном эксперименте моделировалась среда с константами

$$\sigma_s^* = \sigma_s, \quad \sigma_f^* = \sigma_f + \sigma_c, \quad \sigma_c^* = 0, \quad \nu^* = 1, \quad f_1 = 1.$$

Веса вычислялись по формуле $Q_n = (\nu\sigma_f/(\sigma_f + \sigma_c))^{n_1}$, где n_1 — число делений, предшествующих данному столкновению [29]. Как было указано в п. 4.1, такой способ построения весов строго обосновывается путем введения номера типа столкновения в число координат фазового пространства.

Результаты численных экспериментов с числом траекторий $N = 3 \cdot 10^6$ представлены в таблицах 4.1 и 4.2. Здесь β_N — статистическая оценка величины $J'(t)/J(t)$, а дисперсия $\mathbf{D}\beta_N$ оценивалась на основе формулы

$$\mathbf{D}\beta_N \approx \frac{\mathbf{D}\xi'_t}{(\mathbf{E}\xi_t)^2} + \frac{(\mathbf{E}\xi'_t)^2}{(\mathbf{E}\xi_t)^4} \mathbf{D}\xi_t - 2 \frac{\mathbf{E}\xi'_t}{(\mathbf{E}\xi_t)^3} \text{cov}(\xi'_t, \xi_t).$$

Результаты в таблице 4.1 получены для $h(\mathbf{r}, \mathbf{v}) \equiv 1$ (при $r < R$), а в таблице 4.2 — для

$$h(\mathbf{r}, \mathbf{v}) \equiv h(\mathbf{r}) \equiv \sin(\alpha r)/r \quad (\text{при } r < R), \quad \alpha = 0.3739866.$$

В последнем случае функция $h(\mathbf{r})$ является диффузионным приближением к стационарному пространственному распределению потока частиц для данной модели среды [29].

Таким образом, использование в качестве функции $h(\mathbf{r}, \mathbf{v})$ приближенного стационарного пространственного распределения потока существенно ускоряет расчеты.

Отметим, что замены начальной плотности на функции $t \exp(-0.5t)$ и $t \exp(-2t)$ привели к увеличению трудоемкости расчетов, в первом случае вследствие увеличения времени сходимости оценки, а во втором — вследствие увеличения дисперсии.

Использованный весовой алгоритм отличается особенной простотой. Однако, если моделировать ветвление (при этом для подкрити-

Таблица 2.1. Оценки для $h(\mathbf{r}, \mathbf{v}) \equiv 1$

t	$\beta_N \pm \sqrt{\mathbf{D}\beta_N/N}$
28	-0.0472 ± 0.0006
29	-0.0471 ± 0.0006
30	-0.0463 ± 0.0006
31	-0.0461 ± 0.0006

Таблица 2.2. Оценки для $h(\mathbf{r}, \mathbf{v}) \equiv \sin(\alpha r)/r$

t	$\beta_N \pm \sqrt{\mathbf{D}\beta_N/N}$
8	-0.0445 ± 0.0004
9	-0.0450 ± 0.0004
10	-0.0460 ± 0.0004
11	-0.0458 ± 0.0004

ческой системы дисперсия заведомо конечна [61]), а поглощение учитывать весовым множителем $\exp(-\sigma_c v t_n)$, то дисперсия оценки существенно уменьшится [29].

Сделаем теперь замечание о соотношении величин λ и σ_c в однокоростном (при $v \equiv 1$) процессе переноса без размножения (то есть при $\sigma_f \equiv 0$). Если для такого процесса σ_c заменить на нуль, то с увеличением времени в ограниченной среде число частиц будет убывать, а в бесконечной – оставаться постоянным. Это означает, что для ограниченной среды $\lambda < -\sigma_c$, а для неограниченной среды $\lambda = -\sigma_c$. Интересно отметить, что при указанных условиях равенство $\lambda = -\sigma_c$ выполняется и для полупространства, так как однородное стационарное уравнение переноса излучения для чисто рассеивающей среды в полупространстве имеет ненулевое решение (см., например, [68]).

4.3.4. Далее построены оценки на основе преобразования Фурье по времени. Рассмотренная выше методика не применима непосредственно для оценки функции $J(t)$ в практически важном случае “импульсного” (по времени) источника частиц [20]. Пусть, например, источник испускает частицы из точки r_0 в направлении $\mathbf{v}_0/|\mathbf{v}_0| = \omega_0$ с постоянной скоростью $|\mathbf{v}_0| = 1$. Тогда соответствующая начальная плотность столкновений выражается формулой:

$$f(\mathbf{r}, \omega, t) = \sigma(\mathbf{r}_0 + \omega t) \exp \left\{ - \int_0^t \sigma(\mathbf{r}_0 + \omega s) ds \right\} \times \\ \times \delta(\omega - \omega_0) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0 - \omega t).$$

Выражение (4.7) для $J(t)$, при этом имеет смысл, если функция $F(\mathbf{r}, \omega, t)$ непрерывно зависит от точки (\mathbf{r}, ω) в некоторой окрестности точки (\mathbf{r}_0, ω_0) . Для справедливости леммы 4.2 здесь, очевидно, следует предположить абсолютную непрерывность функции $\sigma_t^{(n-1)}(\mathbf{r}_0 + \omega t)$ по t во всяком конечном интервале, полагая $\sigma(r_0 + \omega t) = 0$ при $t < 0$. Если это условие, наряду с другими условиями леммы 4.2 и теоремы 4.4, выполнены при $n = 3$, то для оценки функций $J(t)$ и $J'(t)$ можно построить эффективные алгоритмы метода Монте-Карло, используя прямое и обратное преобразование Фурье. На основе оценки по столкновениям получаем:

$$I(s) = \int_0^{\infty} J(t) \exp(-ist) dt = \mathbf{E} \sum_{n=0}^N Q_n h(\mathbf{r}_n, \mathbf{v}_n) \exp(-ist_n).$$

Следовательно, при достаточно большом $S > 0$,

$$2\pi J(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} I(s) \exp(ist) ds \approx \\ \approx 2\mathbf{E} \sum_{n=0}^N Q_n h(\mathbf{r}_n, \mathbf{v}_n) \frac{\sin(S(t_n - t))}{t_n - t} = 2\mathbf{E}\xi(S). \quad (2.14)$$

Оценим теперь порядок роста величины $\mathbf{D}\xi(S)$ при $S \rightarrow +\infty$. Из выражения дисперсии оценки по столкновениям (см. [14, 20]) следует, что при $\sigma_c/\sigma > \varepsilon > 0$ имеет место асимптотическое соотношение

$$\mathbf{D}\xi(S) \sim C_1 \int_0^1 \frac{\sin^2(Sx)}{x^2} dx = C_1 R(S),$$

причем

$$R(S) = S \int_0^S \frac{\sin^2 t}{t^2} dt \rightarrow C_2 S.$$

Таким образом $\mathbf{D}\xi(S) \sim CS$. Аналогично одновременно оценивается функция $J'(t)$:

$$\begin{aligned} 2\pi J'(t) &\approx \\ &\approx 2\mathbf{E} \sum_{n=0}^N Q_n h(r_n, v_n) \frac{S(t-t_n) \cos[S(t-t_n)] - \sin[S(t-t_n)]}{(t-t_n)^2} = \\ &= 2\mathbf{E}\xi'_t(S). \end{aligned}$$

Отметим, что

$$\frac{S(t-t_n) \cos[S(t-t_n)] - \sin[S(t-t_n)]}{(t-t_n)^2} \xrightarrow{t_n \rightarrow t} 0$$

Анализ, аналогичный предыдущему, показывает, что $\mathbf{D}\xi'_t(S) \sim CS^3$ при $S \rightarrow \infty$. При сделанных предположениях подинтегральная функция в последнем выражении для $J(t)$ сходится к нулю на бесконечности не медленнее, чем $|S|^{-3}$, а в соответствующем выражении для $J'(t)$ – не медленнее, чем $|S|^{-2}$ (см., например, [69]).

Нетрудно заметить, что выражение $\xi_t(S)$ является частным случаем (4.9) для функции источника $\sin(St)/t$. Поэтому здесь целесообразно оценивать интегралы от функции $J(t)$ по интервалам длины $2\pi/S$ до заданного предельного значения времени T . Отметим, что такие интегралы от функции $\sin(S(t_n - t))/(t_n - t)$, после замены переменных $x = S(t - t_n)$, выражаются через значения интегрального синуса $\text{si}(x)$:

$$\int_{t^{(1)}}^{t^{(2)}} \frac{\sin(S(t_n - t))}{t_n - t} dt = \text{si}(S(t^{(2)} - t_n)) - \text{si}(S(t^{(1)} - t_n)). \quad (2.15)$$

Аналогичные интегральные оценки значений $J'(t)$, очевидно, совпадают с конечно-разностными оценками производных от функции $2\mathbf{E}\xi_t(S)$ по таблице значений t с шагом $2\pi/S$.

Ясно, что при $S \rightarrow \infty$ основанная на (4.15) кусочно-постоянная оценка $\tilde{J}_S(t)$ функции $J(t)$ переходит в стандартную гистограмму,

связанную с совокупностью столкновений $\{x_n\}$. Это утверждение справедливо для любой плотности источника, то есть оценку $\tilde{J}_S(t)$ можно использовать и для негладких временных зависимостей источника. Это целесообразно, так как, вообще говоря, при убывании S дисперсия оценки уменьшается.

Задачи такого типа возникают, например, в связи с изучением помехи обратного рассеяния при лазерном зондировании в системе “атмосфера-океан” [20]. Оценка величины $J'(t)$, как указано в п. 4.3.3, позволяет оценить константу временной экспоненциальной асимптотики функции $J(t)$; при известной константе это позволяет численно определять момент перехода к асимптотике (см. далее п. 4.3.6).

Как уже было указано выше, при решении таких задач методом Монте-Карло трудоемкость вычислений может быть существенно снижена путем учета поглощения весовым множителем, который непосредственно после выбора очередного типа столкновения выражается экспонентой вида $\exp(-\tau_{c,n})$, где $\tau_{c,n}$ – оптическая длина пути до точки r_n относительно поглощения. Предположим теперь, что функция $J(t)$ оценивается в конечном интервале $(0, T)$. Ясно, что в случае $t_n > T$ траекторию можно заведомо оборвать, если оценка осуществляется каким-либо методом без использования интегральных преобразований по времени (например, путем построения гистограммы или полигона частот), причем вклад от последнего, n -го, столкновения получается нулевым. Прямое распространение такого способа на построенные выше оценки приводит к их существенному ухудшению, так как оно связано с использованием преобразования Фурье для разрывной функции $J_T(t) = J(t)\Delta(0, T)$, где $\Delta(a, b)$ – индикатор интервала (a, b) . Однако это затруднение преодолевается путем суммирования вкладов от указанных последних столкновений, то есть при достижении неравенства $t_n \geq T$ траектория обрывается, но вклад в оценку $\xi(S)$ суммируется. Таким образом реализуется достаточно

гладкое (при сделанных предположениях о регулярности радиационной модели среды) восполнение $J_T^{(0)}$ функции $J_T(t)$. Это следует из того, что здесь реализуется достаточно гладкая плотность столкновений

$$\varphi_T^{(0)} = K[\varphi\Delta(0, T)] + f,$$

причем $\varphi_T^{(0)}\Delta(0, T) \equiv \varphi\Delta(0, T)$.

4.3.5. Рассмотрим теперь оценку временной зависимости интеграла от интенсивности излучения по некоторой области V_0 пространства скоростей (в односкоростном случае – направлений) в данной точке r^* координатного пространства. Для этого можно использовать так называемую локальную оценку, то есть соотношение (см., например, [14])

$$\begin{aligned} \int_{V_0} \int_0^\infty \varphi(\mathbf{r}^*, \mathbf{v}, t) \chi(t) dv dt &= \mathbf{E} \sum_{n=0}^N Q_n h_0(x_n) \chi(t_n) + \\ &+ \int_{V_0} \int_0^\infty \frac{f(\mathbf{r}^*, \mathbf{v}, \tau)}{\sigma(\mathbf{r}^*, \mathbf{v})} \chi(\tau) dv d\tau, \end{aligned} \quad (2.16)$$

где

$$h_0(x_n) = \frac{\sigma_s(\mathbf{r}_n, v_n)}{\sigma(\mathbf{r}_n, v_n)} \frac{w_s(\mathbf{v}_n \rightarrow \mathbf{v}_n^*)}{|r^* - r_n|^2} p(|r^* - r_n|; r_n, \omega_n^*) \Delta_{V_0}(\mathbf{v}_n^*).$$

Здесь $\chi(t)$ – непрерывная функция, \mathbf{v}_n^* – скорость, связанная с новым направлением $\omega_n^* = (r^* - r_n)/|r^* - r_n|$, $\Delta_{V_0}(\cdot)$ – индикатор области V_0 , и $t_n^* = t_n + |r^* - r_n|/|\mathbf{v}_n^*|$. Соотношение (4.16) следует непосредственно из общего интегрального уравнения переноса (см. п. 4.3.1). Для простоты будем полагать, что $f(\mathbf{r}^*, \mathbf{v}, \tau) \equiv 0$ и

$$f(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, t) = f_1(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0) f_0(t).$$

Пусть теперь $\chi(\tau) = f_0(t - \tau)$. Тогда соотношение (4.16) приобретает вид

$$J_0(t) = \int_{V_0} \int_0^\infty \Phi(\mathbf{r}^*, \mathbf{v}, \tau) f_0(t - \tau) d\mathbf{v} d\tau = \mathbf{E} \sum_{n=0}^N Q_n h_0(x_n) f_0(t - t_n). \quad (2.17)$$

По аналогии с п. 4.3.2 нетрудно получить соотношение

$$\int_{V_0} \Phi(\mathbf{r}^*, \mathbf{v}, t) d\mathbf{v} = \int_{V_0} \int_0^\infty \Phi_0(\mathbf{r}^*, \mathbf{v}, \tau) f_0(t - \tau) d\mathbf{v} d\tau, \quad (2.18)$$

где $\Phi_0(\mathbf{r}^*, \mathbf{v}, \tau)$ – интенсивность излучения в точке $(\mathbf{r}^*, \mathbf{v}, \tau)$ от источника с плотностью $f_0(\mathbf{r}, \mathbf{v})\delta(t)$. Сопоставляя (4.17) и (4.18) получаем, что, если начальное столкновение x_0 распределено с плотностью $f_0(\mathbf{r}, \mathbf{v})\delta(t)$, то

$$\mathbf{E} \sum_{n=0}^N Q_n h_0(x_n) f_0(t - t_n^*) = \int_{V_0} \Phi(\mathbf{r}^*, \mathbf{v}, t) d\mathbf{v}.$$

Рассмотрим теперь использование локальной оценки для реализации преобразования Фурье по времени. Полагая $\chi(t) = \exp(-ist)$ после интегрирования по s в интервале $(-S, S)$ получаем:

$$2\pi \int_{V_0} \Phi(\mathbf{r}^*, \mathbf{v}, t) d\mathbf{v} \approx \mathbf{E} \sum_{n=0}^N Q_n h_S(x_n),$$

где

$$h_S(x_n) = h_0(\mathbf{r}_n, \mathbf{v}_n) \frac{\sin(S(t_n^* - t))}{t_n^* - t}.$$

Отметим, что если поглощение учитывается весовым множителем (как указывалось выше), то произведение этого множителя на величину σ_s/σ из выражения для h_S определяется экспонентой вида $\exp(-\tau_{c,n})$, где $\tau_{c,n}$ – оптическая длина пути до точки r_n относительно поглощения (при постоянном σ_c имеем: $\tau_{c,n} = \sigma_c v t_n$). Если временная зависимость оценивается для $t \leq T$, то в случае $t_n^* > T$, после суммирования вклада в оценку, траекторию можно оборвать. Достаточная гладкость оцениваемой таким образом функции обеспечивается так же, как и в случае оценки по столкновениям, с тем отличием,

что вместо функции $\varphi(\cdot)$ следует использовать функцию $[K\varphi](\cdot)$. Аналогичным способом здесь строится оценка производной по времени. Дисперсии полученных локальных оценок конечны и имеют указанный выше порядок роста по S , если $\sigma \equiv 0$ в некоторой окрестности точки \mathbf{r}^* .

4.3.6. Рассмотрим теперь модельную задачу оценки помехи обратного рассеяния, которая возникает при лазерном зондировании океана из атмосферы [20]. Упрощенная система “атмосфера-океан” определяется следующим образом. Рассеивающая излучения среда – “океан” – заполняет полупространство $z \leq 0$. Полный коэффициент ослабления $\sigma = 0.216 \text{ м}^{-1}$, коэффициент рассеяния $\sigma_s = 0.175 \text{ м}^{-1}$, то есть коэффициент выживания “кванта” излучения при элементарном взаимодействии $q = 0.81$. Новое направление ω кванта после рассеяния моделируется согласно формуле [70]

$$\mu = (1 + \mu_0^2 - (\frac{1 - \mu_0^2}{2\mu_0\beta + 1 - \mu_0})^2) / (2\mu_0), \quad \mu_0 = 0.9,$$

где μ – косинус угла рассеяния, β – случайное число, равномерно распределенное в интервале $(0,1)$. Эта формула соответствует известной модельной индикатрисе Хенъи-Гринштейна:

$$\tilde{w}_s(\mu) = \frac{1}{2} \frac{1 - \mu_0^2}{(1 + \mu_0^2 - 2\mu_0\mu)^{3/2}}.$$

Верхнее полупространство $z > 0$ заполнено вакуумом. Мгновенный (с временной зависимостью $\delta(t)$) источник излучения находится в точке с координатами $(0, 0, H)$ и излучает кванты в направлении $\omega = (0, 0, -1)$, то есть в сторону отрицательной полуоси z . Приемник излучения регистрирует распределение по времени полного потока излучения, то есть освещенности $J(t) = \Phi_0(\mathbf{r}_0, t) = \int \Phi(\mathbf{r}_0, \omega, t) \omega_z d\omega$, в той же точке $(0, 0, H)$.

Вычисление времени выхода функции интенсивности на асимптотику будем проводить методом Монте-Карло. Для данной задачи параметр λ известен и равен $-\sigma_c = -0.041$ (см. п. 4.3.3). Расчеты были проведены для модели с параметрами $\sigma^{(1)} = \sigma_s^{(1)} = \sigma_s$, $\sigma_c^{(1)} = 0$, $H = 5\text{м}$, угол источника $\gamma = 0.001\text{рад}$, $v = 0.225\text{м/нсек}$. Соответствующие веса имеют экспоненциальный вид: $Q_n = \exp(-\sigma_c L_n)$, где L_n — длина пути частицы от входа в “океан”. Поскольку $\sigma_c^{(1)} = 0$, то траекторию целесообразно обрывать при выполнении условия $L_n + \ell^* > vT$ (см. п. 4.3.4).

Для оценки момента перехода к асимптотике на основе формулы (4.17) был использован искусственный модельный источник с

$$f_0(t) = vt(1/\sigma - vt), \quad 0 \leq vt \leq 1/\sigma.$$

Ясно, что такой способ дает несколько завышенную, то есть практически удовлетворительную оценку момента перехода к асимптотике. В работе [71] для рассматриваемой задачи в диффузионном приближении получена следующая асимптотическая формула

$$\Phi(\mathbf{r}, \omega, t) \sim C(\mathbf{r}, \omega) t^{-5/2} \exp(-\sigma_c vt), \quad t \rightarrow +\infty,$$

которая не противоречит материалу п. 4.3.3 ввиду неограниченности среды. Эта формула согласуется с известной асимптотикой $t^{-3/2} \exp(-\sigma_c vt)$ для плоскопараллельного приемника [72] на основе геометрических соображений подобия. Ясно, что асимптотика освещенности определяется некоторой промежуточной формулой, и для данной задачи справедливо соотношение

$$\frac{J'(t)}{J(t)} \sim -\frac{\alpha}{t} - \sigma_c v, \quad t \rightarrow +\infty, \quad 3/2 < \alpha < 5/2.$$

Расчеты показали, что это соотношение с $\alpha = 2$ довольно точно выполняется уже при $t = t_0 \approx 140(\text{нсек})$, то есть асимптотика освещенности здесь имеет вид: $Ct^{-2} \exp(-\sigma_c vt)$. Отметим, что приведенная в

[20] (раздел 5.6) соответствующая оценка является существенно менее точной в связи с тем, что она была получена простым сравнением графиков вычисленной и асимптотической функций при меньшей точности расчетов.

Для оценки множителя при асимптотике было использовано соотношение

$$\int_{t_0}^{t_0+\Delta t} J(t) dt \approx C \int_{t_0}^{t_0+\Delta t} t^{-2} \exp(-\sigma_c vt) dt = \tilde{J},$$

которое при $\Delta t = 15.7$ дало значение $C \approx 0.0023$.

Величина \tilde{J} вычислялась для физического источника с $f_0(t) = \delta(t)$ непосредственно локальной оценкой (см. п. 4.3.4), а также с помощью преобразования Фурье при $S = 2$. Эти оценки практически совпали, но вероятностная погрешность “фурье-оценки” несколько меньше; кроме того эта оценка позволила одновременно оценить величину $J'(t_0)$ (см. п. 4.3.4) и, тем самым, проконтролировать переход к асимптотике для физического источника. Использование “фурье-оценок” еще более целесообразно при детальном исследовании “доасимптотических” временных зависимостей, например, для оценки точки максимума функции $J(t)$.

Ясно, что величины α и λ можно оценивать, используя приближенные значения функции $J'(t)/J(t)$ для двух достаточно больших значений t . Поскольку параметр λ инвариантен относительно источника и функционала, его можно предварительно эффективно оценить, используя оптимальные нелокальные функции $f(\cdot)$ и $h(\cdot)$, как в п. 4.3.3. Отметим, что, хотя временная асимптотика помехи обратного рассеяния в случае ограниченной среды, как правило, экспоненциальна, множитель вида $t^{-\alpha}$ может существенно улучшать приближенную аналитическую оценку помехи в некоторой “доасимптотической” области.

2.4. Использование осредненных оценок для исследования влияния стохастичности среды

4.4.1. Рассматривается задача об оценке вероятности прохождения и альbedo частицы для параллелепипедальной среды, то есть конечного плоского слоя достаточно большой протяженности; плотность среды представляет собой случайное поле. Для решения этой задачи используются весовые оценки метода Монте-Карло. Рассматриваются две модели однородной случайной среды: одномерная и трехмерная. В одномерной модели строится пуассоновский поток точек по главной оси в пределах параллелепипеда. Получается разбиение параллелепипеда на случайные слои, после чего в каждом слое независимо выбирается значение плотности, соответствующее заданной одномерной функции распределения. В трехмерной модели строятся пуассоновские потоки по трем главным осям в пределах параллелепипеда; в каждом полученном случайном элементарном параллелепипеде независимо выбирается значение плотности соответственно заданной одномерной функции распределения. Выполнено аналитическое частичное осреднение весовой оценки по распределению случайной плотности при фиксированном разбиении. Получены условия конечности дисперсии таких частично осредненных оценок. Произведены вычисления вероятности прохождения и вероятности альbedo. Весовой алгоритм позволяет вычислить малые изменения характеристик процесса переноса при переходе от детерминированной среды к стохастической с той же средней плотностью, например изменение альbedo. Весовой алгоритм также позволяет вычислять изменение характеристик процесса переноса при переходе от одномерной модели случайного поля к трехмерной.

4.4.2. В трехмерном пространстве рассмотрим следующие модели однородных случайных полей.

1) На оси x в слое $0 \leq x \leq H$, $(y, z) \in R^2$ строится пуассоновский поток точек $\tau_0 = 0$, $\tau_{i+1} = \tau_i + \Delta\tau_i$, где $\Delta\tau_i$ - случайная величина, распределенная с плотностью $\lambda \exp(-\lambda t)$, $\lambda = L^{-1}$. Получается разбиение слоя $\{0 \leq x \leq H, (y, z) \in R^2\}$ на m случайных слоев $\tau_i \leq x \leq \tau_{i+1}$, $\tau_0 = 0$, $\tau_m = H$. Далее в каждом таком слое независимо выбирается значение σ_i , где

$$\sigma_i = \begin{cases} \sigma^{(1)} & \text{с вероятностью } p, \\ \sigma^{(2)} & \text{с вероятностью } 1 - p. \end{cases}$$

2) По каждой оси при $0 \leq x \leq H_1$, $0 \leq y, z \leq H_2$ независимо строятся потоки точек, указанного выше типа, в результате чего получаются разбиения:

по x : (τ_i, τ_{i+1}) , $i = 0, 1, \dots, m_x$ -слоев;

по y : (t_j, t_{j+1}) , $j = 0, 1, \dots, m_y$ -слоев;

по z : (l_k, l_{k+1}) , $k = 0, 1, \dots, m_z$ -слоев.

Объединяя все три разбиения, получаем разбиение параллелепипеда $0 \leq x \leq H_1$, $0 \leq y, z \leq H_2$ на $m_x m_y m_z$ параллелепипедов. Далее, в каждом элементарном параллелепипеде независимо выбирается значение

$$\sigma_{ijk} = \begin{cases} \sigma^{(1)} & \text{с вероятностью } p, \\ \sigma^{(2)} & \text{с вероятностью } 1 - p. \end{cases}$$

Эти модели полей будут в дальнейшем использоваться при решении задач теории переноса. На самом деле, можно рассматривать более общие модели случайных полей, производя указанные выше случайные разбиения по координатным осям и выбирая независимо в каждом слое (или в параллелепипеде) случайное значение σ_i (σ_{ijk}), соответствующее заданной одномерной функции распределения $F_\xi(x)$.

4.4.3. Далее построены частично-осредненные оценки метода Монте-Карло. Будут использованы обозначения: $r = (x, y, z)$, $X = (r, \rho)$

- точка столкновения в фазовом пространстве координат и направлений.

Пусть $\sigma(r)$ - первое из описанных выше случайных полей, то есть одномерное пуассоновское поле.

Рассмотрим случайную величину [20]

$$\xi = Q_N(\sigma) = \prod_{i=1}^N \frac{k(X_{i-1}, X_i, \sigma)}{p(X_{i-1}, X_i)} D, \quad Q_0 = 1,$$

где $k(X', X; \sigma)$ - ядро интегрального уравнения переноса частиц [20] с параметрами

$$\sigma_s(r) = q\sigma(r), \quad \sigma_c(r) = (1 - q)\sigma(r), \quad 0 < q < 1, \quad (2.19)$$

причем q - вероятность выживания частицы при столкновении, то есть рассеяния соответственно некоторой заданной индикатрисе $w_s(\mu)$, μ - косинус угла рассеяния. В качестве переходной плотности $p(X', X)$ моделируемой марковской цепи столкновений частиц рассматривается ядро с параметрами

$$\sigma_{s,0} = q_0\sigma_0, \quad \sigma_{c,0} = (1 - q_0)\sigma_0, \quad 0 < q_0 < 1, \quad (2.20)$$

и с той же индикатрисой; величина D равна нулю или единице в зависимости от варианта вылета, вероятность которого оценивается. Для данной реализации $\sigma(r)$ весовой множитель $k(X_{i-1}, X_i; \sigma)/p(X_{i-1}, X_i)$ представляет собой отношение плотностей вероятностей длины свободного пробега после рассеяния в точке X_{i-1} для моделей сред с параметрами (4.19), (4.20) и с заданной индикатрисой [20]. Искомая вероятность

$$P = E_\sigma M_\omega \{Q_N(\sigma) | \sigma\}$$

есть среднее значение оцениваемого функционала для случайной среды (ω - случайная траектория) [20].

Для первой модели случайного поля из п. 4.4.2 имеем:

$$\begin{aligned} \bar{p} = M_{\omega, \{\tau_i\}} \{ & \prod_{j=1}^m (p(\frac{q\sigma^{(1)}}{q_0\sigma_0})^{n_i} \exp(-(\sigma^{(1)} - \sigma_0)l_i) + \\ & + (1-p)(\frac{q\sigma^{(2)}}{q_0\sigma_0})^{n_i} \exp(-(\sigma^{(2)} - \sigma_0)l_i)) \} \end{aligned} \quad (2.21)$$

где l'_j -длина j-го пробега,

m -число случайных слоев по x ,

σ_i -случайное значение σ в i -м слое,

n_i -число столкновений частицы в i -м слое,

l_i -длина пробега частицы в i -м слое,

N -случайный номер последнего состояния цепи столкновений, то есть x_N - точка поглощения или первая точка столкновения вне области, которая предполагается окруженной фиктивной средой, в которой $\sigma = \sigma_0$ и $q = 0$.

Для второй модели случайного поля формула (4.19) принимает вид:

$$\begin{aligned} E_{\sigma} M_{\omega} \{ Q_N(\sigma) | \sigma \} = \\ = M_{\omega, \{\tau_i\}, \{l_j\}, \{l_k\}} \{ & \prod_{i=1}^{m_x} \prod_{j=1}^{m_y} \prod_{k=1}^{m_z} (p(\frac{q\sigma^{(1)}}{q_0\sigma_0})^{n_{ijk}} \exp(-(\sigma^{(1)} - \sigma_0)l_{ijk}) + \\ & + (1-p)(\frac{q\sigma^{(2)}}{q_0\sigma_0})^{n_{ijk}} \exp(-(\sigma^{(2)} - \sigma_0)l_{ijk})) \} \end{aligned} \quad (2.22)$$

где n_{ijk} - число столкновений частицы в ijk -м параллелепипеде,

l_{ijk} - длина пробега в нем,

m_x - число слоев по x ,

m_y - число слоев по y ,

m_z - число слоев по z .

Как отмечалось выше распределение случайной величины $\sigma_i(\sigma_{ijk})$ может быть не обязательно бернуллиевским. Оно может иметь любую функцию распределения $F_{\xi}(x)$. Если при этом удастся вычислить аналитически математическое ожидание $E_{\sigma} \{ Q_N(\sigma) | \omega, \{\tau_i\} \}$ при фик-

сированных траекториях и границах слоев, то получаются формулы, аналогичные формулам (4.21) и (4.22). Если же интеграл, представляющий собой математическое ожидание

$$\int_R \left(\frac{q\sigma}{q_0\sigma_0}\right)^{n_i} \exp(-(\sigma - \sigma_0)l_i) dF_\xi(\sigma),$$

не удастся вычислить аналитически, то его можно заменить какой-либо приближенной квадратурной формулой.

4.4.4. Далее рассмотрены условия конечности дисперсии частично-осредненной весовой оценки. Дисперсия конечна если конечна величина

$$E_\sigma M_\omega \{Q_N^2(\sigma) | \sigma\}$$

где

$$Q_N(\sigma) = \prod \left(\frac{q\sigma}{q_0\sigma_0}\right)^n \exp(-(\sigma - \sigma_0)l)$$

Здесь σ - случайное значение плотности ijk -м параллелепипеде, n - число столкновений частицы в ijk -м параллелепипеде, l - длина пробега в нем. Рассмотрим выражение

$$\begin{aligned} Q_N^2(\sigma) &= \prod \left(\frac{q^2\sigma^2}{q_0^2\sigma_0^2}\right)^n \exp(-2(\sigma - \sigma_0)l) = \\ &= \prod \left(\frac{\bar{\sigma}}{q_0\sigma_0}\right)^n \frac{\exp(-(\bar{\sigma} - \sigma_0)l)}{\exp(-(\bar{\sigma} - \sigma_0)l)} \exp(-2(\sigma - \sigma_0)l), \end{aligned}$$

где использовано обозначение

$$\bar{\sigma} = \frac{q^2\sigma^2}{q_0\sigma_0}.$$

Если величина $\exp(-2(\sigma - \sigma_0)l) / \exp(-(\bar{\sigma} - \sigma_0)l)$ не превосходит 1 то среднее значение $Q_N^2(\sigma)$ не превосходит среднего значения оцениваемого функционала для сечения $\bar{\sigma}$, которое конечно.

Таким образом относительно σ необходимо решать неравенство:

$$\exp(-2(\sigma - \sigma_0)l + (\bar{\sigma} - \sigma_0)l) \leq 1,$$

которое равносильно неравенству

$$2(\sigma_0 - \sigma) + (\bar{\sigma} - \sigma_0) \leq 0,$$

или, если положить $q = 0.9$, $q_0 = 1$, $\sigma_0 = q^2 = 0.81$ (см.п. 4.4.6), неравенству

$$\sigma^2 - 2\sigma + 0.81 \leq 0$$

Отсюда в предположении, что $q = 0.9$, $q_0 = 1$, $\sigma_0 = q^2 = 0.81$, получаем следующее условие конечности дисперсии: $\sigma \in [0, 6; 1.4]$.

4.4.5. Отметим, что для детерминированной плоско-параллельной среды искомая вероятность $I(H)$ прохождения может иногда вполне удовлетворительно оцениваться асимптотической формулой

$$I_{as}(\tau(H)) \asymp e^{-\tau(H)/L}, \quad \tau(H) = \int_0^H \sigma(x) dx, \quad (2.23)$$

где L - диффузионная длина. Если рассеяние сильно анизотропно, то для оценки величины L можно воспользоваться “транспортным” приближением для индикатрисы

$$w(\nu, \nu') = (1 - \mu_0) \frac{1}{4\pi} + \mu_0 \delta(\nu - \nu'), \quad (2.24)$$

которое сохраняет средний косинус угла рассеяния μ_0 . При этом приближенное значение L определяется соотношениями

$$\frac{2\tilde{l}}{\tilde{q}L} = \ln \frac{L + \tilde{l}}{L - \tilde{l}}, \quad \tilde{q} = \frac{q(1 - \mu_0)}{1 - q\mu_0}, \quad \tilde{l} = \frac{1}{1 - q\mu_0}$$

Например, для рассмотренной в следующем разделе радиационной модели со стандартной индикатрисой Хензи-Гринштейна и параметрами $\mu_0 = q = 0.9$ методом Монте-Карло была получена оценка

$I(20) \approx 0.0236$, в то время, как формула (4.23) с “транспортным” значением $L = 5.4$ дает величину $I_{as}(20) = 0.0246$. Ясно, что приближение (4.23) в данном случае можно улучшить, введя перед экспонентой коэффициент $0.0236/0.0246=0.959$ для больших значений $\tau(H)$.

На основе теории восстановления с использованием асимптотической формулы (4.23) в [24] была получена следующая асимптотическая формула для одномерного пуассоновского поля $\sigma(x)$ с параметром λ (то есть для первого варианта из п. 4.4.2):

$$\mathbf{E}I(\tau(H)) = \mathbf{E}I_{as}(\tau(H)) \asymp \frac{\lambda^{-2}}{\mathbf{E}(\lambda - \alpha + \sigma/L)^2} e^{-\alpha H}, \quad (2.25)$$

причем значение α находится из уравнения

$$\lambda \mathbf{E}(\lambda - \alpha + \sigma/L)^{-1} = 1.$$

Осреднение здесь осуществляется по одномерному распределению поля σ , то есть для основного в данной работе бинарного распределения имеем

$$\mathbf{E}(\lambda - \alpha + \sigma/L)^{-1} = p(\lambda - \alpha + \sigma^{(1)}/L) + (1 - p)(\lambda - \alpha + \sigma^{(2)}/L)$$

Рассмотрим теперь некоторые возможности аналогичных асимптотических оценок для указанного в п. 4.4.2 трехмерного варианта поля $\sigma(x, y, z)$. Ясно, что крупномасштабная горизонтальная (по (y, z)) неоднородность слабо влияет на асимптотику, то есть при $\lambda_y^{-1}, \lambda_z^{-1} \gg L$ формула (4.25) с $\lambda = \lambda_x$ должна давать удовлетворительный результат и в трехмерном случае.

С другой стороны, хорошо известно, что в случае мелкомасштабной горизонтальной неоднородности (при $\lambda_y^{-1}, \lambda_z^{-1} \ll L$) допустимо горизонтальное осреднение, то есть, за исключением строго вертикальных направлений, траектория частицы строится фактически в среде с $\sigma \equiv \mathbf{E}\sigma$.

Используя транспортное приближение (4.24) можно перейти к рассмотрению задачи переноса с изотропным рассеянием и параметрами

$$\sigma_{tr} = \nu\sigma, \quad \sigma_{s,tr} = q\sigma(1 - \mu_0), \quad q_{tr} = q(1 - \mu_0)/\nu, \quad \nu = 1 - q\mu_0.$$

После вертикального падения на верхнюю поверхность слоя в точке $(x_0 = 0, y_0, z_0)$ (ось x предполагается направленной вниз) частица может соответственно (4.24) испытать несколько “дельта-рассеяний”, после чего либо вылетает через нижнюю поверхность слоя $x = H$, либо поглощается, либо изотропно рассеивается. Искомый функционал, то есть вероятность вылета, складывается из двух частей:

$$I^{(0)}(H) = I_1^{(0)}(H) + I_2^{(0)}(H), \quad (2.26)$$

где $I_1^{(0)}$ - вероятность вылета без изотропного рассеяния и поглощения, а

$$I_2^{(0)}(H) = \int_0^H \mathbf{E} f(t; \sigma) i^{(0)}(t, H) dt,$$

где $f(t; \sigma)$ - плотность распределения первого изотропного рассеяния для данной реализации σ , а $i^{(0)}(t, H)$ - вклад в искомый функционал, то есть вероятность вылета для изотропного единичного источника частиц в точке $x = t$, $y = y_0$, $z = z_0$ при $\sigma \equiv \mathbf{E}\sigma$. Весовую функцию $\mathbf{E}f(t, \sigma)$ здесь можно приближенно заменить на

$$f(t; \mathbf{E}\sigma) = \mathbf{E}\sigma_{s,tr} \exp(-t\mathbf{E}\sigma_{s,tr}),$$

то есть на плотность распределения первого изотропного рассеяния в модифицированной среде с $\sigma \equiv \nu\mathbf{E}\sigma$. В результате, на основе сказанного выше о влиянии мелкомасштабной неоднородности на перенос частицы получаем оценку

$$I_2^{(0)} \approx I_s^{(0)} - e^{\nu H} \mathbf{E}\sigma$$

где $I_s^{(0)}$ - вероятность прохождения частицы через слой с $\sigma \equiv \mathbf{E}\sigma$ в транспортном приближении. Используя асимптотику для $I_s^{(0)}$, получаем

$$I_2^{(0)} \approx C e^{-\nu H \mathbf{E}\sigma/L_0} - e^{\nu H \mathbf{E}\sigma},$$

где коэффициент C близок к единице и может быть определен, как указано выше. Для примера с индикатрисой Хеньи-Гринштейна (см. п. 4.4.6) имеем $\nu = 0.19$, $q_{tr} = 0.09/0.19 \approx 0.4737$, $C = 0.959$ и $L_0 = 1.034$, то есть

$$I_2^{(0)} = 0.959 e^{-0.1838H} - e^{-0.19H}$$

.

Для определения величины $I_1^{(0)}(H)$ прежде всего отметим, что при использовании транспортного приближения она выражается формулой

$$I_1^{(0)}(H) = \mathbf{E} e^{-\tau_{tr}^{(1)}(H)}, \quad (2.27)$$

где

$$\tau_{tr}^{(1)}(H) = \int_0^H [\sigma_{s,tr}(H) + \sigma_{c,tr}(t)] dt = \int_0^H \nu \sigma(t) dt.$$

Таким образом, величина $I_1^{(0)}(H)$ может быть асимптотически оценена формулой (4.25) с заменой L на ν^{-1} .

В качестве примера рассмотрим уже описанную выше задачу (см. также п. 4.4.6) при $\lambda^{-1} = L = 5.4$, $H = 20$, $p = 0.5$, $\sigma^{(1)} = 0.6$, $\sigma^{(2)} = 1.4$, $\mathbf{E}\sigma = 1$.

Формула (4.25) в транспортном приближении, то есть при $L = 1.034/0.19$, приобретает вид:

$$\mathbf{E}I(\tau(H)) \asymp 0.8915 e^{-0.1582H},$$

Проведенные методом Монте-Карло контрольные расчеты показали, что здесь целесообразно ввести дополнительный множитель,

приближенно равный 1.035, и уточненная асимптотическая формула такова:

$$EI(\tau(H)) \asymp 0.9227e^{-0.1582H},$$

причем для $H = 20$ имеем: $EI(\tau(20)) \approx 0.03899$.

Для величины (4.27) формула (4.25) дает следующую оценку:

$$I_1^{(0)}(H) \asymp 0.8867e^{-0.1628H}.$$

Окончательно для $I^{(0)}(H)$ получаем

$$I^{(0)}(H) \approx 0.959e^{-0.1838H} - e^{-0.19H} + 0.8867e^{-0.1628H},$$

и $I^{(0)}(20) \approx 0.03610$, то есть вероятность прохождения частицы через стохастический трехмерный слой с мелкомасштабной горизонтальной неоднородностью в данном случае на 7 % меньше аналогичной вероятности для стохастического горизонтально однородного слоя.

4.4.6. Рассматривается тестовая задача об оценке средней вероятности прохождения и средней вероятности вылета назад (альбедо) частицы для слоя вещества: $0 \leq x \leq H_1$, $0 \leq y, z \leq H_2$. являющегося случайным полем, построенным в п. 4.4.2 для этого слоя. При этом $\lambda = 1/L$, $L = 5.4$, $H_1 = 20$, $H_2 = 40$, $p = 0.5$, $\sigma^{(1)} = 0.6$, $\sigma^{(2)} = 1.4$. Таким образом, выполнены условия конечности дисперсии весовой оценки (см. п. 4.4.4).

Задача решается моделированием траекторий частиц по стандартной схеме [20]. Моделируется значение косинуса угла рассеяния μ по индикатрисе Хеньи- Гринштейна [24]:

$$w_s(\mu) = \frac{1}{2} \frac{1 - \mu_0^2}{(1 + \mu_0^2 - 2\mu\mu_0)^{\frac{3}{2}}}, \quad -1 \leq \mu \leq 1, \quad \mu_0 = E\mu = 0.9.$$

Используется весовой алгоритм. Моделирование траекторий частиц осуществляется для детерминированной среды с постоянными

$\sigma_0 = 0.81$ и $q_0 = 1$. Траектории выпускаются из точки $(0, 20, 20)$ вдоль оси x и отслеживаются до момента выхода из области: $0 \leq x \leq H_1$, $0 \leq y, z \leq H_2$. Вне области $q_0 = 0$.

При этом для каждой траектории строится разбиение этой области на случайные параллелепипеды. Используется следующий алгоритм вычисления l_{ijk} - длин пробега в параллелепипедах.

Пусть l - длина свободного пробега (выбранная согласно σ_0), (nx, ny, nz) - номер параллелепипеда, в котором произошло очередное столкновение,

$(nx1, ny1, nz1)$ - номер параллелепипеда, в котором было предшествующее столкновение. Сначала вычисляются части длины пробега l в каждом слое

по x : $lx[nx1], \dots, lx[nx]$, сумма всех равна l ;

по y : $ly[ny1], \dots, ly[ny]$, сумма всех равна l ;

по z : $lz[nz1], \dots, lz[nz]$, сумма всех равна l .

Далее, индексам i, j, k присваиваются текущие значения $nx1, ny1, nz1$ соответственно. Сравниваются три значения: $lx[i], ly[j], lz[k]$. Если $lx[i]$ наименьшее из них, то текущее значение $l[i, j][k]$ увеличивается на $lx[i]$. Изменяется и текущее значение индекса i : если nx больше $nx1$, то значение i увеличивается на единицу, если nx меньше $nx1$, то значение i уменьшается на единицу. Если наименьшим является $ly[j]$ или $lz[k]$, то текущее значение $l[i, j][k]$ увеличивается на $ly[j]$ или $lz[k]$ соответственно. Происходит также изменение текущего значения индекса j или k . Если же $nx1 = nx$ и $ny1 = ny$ и $nz1 = nz$, то $l[i, j][k]$ увеличивается на l . Процесс заканчивается тогда, когда $i = nx$ и $j = ny$ и $k = nz$.

4.4.7. Проводились расчеты средней вероятности прохождения частицы и среднего альбедо для построенных выше моделей случайной среды.

Введены следующие обозначения: N - количество моделируемых траекторий; $P^{(p)}$ и $P^{(a)}$ - средняя вероятность прохождения и средняя вероятность альбедо для сред: $3s$ - трехмерная стохастическая, $1s$ - одномерная стохастическая, $1d$ - одномерная детерминированная с коэффициентом ослабления $\sigma \equiv E\sigma$,

σ_N - оценка среднеквадратической погрешности.

Таблица 2.3. Результаты расчетов средней вероятности прохождения

N	$P_{3s}^{(p)}$	σ_N	$P_{1s}^{(p)}$	σ_N
10000	0,0325	0,0009	0,0350	0,0011
50000	0,0329	0,0004	0,0357	0,0005
100000	0,0338	0,0003	0,0366	0,0004
1000000	0,0340	0,0001	0,0368	0,0001

Таблица 2.4. Изменение вероятности прохождения при переходе от одномерной случайной среды к трехмерной и соответствующая среднеквадратическая погрешность.

N	$P_{3s}^{(p)} - P_{1s}^{(p)}$	σ_N
10000	-0,0025	0,0005
50000	-0,0028	0,0003
100000	-0,0027	0,0002
1000000	-0,0028	0,00008

Таблица 2.5. Изменение альbedo и соответствующая среднеквадратическая погрешность

N	$P_{1d}^{(a)} - P_{3s}^{(a)}$	σ_N
50000	0,0020	0,0006
100000	0,0023	0,0003
1000000	0,0017	0,0001

Таблица 2.6. Изменение альbedo и соответствующая среднеквадратическая погрешность

N	$P_{1s}^{(a)} - P_{3s}^{(a)}$	σ_N
50000	0,0001	0,0004
100000	0,0006	0,0003
1000000	0,0007	0,0001

Таблица 2.7. Изменение альbedo и соответствующая среднеквадратическая погрешность

N	$P_{1d}^{(a)} - P_{1s}^{(a)}$	σ_N
50000	0,0020	0,0006
100000	0,0017	0,0004
1000000	0,0009	0,0001

Из таблицы 4.4 видно, что для трехмерной модели случайного поля средняя вероятность прохождения приблизительно на 8 процентов меньше, чем для одномерной модели.

Из таблиц 4.6 и 4.7 видно небольшое уменьшение среднего альbedo при переходе от детермированной среды к стохастической с той же средней плотностью: при переходе к трехмерной модели приблизительно на 2.5 процента, при переходе к одномерной модели приблизительно на 1.5 процента.

Из таблицы 4.7 видно, что при переходе от одномерной модели случайной среды к трехмерной среднее альbedo уменьшается приблизительно на 1 процент.

Анализ оценок среднеквадратических погрешностей для различных значений N подтверждает конечность дисперсий.

Отметим также, что оценка

$$P_{3s}^{(p)} - P_{1s}^{(p)} = -0.0028$$

с приближенной среднеквадратической погрешностью $\sigma_N = 0.00008$ практически совпадает с аналитической оценкой

$$I^{(0)}(20) - EI(\tau(20)) = -0.00289,$$

полученной в п. 4.4.5 для случая мелкомасштабной горизонтальной неоднородности. Это означает, что рассмотренная в п. 4.4.5 модель удовлетворительна даже, если $\lambda_y^{-1}, \lambda_z^{-1} \approx L$; здесь, по-видимому, играет роль наличие неоднородности и по y и по z .

Представленное в Таблице 4.7 изменение альбедо $P_{1d}^a - P_{1s}^a \approx 0.0009 > 0$ вполне естественно, так как для слоев большой оптической толщины τ альбедо P_a , очевидно, является выпуклой функцией аргумента τ (то есть $P_a'(\tau) > 0$, $P_a''(\tau) < 0$), среднее значение которой меньше функции от среднего значения аргумента.

Рассмотренные выше модели и оценки обладают довольно высокой степенью универсальности, так как ряд расчетов по методу Монте-Карло показал, что среднее значение радиации, проходящей через стохастический оптически толстый слой, в основном определяется корреляционной длиной среды, которая для пуассоновского поля равна λ^{-1} .

4.4.8. Приведенные в конце п. 4.4.7 результаты расчетов подтверждают высокую эффективность построенных осредненных оценок для вычисления изменений различных функционалов радиации при изменении вероятностных моделей среды. Вычислительный опыт показывает, что коррелированная выборка (например, связанная с ис-

пользованием одних и тех же случайных чисел в рассмотренных условиях дает меньшую точность; однако такая выборка при использовании “двойной рандомизации” для прямой невесовой оценки среднего $E_{\sigma} M_{\omega} \{Q_N(\sigma) | \sigma\}$ является прямым моделированием и всегда дает оценки с конечной дисперсией.

Для рассматриваемых задач можно предложить следующий просто реализуемый алгоритм коррелированной выборки. Введем обозначения: $\rho = (\rho_x, \rho_y, \rho_z)$ единичный вектор направления пробега,

$$\tau(l) = \int_0^l \sigma(r + \rho t) dt,$$

то есть $\tau(l)$ - оптическая длина пробега из точки r в направлении ρ . Прямое моделирование траектории частицы в неоднородной среде состоит в последовательном моделировании длины пробега (путем решения уравнения $\tau(l) = -\ln \beta$, где β - стандартное случайное число [20]), факта выживания или поглощения в конце пробега и, в случае выживания, нового значения ρ . Очевидно, что при решении радиационных задач для различных сред с одной и той же индикатрисой и вероятностью выживания q можно строить траектории на базе предварительно моделируемой универсальной случайной последовательности

$$\{\ln \beta_i\}, \quad \{\nu_i\}, \quad i = 1, \dots, N,$$

которую можно связывать с бесконечной однородной средой.

На основе полученных результатов можно константировать, что для радиационных расчетов в первом приближении стохастически-неоднородный слой можно заменить на однородный слой с полным коэффициентом ослабления $\sigma = \alpha L$, где L - диффузионная длина для заданных индикатрис рассеяния и коэффициента выживания q , а величина α определяется из одномерного пуассоновского приближения поля соответственно (4.25). При этом следует учитывать, что такая

замена для слоя достаточно большой оптической толщины хорошо воспроизводит и значения альbedo на разных уровнях. Если существенной является горизонтальная неоднородность, то в случае большой оптической толщины в формуле (4.26) можно учитывать лишь первое слагаемое, то есть определять значение α по прямо проходящему “дельта-рассеянному” излучению в транспортном приближении.

Предварительно осредненные таким образом константы можно уточнять, рассматривая полученные по методу Монте-Карло результаты для исходных сложных стохастических моделей сред, как экспериментальные, и затем оценивать константы упрощенных моделей с помощью методов решения параметрических обратных задач [20].

- [1] Арсенин В.Я. Методы математической физики и специальные функции. – М.: Наука, 1974.
- [2] Бахвалов Н.С. Численные методы. – М.: Наука, 1973.
- [3] Боровков А.А. Теория вероятностей. – М.: Наука, 1976.
- [4] Булавский Ю.В. О выборе коэффициента выживания в схеме Неймана–Улама // Методы и алгоритмы статистического моделирования. – Новосибирск, 1983. – С. 13–20.
- [5] Булавский Ю.В. Минимизация дисперсии оценки по столкновениям в задачах со знакопеременными элементами // ЖВМиМФ. – 1984. – № 5. – С. 148–152.
- [6] Вентцель А.Д. Курс теории случайных процессов. – М.: Наука, 1975.
- [7] Войтишек А.В. Асимптотика сходимости дискретно-стохастических методов глобальной оценки решения интегрального уравнения второго рода // Сиб. мат. журн. – 1994. – Т. 35, № 4. – С. 728–736.
- [8] Данфорд Н., Шварц Дж.Т. Линейные операторы (общая теория). – М.: ИЛ, 1962.
- [9] Елепов Б.С., Кронберг А.А, Михайлов Г.А., Сабельфельд К.К. Решение краевых задач методом Монте–Карло. – Новосибирск: Наука, 1980.
- [10] Елепов Б.С., Михайлов Г.А. О решении задачи Дирихле для уравнения $\Delta u + cu = -g$ моделированием "блужданий по сферам" // ЖВМиМФ. – 1969. – № 3. – С. 647–654.
- [11] Елепов Б.С., Михайлов Г.А. Алгоритмы "блуждания по сферам" для уравнения $\Delta u - cu = -g$ // ДАН. – 1973. – Т. 212, № 1. – С. 15–18.
- [12] Ермаков С.М. Об аналоге схемы Неймана–Улама в нелинейном случае // ЖВМиМФ. – 1973. – Т. 13, № 3. – С. 564–573.
- [13] Ермаков С.М., Золотухин В.Г. Применение метода Монте–Карло к расчету защиты от ядерных излучений // Вопросы физической защиты факторов. – М: Госатомиздат, 1963. – С. 171–182.
- [14] Ермаков С.М., Михайлов Г.А. Статистическое моделирование. – М.: Наука, 1982.
- [15] Ермаков С.М., Некруткин В.В., Сипин А.С. Случайные процессы для решения классических уравнений математической физики. – М.: Наука, 1984.

- [16] Кертисс Д. Методы Монте–Карло для итерации линейных операторов // УМН. – 1957. – № 5. – С. 149–174.
- [17] Кронберг А.А. Об алгоритмах статистического моделирования решения краевых задач эллиптического типа // ЖВМиМФ. – 1984. – Т. 24, № 10. – С. 1531–1537.
- [18] Курант Р. Уравнения с частными производными. – М.: Мир, 1964.
- [19] Марчук Г.И. Методы расчета ядерных реакторов. – М.: Госатомиздат, 1961.
- [20] Марчук Г.И., Михайлов Г.А., Назаралиев М.А. и др. Метод Монте–Карло в атмосферной оптике. – Новосибирск: Наука, 1976.
- [21] Мильштейн Г.Н. Численное интегрирование стохастических дифференциальных уравнений. – Свердловск: Изд. Свердловского ун-та, 1988.
- [22] Михайлов Г.А. Новый алгоритм метода Монте–Карло для оценки максимального собственного значения интегрального оператора // Докл. АН СССР. – 1970. – Т. 191, № 5. – С. 993–996.
- [23] Михайлов Г.А. Метод моделирования длины свободного пробега частицы // Атомная энергия. – 1970. – Т. 28, № 2. – С. 175.
- [24] Михайлов Г.А. Оптимизация весовых методов Монте–Карло. – М.: Наука, 1987.
- [25] Михайлов Г.А. Решение задачи Дирихле для нелинейного эллиптического уравнения методом Монте–Карло // Сиб. мат. журн. – 1994. – Т. 35, № 5. – С. 1085–1093.
- [26] Михайлов Г.А. Новый подход к построению и обоснованию ”оценок по пробегу” в методе Монте–Карло // Докл. РАН. – 1998. – Т. 358, № 1. – С. 22–25.
- [27] Михайлов Г.А., Антипов М.В. Оценки неравномерности распределений конгруэнтных сумм случайных величин // Докл. РАН. – 1996. – Т. 347, № 1. – С. 23–26.
- [28] Михайлов Г.А., Бурмистров А.В. Оценка ”по времени” в методе Монте–Карло // Докл. РАН. – 1999. – Т. 360, № 1. – С. 700–703.
- [29] Михайлов Г.А., Лотова Г.З. Оценки вероятностных моментов критических значений параметров уравнения переноса частиц в стохастической среде // Докл. РАН. – 1997. – Т. 356, № 2. – С. 166–169.
- [30] Михайлов Г.А., Макаров Р.Н. Решение краевых задач второго и третьего рода методом Монте–Карло // Сиб. мат. журн. – 1997. – Т. 38, № 3. – С. 603–614.

- [31] Михайлов Г.А., Макаров Р.Н. Параметрическое дифференцирование и оценки собственных чисел методом Монте–Карло // Сиб. мат. журн. – 1998. – Т. 39, № 4. – С. 931–941.
- [32] Михайлов Г.А., Макаров Р.Н. Оценки собственных чисел оператора $\Delta + c(r)$ путем вычисления параметрических производных методом Монте–Карло // Докл. РАН. – 1998. – Т. 362, № 5. – С. 598–601.
- [33] Михайлов Г.А., Меньшиков Б.В. Решение уравнения Гельмгольца с комплексными параметрами и реализация преобразования Фурье методом Монте–Карло // Докл. РАН. – 1996. – Т. 349, № 1. – С. 17–19.
- [34] Михайлов Г.А., Плотников М.Ю. Оценка ”по пробегу” для решения линейного и нелинейного уравнения переноса излучения в целом // Докл. РАН. – 1994. – Т. 337, № 2. – С. 162–164.
- [35] Михайлов Г.А., Середняков А.С. Численные и асимптотические оценки влияния размерности модели стохастической среды на оценки переноса излучения // Оптика атмосферы и океана. – 1997. – Т. 10, № 3. – С. 201–210.
- [36] Михайлов Г.А., Чешкова А.Ф. Решение задачи Дирихле для эллиптических систем с переменными параметрами методом Монте–Карло // Докл. РАН. – 1994. – Т. 336, № 6. – С. 737–740.
- [37] Михайлов Г.А., Чешкова А.Ф. Решение разностной задачи Дирихле для многомерного уравнения Гельмгольца методом Монте–Карло // ЖВМиМФ. – 1996. – Т. 38, № 1. – С. 99–106.
- [38] Пригарин С.М. О сходимости и оптимизации функциональных оценок метода Монте–Карло в пространствах Соболева // Сиб.ЖВМ. – 1999. – Т. 2, № 1. – С. 57–67.
- [39] Романов Ю.А. Точные решения односкоростного кинетического уравнения и их использование для расчета диффузионных задач // Исследование критических параметров реакторных систем. – М.: Атомиздат, 1960. – С. 3–26.
- [40] Соболев И.М. Численные методы Монте–Карло. – М.: Наука, 1973.
- [41] Соболев И.М. Об одном подходе к вычислению многомерных интегралов // Вопросы вычислительной и прикладной математики. – Ташкент. – 1970. – № 38. – С. 100–111.
- [42] Феллер В. Введение в теорию вероятностей и ее приложения. Т. 2. – М.: Мир, 1967.

- [43] Фролов А.С., Ченцов Н.Н. О вычислении методом Монте–Карло определенных интегралов, зависящих от параметра // ЖВМиМФ. – 1962. – № 4. – С. 714–717.
- [44] Ширяев А.Н. Вероятность. – М.: Наука, 1980.
- [45] Amann H. Optimale anfangsverteilungen bei der Monte Carlo methode mit informationspeicherung // ZAMM. – 1976. – Vol. 47. – P. 285–299.
- [46] Bulavsky Yu.V. and Temnikov S.A. Randomized method of successive approximations // Mathematical methods in Stochastic Simulation and Experimental Design. – St.Petersburg University Publishing House. – 1996. – P. 64–68.

- [47] Coleman W.A. Mathematical verification of a certain Monte Carlo sampling technique and applications of the techniques to radiation transport problems // Nucl. Sci. and Engng. – 1968. – Vol. 32, № 1. – P. 76–81.
- [48] Cvesielski Z., Tayler S.J. First passage times and sojourn times for Brownian motion in space and the exact Hausdorff measure of the sample path // Trans. Amer. Math. Soc. – 1962. – Vol. 103, № 3. – P. 434–450.
- [49] Davison B. Neutron transport theory. – Oxford: Clarendon Press, 1957.
- [50] Freidlin M. Functional integration and partial differential equations. – Princeton: Princeton Univ. Press. – 1985. (Ann. of Math. Stud. Vol. 109.)
- [51] Halton J.H. A retrospective and prospective survey of the Monte Carlo methods // SIAM Rev. – 1970. – Vol. 12. – P. 1–63.
- [52] Knuth D.E. The art of computer programming. Vol. 2: Seminumerical Algorithms. – London: Addison–Wesley Publishing Company, 1969.
- [53] Makarov R.N. The Monte Carlo methods for solving many-dimensional boundary value problems of second and third kinds // Proc. of the Third St.Petersburg Workshop on Simulation. – St.Petersburg University Publishing House. – 1998. – C. 95–100.
- [54] Mikhailov G.A. Minimization of computational cost of nonanalogue Monte Carlo methods. – Singapore–New Jersey–London– Hong Kong: World Scientific, 1991.
- [55] Mikhailov G.A. New Monte Carlo methods with estimating derivatives. – Utrecht: VSP, 1995.

- [56] Motoo M. Some evaluations for continuous Monte Carlo method by using Brownian hitting process // *Ann. Math. Stat.* – 1959. – Vol. 11. – P. 49–54.
- [57] Muller M.E. Some continuous Monte Carlo methods for the Dirichlet problem // *Ann. Math. Stat.* – 1956. – Vol. 27, № 3. – P. 569–589.
- [58] Tocher K.D. The application of automatic computers to sampling experiments // *J. Royal Statist. Soc. Ser. B.* – 1954. – Vol. 16, № 1. – P. 39–61.
- [59] Plotnikov M.Yu. Using the weighted Monte Carlo method for solving nonlinear integral equations // *Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling.* – 1994. – Vol. 9, № 2. – P. 1–24.
- [60] Rockafellar R.T. *Convex Analysis.* – Princeton: University Press, 1970.
- [61] Михайлов Г.А. Весовые методы Монте-Карло. Новосибирск. Изд-во СО РАН, 2000.
- [62] Михайлов Г. А. Новые методы Монте-Карло для решения уравнения Гельмгольца // *Докл. РАН.* – 1992. – Т. 326, № 6. С. 943–947.
- [63] Похожаев С. И. О задаче Дирихле для уравнения $\Delta u = u^2$ // *Докл. АН СССР.* – 1960. – Т. 134, № 4. С. 769–773.
- [64] Сабельфельд К.К. Методы Монте-Карло в краевых задачах. М.: Наука, 1989.
- [65] Болотин В.В. Случайные колебания упругих систем. М.: Наука, 1979.
- [66] Михайлов Г.А., Рогазинский С.В. Весовые методы Монте-Карло для решения многочастичных задач, связанных с уравнением Больцмана // *Доклады РАН.* – 2002. – Т. 383, № 3. С. 731–734.
- [67] Камаева О.Б. Оценка по пробегу в весовых методах Монте-Карло // *Журнал вычисл. матем. и матем. физ.* – 1984. – Т. 24, № 4. С. 514–519.
- [68] Дэвисон Б. Теория переноса нейтронов. М.: Атомиздат, 1960.
- [69] Колмогоров А.Н., Фомин С.В. Элементы теории функций и функционального анализа. М.: Наука, 1972.
- [70] Mikhailov G.A. and Voytishchek A.V. Numerical constructing of special non-Gaussian fields in solving problems of the radiation transfer theory for stochastically inhomogeneous media // *Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling.* – 1995, Vol. 10, № 3, P. 213 – 232.
- [71] Зеге Э.П., Кацев И.Л. Временные асимптотические решения уравнения переноса излучения и их применения. Препринт ИФ АН БССР. Минск, 1973.

- [72] Романова Л.М. Предельные случаи функции распределения по пробегам фотонов, выходящих из толстого светорассеивающего слоя // Изв.АН СССР, серия "Физика атмосферы и океана", – 1965, – Т. 1, № 6, С. 599–606.
- [73] Gikhman I. I, Skorokhod A. V. Stochastic differential equation. Springer-Verlag, 1979.
- [74] Artemiev S. S., Averina T. A. Numerical analysis of systems of ordinary and stochastic differential equations. - Utrecht, Tokyo: VSP, 1997.
- [75] Kloeden P. E., Platen E. Numerical Solution of Stochastic Differential Equations. – Berlin–Heidelberg–New York: Springer, 1992.
- [76] Марченко М.А. Оптимизация и параллельная реализация статистического моделирования диффузионных процессов: Дис. на соискание учен. степ. канд. физ.-мат. наук. - Новосибирск: ИВМиМГ СО РАН, 2002.
- [77] Gobet E. Efficient schemes for the weak approximation of reflected diffusions. // Monte Carlo methods and applications, – 2001, – Vol. 7, № 1–2, P. 193 – 202.
- [78] Marchenko M.A. Calculation optimization in the solution of diffusion problems // Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling. – 2001. – Vol. 16, № 5, P. 483 – 498.
- [79] Икрамов Х.Д. Численное решение матричных уравнений. М.: Наука, 1984.
- [80] Milshtein G.N. The solving of boundary value problems by numerical integration of stochastic equations // Mathematic and Computers in Simulation (1995) 38, P. 77–85.
- [81] Макаров Р.Н. Комбинированные оценки метода Монте-Карло для решения третьей краевой задачи для уравнения параболического типа // Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling. – 2002, Vol. 17, № 6, P. 501–515.
- [82] Берд Г. Молекулярная газовая динамика. – М.: Мир, 1981.
- [83] Рогазинский С.В. Об одном подходе к решению однородного уравнения Больцмана. - Ж. вычисл. матем. и матем.физ., 1987, Т. 27, № 4, С. 564–574.
- [84] Королев А.Е., Яницкий В.Е. Прямое статистическое моделирование столкновительной релаксации в смесях газов с большим различием в концентрациях. - Ж. вычисл. матем. и матем.физ., 1983, Т. 23, № 3, С. 674–680.
- [85] Иванов М.С., Рогазинский С.В. Экономичные схемы статистического моделирования течений разреженного газа. - Математическое моделирование., 1989, Т. 1, № 7, С. 130–145.

- [86] Леонтович М.А. Основные уравнения кинетической теории газов с точки зрения теории случайных процессов. - Журн. эксперим. и теоретич. физики., 1935, Т. 5, С. 75–79.
- [87] Повзнер А.Я. Об уравнении Больцмана кинетической теории газов. – Мат. сборник., 1962, Т. 58(100) – С. 65–86.
- [88] Кац М. Вероятность и смежные вопросы в физике. – М.: “Мир”, 1965.
- [89] Dyadkin I.G., Hamilton K.G. A study of 128-bit multipliers for congruential pseudorandom number generators // Computer Physics Communications. – 2000. – Vol. 125 (2000). – P. 239 –258.
- [90] Mikhailov G.A., Marchenko M.A. Parallel realization of statistical simulation and random number generators. // Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling. - 2002. - Vol. 17. - №1, – P. 113 – 124.
- [91] Marsaglia G. Random numbers fall mainly in the planes // Proc. Nat. Acad. Sci. USA. – 1968. – Vol. 61. – P. 23 – 25.
- [92] Кендалл М., Стьюарт А. Статистические выводы и связи. – М.: Наука, 1973.
- [93] Лаврентьев М.М., Савельев Л.Я. Линейные операторы и некорректные задачи – М.: Наука, 1991.
- [94] Лотова Г.З., Михайлов Г.А. Новые методы Монте-Карло для решения нестационарных задач теории переноса излучения //Журн. вычисл. матем. и матем. физ. – 2002. – Т. 42, № 4. – С. 569 – 579.
- [95] Марченко М.А., Михайлов Г.А. Весовые алгоритмы статистического моделирования диффузионных процессов. // Журн. вычисл. матем. и матем. физ. – 2003. – Т. 43, № 4.
- [96] Михайлов Г.А., Лукинов В.Л. Решение многомерного разностного бигармонического уравнения методом Монте-Карло. // Сиб. матем. журн. – 2001. – Т. 42, № 5. – С. 1125 – 1135.
- [97] Burmistrov A.V., Mikhailov G.A. Estimating the gradient of the conjugate diffusion equation by the Monte Carlo method // Rus. J. Num. Math. and Math. Modell. – 2002. – Т. 17, № 4. – С. 367 – 380.
- [98] Владимиров В.С. О применении метода Монте-Карло для отыскания наименьшего характеристического числа и соответствующей собственной функции линейного интегрального уравнения // Теор. вероятн. и ее примен. – 1956. – Т. 1, № 1. – С. 113 – 130.

Предисловие	3
Глава 1. Вероятностные модели, интегральные уравнения и весовые методы Монте-Карло	5
1.1. Вводная информация	5
1.2. Модификация фазового пространства и весовой оценки	8
1.3. Векторные оценки для треугольных систем интегральных уравнений	10
1.4. Вычисление параметрических производных и собственных чисел	14
1.5. Оптимизация моделирования по части переменных . .	19
Глава 2. Приложения в теории переноса частиц	29
2.1. Вводная информация	29
2.2. Весовая “оценка по пробегу”	36
2.3. Оценка временных зависимостей в процессе переноса излучения	39
2.4. Использование осредненных оценок для исследования влияния стохастичности среды	58
Литература	74